



HAL
open science

Modélisation et caractérisation expérimentale du phénomène de luminescence induit par l'irradiation de protons dans les détecteurs IR HgCdTe en environnement spatial

Thibault Pichon

► **To cite this version:**

Thibault Pichon. Modélisation et caractérisation expérimentale du phénomène de luminescence induit par l'irradiation de protons dans les détecteurs IR HgCdTe en environnement spatial. Instrumentation et méthodes pour l'astrophysique [astro-ph.IM]. Université Paris-Saclay, 2020. Français. NNT : 2020UPASP090 . tel-03121561

HAL Id: tel-03121561

<https://theses.hal.science/tel-03121561>

Submitted on 26 Jan 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.

Modélisation et caractérisation
expérimentale du phénomène de
luminescence induit par l'irradiation de
protons dans les détecteurs IR HgCdTe
en environnement spatial

Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay

École doctorale n°127 d'Astronomie et Astrophysique Ile-de-France
Spécialité de doctorat : Astronomie et Astrophysique
Unité de recherche : Université Paris-Saclay, CEA, Département d'Astrophysique,
91191, Gif-sur-Yvette, France
Réfèrent : Facultés des sciences d'Orsay

**Thèse présentée et soutenue à Saclay, le 2 Décembre 2020, par
Thibault PICHON**

Composition du Jury

Bruno MAFFEI Professeur, IAS	Président
Rémi BARBIER Chercheur IN2P3	Rapporteur & Examineur
Philippe CHRISTOL Professeur, Université de Montpellier	Rapporteur & Examineur
Christophe INGUIMBERT Ingénieur de recherche, ONERA	Examineur
Laurie PISTRE Ingénieure, CNES	Examinatrice
Thibaut PROD'HOMME Physicien, ESA	Examineur
Olivier LIMOUSIN Ingénieur de recherche, CEA	Directeur de thèse
Salima MOUZALI Ingénieure de recherche, CEA	Co-Encadrante

Table des matières

INTRODUCTION	8
CHAPITRE 0 ÉTUDE DE CAS : LA MISSION SPATIALE EUCLID ET L'INFLUENCE DE L'ENVIRONNEMENT SPATIAL RADIATIF	11
1 OBJECTIFS SCIENTIFIQUES DE LA MISSION SPATIALE EUCLID	12
1.1 <i>Introduction à la cosmologie moderne</i>	12
1.2 <i>La mission spatiale Euclid</i>	13
1.2.1 Objectifs de la mission spatiale et sondes cosmologiques	13
1.2.2 Présentation de la charge utile d'Euclid	15
2 L'INSTRUMENT NISP ET LES PERFORMANCES DE VOIE IR	15
2.1 <i>Spécifications du mode spectrométrique de l'instrument NISP</i>	16
2.2 <i>Étude de sensibilité de l'instrument NISP</i>	18
2.2.1 Définition du rapport signal sur bruit	18
2.2.2 Étude de la sensibilité de l'instrument NISP	20
3 INFLUENCE DE L'ENVIRONNEMENT SPATIAL RADIATIF SUR LES PERFORMANCES DES DETECTEURS IR	21
3.1 <i>Effets de l'irradiation sur les détecteurs IR d'Euclid</i>	22
3.2 <i>Problématique du dépôt d'énergie dans le substrat CdZnTe des détecteurs IR</i>	24
4 CONCLUSIONS DU CHAPITRE	27
REFERENCES	29
CHAPITRE 1 LES DETECTEURS INFRAROUGES EN ENVIRONNEMENT SPATIAL	31
1 LES DETECTEURS IR EN ASTROPHYSIQUE	33
4.1 <i>Introduction au rayonnement IR</i>	33
4.1.1 Le spectre électromagnétique	33
4.2 <i>Les différents types de détecteurs IR</i>	35
4.2.1 Les détecteurs thermiques	35
4.2.2 Les détecteurs quantiques	36
4.2.3 Les détecteurs IR pour l'astrophysique spatiale	36
4.3 <i>Principe de fonctionnement des détecteurs photovoltaïques</i>	37
4.3.1 Introduction aux semi-conducteurs	37
4.3.2 Transition inter-bandes dans les semi-conducteurs : l'effet photoélectrique	39
4.3.3 Dopage	40
4.3.4 Jonction PN	41
4.4 <i>Les matrices de détecteurs HgCdTe</i>	43
4.4.1 Architecture générale	44
4.4.2 Description du substrat de CdZnTe	44
4.4.2.1 Propriétés de l'alliage $Cd_{1-y}Zn_yTe$	45
4.4.2.2 L'énergie de gap du CdTe et photons de luminescence	46
4.4.3 La couche absorbante de HgCdTe	48
4.4.3.1 Propriétés de l'alliage HgCdTe	48
4.4.3.2 Énergie du gap et longueur d'onde de coupure du HgCdTe	48
4.4.4 Le circuit de lecture	50
4.4.5 Nouveaux développements dans les détecteurs IR HgCdTe	51
5 EFFETS DES PARTICULES CHARGÉES SUR LES DETECTEURS IR	52
5.1 <i>L'environnement spatial radiatif</i>	52
5.1.1 Le rayonnement cosmique galactique	52

5.1.2	Les évènements solaires	53
5.1.3	Les particules piégées	55
5.1.4	Résumé des environnements radiatifs spatiaux et comparaison avec les environnements artificiels.....	55
5.2	<i>Interaction particule matière</i>	56
5.2.1	Introduction du LET et du pouvoir d'arrêt	57
5.2.2	Interaction nucléaire entre une particule incidente et le milieu cible.....	59
5.2.3	Interaction de la particule incidente avec le cortège électronique du milieu cible.....	60
5.2.4	Les effets de l'interaction de particules ionisantes sur les composants électroniques	62
5.3	<i>Effets des radiations sur les détecteurs IR HgCdTe et problématique du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe</i>	64
5.3.1	Effets de dose dans la couche de HgCdTe.....	64
5.3.2	Effets transitoires dans la couche de HgCdTe.....	64
5.3.3	Problématiques du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe	66
5.3.4	Outils de modélisation de l'effet des radiations sur les composants électroniques.....	67
6	CONCLUSIONS DU CHAPITRE	68
	REFERENCES.....	69

CHAPITRE 2 MODELISATION DE LA REPONSE DES DETECTEURS IR NON AMINCIS SOUS IRRADIATION DE PROTONS 73

1	DESCRIPTION GENERALE DE L'APPROCHE DE MODELISATION	75
1.1	<i>Structures des détecteurs IR simulés</i>	75
1.1.1	Description de la géométrie des détecteurs.....	75
1.1.2	Diagramme de bande des détecteurs.....	76
1.2	<i>Description générale du modèle</i>	77
2	MODELISATION DE LA TRACE DES PROTONS DANS LE CdZnTe ET LE HgCdTe.....	80
2.1	<i>Modélisation de la trace des protons et détermination du profil d'énergie déposée</i>	80
2.1.1	Modèles analytiques de dépôt d'énergie	80
2.1.2	Présentation des logiciels de calcul Monte Carlo	81
2.1.2.1	Stopping and Range of Ion in Matter (SRIM)	82
2.1.2.2	GEometry And Tracking 4.....	83
2.1.3	Présentation de la structure utilisée dans GEANT4	85
2.1.4	Exemple et validation des traces d'ions.....	87
2.2	<i>Détermination de la densité de paires électron-trou</i>	91
2.2.1	Énergie de création d'une paire électron-trou	91
2.2.1.1	Description du modèle d'énergie de création de paires électron-trou : modèle de Klein.....	92
2.2.1.2	Énergie de création de paires dans le CdZnTe	94
2.2.1.3	Énergie de création de paires dans le HgCdTe.....	95
2.2.2	Détermination de la densité de paires électron-trou générées par le passage d'un proton.....	95
3	MODELISATION ANALYTIQUE DE LA LUMINESCENCE ET DE LA DIFFUSION DES PORTEURS DANS LE CdZnTe	97
3.1	<i>Modèle de diffusion des porteurs et hypothèses</i>	97
3.1.1	Équation de diffusion ambipolaire.....	97
3.1.2	Conditions aux limites.....	100
3.2	<i>Résolution analytique de l'équation de diffusion dans le CdZnTe</i>	100
3.3	<i>Modélisation du courant de diffusion des porteurs du CdZnTe vers le HgCdTe</i>	102
3.3.1	Description mathématique du modèle de courant de diffusion.....	102
3.3.2	Exemple d'application.....	104
3.4	<i>Modélisation de la luminescence dans le substrat de CdZnTe</i>	105
3.4.1	Description mathématique du modèle analytique de luminescence	105
3.4.1.1	Détermination du nombre total de photons émis en tout point du substrat de CdZnTe	105
3.4.1.2	Détermination de la fluence.....	107
3.4.2	Exemple d'application.....	109
3.5	<i>Conclusion et importance des propriétés matériaux</i>	110
4	MODELISATION DE LA COLLECTE DES PORTEURS DANS LE HgCdTe.....	111

4.1	<i>Modèle de diffusion dans le HgCdTe</i>	111
4.2	<i>Exemple d'application pour un proton de 63 MeV</i>	112
5	DISCUSSION	113
5.1	<i>Recyclage photonique et chaîne de Markov</i>	113
5.1.1	Introduction de la notion de recyclage photonique	114
5.1.2	Résultat et discussion	114
5.2	<i>Hypothèses sur le dépôt d'énergie</i>	115
5.3	<i>Hypothèses des modèles de transport</i>	116
6	CONCLUSIONS DU CHAPITRE	117
	REFERENCES	118

CHAPITRE 3 MESURES DES PROPRIETES OPTIQUES ET ELECTRIQUES DU CDTE ET DU CDZnTE ET APPLICATION DU MODELE..... 121

1	PRINCIPES DES MESURES DE LUMINESCENCE ET D'ELLIPSOMETRIE	124
1.1	<i>Caractérisation optique des échantillons : mesure de luminescence</i>	125
1.1.1	Principe des caractérisations de luminescence	125
1.1.2	Recombinaisons radiatives dans un semi-conducteur	126
1.1.2.1	Recombinaisons bande à bande	126
1.1.2.2	Recombinaisons de type bande niveau	127
1.1.2.3	Recombinaisons de paires	128
1.1.2.4	Annihilations excitoniques	128
1.1.2.5	Répliques phonons	131
1.1.2.6	Résumé des différents processus de recombinaison	131
1.1.3	Description des bancs de luminescence	132
1.1.3.1	Banc de photoluminescence	132
1.1.3.2	Banc de cathodoluminescence	134
1.2	<i>Caractérisation par ellipsométrie de surface</i>	135
1.2.1	Objectif et principe de mesure de l'ellipsométrie de surface	135
1.2.2	Description du banc de test d'ellipsométrie et préparation des échantillons	137
1.2.3	Calcul de propagation d'erreur sur l'estimation des propriétés optiques	139
1.3	<i>Description des échantillons</i>	140
2	RESULTATS ET INTERPRETATION DES MESURES DE PHOTOLUMINESCENCE DE 4 K A 50 K	142
2.1	<i>Interprétation des spectres de photoluminescence du CdTe et du CdZnTe de 4 K à 50 K</i>	142
2.1.1	Étude du bord de bande de 4 K à 50 K	143
2.1.1.1	Échantillon de CdTe	144
2.1.1.2	Échantillons de CdZnTe A et B	145
2.1.1.3	Comparaison du CdTe et du CdZnTe	147
2.1.2	Étude de la région DAP des spectres des échantillons de CdTe et de CdZnTe de 4 K à 50 K	149
2.1.3	Étude de la bande de défauts profonds dans les échantillons de CdTe et CdZnTe	151
2.2	<i>Résumé des mesures de PL de 4K à 50 K</i>	152
3	RESULTATS DES MESURES DE PROPRIETES OPTIQUES DU CDTE ET DU CDZnTE A 80 K ET A 100 K	153
3.1	<i>Interprétation des spectres de luminescence à 80 K et 100 K</i>	154
3.1.1	Spectres de cathodoluminescence du CdTe à 80 K et 100 K	154
3.1.2	Spectres de cathodoluminescence du CdZnTe à 80 K et 100 K	155
3.1.3	Résumé des mesures de CL effectuées à 80 K et 100 K dans le CdTe et le CdZnTe	156
3.2	<i>Résultats des mesures d'ellipsométrie sur le CdTe et le CdZnTe à 80 K et 100 K</i>	157
3.2.1	Résultats des mesures des fonctions optiques du CdTe à 80 K et 100 K	157
3.2.2	Résultats des mesures des fonctions optiques du CdZnTe à 80 K et 100 K	160
3.3	<i>Récapitulatifs des mesures de propriétés optiques du CdTe et du CdZnTe à 80 K et 100 K</i>	162
4	VERS UNE MESURE DE LA LONGUEUR DE DIFFUSION DANS LE CDZnTE	164
4.1	<i>Principe de mesure de la longueur de diffusion des porteurs</i>	164
4.2	<i>Résultats préliminaires de la mesure de longueur de diffusion des porteurs dans le CdZnTe</i>	165

5	APPLICATION DU MODELE A PARTIR DES MESURES DE PROPRIETES MATERIAUX.....	166
5.1	<i>Rappels de la démarche générale.....</i>	166
5.1.1	Propriétés matériaux du CdZnTe à 80 K.....	167
5.1.2	Propriétés matériaux du HgCdTe à 80 K.....	169
5.2	<i>Application du modèle.....</i>	169
5.2.1	Comparaison de la contribution photonique et de diffusion.....	169
5.2.2	Image simulée : en considérant un proton de 63 MeV incident sur un détecteur ayant 800 μm d'épaisseur de substrat.....	170
6	CONCLUSIONS DU CHAPITRE	172
	REFERENCES.....	174

CHAPITRE 4 RESULTATS DES CAMPAGNES D'IRRADIATION DES DETECTEURS NIR DE TYPE ALFA ET DU DETECTEUR H1RG DE LA MISSION SPATIALE ARIEL..... 177

1	RESULTATS EXPERIMENTAUX DE LA CAMPAGNE D'IRRADIATION EFFECTUEE SUR LES DETECTEURS NIR A 2.1 μm	179
1.1	<i>Présentation de la campagne d'irradiation.....</i>	179
1.1.1	Présentation de l'installation Arronax.....	180
1.1.2	Présentation générale du dispositif expérimental.....	181
1.1.3	Description du cryostat d'irradiation Irradix.....	182
1.1.3.1	Présentation générale.....	182
1.1.3.2	Présentation du plan focal du détecteur.....	183
1.1.4	Présentation des détecteurs irradiés et du plan de test.....	185
1.1.5	Caractéristique du faisceau de protons.....	188
1.1.6	Caractérisation des détecteurs au laboratoire IR du Département d'Astrophysique du CEA.....	191
1.1.6.1	Principe des caractérisations effectuées.....	191
1.1.6.2	Mesure du gain de conversion GV/ADU au laboratoire IR.....	192
1.1.6.3	Détermination de la capacité d'intégration C_{int} mesuré au laboratoire IR.....	193
1.1.6.4	Courant d'obscurité mesuré au laboratoire IR.....	195
1.1.6.5	Mesure de QE relative effectué au laboratoire IR.....	198
1.1.7	Caractérisation des détecteurs pré-irradiation et post-irradiation.....	201
1.2	<i>Résultats de la campagne d'irradiation.....</i>	205
1.2.1	Analyse des données sous irradiation.....	205
1.2.1.1	Présentation de l'outil SEXtractor.....	206
1.2.1.2	Détection des impacts de protons sur les mesures FUR avec SEXtractor.....	206
1.2.2	Caractérisation du signal de fond dans les pixels non affectés par un proton pendant l'irradiation.....	208
1.2.3	Caractéristique de l'impact d'un proton unique.....	211
1.2.4	Image CDS sous irradiation.....	213
1.3	<i>Résumé des résultats de mesures de la campagne d'irradiation sur les détecteurs NIR.....</i>	215
1.4	<i>Comparaison des images simulées aux images extraites des mesures effectuées sous irradiation</i>	215
1.5	<i>Discussion.....</i>	218
2	RESULTATS EXPERIMENTAUX DE LA CAMPAGNE D'IRRADIATION D'ARIEL ET COMPARAISON AU MODELE	219
2.1	<i>Campagne d'irradiation : objectif et résultats.....</i>	220
2.1.1	Présentation des détecteurs et objectif de la campagne d'irradiation.....	220
2.1.2	Moyens de tests et plan d'irradiation.....	221
2.1.3	Résultat de la campagne d'irradiation d'ARIEL.....	224
2.1.3.1	Étude des clusters de pixels affectés par un impact de proton.....	225
2.1.3.2	Détermination du signal de fond sous irradiation.....	227
2.2	<i>Application du modèle aux détecteurs H1RG d'ARIEL et comparaison aux résultats expérimentaux</i>	230
2.2.1	Discussion sur l'application du modèle au détecteur CH1 d'ARIEL.....	230
2.2.2	Application du modèle aux détecteurs H1RG d'ARIEL et comparaison aux résultats expérimentaux.....	231
3	CONCLUSIONS DU CHAPITRE	233
	REFERENCES.....	235

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES.....	237
ANNEXE A ÉTUDE DE LA POSITION DU FILM.....	245
ANNEXE B CALCUL COEFFICIENT DIFFUSION AMBIPOLAIRE.....	247
ANNEXE C MODELISATION DU RECYCLAGE PHOTONIQUE ET CHAINES DE MARKOV.....	249
1 PRESENTATION DU FORMALISME BASE SUR UNE CHAINE DE MARKOV.....	249
2 PRESENTATION DU FORMALISME MATRICIEL.....	250
3 CALCUL DES PROBABILITES.....	252
3.1 <i>Calcul de la probabilité p_0 : probabilité pour que la paire électron-trou diffuse hors du matériau</i>	
252	
3.2 <i>Calcul de la probabilité p_1 : probabilité pour qu'un photon s'échappe du matériau</i>	253
3.3 <i>Calcul de η_{in} : probabilité pour que la paire électron-trou se recombine de manière radiative</i> ...	255
4 RESULTAT ET DISCUSSION.....	256
ANNEXE D PROPRIETES OPTIQUES DU CDZnTE	259
1 PROBABILITE QUE LE PHOTON S'ÉCHAPPE COTE HgCdTe.....	259
2 PROBABILITE QUE LE PHOTON S'ÉCHAPPE COTE VIDE.....	259
3 PROBABILITE QUE LE PHOTON « SORTE » DU MATERIAU :.....	260
ANNEXE E CALCUL DE PROPAGATION D'ERREUR.....	261
ANNEXE F ANNIHILATION D'EXCITONS LIBRES DANS LES ECHANTILLONS DE CDTE ET CDZnTE :	
DETERMINATION DU GAP EN FONCTION DE LA TEMPERATURE	265
1 DETERMINATION DE LA POSITION DE L'EXCITON ET DE L'ENERGIE DE GAP	265
2 ÉVOLUTION DE L'ENERGIE GAP EN FONCTION DE LA TEMPERATURE	268
3 AJUSTEMENT DE L'ENERGIE DE GAP EN FONCTION DE LA TEMPERATURE	269
REFERENCES.....	271
ANNEXE G MESURES DE CATHODOLUMINESCENCE ET D'ELLIPSOMETRIE EFFECTUEES A 300 K.....	273
1 INTERPRETATION DES SPECTRES DE CATHODOLUMINESCENCE A 300 K	273
2 MESURE D'ELLIPSOMETRIE A 300 K	274
3 DISCUSSION SUR LE GAP DU CdTe ET DU CdZnTe	276
3.1 <i>Discussion sur le gap du CdTe à 300 K</i>	276
3.2 <i>Discussion sur le gap du CdZnTe</i>	277
REFERENCES.....	279
ANNEXE H EXEMPLE DE CLUSTERS OBSERVES LORS DES MESURES FUR SOUS IRRADIATION.....	281
1 DETECTEUR NIR800 ET NIR50	281
2 DETECTEUR H1RG DE LA MISSION ARIEL	282

Introduction

En astrophysique, les objectifs scientifiques requièrent des détecteurs de grand format aux performances élevées (très bas bruit, très faible courant d'obscurité, très bon rendement quantique). Dans le domaine IR, la technologie HgCdTe permet de satisfaire à ces spécifications. Ainsi, en astrophysique les détecteurs de photons IR les plus utilisés sont des détecteurs matriciels composés d'un matériau absorbant de HgCdTe dont l'approvisionnement est monopolisé par l'entreprise américaine Teledyne Imaging Sensors (TIS). Ainsi, par exemple, les plans focaux IR des télescopes spatiaux Hubble Space Telescope (HST) (NASA, *National Aeronautics and Space Administration*), James Webb Space Telescope (NASA), Euclid (ESA, *European Space Agency*) et ARIEL (*Atmospheric Remote-sensing Infrared Exoplanet Large-survey*), développée par l'ESA, sont équipés de capteurs fabriqués par TIS.

La demande étant importante dans ce domaine spectral (chimie d'exoplanètes, relevé cosmologique), l'ESA a initié le développement de détecteurs européens grand format au travers du programme ALFA (*Astronomical Large Format Array*) afin d'assurer une indépendance européenne à l'égard de l'approvisionnement de ces capteurs stratégiques. Durant les premières phases du programme, l'entreprise anglaise de microélectronique Selex (filiale de Leonardo) et le centre de recherche français du CEA-LETI (Laboratoire d'Electronique et des Technologies de l'Information du Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives) ont été mis en compétition. Finalement remportée par le laboratoire hexagonal, le programme est actuellement dans sa phase 3, mené par Lynred (anciennement Sofradir) partenaire industriel du CEA-LETI. L'objectif est de fabriquer et caractériser des matrices 2048×2048 au pas pixel de 15 μm avec une longueur d'onde de coupure de 2.1 μm . La première matrice a été caractérisée au Département d'Astrophysique du CEA début 2020.

Par ailleurs, l'Europe finance via le programme Horizon 2020, le projet ASTEROID (ASTRONomy EUROpean Infrared Detector), dont l'objectif est de doter l'Europe des capacités de production à l'échelle industrielle de détecteurs 2k2 de hautes performances pour les applications scientifiques. Lynred et le CEA (le LETI et le Département d'Astrophysique) sont impliqués dans ce programme aux côtés d'autres laboratoires et entreprises européennes.

Les détecteurs ALFA sont amenés à être utilisés dans des missions spatiales, dès lors il est essentiel d'étudier l'effet de l'environnement spatial sur ces composants.

En environnement spatial, les télescopes spatiaux ainsi que les différents instruments embarqués à leur bord sont soumis à des conditions naturelles difficiles (photons Ultra-Violet (UV), plasma, températures extrêmes, particules ionisantes, micro-météorites) auxquelles s'ajoutent les débris associés au développement des activités astronautiques. En particulier, en interagissant avec les matériaux semi-conducteurs, les particules ionisantes (protons, ions, X, Gamma) vont déposer une

partie de leur énergie dans les composants électroniques et optoélectroniques pouvant altérer leur fonctionnement. On distingue les effets de dose, liés à l'accumulation d'énergie déposée, des effets singuliers affectant momentanément ou de manière destructive les composants. Afin de préparer à la spatialisation des composants électroniques, il est nécessaire d'analyser l'effet des radiations sur ces éléments avec l'aide d'outils de simulation numérique (*Technology Computer Aid Design* et des méthodes Monte Carlo) accompagnés d'études expérimentales. Des générateurs de particules ionisantes (générateurs X, lasers, accélérateurs) sont utilisés lors de ces essais afin de reproduire artificiellement les effets de l'environnement spatial radiatif sur les composants. L'objectif de ces investigations est d'assurer la fiabilité des composants sur la durée totale de la mission spatiale.

Lors de la phase de développement de l'instrument *Wide Field Camera 3* (WFC3) embarqué sur le HST, les tests d'irradiations menés sur les détecteurs IR HgCdTe ont révélé un phénomène inattendu. Sous irradiation de protons, outre les impacts directs des protons, un signal parasite diffus a été observé sur les images. Une étude plus approfondie conduite par une équipe américaine sur ces détecteurs suggère que ce signal parasite serait associé au dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe. Ce substrat permet de faire croître la couche de HgCdTe par épitaxie. Les photons émis par la désexcitation radiative des porteurs excités dans le substrat par le passage du proton sont détectés par la couche de HgCdTe ajoutant un signal photonique perturbateur au signal photonique utile. Le retrait complet du substrat résout radicalement le problème. Néanmoins, c'est une étape particulièrement délicate dans le processus de fabrication des détecteurs.

Une campagne d'irradiation récente menée sur les détecteurs IR HgCdTe de l'instrument de la mission NEOSM (pour *Near Earth Observation Surveillance Mission*, anciennement NEOCam pour *Near Earth Observation*), a montré que des détecteurs avec un substrat résiduel de 30 μm ne présentaient pas de signal parasite diffus. Bien que l'amincissement du substrat semble réduire la pollution des images acquises, le phénomène physique reste mal compris. Une compréhension approfondie permettrait aux fabricants d'optimiser l'épaisseur du substrat et ainsi d'éviter les problèmes liés au dépôt d'énergie dans le substrat tout en parant aux difficultés induites par sa suppression complète.

L'objectif de ma thèse est de modéliser et de caractériser expérimentalement le phénomène de luminescence induit par l'irradiation de protons afin d'estimer l'influence de l'épaisseur du substrat de CdZnTe sur la réponse de détecteurs IR HgCdTe sous irradiation de protons.

Le modèle que j'ai développé s'appuie sur différents outils et méthodes de modélisation et simulation. Les interactions des particules ionisantes dans le détecteur sont simulées à l'aide de méthodes de Monte Carlo. Le transport et la collection des porteurs dans la structure du détecteur sont modélisés analytiquement et sont résolues à l'aide de méthodes numériques. De plus, j'ai réalisé des mesures de propriétés optiques (luminescence et absorption) et de propriétés électriques (longueur de diffusion) sur des échantillons de CdZnTe et le CdTe à basse température. Ces données sont indispensables et servent d'entrée au modèle. L'objectif est d'obtenir des images simulées sous irradiation en fonction de l'épaisseur du substrat. En parallèle du travail de modélisation, j'ai préparé une campagne d'irradiation sur des détecteurs de technologie similaire à ALFA. Lors de cette campagne deux détecteurs avec différentes épaisseurs de substrat ont été irradiés avec des protons de 63 MeV. Les images ainsi obtenues sont analysées et comparées aux images simulées. Les résultats d'une seconde campagne d'irradiation réalisée sur les détecteurs Teledyne de la mission Ariel sont analysées. Le

modèle développé au cours de cette thèse est applicable à différents détecteurs IR dans la mesure où les données matériaux ainsi que les caractéristiques de la structure du détecteur sont connues.

Ce mémoire de thèse suit cette démarche.

Dans le premier chapitre, quelques notions sur les détecteurs et le rayonnement IR sont rappelées. L'attention est portée sur les applications spatiales. Les détecteurs HgCdTe faisant l'objet de cette thèse sont présentés dans le détail. Enfin, une description de l'environnement spatial et l'effet du rayonnement ionisant sur les composants électriques et optoélectroniques est exposée.

Dans le deuxième chapitre, je détaille l'ensemble de la démarche de modélisation que j'ai développée : de la pénétration du proton dans le détecteur jusqu'à la collection des porteurs. La distribution des porteurs excités par le passage de protons dans le substrat de CdZnTe et dans le HgCdTe est calculée en utilisant des méthodes Monte Carlo. La luminescence et la diffusion des porteurs dans le CdZnTe sont calculés analytiquement. Enfin, le transport des porteurs dans la couche de HgCdTe est modélisé avec des méthodes d'éléments finis.

Dans le chapitre trois, les mesures de propriétés optiques et électriques que j'ai effectuées sur des échantillons de CdZnTe et de CdTe sont présentées et analysées. Des mesures de luminescence avec différentes sources d'excitation et des mesures d'ellipsométrie ont été réalisées à basse température. Une première mesure de longueur de diffusion a également été réalisée sur ces échantillons. Ces données expérimentales sont comparées aux données de la littérature.

Enfin, dans le quatrième chapitre, la campagne d'irradiation que j'ai préparé durant ma thèse est présentée. Les conclusions de cette expérience sont comparées aux observations effectuées sur les images simulées. Puis, les résultats de la campagne d'irradiation du détecteur de la mission ARIEL concernant l'étude des impacts individuels de proton sur l'image sont présentés.

Chapitre 0

Étude de cas : la mission spatiale Euclid et l'influence de l'environnement spatial radiatif

Table des matières

1	OBJECTIFS SCIENTIFIQUES DE LA MISSION SPATIALE EUCLID.....	12
1.1	INTRODUCTION A LA COSMOLOGIE MODERNE	12
1.2	LA MISSION SPATIALE EUCLID	13
1.2.1	<i>Objectifs de la mission spatiale et sondes cosmologiques.....</i>	<i>13</i>
1.2.2	<i>Présentation de la charge utile d'Euclid</i>	<i>15</i>
2	L'INSTRUMENT NISP ET LES PERFORMANCES DE VOIE IR	15
2.1	SPECIFICATIONS DU MODE SPECTROMETRIQUE DE L'INSTRUMENT NISP	16
2.2	ÉTUDE DE SENSIBILITE DE L'INSTRUMENT NISP	18
2.2.1	<i>Définition du rapport signal sur bruit</i>	<i>18</i>
2.2.2	<i>Étude de la sensibilité de l'instrument NISP.....</i>	<i>20</i>
3	INFLUENCE DE L'ENVIRONNEMENT SPATIAL RADIATIF SUR LES PERFORMANCES DES DETECTEURS IR ..	21
3.1	EFFETS DE L'IRRADIATION SUR LES DETECTEURS IR D'EUCLID	22
3.2	PROBLEMATIQUE DU DEPOT D'ENERGIE DANS LE SUBSTRAT CdZnTe DES DETECTEURS IR	24
4	CONCLUSIONS DU CHAPITRE	27
	REFERENCES	29

Dans ce chapitre introductif, je vais illustrer l'effet de l'irradiation de protons sur les détecteurs infrarouge de technologie HgCdTe lorsque le substrat de CdZnTe de ces détecteurs n'est pas complètement retiré. Pour ce faire, je vais effectuer une étude de la sensibilité du spectromètre infrarouge d'Euclid sous irradiation de protons, en considérant le cas fictif où le substrat des détecteurs utilisés serait resté intact après fabrication. Nous verrons alors que l'interaction des protons avec le substrat conduit à une dégradation des performances de l'instrument pouvant menacer les objectifs scientifiques de la mission.

Je présenterai dans un premier temps, les objectifs scientifiques de la mission Euclid. Puis je m'intéresserai en particulier au spectromètre proche infrarouge et présenterai les spécifications de l'instrument. Enfin, je vais étudier l'effet des radiations sur les détecteurs IR d'Euclid avant d'évoquer la problématique de l'interaction des particules cosmiques avec le substrat.

1 Objectifs scientifiques de la mission spatiale Euclid

1.1 Introduction à la cosmologie moderne

La cosmologie concerne l'étude de l'origine et de l'évolution de notre Univers. Le modèle de cosmologie standard de référence, illustré sur la Figure 1 (a), est issu des observations actuelles. Il repose sur la théorie de la relativité d'Einstein et se fonde sur deux hypothèses, l'une relative aux conditions initiales de l'Univers (« Big Bang ») et la seconde sur sa nature isotrope et homogène aux échelles cosmologiques. De plus, ce modèle suppose l'existence de deux composantes dominantes dont la nature reste inconnue : l'énergie noire et la matière noire [1]. La première représente environ 76 % de la densité d'énergie totale de l'Univers et la seconde 20 %. Les 4 % restants correspondent à la matière ordinaire (voir Figure 1 (b)). La matière et l'énergie noires forment ce qui est parfois appelé l'Univers sombre.

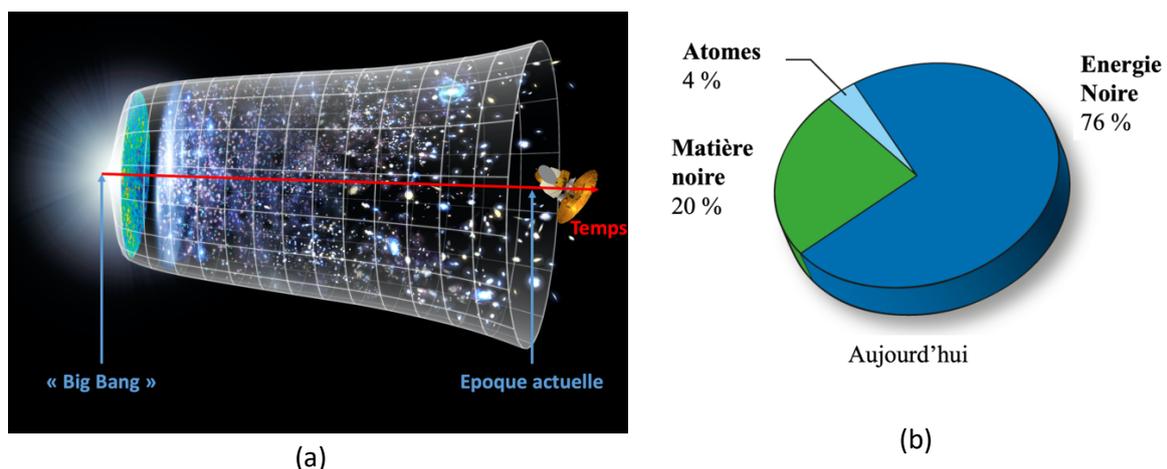


Figure 1 –(a) Illustration de l'évolution de l'Univers à partir du Big Bang dans le modèle standard actuel (Crédits NASA WMAP). (b) Répartition de la densité d'énergie de l'Univers.

La nature de l'énergie noire reste à ce jour inconnue. Elle serait à l'origine de l'accélération de l'expansion de l'univers. Celle-ci a été mesurée, à la fin des années 90 par deux équipes indépendantes [2], [3], en observant la luminosité de supernovas de type Ia (SNs) en fonction de leur distance par

rapport à l'observateur. Ces chercheurs ont alors observé que la vitesse d'éloignement de ces objets augmentait au cours du temps. L'introduction de l'énergie noire, sous forme de constante cosmologique dans l'équation du champ d'Einstein, permet de réajuster le modèle aux observations [4]. Cette constante cosmologique correspondrait à l'énergie du vide introduite par le modèle standard de la physique des particules. Mais sa valeur expérimentale est très faible en comparaison de la valeur théorique attendue. Par conséquent, d'autres modèles ont été développés, allant de la modification de la théorie de la gravité à sa révision complète [1].

La matière noire serait une forme de matière, sensible à la gravité mais qui n'interagit pas avec la lumière (pas d'émission ni d'absorption). La première preuve de l'existence de la matière noire est au crédit de Zwicky, qui en 1930 a observé que la masse dynamique de l'amas de galaxies du Coma (calculée à partir de l'analyse de vitesses) était supérieure à la masse estimée à partir de la luminosité des galaxies composant l'amas [5][6]. Il suggère alors la présence d'une composante non lumineuse. Il faudra néanmoins attendre 40 ans pour voir apparaître le concept de matière noire. La nature de la matière noire reste aujourd'hui inconnue.

L'objectif de la mission spatiale Euclid est de tester le modèle cosmologique standard actuel à travers l'étude des composantes de l'Univers sombre. Euclid étudiera l'histoire de l'expansion de l'Univers ainsi que la formation des grandes structures cosmologiques.

1.2 La mission spatiale Euclid

La mission spatiale Euclid est une mission de classe moyenne de l'ESA sélectionnée en 2011. Le lancement est prévu en 2022. Le satellite sera envoyé au point de Lagrange L2 et la mission est planifiée pour durer 6 ans.

1.2.1 Objectifs de la mission spatiale et sondes cosmologiques

Les principaux axes de recherches de la mission spatiale sont les suivants : distinguer les différents modèles d'énergie noire, tester la théorie de la gravité aux échelles cosmologiques et contraindre les scénarios de conditions initiales de l'Univers. Afin de répondre aux questions soulevées par la science, deux principales sondes cosmologiques ont été choisies, à savoir le cisaillement gravitationnel et les oscillations baryoniques acoustiques. Ces observables permettent de relier les mesures aux modèles théoriques. Les exigences scientifiques relatives à leurs observations sont les principaux facteurs de dimensionnement des différents instruments.

Le décalage vers le rouge, ou *redshift*, noté z , caractérise une augmentation de la longueur d'onde d'une transition atomique observée, λ_{obs} , par rapport à la longueur d'onde d'émission mesurée en laboratoire, $\lambda_{émis}$. Il s'exprime selon l'équation (1-1).

$$z = \frac{\lambda_{obs} - \lambda_{émis}}{\lambda_{émis}} \quad (1-1)$$

En astrophysique, la mesure de z permet de déterminer la distance, d , qui sépare l'objet observé de l'observateur. En effet, ces deux grandeurs sont reliées entre elles par la relation de Hubble (1-2), où c est la vitesse de la lumière et H_0 est la constante de Hubble^a [7]. Ces mesures de redshift sont essentielles pour étudier l'histoire de notre Univers.

$$cz = H_0 d \quad (1-2)$$

Le cisaillement gravitationnel, qui constitue la première sonde cosmologique utilisée par la mission spatiale Euclid, est le nom donné au phénomène de déformation des images de galaxies induit par la présence de structures massives qui dévient la trajectoire des photons. Couplées à des mesures de *redshift*, ces mesures de distorsion (réalisées avec une caméra visible de haute résolution spatiale) permettent d'effectuer une cartographie 3D de la distribution de matière noire [1]. Pour contraindre les modèles, Euclid fournira une mesure de la forme des galaxies dans la totalité de son champ d'observation, soit 15 000 deg² au total à la fin de mission, dans une bande allant de $0 < z < 1.2$ avec une précision de 5% sur la mesure du *redshift* photométrique [1].

Les oscillations baryoniques acoustiques sont les secondes sondes utilisées par la mission Euclid. L'Univers primordial était constitué d'un plasma formé d'un mélange de baryons et de photons. De faibles variations de la densité de plasma ont entraîné l'apparition d'ondes de pression (analogues aux ondes acoustiques). Au fil du temps, l'Univers s'est refroidi, le plasma s'est neutralisé et ces ondes de pression ont cessé de se propager. Ces ondes, aussi appelées oscillations baryoniques acoustiques ou BAO (*Baryonic Acoustic Oscillations*), ont laissé des empreintes dans la structure de l'Univers à grande échelle. Lorsque ces BAOs ont cessé de se propager, elles ont formé des surdensités de matière à l'origine des premières galaxies. L'étude des BAOs à travers l'observation des amas de galaxies permet de remonter au taux d'expansion de l'Univers et d'étudier l'énergie noire. Leur analyse nécessite une mesure précise de la distribution spatiale des galaxies, réalisable à partir de mesures de redshift spectrométrique. Ainsi, Euclid va réaliser ces mesures pour une densité de galaxies de 1700 galaxies/deg², et va couvrir un redshift allant de 0.9 à 1.8 avec une précision inférieure à 0.001[1].

Euclid observera les galaxies jusqu'à un redshift de 1.8, couvrant ainsi l'ensemble de la période durant laquelle l'énergie noire a joué un rôle important dans l'expansion de l'Univers [1]. Les spécifications scientifiques pour les deux sondes choisies sont présentées dans le Tableau 1.

^a Cette loi est valable pour les petits *redshift*. Pour les grands *redshift*, il faut ajouter des termes correctifs tenant compte de l'expansion de l'Univers.

Tableau 1 - Résumé des spécifications scientifiques exigées sur les deux sondes cosmologiques d'Euclid.

Cisaillement gravitationnel	
Redshift	0 < z < 1.2
Précision du redshift photométrique	5 %
Densité de galaxies	30 galaxies/arcmin ²
Oscillations Baryoniques Acoustiques	
Redshift	0.9 < z < 1.8
Précision du redshift spectroscopique	0.1 %
Densité de galaxies	1 700 galaxies/deg ²

1.2.2 Présentation de la charge utile d'Euclid

L'observation des sondes cosmologiques est effectuée dans le domaine des longueurs d'onde visible et IR. Dans la bande spectrale IR, l'atmosphère présente des raies d'émission et d'absorption source de pollution. Par ailleurs, la grande précision exigée sur les mesures effectuées requiert une grande stabilité de la qualité optique des instruments. Sur Terre, les perturbations atmosphériques dégradent la qualité des images. Ainsi, ces arguments justifient le besoin d'une mission spatiale pour satisfaire aux besoins scientifiques [1].

Le schéma fonctionnel de la charge utile du satellite Euclid est donné par la **Erreur ! Source du renvoi introuvable.** [8]. Un télescope de type Korsch collecte et fournit du flux de photons pour les deux instruments équipant le satellite : un imageur visible (VIS) et un spectrophotomètre proche infrarouge (ou NISP pour *Near Infrared Spectro-Photometer*).

L'instrument VIS fournira des images de haute qualité dans le visible afin de mesurer la déformation des images de galaxies. Quant à l'instrument NISP, il observera les galaxies dans l'infrarouge proche pour compléter les observations de galaxies effectuées dans le visible et réalisera par ailleurs des mesures de redshift spectrométrique. Ce mode spectrométrique du NISP fait l'objet de la section suivante. Nous détaillerons dans un premier temps les spécifications (imposées par la science) de ce mode de fonctionnement puis nous étudierons la sensibilité de l'instrument avec les paramètres d'observation.

2 L'instrument NISP et les performances de voie IR

L'instrument NISP peut fonctionner selon deux modes : photométrique et spectrométrique. Dans le cadre de cette étude nous nous intéressons uniquement au mode spectrométrique de l'instrument NISP^a.

^a L'étude du mode spectrométrique permettra de mieux mettre en évidence l'effet de la dégradation de la sensibilité de l'instrument sous irradiation de protons dans le cas hypothétique où le substrat des détecteurs n'est pas retiré.

Nous avons vu précédemment que l'observation des BAOs pour répondre aux problématiques de la cosmologie moderne nécessite d'effectuer des mesures de redshift pour une densité de 1700 galaxies/deg², pour une valeur de z comprise entre 0.9 à 1.8 avec une précision inférieure à 0.001. Dans cette section, nous déduirons de ces préconisations scientifiques les spécifications de l'instrument NISP.

2.1 Spécifications du mode spectrométrique de l'instrument NISP

Le *redshift* est mesuré à partir du décalage vers le rouge de la raie d'émission correspondant à la transition d'un électron de l'état excité n=3 à l'état excité n=2 dans l'atome d'hydrogène. Cette raie, appelée H α , est la plus brillante dans les galaxies [1]. La longueur d'onde d'émission se situe dans le visible, à 656.3 nm. Pour couvrir le domaine de redshift allant de 0.9 à 1.8, pour la mesure spectrométrique, il faut alors observer dans le domaine spectral allant de 1.25 μ m à 1.85 μ m (d'après l'équation (1-1)).

Afin de réaliser le relevé spectrométrique de 1700 galaxies/deg², le flux minimum de détection à 1.6 μ m doit être de 2×10^{-16} erg/cm²/s^a [9] soit 1.6×10^{-4} photons/cm²/s. Ce flux minimum est issu de modèles reliant la densité de galaxies observables à la luminosité minimale de détection. Ce flux limite correspond à un rapport signal sur bruit, ou SNR (*Signal Noise Ratio*), supérieur à 3.5 [1]. Ce rapport caractérise **la sensibilité de l'instrument^b**, il sera présenté puis étudié dans le cas d'Euclid dans la sous-section suivante.

Le mode d'observation spectrométrique utilise un *grism* (néologisme formé à partir de *grating* et *prism*). Cette technologie permet d'effectuer de la spectroscopie sans fente et permet ainsi de mesurer

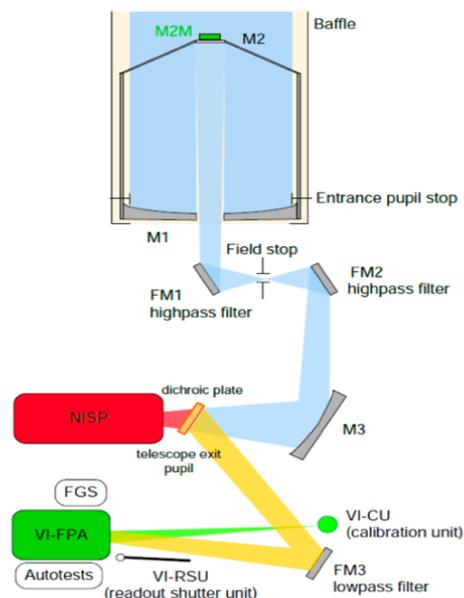


Figure 2 - Schéma de la charge utile d'Euclid, tiré de [3].

^a 1 eV = 1.60218e-12 erg

^b La sensibilité se définit par le signal minimal que l'on peut mesurer.

simultanément le spectre de toutes les sources observées dans le champ de vue de l'instrument. Ainsi, le spectre de chaque source s'étale sur plusieurs pixels. La dispersion des grisms utilisés est de $\delta\lambda/\text{pixel} = 13.4 \text{ \AA}$ [10]. Cependant, dans le cas de deux sources rapprochées angulairement, cette méthode de spectroscopie souffre de problèmes de contamination : certains spectres peuvent se superposer. Pour répondre à cette problématique une scène est observée 4 fois. Chacune de ses observations s'appuie sur l'utilisation de trois *grisms* identiques ayant une orientation différente (0°, 90° et 180°). La quatrième mesure réitère l'emploi d'un *grism* précédemment utilisé. [9].

Les spécifications de l'instrument NISP sont résumées dans le Tableau 2. Afin de détecter les photons dans le domaine spectral $1.25\mu\text{m} < \lambda < 1.85 \mu\text{m}$, l'instrument NISP utilise 16 détecteurs infrarouge (IR) de 2048×2048 pixels ayant un pas pixel de $18 \mu\text{m}$. Ce sont des détecteurs Hawaii 2 RG, noté aussi H2RG, fabriqués par TIS (USA) [11].

Tableau 2 - Récapitulatif des spécifications de l'instruments NISP pour le mode spectrométrie.

Spécifications NISP

Paramètres	Valeurs
<i>Domaine de longueur d'onde</i>	$1.25\mu\text{m} < \lambda < 1.85 \mu\text{m}$.
<i>Dispersion spectrographe</i>	$\delta\lambda/\text{pixel} = 13.4 \text{ \AA}$
<i>Flux limite de détection de Hα</i>	$2 \times 10^{-16} \text{ erg. cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ à $1.6 \mu\text{m}$
<i>Seuil de détection</i>	SNR > 3.5
<i>Durée d'une observation</i>	560s.
<i>Nombre d'observation</i>	4

Ces détecteurs sont fabriqués à partir d'un substrat (cristal massif de CdZnTe) sur lequel est déposé un cristal de HgCdTe, un matériau sensible au rayonnement IR, qui permet de convertir le flux de photons en courant électrique. Des plots d'interconnexion permettent de transmettre ce courant vers un circuit de lecture qui le convertit en tension mesurable. Une description plus détaillée de ces détecteurs, qui font l'objet de cette thèse, sera présentée dans le chapitre 1. Le schéma de principe d'un pixel est présenté sur la Figure 3.

Dans le cas d'Euclid, le substrat (en vert sur la Figure 3) de chaque détecteur est supprimé en fin de fabrication. Comme nous le verrons dans la section III, la suppression complète du substrat permet d'améliorer la sensibilité des détecteurs sous irradiation.

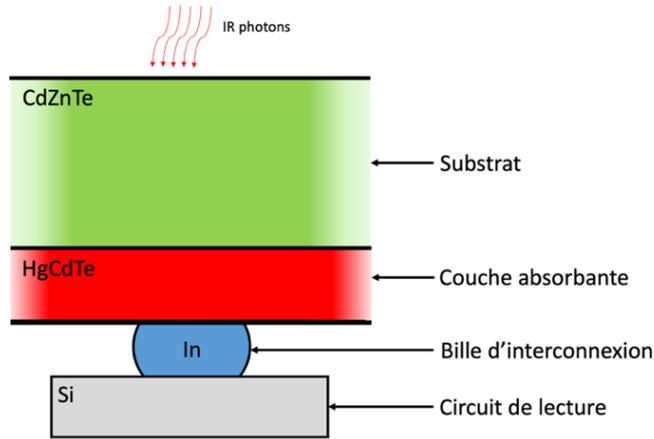


Figure 3 - Schéma de principe d'un pixel de détecteur IR de technologie HgCdTe. Dans le cas d'Euclid, le substrat (en vert) est supprimé en fin de fabrication.

Cependant, la mesure du signal photonique effectuée par ces détecteurs est entachée de bruit qui s'ajoute au signal photonique utile. Afin de vérifier que les conditions d'observation ainsi que les performances de l'instrument permettent de répondre aux spécifications requises par les besoins scientifiques, nous allons effectuer une étude de la sensibilité de l'instrument dans la section suivante. Cette analyse s'appuie sur l'évolution du rapport signal sur bruit en fonction de différents paramètres.

2.2 Étude de sensibilité de l'instrument NISP

2.2.1 Définition du rapport signal sur bruit

J'utilise la définition donnée par l'équation (2-1) pour définir le rapport signal sur bruit ou **SNR** (*Signal to Noise Ratio*). Il correspond au rapport du signal que l'on cherche à mesurer, S_{source} , et du bruit associé à sa mesure, N_{total} .

$$SNR(\lambda) = \frac{S_{source}(\lambda)}{N_{total}(\lambda)} \quad (2-1)$$

N_{total} s'exprime en nombre d'électrons. Il représente le bruit de l'ensemble des signaux qui viennent perturber la mesure. Le signal S_{source} correspond au nombre d'électrons collectés par le détecteur associés à l'observation de la raie H α (le signal utile dans le cas d'Euclid), il s'exprime selon l'équation (2-2)[12], où :

$$S_{source} = F(\lambda) \times A_{col} \times t_{int} \times \eta(\lambda) \times T_{NISP}(\lambda) \times T_{t\acute{e}le}(\lambda) \times N_{expo} \quad (2-2)$$

Où

- $F(\lambda)$ est le flux de photons issus de la source en photons/s/cm²
- A_{col} est la surface de collection en cm²
- t_{int} est le temps d'intégration en secondes
- $\eta(\lambda)$ est l'efficacité quantique interne en électrons/photons
- $T_{NISP}(\lambda)$ et $T_{t\acute{e}le}(\lambda)$ sont les transmissions de l'instrument et du télescope respectivement

- N_{expo} est le nombre d'observations réalisées

L'efficacité quantique interne se traduit mathématiquement par l'équation (2-3), elle correspond au facteur de conversion photons-électrons collectés. En pratique, cette grandeur dépend de la longueur d'onde des photons incidents. Cependant, dans mon étude je néglige cette dépendance chromatique^a.

$$\eta(\lambda) = \frac{\text{Nombre d'électrons collectés}}{\text{Nombre de photons incidents}} \quad (2-3)$$

Le bruit N_{total} , dans l'équation (2-1), peut se définir comme la somme quadratique des différentes sources de bruit, dans la mesure où les bruits sont indépendants, comme exprimé par l'équation (2-4), où :

$$N_{total}(\lambda) = \sqrt{N_{source}^2(\lambda) + N_{pix} \times N_{dark}^2 + N_{pix} \times \sigma_{lecture}^2 + N_{pix} \times N_{fond}^2} \quad (2-4)$$

Où

- $N_{source}^2(\lambda)$ correspond au bruit de poisson associé au flux de photons incidents, il est égal à S_{source} .
- N_{pix} représente le nombre de pixels utilisés dans la mesure.
- N_{dark}^2 correspond au bruit associé à la génération thermique de porteurs dans le détecteur. Il est lié au courant d'obscurité noté I_{dark} exprimé en e⁻/s/pixel. En supposant une statistique poissonnienne, on obtient $N_{dark}^2 = I_{dark} \times t_{int} \times N_{expo}$.
- $\sigma_{lecture}^2$ correspond au bruit de lecture, il s'agit généralement d'un bruit blanc, il s'exprime en e⁻/pixel.
- $N_{fond}^2(\lambda)$ correspond au bruit de poisson associé au flux de photons provenant de l'environnement du détecteur appelé également : le fond. En supposant que le signal du fond photonique, S_{fond} , suit une statistique poissonnienne, $N_{fond}^2(\lambda) = S_{fond}(\lambda)$. Celui-ci s'exprime par l'équation (2-5).

$$S_{fond}(\lambda) = F_{fond}(\lambda) \times t_{int} \times N_{expo} \quad (2-5)$$

Dans l'équation (2-5), $F_{fond}(\lambda)$ comprend différentes contributions : le flux de photons provenant du fond de ciel (lumière zodiacale), ainsi qu'une composante photonique instrumentale. Il s'exprime en e⁻/s/pix.

Ainsi le SNR s'obtient en remplaçant S_{source} et N_{total} par leur expression respective ((2-2) et (2-4)) dans l'équation (2-1). On obtient alors l'équation (2-6). Le SNR dépend du flux de la source, des conditions environnementales d'observation, des spécifications de l'instruments et du détecteur, ainsi que du temps d'observation.

^a C'est une approximation acceptable dans la mesure où les courbes d'efficacité quantique varient peu dans le domaine spectral considéré.

$$SNR(\lambda) = \frac{F(\lambda) \times A_{col} \times t_{int} \times \eta(\lambda) \times T_{NISP}(\lambda) \times T_{t\acute{e}le}(\lambda) \times N_{expo}}{\sqrt{N_{source}^2(\lambda) + N_{pix} \times N_{fond}^2(\lambda) + N_{pix} \times N_{dark}^2 + N_{pix} \times \sigma_{lecture}^2}} \quad (2-6)$$

Cette expression du rapport signal sur bruit permet d'effectuer une étude de sensibilité à partir d'un modèle d'instrument et des conditions d'observation. Cette analyse fait l'objet de la section suivante.

2.2.2 Étude de la sensibilité de l'instrument NISP

Les valeurs des différents paramètres utilisés pour effectuer l'étude de sensibilité sont données dans le Tableau 3. Ces paramètres sont tirés de [10] et [9]. Cependant dans cette étude, ils sont supposés indépendants de la longueur d'onde. En particulier, les transmissions du télescope et de l'instrument NISP ainsi que l'efficacité quantique sont supposées achromatiques.

Tableau 3 – Valeur des paramètres utilisés dans l'estimation du SNR, issu de [10].

Paramètres	Valeurs
Télescope	
Diamètre M1	120 cm
Diamètre M2	11% de M1
Transmission télescope $T_{t\acute{e}le}$	0.773
Détecteur et instrument	
Courant d'obscurité I_{dark} (Spécification)	< 0.07 e-/s/pix
Bruit de lecture $\sigma_{lecture}$ (Spécification)	6 e-
Efficacité quantique η (Spécification)	> 0.75
Transmission instrument T_{NISP}	0.5
Paramètres d'observation	
Durée d'une observation t_{int}	560s
Nombre d'observation N_{expo}	4
Nombre de pixels utilisés pour l'extraction N_{pix}	16 (cas moyen)
Flux du fond F_{fond}	0.84 e-/s/pix

Les informations sur la géométrie des miroirs, primaire et secondaire, permet de calculer la surface de collection, A_{coll} . Le nombre de pixels utilisés pour l'extraction du signal est égal à 16, il correspond au cas moyen rencontré dans Euclid. Le flux photonique du fond comprend deux composantes : le flux de lumière zodiacale et le flux photonique instrumental. Le flux de photons associés au fond de ciel intégré sur le domaine spectral 1.25 μm – 1.85 μm dépend de la direction d'observation et vaut au minimum 0.67 e-/s/pix [2],[5]. Des contraintes de fabrication permettent de maintenir le flux parasite instrumental en dessous du bruit du fond de ciel. Ainsi les flux de photons instrumentaux (télescope et instrument NISP) ne dépassent pas 10 % du flux de photons issus du fond de ciel. Ainsi, le flux du fond intégré sur le même domaine spectral vaut au total $F_{fond}=0.84$ e-/s/pix (la composante de bruit instrumental est de l'ordre de 0.017 e-/s/pix) [10].

L'évolution du rapport signal sur bruit, exprimée par l'équation (2-6), avec les paramètres présentés dans le Tableau 3, est présentée Figure 4. On constate que le SNR calculé (en rouge) reste supérieur au SNR requis par les objectifs scientifiques (en traits tirés noirs) dans ces conditions d'observations pour toutes les longueurs d'onde d'observation.

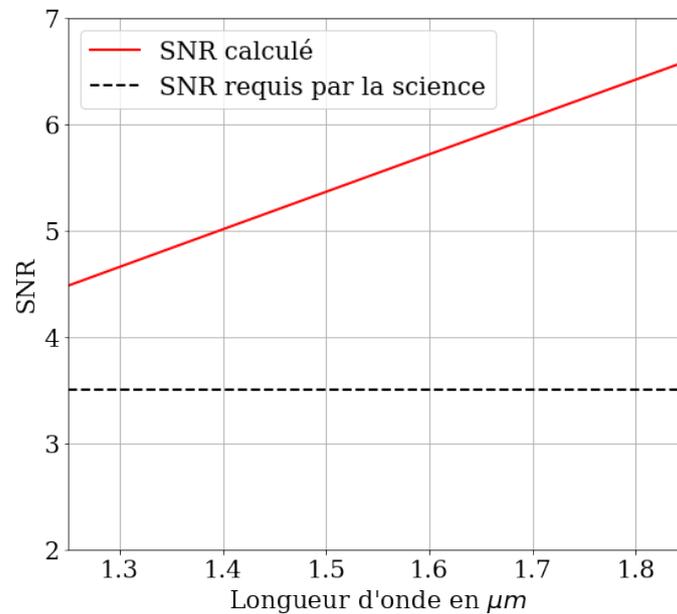


Figure 4 - Évolution du rapport signal sur bruit (SNR, en rouge, exprimé par l'équation (2-6) avec les paramètres exprimés dans le Tableau 3. Le SNR requis par la science est tracé en traits tirés noirs, il vaut 3.5.

En environnement spatial, le satellite et ses instruments sont soumis à un flux continu de particules cosmiques. Ces particules, ionisantes, génèrent un courant parasite dans le détecteur qui s'ajoute au courant photonique utile. L'étude de la sensibilité de l'instrument NISP présentée dans cette section ignore ce rayonnement non photonique. L'influence de l'environnement spatial radiatif sur les performances des détecteurs IR est analysée dans la section suivante.

3 Influence de l'environnement spatial radiatif sur les performances des détecteurs IR

En orbite, le satellite Euclid sera soumis à un flux de particules ionisantes. Dans un premier temps, j'étudierai l'influence de ces particules sur les performances de l'instrument NISP. Puis, dans un second temps et dans une perspective plus large, j'examinerai l'effet du dépôt d'énergie dans les détecteurs IR HgCdTe, lorsque le substrat de CdZnTe n'est pas complètement retiré. Nous verrons alors que le SNR se trouve dégradé et que le nombre de pixels impactés au cours d'une observation par ce rayonnement peut devenir important^a.

^a Nous effectuons ici une étude au premier ordre ainsi nous nous intéressons uniquement aux particules primaires. Les particules secondaires produites par l'interaction des particules primaires avec les différents éléments du satellite ne sont pas considérées. La prise en compte de ces particules

3.1 Effets de l'irradiation sur les détecteurs IR d'Euclid

Euclid sera envoyé au point de Lagrange L2 [1], position dans l'espace où de nombreux satellites ont été, sont ou seront, mis en orbite (par exemple Herschel, Gaia, Planck, *Wilkinson Microwave Anisotropy Probe* (WMAP), *James Webb Space Telescope* (JWST) ou encore *Atmospheric Remote-Sensing Infrared Exoplanet Large-survey* (ARIEL)).

En orbite, le flux moyen sera d'environ 5 particules/cm²/s, principalement des protons (~ 86 %), quelques alpha (~11 %) et quelques pourcents de noyaux plus lourds [14]. En période de minimum solaire les protons ayant une énergie de 1 GeV seront les plus abondants. L'origine ainsi que les caractéristiques de ce rayonnement spatial radiatif seront présentées dans le chapitre 2. L'environnement spatial radiatif d'Euclid est résumé dans le Tableau 4.

Les détecteurs utilisés dans l'instrument NISP permettent une lecture non destructive du signal mesuré par chaque pixel. Ainsi, au cours d'une observation (d'une durée de 560s, pour le mode spectrométrique), des images sont acquises à intervalles de temps réguliers. Sous flux de photons en l'absence de rayonnement cosmique ce signal acquis au cours d'une observation est présenté sur la Figure 5 (à gauche). La valeur de la pente, calculée avec une régression linéaire, permet de remonter au flux lumineux incident.

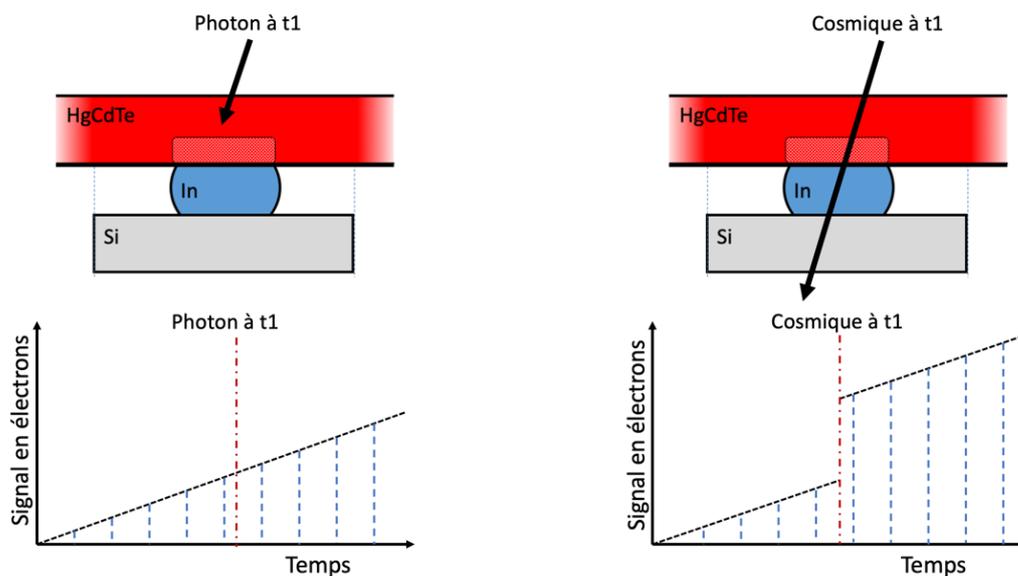


Figure 5 - Schéma de l'interaction d'un photon (à gauche) et d'une particule cosmique (à droite) avec un pixel d'un détecteur d'Euclid. Les traits tirés bleus correspondent aux lectures du signal du pixel.

Cependant, si une particule ionisante interagit avec le pixel au cours d'une acquisition, elle va induire une augmentation rapide du signal mesuré par le détecteur, introduisant une discontinuité. Après cet évènement transitoire, le pixel reprend un comportement normal : son signal évolue suivant le flux

requiert une bonne connaissance de la géométrie du satellite afin de déterminer précisément le nombre de particules susceptibles d'interagir avec le détecteur.

photonique incident. L'évolution schématique du signal d'un pixel affecté par une particule ionisante est représentée sur la Figure 5 (à droite). L'interaction de cette particule ionisante peut altérer un ou plusieurs pixels. Dans le cas d'Euclid, des simulations, effectuées dans le cadre du développement de la mission, ont montré qu'un impact de proton affectait dans la majorité des cas 1 à 2 pixels [10]. Par ailleurs, ces analyses ont mis en évidence qu'au cours d'une observation de type spectrométrique (d'une durée de 560s), 3 % des pixels étaient touchés par une particule cosmique^a.

En fonction de l'énergie de cette particule, l'amplitude de la discontinuité sera plus au moins importante. Au premier ordre, celle-ci peut être estimée par le **transfert d'énergie linéique** (ou **LET**, *Linear Energy Transfer*) qui caractérise la quantité d'énergie perdue par la particule ionisante par unité de distance parcourue dans le matériau cible. Cette grandeur dépend de l'énergie de la particule incidente. Elle s'exprime généralement en MeV/mm. Par exemple, le LET d'un proton de 1 GeV dans le HgCdTe est de 1.11 MeV/mm^b. L'énergie déposée par la particule est ensuite convertie en électrons, lesquels sont ensuite collectés et participent alors au signal mesuré par tous les pixels affectés.

Tableau 4 - Résumé de l'environnement spatial radiatif d'Euclid [14].

**Caractéristique de l'environnement spatiale d'Euclid
(en période de minimum solaire)**

<i>Flux</i>	5 particules/cm ² /s
<i>Spectre</i>	86 % de protons 11 % d'alphas 3 % de noyaux plus lourds
<i>Énergie des protons les plus abondants</i>	1 GeV

Dans le cadre de la mission Euclid, un facteur qualifiant la qualité de la régression linéaire, calculé pour chaque pixel, permet de déterminer si un cosmique a affecté le signal de ce pixel au cours de l'observation. L'échantillonnage temporel du signal mesuré par un pixel (voir Figure 5), permet de déterminer le moment où un proton affecte un pixel. La lecture correspondante est alors exclue de l'analyse. Le flux photonique, issu de l'objet observé est estimé à partir de la pente du signal avant et après l'augmentation subite du signal induite par le cosmique, ce qui augmente néanmoins l'incertitude sur la valeur du flux.

Par conséquent, l'effet des rayons cosmiques ne menace pas les performances de l'instrument NISP. Des méthodes de post-traitement permettent de retrouver le flux de l'objet observé lorsque le pixel est touché par une particule cosmique. Par ailleurs, les simulations ont montré qu'un impact de proton affectait seulement 1 ou 2 pixels.

Comme mentionné précédemment, le substrat CdZnTe des détecteurs utilisés dans l'instrument NISP a été complètement retiré après fabrication. Néanmoins, les détecteurs, de technologie similaire,

^a Appelé aussi un cosmique, par abus de langage.

^b Cette valeur a été calculée avec SRIM (*Stopping and Range of Ion in Matter*), un logiciel de calcul Monte Carlo qui permet de calculer la quantité d'énergie perdue par des ions dans différents matériaux. Ce logiciel sera présenté plus en détail dans le chapitre 2.

sensibles à de plus grandes longueurs d'onde ne sont pas systématiquement amincis. Ainsi, le substrat CdZnTe du détecteur de la voie grande longueur d'onde (coupure $7.8\mu\text{m}$) d'ARIEL, sera probablement seulement aminci et non intégralement supprimé. Par ailleurs, des détecteurs avec un substrat partiellement retiré ont été étudiés dans le cadre de la mission *Near-Earth Object Camera* (NEOCam) [15].

Le retrait ou non du substrat est une question importante, notamment dans le cadre de la spatialisation de ces détecteurs, puisque l'interaction des particules ionisantes avec le substrat est à l'origine de la dégradation des performances de détection sous irradiation. En effet, une élévation du signal du fond du détecteur a été observée lorsque le substrat est resté intact après fabrication [15]–[18].

Dans la section suivante, la problématique liée à l'interaction de particules ionisantes avec le substrat de CdZnTe est présentée en détail. Puis, une étude de la sensibilité de l'instrument NISP est effectuée, dans le cas hypothétique où le substrat des détecteurs d'Euclid n'est pas intégralement supprimé. Nous verrons alors que le SNR présenté précédemment est dégradé.

3.2 Problématique du dépôt d'énergie dans le substrat CdZnTe des détecteurs IR

Lors des phases de développement de la voie proche IR de l'instrument *Wide Field Camera 3* (WFC3) du *Hubble Space Telescope* (HST), Johnson et al. ont irradié des détecteurs H1RG non amincis (l'épaisseur de substrat est d'environ $800\mu\text{m}$). Ces détecteurs sont similaires aux détecteurs H2RG d'Euclid : de format plus petit, la technologie est analogue et le domaine d'absorption est sensiblement identique. Outre l'effet du dépôt d'énergie dans le HgCdTe, **l'étude des évènements transitoires a mis en évidence l'existence d'un signal du fond diffus au voisinage des pixels affectés par le passage de protons** [16].

Une étude expérimentale, menée par Waczynski et al. [17], fait l'hypothèse que **cette élévation du signal du fond est associée à la luminescence du substrat de CdZnTe**. Une partie des porteurs excités dans le substrat par la particule ionisante se désexcite en émettant un photon, on parle alors de recombinaison radiative. Ces photons seraient ensuite détectés par la couche de HgCdTe, ajoutant un signal photonique parasite au signal photonique utile (issu des étoiles par exemple). Leur hypothèse est basée sur l'observation de similitudes dans la cartographie de l'efficacité quantique à 800 nm (qui correspond à l'énergie de gap du CdZnTe à 80 K et qui correspondrait à l'énergie des photons émis par désexcitation dans le CdZnTe) avec la valeur du signal du fond mesuré sous irradiation. En irradiant des détecteurs avec des protons de 63 MeV à une fluence de $7\,000\text{ protons/cm}^2$, ce signal du fond mesuré s'élève à $11\,000\text{ e}^-/\text{pixel}$. Ainsi, d'après ces travaux, une augmentation globale du courant circulant dans chaque pixel est observée sous irradiation.

Waczynski et al. ont observé une relation linéaire entre le signal du fond mesuré sous irradiation de protons de 30 MeV , normalisé par la fluence et le LET^a, et le signal de fond mesuré sous irradiation de protons de 63 MeV , normalisé par la fluence et le LET. Le facteur de proportionnalité estimé par cette équipe est égal à 0.88 [17].

^a Il s'agit du LET calculé dans le substrat de CdZnTe

A partir de cette relation linéaire, je vais maintenant calculer la valeur du SNR sous irradiation de proton en faisant l'hypothèse que le substrat des détecteurs d'Euclid n'ait pas été retiré. En supposant que la relation linéaire présentée dans le paragraphe précédent est applicable si l'on considère un proton de 1 GeV, on peut estimer l'élévation du fond attendue dans les conditions d'observation d'Euclid. Ceci se traduit par l'équation (3-1).

$$\frac{\text{Signal de fond à } 1 \text{ GeV}}{\text{LET à } 1 \text{ GeV} \times \text{Fluence}} = 0.88 \times \frac{\text{Signal de fond à } 63 \text{ MeV}}{\text{LET à } 63 \text{ MeV} \times \text{Fluence}} \quad (3-1)$$

Le LET d'un proton de 63 MeV dans le substrat de CdZnTe est de 3.5 MeV/mm et de 0.80 MeV/mm pour un proton de 1 GeV. La fluence est calculée en multipliant le flux de protons reçu au niveau des détecteurs IR du NISP d'Euclid (5 particules/s/cm²) par la durée d'une observation (560 s). Ainsi, le signal du fond estimé sous irradiation de proton de 1 GeV est de 885 e⁻/pix. Le flux est obtenu en divisant la fluence par la durée d'une acquisition, soit 1.59 e⁻/s/pix. Par conséquent, d'après ses travaux, sous irradiation de protons, un courant additionnel s'ajoute au courant généré par le flux photonique utile de l'objet que l'on souhaite observer.

A partir de l'estimation de ce signal du fond parasite nous allons effectuer une nouvelle étude du SNR dans le cas d'Euclid. Ce signal du fond induit par l'irradiation de protons s'ajoute au courant d'obscurité, I_{dark} , du détecteur (mentionné dans la section 2.2.2.1.). Sur la Figure 6, la valeur du SNR en tenant compte de l'effet de l'interaction des protons avec le substrat de CdZnTe est tracée en trait plein rouge. En traits tirés rouges, la valeur du SNR précédemment calculée, correspondant au cas attendu d'Euclid dans la configuration présentée dans la section 2.2.2.. Le trait noir horizontal correspond au SNR requis par les objectifs scientifiques. On constate sur la Figure 6, que lorsque le substrat n'est pas retiré après fabrication, le SNR est dégradé. Dans la moitié du domaine spectral d'étude, le SNR est en dessous du seuil de SNR de référence. L'instrument ne répond plus aux spécifications imposées par les besoins scientifiques. Une modification de la stratégie d'observation permettrait d'augmenter la valeur du SNR. Par exemple, en allongeant le temps d'observation. Néanmoins, cette option augmenterait considérablement la durée totale de la mission pour couvrir le même champ total.

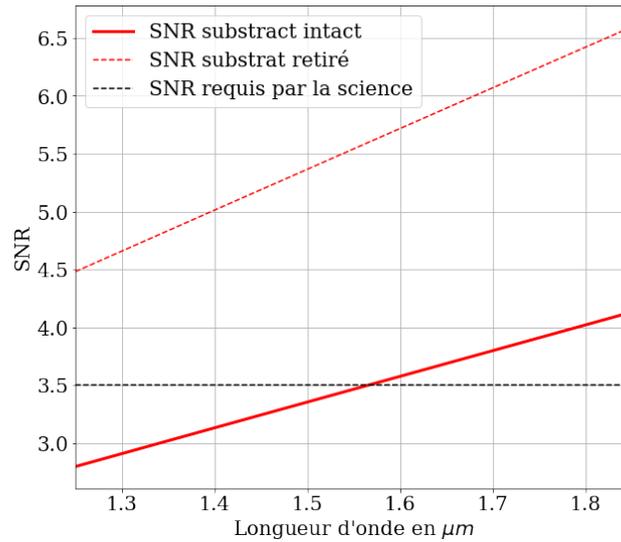


Figure 6 - Évolution du rapport signal sur bruit SNR, en rouge traits tirés, exprimé par l'équation (2-6) avec les paramètres exprimés dans le Tableau 2. Cela correspond au cas attendu d'Euclid sans l'effet du dépôt d'énergie dans le substrat. En trait plein, la valeur du SNR en tenant compte de l'élévation du fond induite par l'irradiation de protons. En noir, la valeur de SNR requise par la science.

Outre l'élévation du fond, Smith et al. [18] ont mis en évidence que le nombre de pixels affectés par l'impact d'une particule cosmique était plus grand lorsque le substrat de CdZnTe n'était pas retiré après fabrication. Leur étude porte sur l'irradiation de détecteurs H2RG avec des protons de 63 MeV. La différence d'images consécutives acquises sous irradiation est présentée sur la Figure 7. La Figure 7(a) correspond à la différence d'images prises avec un détecteur dont le substrat est intact (~ 800 μm). La Figure 7 (b) présente la différence d'images consécutives acquises avec un détecteur dont le substrat a été complètement retiré en fin de fabrication. Sur l'image (a), les taches blanches et noires correspondent aux impacts de protons sur le détecteur. Les protons n'affectant pas les mêmes pixels sur deux images, la différence de deux images révèle alors ces taches de couleurs différentes. Sur la Figure 7 (b), acquise avec un détecteur au substrat complètement retiré, les différents pixels affectés par l'impact des protons ne sont pas visibles. Ces derniers affectent majoritairement un unique pixel [18]. On constate alors que le nombre de pixels affectés par un proton est plus important lorsque le substrat est intact. Cette augmentation suggère qu'un plus grand nombre de pixels devront être traités, particulièrement durant l'analyse des données. Deux problèmes peuvent alors apparaître :

- L'efficacité de détection de ces pixels peut être réduite. Notamment pour les pixels éloignés de l'impact où la discontinuité induite par le cosmique est très faible.
- L'augmentation du nombre de pixels affectés par impact de cosmique s'accompagne d'une augmentation de l'incertitude sur les flux mesurés au cours d'une observation.

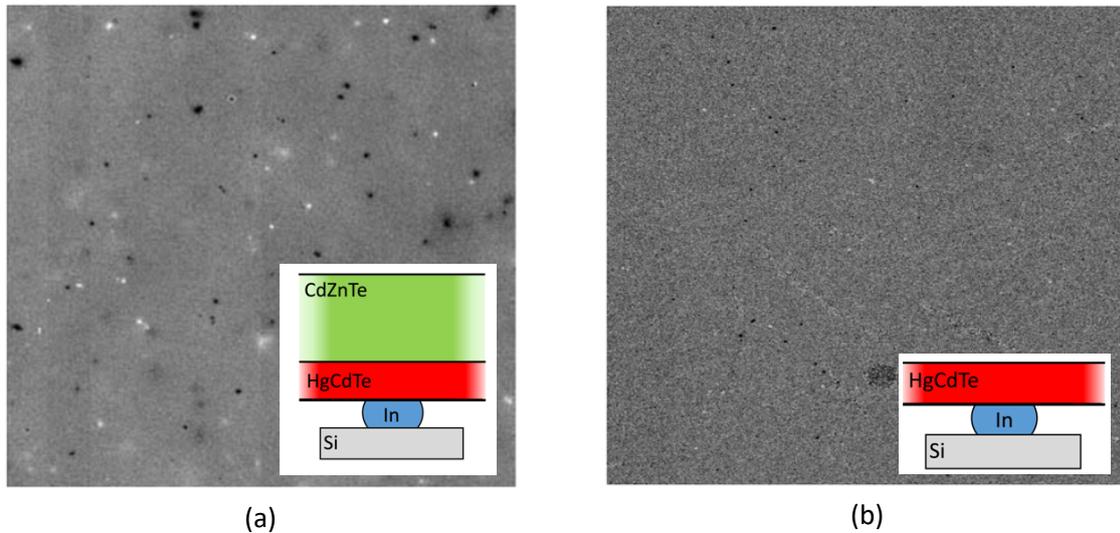


Figure 7 – Différence d'images consécutives acquises sous irradiation de proton d'énergie 63 MeV avec des détecteurs IR HgCdTe. (a) le substrat CdZnTe du détecteur est intact (non aminci) après fabrication. (b) le substrat CdZnTe est retiré. Tiré de [18].

Le retrait complet du substrat résout radicalement les problématiques d'augmentation du signal du fond et du nombre de pixels affectés par un impact [15], [17], [18]. En revanche, le processus de retrait du substrat est une étape délicate lors de la fabrication du détecteur, réduisant le rendement de production [15]. Par ailleurs, la suppression du substrat fragilise la tenue mécanique du détecteur.

Par conséquent, plusieurs questions que je vais traiter dans ce manuscrit se posent :

- Le retrait intégral du substrat est-il indispensable ?
- Un amincissement partiel du substrat permet-il de réaliser des observations de hautes performances exigées par les besoins scientifiques ?
- Quelle est l'épaisseur de substrat que l'on peut accepter pour une application donnée ?

Une étude récente [15] a montré qu'un détecteur HgCdTe dont le substrat de CdZnTe est partiellement aminci (30 μm de substrat résiduel) ne manifestait pas d'élévation du fond sous irradiation. Néanmoins les processus physiques mis en jeu ne sont pas bien compris. C'est dans cet axe que s'inscrivent mes travaux de thèse. Jusqu'à présent, il n'existe pas de modèle décrivant l'effet du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe sur la réponse des détecteurs IR basés sur la technologie HgCdTe. Une meilleure compréhension du phénomène permettrait aux fabricants de déterminer une épaisseur de substrat assurant le fonctionnement du détecteur dans des conditions optimales pour les missions spatiales astronomiques, en minimisant la pollution d'image induite par l'irradiation.

4 Conclusions du chapitre

Nous avons vu, au travers de l'étude du cas de la mission spatiale Euclid, que les performances des instruments découlent directement des besoins scientifiques. Par ailleurs, nous avons pu constater que les performances instrumentales, les performances des détecteurs ainsi que les conditions d'observation permettent effectivement de répondre aux exigences scientifiques.

En orbite, le satellite sera soumis à un flux de particules ionisantes. Nous avons pu constater, dans le cas d'Euclid, que l'effet du rayonnement cosmique ne menace pas les objectifs scientifiques. Le substrat des détecteurs IR de l'instrument NISP est intégralement retiré. Ce retrait complet du substrat est d'une importance cruciale dans le cas d'Euclid. En effet, nous avons vu que lorsque le substrat n'est pas retiré, les détecteurs IR souffraient d'une augmentation du signal de fond sous irradiation. En faisant l'hypothèse que le substrat des détecteurs IR d'Euclid soit resté intact après fabrication, nous avons observé une dégradation de la sensibilité de l'instrument NISP sous irradiation. Bien que le substrat des détecteurs d'Euclid soit retiré, ce processus est une étape délicate dans la fabrication des détecteurs. Ainsi, ce constat soulève les questions suivantes :

- Le retrait complet du substrat est-il indispensable ?
- Un amincissement partiel du substrat permet-il de réaliser des observations de hautes performances exigées par les besoins scientifiques ?

Une étude récente a montré qu'un amincissement partiel du substrat était suffisant pour réduire l'effet de l'augmentation du signal de fond sous irradiation. Cependant, il n'existe pas de modèle permettant de décrire l'effet des radiations sur les détecteurs IR dont le substrat n'est pas supprimé dans sa totalité. En outre, les processus physiques à l'origine de l'élévation de fond observée par certaines équipes ne sont pas bien compris.

L'objectif de cette thèse est de développer un modèle qui permet d'étudier l'effet des radiations dans les détecteurs IR de technologie HgCdTe, en tenant compte de l'effet du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe. Les paramètres de ce modèle sont basés sur des mesures de propriétés matériaux, effectuées dans cette thèse sur des substrats représentatifs de CdZnTe. Enfin, des images acquises sous irradiation sont comparées aux images simulées. Cette dernière étape permettra de valider le modèle développé au cours de mes trois années de thèse.

Références

- [1] R. Laureijs *et al.*, « Euclid Definition Study Report », *ArXiv E-Prints*, vol. 1110, p. arXiv:1110.3193, oct. 2011.
- [2] A. G. Riess *et al.*, « Observational Evidence from Supernovae for an Accelerating Universe and a Cosmological Constant », *Astron. J.*, vol. 116, n° 3, p. 1009–1038, sept. 1998, doi: 10.1086/300499.
- [3] S. Perlmutter *et al.*, « Measurements of Ω and Λ from 42 High-Redshift Supernovae », *Astrophys. J.*, vol. 517, n° 2, p. 565, juin 1999, doi: 10.1086/307221.
- [4] J. A. Frieman, M. S. Turner, et D. Huterer, « Dark Energy and the Accelerating Universe », *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, vol. 46, n° 1, p. 385-432, 2008, doi: 10.1146/annurev.astro.46.060407.145243.
- [5] F. Zwicky, « Die Rotverschiebung von extragalaktischen Nebeln », *Helvetica Phys. Acta*, vol. 6, p. 110-127, 1933.
- [6] G. Bertone et D. Hooper, « History of dark matter », *Rev. Mod. Phys.*, vol. 90, n° 4, p. 045002, oct. 2018, doi: 10.1103/RevModPhys.90.045002.
- [7] N. A. Bahcall, « Hubble's Law and the expanding universe », *Proc. Natl. Acad. Sci.*, vol. 112, n° 11, p. 3173, mars 2015, doi: 10.1073/pnas.1424299112.
- [8] G. D. Racca *et al.*, « The Euclid mission design », in *Space Telescopes and Instrumentation 2016: Optical, Infrared, and Millimeter Wave*, juill. 2016, vol. 9904, p. 99040O, doi: 10.1117/12.2230762.
- [9] T. Maciaszek *et al.*, « Euclid near infrared spectrophotometer instrument concept and first test results at the end of phase B », in *Space Telescopes and Instrumentation 2014: Optical, Infrared, and Millimeter Wave*, août 2014, vol. 9143, p. 91430K, doi: 10.1117/12.2056702.
- [10] B. Serra, « Caractérisation des détecteurs infrarouges de la mission spatiale Euclid : étude des performances des détecteurs infrarouges H2RG », thesis, Aix-Marseille, 2016.
- [11] J. W. Beletic *et al.*, « Teledyne Imaging Sensors: infrared imaging technologies for astronomy and civil space », in *High Energy, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy III*, juill. 2008, vol. 7021, p. 70210H, doi: 10.1117/12.790382.
- [12] I. S. McLean, *Electronic imaging in astronomy: detectors and instrumentation*. Berlin]; Chichester, UK: Springer ; Published in association with Praxis Pub., 2010.
- [13] G. Aldering, « SNAP sky background at the north ecliptic pole », *UNT Digital Library*, janv. 07, 2002. <https://digital.library.unt.edu/ark:/67531/metadc785240/> (consulté le avr. 15, 2020).
- [14] A. Eealet, A. Chapon, J. Zoubian, et K. Ganga, « Cosmic ray impact on NISP spectroscopic performance », CPPM, APC, 2013.
- [15] M. L. Dorn *et al.*, « Proton irradiation results for long-wave HgCdTe infrared detector arrays for Near-Earth Object Camera », *J. Astron. Telesc. Instrum. Syst.*, vol. 2, n° 3, p. 036002, août 2016, doi: 10.1117/1.JATIS.2.3.036002.
- [16] S. D. Johnson *et al.*, « Radiation effects in WFC3 IR detectors », in *Focal Plane Arrays for Space Telescopes*, janv. 2004, vol. 5167, p. 243-257, doi: 10.1117/12.508443.
- [17] A. Waczynski *et al.*, « Radiation induced luminescence of the CdZnTe substrate in HgCdTe detectors for WFC3 », in *Focal Plane Arrays for Space Telescopes II*, San Diego, California, USA, août 2005, p. 59020P, doi: 10.1117/12.617716.
- [18] R. Smith *et al.*, « Noise and zero point drift in 1.7 μ m cutoff detectors for SNAP », in *High Energy, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy II*, juin 2006, vol. 6276, p. 62760R, doi: 10.1117/12.672616.

Chapitre 1

Les détecteurs infrarouges en environnement spatial

Table des matières

1	LES DETECTEURS IR EN ASTROPHYSIQUE	33
1.1	INTRODUCTION AU RAYONNEMENT IR.....	33
1.1.1	<i>Le spectre électromagnétique</i>	<i>33</i>
1.2	LES DIFFERENTS TYPES DE DETECTEURS IR	35
1.2.1	<i>Les détecteurs thermiques.....</i>	<i>35</i>
1.2.2	<i>Les détecteurs quantiques</i>	<i>36</i>
1.2.3	<i>Les détecteurs IR pour l'astrophysique spatiale.....</i>	<i>36</i>
1.3	PRINCIPE DE FONCTIONNEMENT DES DETECTEURS PHOTOVOLTAÏQUES	37
1.3.1	<i>Introduction aux semi-conducteurs</i>	<i>37</i>
1.3.2	<i>Transition inter-bandes dans les semi-conducteurs : l'effet photoélectrique.....</i>	<i>39</i>
1.3.3	<i>Dopage</i>	<i>40</i>
1.3.4	<i>Jonction PN.....</i>	<i>41</i>
1.4	LES MATRICES DE DETECTEURS HgCdTe	43
1.4.1	<i>Architecture générale.....</i>	<i>44</i>
1.4.2	<i>Description du substrat de CdZnTe.....</i>	<i>44</i>
1.4.3	<i>La couche absorbante de HgCdTe.....</i>	<i>48</i>
1.4.4	<i>Le circuit de lecture.....</i>	<i>50</i>
1.4.5	<i>Nouveaux développements dans les détecteurs IR HgCdTe</i>	<i>51</i>
2	EFFETS DES PARTICULES CHARGÉES SUR LES DETECTEURS IR	52
2.1	L'ENVIRONNEMENT SPATIAL RADIATIF	52
2.1.1	<i>Le rayonnement cosmique galactique.....</i>	<i>52</i>
2.1.2	<i>Les événements solaires</i>	<i>53</i>
2.1.3	<i>Les particules piégées.....</i>	<i>55</i>
2.1.4	<i>Résumé des environnements radiatifs spatiaux et comparaison avec les environnements artificiels</i>	<i>55</i>
2.2	INTERACTION PARTICULE MATIERE	56
2.2.1	<i>Introduction du LET et du pouvoir d'arrêt.....</i>	<i>57</i>
2.2.2	<i>Interaction nucléaire entre une particule incidente et le milieu cible.....</i>	<i>59</i>
2.2.3	<i>Interaction de la particule incidente avec le cortège électronique du milieu cible</i>	<i>60</i>

2.2.4	<i>Les effets de l'interaction de particules ionisantes sur les composants électroniques</i>	62
2.3	EFFETS DES RADIATIONS SUR LES DETECTEURS IR HgCdTe ET PROBLEMATIQUE DU DEPOT D'ENERGIE DANS LE SUBSTRAT DE CdZnTe.....	64
2.3.1	<i>Effets de dose dans la couche de HgCdTe.....</i>	64
2.3.2	<i>Effets transitoires dans la couche de HgCdTe.....</i>	64
2.3.3	<i>Problématiques du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe.....</i>	66
2.3.4	<i>Outils de modélisation de l'effet des radiations sur les composants électroniques.....</i>	67
3	CONCLUSIONS DU CHAPITRE	68
	REFERENCES	69

Dans le chapitre précédent, j'ai introduit la problématique associée aux dégradations des performances des détecteurs infrarouges (IR) non amincis sous irradiations de protons en environnement spatial à travers l'étude de la mission spatiale EUCLID. Nous avons constaté, dans le cas hypothétique où les substrats des détecteurs étaient intacts, que la sensibilité du spectromètre IR se trouvait dégradée suite à l'interaction des protons avec le substrat. Les mécanismes à l'origine de cette dégradation restent mal connus. L'objectif de cette thèse est de modéliser et caractériser expérimentalement les effets de l'interaction des protons avec le substrat sur la réponse des détecteurs IR sous irradiation de protons et de comprendre finement les processus qui conduisent à une dégradation des performances sous irradiation de protons.

L'objectif de ce chapitre est d'introduire les concepts utilisés tout au long de ce manuscrit. Nous étudierons dans un premier temps le rayonnement IR ainsi que les différentes technologies de détecteurs IR utilisées, en distinguant les détecteurs quantiques des détecteurs thermiques. Les détecteurs IR de technologie HgCdTe étudiés dans cette thèse sont des détecteurs quantiques dits photovoltaïques. Je détaillerai alors le fonctionnement de ces détecteurs dont le principe de détection est basé sur l'effet photo-électrique. Puis, je présenterai le détail de l'architecture de ces détecteurs. Dans la suite, après avoir introduit les concepts associés aux détecteurs IR, j'évoquerai les effets de l'environnement spatial radiatif sur les composants électroniques. J'introduirai les différentes composantes de l'environnement spatial radiatif puis les mécanismes physiques mis en jeu lors de la pénétration de particules ionisantes dans la matière. Enfin, je discuterai des effets du rayonnement ionisant sur les détecteurs de technologie HgCdTe mentionnés dans la littérature.

1 Les détecteurs IR en astrophysique

1.1 Introduction au rayonnement IR

1.1.1 Le spectre électromagnétique

Au 17^{ème} siècle, avec son expérience historique de décomposition de la lumière par un prisme, Newton met en évidence la nature polychromatique de la lumière blanche. Celle-ci constitue la partie visible par l'œil humain de ce qui sera appelé plus tard le spectre électromagnétique. L'interprétation de la lumière comme onde électromagnétique (caractérisée par la propagation d'un champ électrique et magnétique) apparaît avec Maxwell dans la seconde moitié du 19^{ème} siècle. Il prédit alors l'existence d'ondes électromagnétiques à toutes les fréquences (de zéro à "l'infini") formant ainsi un spectre [1]. Ces ondes sont issues de la propagation d'un champ électrique et magnétique, elles sont caractérisées par leur périodicité spatiale appelée longueur d'onde. Un rayonnement électromagnétique constitué d'une seule longueur d'onde est dit monochromatique. La connaissance de ce spectre est restreinte au domaine visible jusqu'au début du 19^{ème}. En 1800, elle est d'abord étendue par Herschel avec la découverte par hasard du rayonnement infrarouge (IR) [2] puis un an plus tard aux courtes longueurs d'onde par Johann Wilhelm Ritter avec le rayonnement ultraviolet (UV) [3]. A très grande longueur d'onde, au-delà du rayonnement IR se trouve les ondes radios dont la découverte a été rendue possible avec les travaux du physicien Heinrich Hertz [3]. Les rayonnements X et Gamma de plus courtes longueurs d'onde, inférieures à l'UV, sont découverts avec le

développement des tubes électriques et de la physique nucléaire. L'ensemble du spectre électromagnétique est présenté sur la Figure 8.

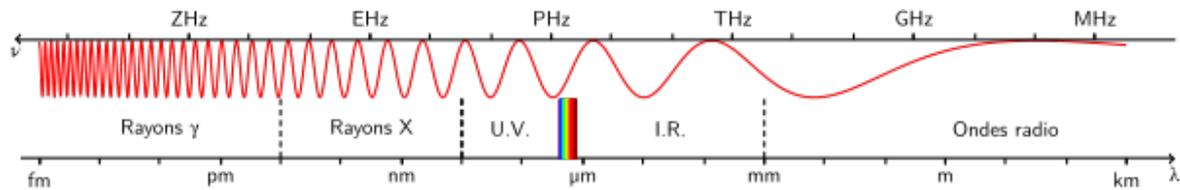


Figure 8 - Spectre électromagnétique.

Le domaine spectral IR s'étend plus particulièrement du visible aux micro-ondes, de $0.9 \mu\text{m}$ à $30 \mu\text{m}$. En astronomie, l'observation du rayonnement IR depuis la Terre est limitée par son absorption par les molécules d'eau et les molécules de dioxyde de carbone présentes dans l'atmosphère. Néanmoins, il existe des bandes spectrales, parfois appelées fenêtres IR, dans lesquelles l'atmosphère est transparente (voir Figure 9). En astronomie, ces fenêtres portent un nom J, H, K, L, M ou N toutes définissant un domaine spectral d'observation :

- La bande J entre $1.1 \mu\text{m}$ et $1.4 \mu\text{m}$
- La bande H entre $1.5 \mu\text{m}$ et $1.8 \mu\text{m}$
- La bande K entre $2.0 \mu\text{m}$ et $2.4 \mu\text{m}$
- La bande L entre $3.0 \mu\text{m}$ et $4.0 \mu\text{m}$
- La bande M entre $4.6 \mu\text{m}$ et $5.0 \mu\text{m}$
- La bande N entre $7.5 \mu\text{m}$ et $14.5 \mu\text{m}$

Cependant, il existe une nomenclature alternative couramment utilisée, basée, elle aussi, sur les fenêtres de transmission. Cette description est issue du domaine militaire. Elle est donnée ci-après :

- Le très proche IR (NIR : *Near IR*), allant de $0.8 \mu\text{m}$ à $1.5 \mu\text{m}$
- Le proche IR (SWIR : *short wave IR*) entre $1.5 \mu\text{m}$ et $3 \mu\text{m}$
- Le moyen IR (MWIR : *medium wave IR*) entre $3 \mu\text{m}$ et $5 \mu\text{m}$
- L'IR lointain (LWIR : *long wave IR*) entre $8 \mu\text{m}$ et $12 \mu\text{m}$
- L'IR très lointain (VLWIR : *very long wave IR*) au-delà de $12 \mu\text{m}$

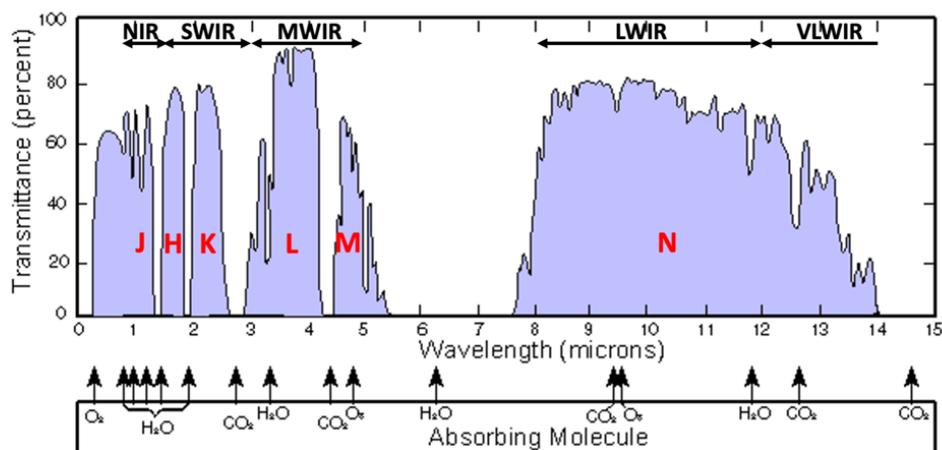


Figure 9 - Fenêtre de transmission de l'atmosphère dans le domaine IR. Les lettres J, H, K, L, M, et N représente les différentes fenêtres transparentes selon la nomenclature utilisée en astronomie. Les domaines spectraux NIR, SWIR, MWIR et LWIR sont aussi représentés.

Les deux nomenclatures, superposées au spectre de transmission de l'atmosphère, sont présentées sur la Figure 9. Bien que ces dénominations soient à l'origine associées aux observations du rayonnement IR sur Terre, influencées par l'atmosphère, celles-ci sont utilisées par extension aux détecteurs IR utilisés en astrophysique spatiale. Dans cette thèse, j'utiliserai la subdivision NIR, SWIR, MWIR, LWIR et VLWIR (plus explicite que la nomenclature utilisée en astronomie) lorsqu'il s'agira d'évoquer les différents domaines de longueur d'onde.

1.2 Les différents types de détecteurs IR

L'objectif des instruments IR des observatoires spatiaux est de détecter ces photons IR. Pour ce faire on utilise des détecteurs de photons que l'on classe en deux catégories : les détecteurs thermiques et les détecteurs quantiques. Les caractéristiques de ces deux types de détecteurs sont présentées dans les deux paragraphes suivants.

1.2.1 Les détecteurs thermiques

Lors de la découverte du rayonnement IR, Herschel a jeté les bases des détecteurs thermiques en utilisant un thermomètre pour mesurer une élévation de température induite par le rayonnement incident. Les détecteurs thermiques sont constitués d'un matériau absorbant, sensible aux rayonnements électromagnétiques, et d'un thermomètre. L'élévation de température qui résulte de l'absorption des photons IR modifie les propriétés physiques du matériau. Ce changement est ensuite utilisé pour générer un signal électrique. Par exemple dans le cas des bolomètres c'est une variation de la résistance électrique qui est mesurée.

Ces détecteurs mesurent une variation d'une grandeur physique, on parle alors de détection relative. Dans certains cas, ces variations sont mesurables à température ambiante, c'est la raison pour laquelle on parle de filière "non refroidie". Par opposition aux détecteurs IR dit « refroidis » qui fonctionnent à des températures cryogéniques. Longtemps cantonné au domaine militaire, l'IR trouve aujourd'hui des applications dans le domaine commercial et le domaine industriel. L'ouverture du marché des détecteurs IR à de nouveaux secteurs favorise le développement de ces détecteurs bon marché. Ainsi, les détecteurs bolométriques, bénéficiant toujours d'importants développements, sont aujourd'hui les plus produits [4].

Aujourd'hui, les détecteurs non refroidis les plus utilisés sont des bolomètres à base d'oxyde de vanadium (VOx) ou de silicium amorphe (a-Si). Ce type de détecteur souffre de limites de performances intrinsèques aux propriétés matériau : l'augmentation de la vitesse de réponse s'accompagne d'une diminution de la sensibilité du détecteur. Cependant, en offrant des coûts de fabrications faibles ainsi qu'une consommation électrique moindre que les détecteurs quantiques ces détecteurs trouvent des applications dans de nombreux domaines militaire et civil (assistance de conduite, contrôle de processus industriels, lutte contre les incendies, surveillance aux frontières, secours, ...) [4].

1.2.2 Les détecteurs quantiques

Les détecteurs quantiques, aussi appelés détecteurs de photons, sont des détecteurs dans lesquels les photons sont absorbés dans le matériau par des électrons liés à un réseau cristallin, à des impuretés ou par des électrons libres. La modification de l'état électronique du matériau induit par l'absorption du photon permet d'obtenir un signal électrique. L'énergie du photon incident sur le détecteur doit être suffisamment importante pour exciter un porteur susceptible de participer au signal électrique. Ce processus de génération entre en compétition avec la génération de porteurs par agitation thermique. C'est la raison pour laquelle ces détecteurs fonctionnent à des températures cryogéniques : on parle de filière "refroidie".

Il existe deux catégories de détecteurs quantiques : les détecteurs photovoltaïques (PV) et les détecteurs photoconducteurs (PC). Dans le premier cas, la détection s'appuie sur l'utilisation d'une jonction PN (hétérostructure semi-conductrice), permettant de limiter le courant circulant dans la structure, modérant ainsi la consommation électrique. En revanche, dans les détecteurs PC, constitués d'un matériau semi-conducteur dopé mis sous tension, le courant peut potentiellement devenir important. Par ailleurs, la grandeur mesurée est différente dans les deux configurations dans un PC, on mesure un courant alors que dans un détecteur PV on mesure une différence de potentiel aux bornes d'une capacité.

Différents matériaux peuvent être utilisés pour réaliser ces détecteurs, les matériaux intrinsèques (comme le HgCdTe, l'InSb, InAs [5]), les matériaux extrinsèques comme les BIB (*Blocked Impurity Band* [6]) ainsi que les matériaux artificiels parmi lesquels on trouve par exemple les détecteurs à puits quantiques [7] (ou QWIP pour *Quantum Well Infrared Photodetector*), les super-réseaux [8] (ou SL pour *Super Lattice*) ou encore les boîtes à puits quantiques [9]. Les filières de détecteurs HgCdTe sont parmi les plus matures à la différence de certaines filières de détecteurs aux matériaux synthétiques dites émergentes [10].

Aujourd'hui, tous domaines confondus, la technologie HgCdTe reste la plus utilisée dans le domaine IR ($1 \mu\text{m} < \lambda < 25 \mu\text{m}$) parmi les technologies quantiques [10]. Bien que les matériaux III-V, tels que l'InSb et l'InGaAs offrent, de par la nature des liaisons mises en jeu, une meilleure stabilité et robustesse, ils présentent des problématiques inhérentes à la qualité du cristal [2].

1.2.3 Les détecteurs IR pour l'astrophysique spatiale

Sur la Figure 10, différentes missions scientifiques ainsi que leurs instruments et leurs détecteurs IR sont présentées. Dans la gamme spectrale $1 \mu\text{m} - 20 \mu\text{m}$, ce sont principalement des détecteurs quantiques qui sont utilisés à savoir des détecteurs InSb, HgCdTe et BIB (Si:As principalement). Hormis les détecteurs HgCdTe de la sonde Cassini, fabriqués au CEA-LETI, les détecteurs HgCdTe utilisés par les missions spatiales en astrophysique sont fournis par l'entreprise américaine TIS.

Pour répondre à ces besoins scientifiques et ces besoins d'indépendance technologique, l'ESA finance le développement de détecteurs IR en Europe. Elle soutient à la fois les filières IR classiques pour l'astrophysique (HgCdTe, InGaAs), ainsi que les technologies IR prometteuses : comme les SLs ou les détecteurs non-refroidis [11].

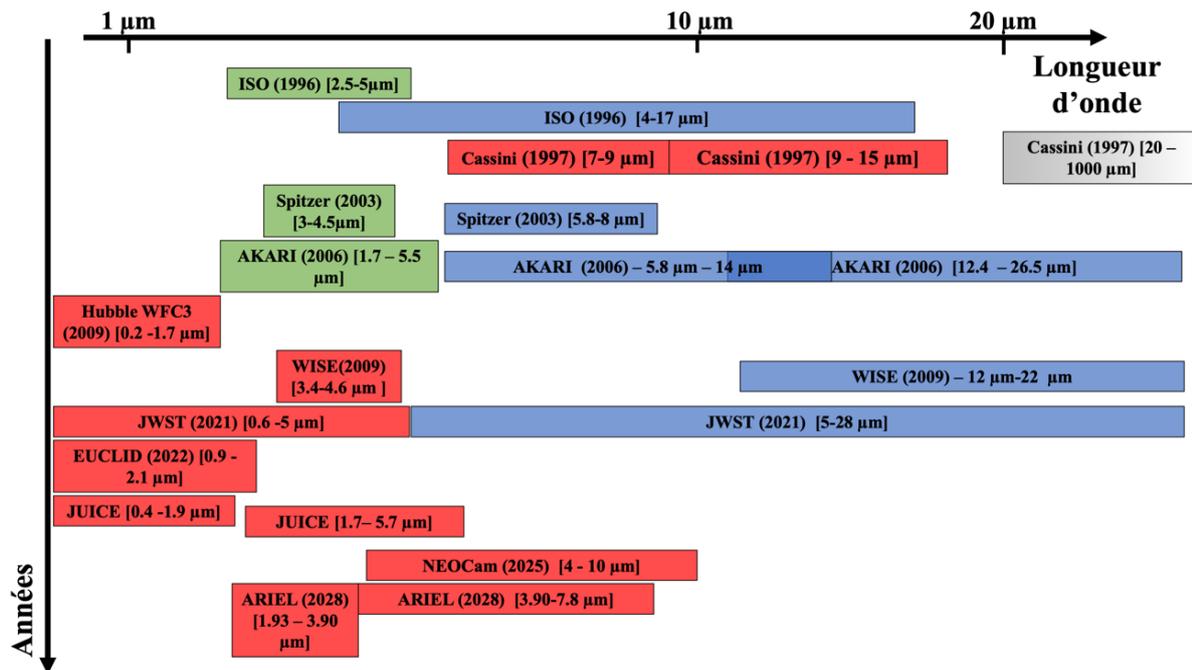


Figure 10 – Missions avec leur instrument observant le domaine IR. En rouge, les instruments utilisant des détecteurs HgCdTe, en vert des détecteurs InSb. En bleu des détecteurs BIB (Si:As ou Si:Ga). En gris les instruments utilisant des détecteurs pyroélectriques. Les dates entre parenthèses indiquent l'année de lancement de la mission.

A travers le programme ALFA (*Astronomical Large Format Array*), l'ESA finance le développement et la caractérisation d'un détecteur SWIR. L'objectif est de développer et caractériser un détecteur grand format 2048×2048 au pas pixel de $15 \mu\text{m}$ avec une longueur d'onde de coupure de $2.1 \mu\text{m}$. Les travaux de cette thèse préparent à la spatialisation de ces détecteurs.

Les détecteurs ALFA (par abus) sont des détecteurs photovoltaïques de technologie HgCdTe. Dans la section suivante, nous présentons le principe de fonctionnement de ces détecteurs, dont le principe de détection est basé sur la physique quantique.

1.3 Principe de fonctionnement des détecteurs photovoltaïques

L'objectif d'un détecteur de photons est de convertir un signal photonique en signal mesurable. Dans les détecteurs photovoltaïques, la conversion s'appuie sur l'effet photo-électrique dans des structures semi-conductrices.

1.3.1 Introduction aux semi-conducteurs

Les atomes sont constitués d'un noyau, composé de protons et de neutrons autour duquel gravite un nuage électronique. Les électrons sont répartis dans différents états électroniques décrits par la physique quantique. Les électrons des couches intérieures sont appelés électrons de cœur par opposition aux électrons de la couche la plus extérieure, appelés électrons de valence. Ces derniers jouent un rôle important dans les propriétés chimiques et électriques des matériaux.

Dans un cristal, les atomes sont placés sur un réseau périodique. On distingue différents types de cristaux catégorisés par la nature des liaisons entre les atomes parmi lesquels on trouve les cristaux covalents et les cristaux ioniques. Dans les cristaux covalents, la liaison entre deux atomes est principalement assurée par la mise en commun d'électrons de valence. Celle-ci se forme lorsque les atomes ont une électronégativité semblable. L'électronégativité caractérise la capacité d'un atome à attirer des électrons. Dans les cristaux ioniques, la différence d'électronégativité entre les atomes du réseau est plus importante, elle conduit à l'ionisation des atomes, formant ainsi des cations et des anions. C'est l'attraction entre ces ions qui domine dans la formation de la liaison. Dans le cas des cristaux covalents, le recouvrement des fonctions d'ondes électroniques conduit à la formation de liaisons fortes entre les atomes. Les liaisons dans les cristaux ioniques sont par nature moins rigides [12]^a.

Dans un cristal, la périodicité atomique et la distance interatomique modifient les états électroniques initialement dégénérés des atomes isolés créant ainsi des bandes d'énergie séparées. Si l'on considère N atomes répartis périodiquement, un électron occupant une orbitale atomique va sentir le potentiel exercé par les autres atomes lorsque la distance interatomique diminue. Les états énergétiques N fois dégénérés d'un niveau se séparent et forment N états séparés (voir Figure 11). Pour une distance interatomique donnée, l'écart entre ces niveaux énergétiques est d'autant plus faible que N est grand. Lorsque N tend vers l'infini, ces états forment alors un continuum d'énergie : on parle de bande d'énergie permise (accessibles aux électrons). En d'autres termes, l'interaction des orbitales atomiques donne naissance à des bandes d'énergie permises séparées par des bandes d'énergie interdites. On parle de bande pleine lorsque tous les états sont occupés par des électrons [13].

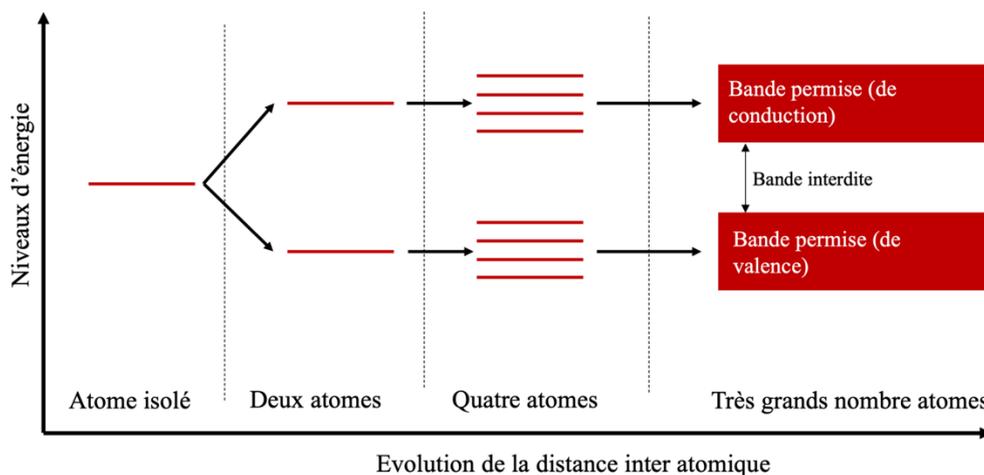


Figure 11 - Évolution des états énergétiques en fonction de la distance interatomique.

Un isolant est un matériau pour lequel les bandes sont pleines ou vides, à la différence d'un métal, pour lequel la bande la plus haute est partiellement remplie. Un métal dispose alors d'électrons susceptibles de participer à la conduction électrique. Un semi-conducteur est un cas intermédiaire :

^a Dans les matériaux semi-conducteurs les liaisons entre les atomes ne sont pas purement covalentes ou ioniques, mais elles sont formées d'un mélange de ces deux contributions.

isolant à 0 K mais conducteur à plus haute température (voir Figure 12). La bande permise la plus énergétique remplie à 0 K est appelée la bande de valence (BV). La bande accessible suivante est appelée bande de conduction (BC). Ces deux bandes sont séparées par une bande d'énergie interdite, appelée le gap du semi-conducteur, à laquelle est associée une énergie, nommée énergie de bande interdite, notée E_g . Pour un matériau donné, la valeur de E_g dépend de sa structure cristalline (cubique, cubique face centrée, zinc blende, ...) et de la nature des atomes qui le constituent. Dans un semi-conducteur, au-dessus du zéro absolu, cette énergie est suffisamment faible pour générer des porteurs libres dans la bande de conduction par agitation thermique (celle-ci n'est plus vide) pouvant contribuer au transport électronique

De plus, dans un matériau semi-conducteur, la génération de porteurs libres peut être favorisée par un apport d'énergie aux électrons de la bande de valence. Cette énergie doit être suffisante pour que ces électrons puissent franchir la bande interdite et rejoindre la bande de conduction. Par exemple, sous flux lumineux, la transition des électrons de la BV à la BC s'effectue grâce à l'effet photoélectrique. Ce dernier fait l'objet de la section suivante.

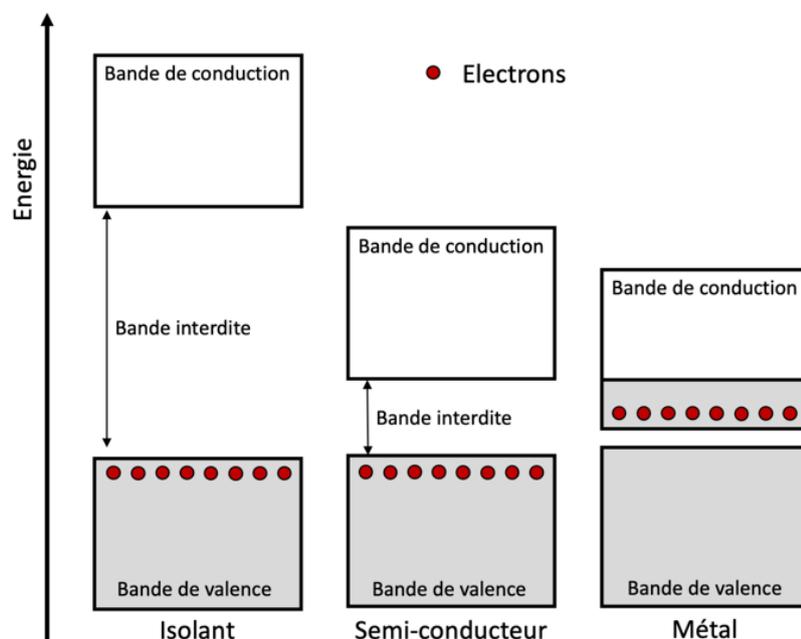


Figure 12 - Classification métal, isolant et semi-conducteur à 0 K.

1.3.2 Transition inter-bandes dans les semi-conducteurs : l'effet photoélectrique

Les détecteurs étudiés dans cette thèse sont des détecteurs quantiques. Le terme quantique vient de la nature discrète des niveaux d'énergie mis en jeu dans la détection. Dans un semi-conducteur, celle-ci est basée sur la transition radiative des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction induite par l'absorption de photons incidents dans la mesure où l'énergie des photons, $E = h\nu$ (où h est la constante de Planck et ν la fréquence du photon), est supérieure à l'énergie du gap : c'est l'**effet photoélectrique**. Le photon apporte suffisamment d'énergie pour exciter des porteurs, générant une paire électron-trou composé d'un électron dans la BC et un trou dans la BV, caractérisé par l'absence d'électrons. Ces porteurs, dits porteurs libres, sont chargés électriquement et peuvent se déplacer

dans le matériau. En les collectant via des contacts métalliques, on passe d'un signal photonique à un signal électrique [13].

Les règles de transition entre les différents états dans un semi-conducteur sont régies par la physique quantique. On retiendra que certaines transitions sont plus probables que d'autres si bien que l'efficacité d'absorption peut varier d'un matériau à un autre. Ainsi les semi-conducteurs à gap indirect comme le Si, ont une capacité d'absorption plus faible que les semi-conducteurs à gap direct comme le HgCdTe ^a. Par ailleurs, nous l'avons évoqué dans la section précédente, le gap d'un semi-conducteur varie d'un matériau à un autre, de sorte que l'on utilisera différents semi-conducteurs en fonction de l'énergie des photons que l'on souhaite détecter.

L'effet photoélectrique permet de convertir les photons incidents en électrons. Dans le but d'obtenir un signal électrique mesurable à partir des électrons photo-générés, les détecteurs photovoltaïques utilisent une hétéro-structure semi-conductrice basée sur le contrôle des propriétés électriques des matériaux : le dopage.

1.3.3 Dopage

Dans un semi-conducteur, le nombre de porteurs libres (nombre d'électrons dans la BC et nombre de trous dans la BV) varie en fonction de la température et est donné par la statistique de Fermi-Dirac [13]. Néanmoins, toute variation dans la périodicité du cristal, induite par la présence de défauts cristallins ou d'impuretés, peut conduire à d'importantes modifications des propriétés électriques : la présence d'états de pièges dans la bande d'énergie interdite pouvant favoriser la génération parasite d'électrons ou de trous. Pour pallier ce problème, lors de la fabrication des semi-conducteurs, des impuretés sont ajoutées délibérément en quantité maîtrisée afin de contrôler la conductivité électrique du matériau. On peut alors créer des zones dans lesquelles les électrons sont excédentaires, on parle de zones n et des zones dans lesquelles ils sont déficitaires, les zones p (auquel cas les trous sont les porteurs majoritaires)[13].

Les zones n sont créées par implantation de dopants donneurs. Ces derniers possèdent des électrons en excès qui peuvent facilement rejoindre la BC et augmenter le nombre d'électrons libres. Dans ces régions, les électrons sont les porteurs majoritaires et les trous les porteurs minoritaires, par opposition aux zones p , où les trous sont les porteurs majoritaires et les électrons les porteurs minoritaires. Ces régions de type p sont créées en introduisant des impuretés acceptrices, susceptibles de capter des électrons de la BV, générant ainsi des trous.

On distingue le dopage intrinsèque du dopage extrinsèque. Dans le premier cas, les propriétés électriques ne dépendent que de la structure du matériau et non de l'adjonction d'impuretés comme c'est le cas pour le dopage extrinsèque. Par exemple, le matériau semi-conducteur HgCdTe peut être dopé p de manière intrinsèque via des lacunes de mercure (Hg) ou bien de manière extrinsèque avec l'implantation d'arsenic (As). La nature du dopage modifie les caractéristiques électriques du matériau

^a Un semi-conducteur à gap indirect est un semi-conducteur pour lequel le minimum de la bande de conduction ne coïncide pas avec le maximum de la bande de valence dans l'espace des phases, par opposition aux semi-conducteurs à gap direct.

semi-conducteur comme les mobilités et les durées de vie des porteurs modifiant alors les performances du détecteur. Outre la nature (n ou p), les paramètres électriques sont aussi influencés par la concentration en éléments dopants.

Le dopage est un élément clef dans la réalisation des détecteurs quantiques photovoltaïques. Son contrôle, à la fois en termes de distribution des atomes dopants dans le cristal ainsi qu'en termes d'intensité, permet de réaliser des structures semi-conductrices complexes. La structure de base des détecteurs photovoltaïques est la jonction PN, aussi appelée photodiode, formée de la juxtaposition de deux semi-conducteurs aux dopages opposés. Cette hétéro-structure crée une barrière de potentiel qui limite le courant circulant dans la jonction aux courants de porteurs minoritaires. Le principe de fonctionnement des jonctions PN est présenté dans la section suivante.

1.3.4 Jonction PN

Une jonction PN est formée suite à la mise en contact de deux semi-conducteurs, l'un dopé n et l'autre p . La mise en contact de ces deux semi-conducteurs de dopage opposé conduit à la formation d'un champ électrique qui permet de limiter le transport des porteurs majoritaires. En pratique, la jonction est asymétrique, un côté n ou p est très fortement dopé par rapport à l'autre. Si la partie fortement dopée est de nature n on parle de diode n sur p^a (ou n/p), par opposition aux diodes p sur n (ou p/n) dans lesquelles la partie p est la plus fortement dopée.

Le schéma d'une diode de type p/n à l'équilibre thermodynamique est présenté sur la Figure 13. Lors de la mise en contact des deux régions, n et p , les porteurs majoritaires vont diffuser vers la région où ils sont minoritaires (les électrons de n vers p , et les trous de p vers n). Ce courant de diffusion \vec{J}_{diff} conduit à l'apparition d'un champ électrique \vec{E} . Le côté n est chargé positivement (les atomes donneurs ayant cédés leur électron excédentaire sont chargés positivement) et le côté p est chargé négativement (les atomes accepteurs ayant captés des électrons de la BV, deviennent chargés négativement). Le champ électrique de cette région, appelée Zone de Charge d'Espace (ZCE), s'oppose au déplacement des porteurs majoritaires. A l'équilibre thermodynamique, le courant de diffusion \vec{J}_{diff} et le courant de conduction \vec{J}_{drift} (induit par la ZCE) se compensent exactement. La ZCE présente une importante barrière de potentiel pour les porteurs majoritaires. Afin d'étendre la taille de la ZCE la diode est polarisée en inverse.

^a Cette nomenclature vient du fait que l'on implante une région dopée n dans un cristal initialement dopé p .

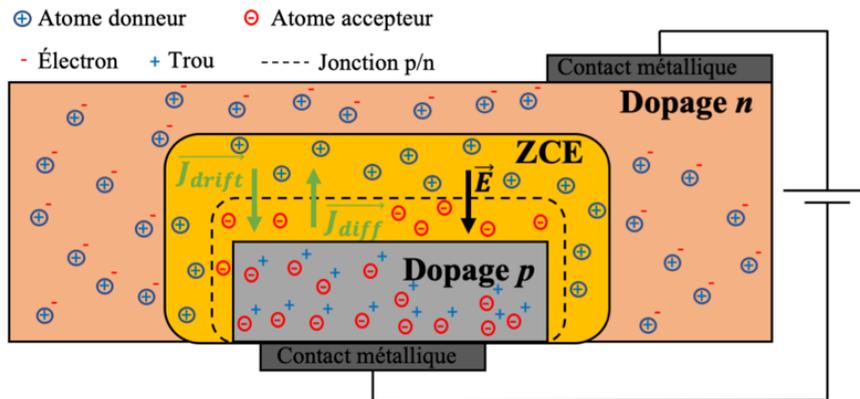


Figure 13 - Schéma d'une diode de type p/n polarisée en inverse. Le courant de diffusion des porteurs majoritaires J_{diff} s'oppose au courant de conduction J_{drift} induit par le champ électrique interne à la jonction E . Seule la Zone de Charge d'Espèce (ZCE) est chargée électriquement, les régions dopées n et p sont neutres.

Sous illumination, par des photons ayant une énergie supérieure au gap, des électrons et des trous sont excités par effet photoélectrique. Les photons sont absorbés et les électrons passent de la bande de valence à la bande de conduction, créant ainsi des lacunes d'électrons, appelées trous. L'enjeu est ensuite de collecter l'un de ces porteurs photo-générés. Dans une structure p/n ce sont les trous qui sont collectés, tandis que dans une structure n/p ce sont les électrons qui sont collectés.

Si les porteurs sont photo-générés en dehors de la ZCE et à une distance inférieure à la longueur de diffusion (distance moyenne parcourue par un porteur avant de se recombiner), les porteurs minoritaires pourront diffuser jusqu'à la ZCE où ils seront propulsés par le fort champ électrique vers la région où ils sont majoritaires. Ces porteurs sont ensuite collectés. Si les porteurs sont générés dans la ZCE (voir Figure 14), ils sont immédiatement séparés par le fort champ électrique et conduits dans la région où ils sont majoritaires, puis collectés. Le déplacement des porteurs libres est à l'origine d'un courant appelé courant photonique ou photo-courant. Avec cette structure, le même matériau semi-conducteur est utilisé pour l'absorption et la collection des porteurs.

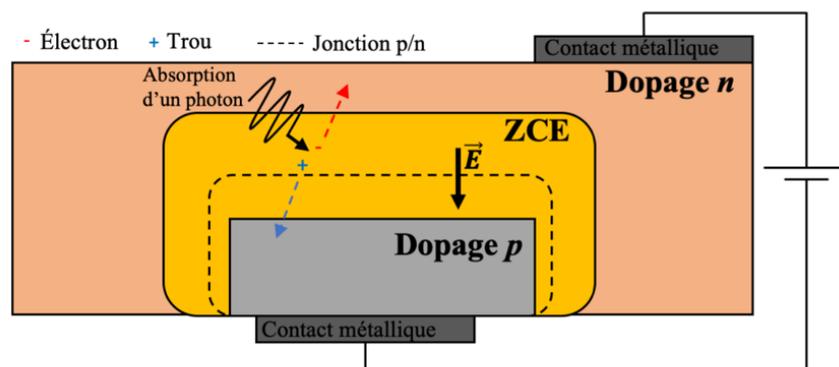


Figure 14 - Schéma d'une jonction p/n sous illumination. Ici une paire électron-trou est générée dans la ZCE. Le champ sépare immédiatement les porteurs : l'électron est envoyé vers la zone dopée n et le trou vers la zone dopée p.

Les paires électron-trou photo-générées peuvent aussi ne pas être collectées. C'est le cas par exemple lorsqu'ils sont générés trop loin de la ZCE, les porteurs libres vont se désexciter (l'électron "tombe" dans la bande de valence) avant d'être collectés : on parle de recombinaison. La présence de défauts dans le matériau, favorisant les processus de recombinaison SRH (Shockley-Read-Hall) [13], peut aussi conduire à la perte de paires électron-trou photo-générées. Le rapport du nombre de photo-électrons collectés sur le nombre de photons incidents est appelé efficacité quantique (généralement noté η)

Il existe un courant parasite, appelé courant d'obscurité qui s'ajoute au courant photonique. Les sources de ce courant sont multiples : courant de diffusion, courant de Génération-Recombinaison (ou GR), courant de surface et courant tunnel. En astrophysique, l'enjeu pour les fabricants de détecteurs est de maintenir ce courant le plus faible possible afin de mesurer des photo-courants faibles associés à de très faibles flux photoniques. Par exemple, il est possible de réduire le nombre de défauts (source de courant GR) via des techniques de passivations des interfaces ou de faire fonctionner le détecteur à basse température. En effet, la densité de courant de diffusion, qui est une des contributions du courant d'obscurité, est proportionnelle au carré de la concentration intrinsèque de porteur dans le semi-conducteur notée n_i . Cette concentration varie de manière exponentielle avec la température (voir l'équation (1-1)).

$$J_{diff} \propto n_i^2 \propto \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \quad (1-1)$$

On voit apparaître ici la nécessité d'abaisser la température de fonctionnement du détecteur afin de réduire la génération spontanée de porteurs par agitation thermique susceptible de contribuer au courant d'obscurité. Ainsi en pratique, les détecteurs IR quantiques sont utilisés à des températures cryogéniques. Les détecteurs SWIR utilisés dans cette thèse fonctionnent à 80 K. Le détecteur AFLA a une température nominale de fonctionnement de 100 K. Et le détecteur LWIR de la voie grande longueur d'onde de l'instrument AIRS (*ARIEL Infrared Spectrometer*) de la mission ARIEL (*Atmospheric Remote-Sensing Infrared Exoplanet*), dont des résultats de mesures sous irradiation sont présentés dans ce manuscrit, fonctionne à 42 K. L'état de l'art actuel rapporte des courants d'obscurité de quelques 10^{-3} électrons par seconde (e^-/s) à 100 K pour des détecteurs SWIR H2RG de la mission spatiale d'Euclid, soit 1 électron parasite généré et collecté par jonction toutes les 15 min environ.

Ainsi, nous avons vu que l'utilisation d'un semi-conducteur permet de convertir les photons incidents en électrons via l'effet photoélectrique. La maîtrise du dopage du matériau semi-conducteur permet de créer des jonctions PN dans lesquelles circulent le courant des porteurs photo-générés. Ces jonctions PN forment des détecteurs (appelé aussi pixel) qui sont en pratique organisés en matrice. Le cas des matrices de détecteurs IR de technologie HgCdTe fait l'objet de la section suivante.

1.4 Les matrices de détecteurs HgCdTe

Cette section détaille successivement les différents éléments constituant les matrices de détecteurs HgCdTe. Enfin, j'évoquerai quelques développements récents concernant ces détecteurs IR.

1.4.1 Architecture générale

Les détecteurs IR basés sur la technologie HgCdTe sont obtenus par dépôt (ou croissance épitaxiale) d'une couche fine de HgCdTe sur un substrat, typiquement formé d'un cristal massif de CdZnTe pour avoir les meilleures performances [4]. Puis, une jonction PN est formée dans le matériau HgCdTe par implantation de dopants. L'ensemble est hybridé sur un circuit de lecture, appelé ROIC pour *ReadOut Integrated Circuit*, en silicium via des billes d'indium. L'objectif du ROIC est de convertir le courant circulant dans chaque pixel en une tension électrique mesurable. L'architecture des détecteurs HgCdTe, dite planaire, est présentée par la Figure 15 [14]. Il existe, cependant, d'autres architectures de détecteurs IR HgCdTe : les structures de type "Mesa" ou "Loophole" [15]. Ces technologies alternatives permettent par exemple de réduire la diaphonie entre les pixels (ou cross-talk) ou de proposer une alternative à l'interconnexion avec le ROIC via les plots d'indium au prix d'une architecture de détecteur plus complexe. Dans la suite de cette thèse, nous nous intéresserons uniquement aux détecteurs de technologie planaire.

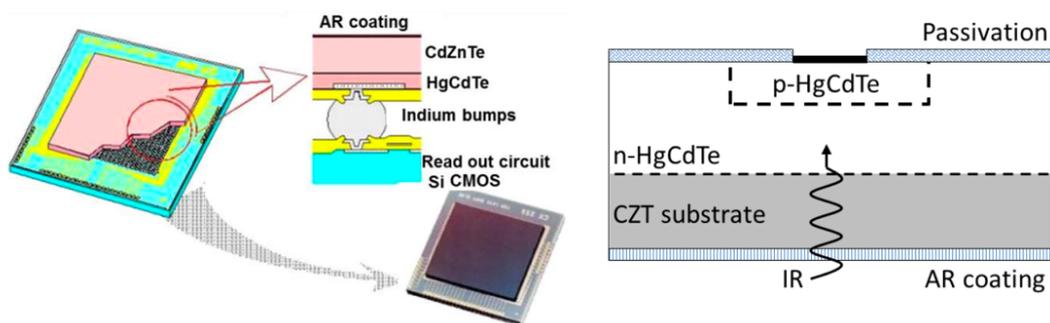


Figure 15 – Schéma de l'architecture planaire d'un détecteur IR basé sur la technologie p/n tiré de [14].

En pratique, l'éclairement se fait à travers le substrat de CdZnTe dans la mesure où celui-ci est transparent au rayonnement détecté, on parle alors d'illumination en face arrière. Par ailleurs, afin d'améliorer le rendement quantique (nombre de photo-électrons collectés divisé par le nombre de photons incidents), une couche anti-reflet est déposée sur la face incidente afin de minimiser la perte de photons liée à leur réflexion sur le substrat.

Les sections suivantes détaillent les propriétés des différentes couches constituant les détecteurs IR basés sur la technologie HgCdTe : du substrat au circuit de lecture.

1.4.2 Description du substrat de CdZnTe

Bien que le substrat de CdZnTe ne joue pas de rôle dans la détection des photons IR, il semblerait que celui-ci modifie le comportement des détecteurs IR sous rayonnement ionisant (voir chapitre 0). Puisque cette thèse s'attache à modéliser l'effet des radiations sur ces détecteurs en tenant compte de l'interaction des particules ionisantes avec le substrat, nous allons décrire dans les sous sections suivantes les propriétés du matériau semi-conducteur CdZnTe.

Tableau périodique des éléments

Le tableau périodique des éléments est présenté avec les éléments suivants encadrés :

- Encadrés verts (éléments chimiques constituant le CdZnTe) :** Zinc (Zn, 30), Cadmium (Cd, 48), Tellure (Te, 52).
- Encadrés rouges (éléments chimiques constituant le HgCdTe) :** Mercure (Hg, 80), Polonium (Po, 84).

Figure 16 - Tableau périodique des éléments. En vert sont encadrés les éléments chimiques constituant le CdZnTe. En rouge : les éléments chimiques constituant le HgCdTe.

1.4.2.1 Propriétés de l'alliage $Cd_{1-y}Zn_yTe$

Le CdZnTe (appelé parfois "CZT") est un matériau semi-conducteur à gap direct (le minimum de la bande de conduction coïncide avec le maximum de la bande de valence dans l'espace des phases) composé de trois éléments appartenant aux colonnes IIB et VIA du tableau périodique (voir Figure 16) à savoir : le cadmium (Cd), le zinc (Zn) et le tellure (Te). On dit alors que le CdZnTe est un alliage ternaire qui appartient à la famille des semi-conducteurs II-VI. Le CdZnTe est le substrat le plus couramment utilisé pour fabriquer des détecteurs IR, il présente l'avantage d'avoir le même paramètre de maille que le HgCdTe, limitant ainsi la formation de défauts de croissance.

La méthode Bridgman est la méthode de fabrication la plus répandue [15]. Il existe néanmoins des méthodes de croissances de cristaux massifs alternatives telles que la technique THM (*Traveling Heater Method*) ou VGF (*Vertical Gradient Freeze*). Bien que certains chercheurs aient essayé de fabriquer des substrats composites réalisés à partir de l'épitaxie de CdTe et CdZnTe sur différents types de cristaux, les méthodes de croissance de cristaux massifs sont les plus largement utilisées dans la fabrication des détecteurs IR. Les substrats des détecteurs utilisés dans cette thèse ont été fabriqués avec la méthode VGF [16].

Le $Cd_{1-y}Zn_yTe$ cristallise en structure zinc blende. La quantité de zinc dans l'alliage est ajustée afin d'assurer l'accord de maille avec le matériau HgCdTe. En pratique, la proportion de zinc dans l'alliage est d'environ 4 %. Dans cette thèse, le taux de zinc dans l'alliage de CdZnTe sera noté y . Dans la mesure où la quantité de zinc est faible, nous pouvons approximer les propriétés matériaux de l'alliage ternaire du CdZnTe par celles du CdTe, profitant ainsi d'une littérature plus complète.

1.4.2.2 L'énergie de gap du CdTe et photons de luminescence

Il existe plusieurs formules qui décrivent l'évolution de l'énergie de gap du $\text{Cd}_{1-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ en fonction de la composition en zinc à 4 K [17]–[22]. Ces formules sont tracées sur la Figure 17. On observe une augmentation du gap avec la concentration en zinc pour l'ensemble de ces formules. On constate néanmoins une disparité entre les différentes formules proposées qui peut s'expliquer par l'utilisation de différentes méthodes de détermination de l'énergie de gap. Par ailleurs, les échantillons n'ont pas été fabriqués de la même manière (VGF [18], THM[21], Bridgman[17] ou MBE [19]). Cependant, la méthode de détermination de la composition de zinc est identique, elle s'appuie sur la mesure du paramètre de maille du cristal via des mesures de diffraction X et sur l'utilisation de la loi de Veggard. [23]^a. La formule la plus couramment utilisée est celle de Tobin [17]. Elle est valide à 4 K pour une composition en zinc allant de 3 % à 6 %. Elle est donnée par l'équation (1-2), où y représente le taux de zinc de l'échantillon.

$$E_g^{\text{CdZnTe}}(y, 4 \text{ K}) = 1.6058 + 0.546 y \quad (1-2)$$

L'évolution en température de l'énergie de gap du CdZnTe, notée E_g^{CdZnTe} , pour une concentration en zinc proche de 4 % est donnée par l'équation (1-3), issue de [24] où $E_0 = 1.625 \text{ eV}$, $\alpha = 6.48 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$ et $\beta = 276 \text{ K}$. Cette expression s'appuie sur des mesures expérimentales de luminescence effectuées sur un échantillon de CdZnTe, ajustées avec la formule de Varshni [25] qui donne l'évolution en température de l'énergie du gap d'un semi-conducteur avec la température^b.

$$E_g^{\text{CdZnTe}} = E_0 - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (1-3)$$

L'évolution de l'équation (1-3) est tracée sur la Figure 18. Cette évolution en température est par ailleurs comparée à celle du CdTe, pour lequel différentes formules provenant de la littérature sont présentées [26]–[31]. L'ensemble des courbes présentées sur la Figure 18 sont issues d'expressions décrivant l'évolution du gap en fonction de la température ajustées à des mesures expérimentales.

^a C'est une loi empirique qui établit une relation linéaire entre la concentration des éléments d'un alliage et le paramètre de maille $a_{\text{Cd}_{1-y}\text{Zn}_y\text{Te}} = a_{\text{CdTe}}y + (1 - y)a_{\text{ZnTe}}$, où a_{CdTe} et a_{ZnTe} sont les paramètres de maille du CdTe et du ZnTe respectivement.

^b Cette formule est utilisée pour différents semi-conducteur bien qu'elle soit plus adaptée aux matériaux semi-conducteurs IV et III-V.

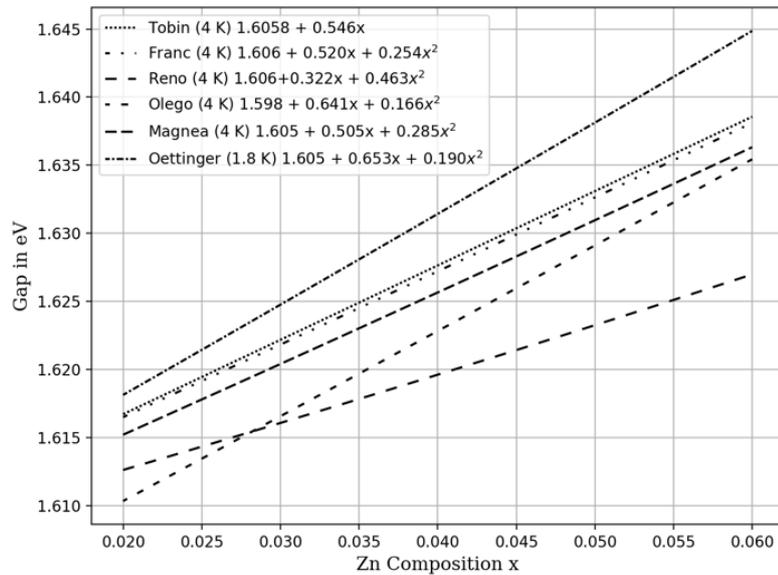


Figure 17 - Évolution de l'énergie du gap du $Cd_{1-y}Zn_yTe$ en fonction de la composition en zinc à basse température selon différentes références bibliographiques [17]–[22].

On observe sur la Figure 18 une diminution de l'énergie de gap du CdTe et du CdZnTe lorsque la température augmente. Par ailleurs, dans le cas du CdTe (courbes noires), bien que les résultats soient similaires à basse température, on observe une forte disparité de la valeur du gap selon les auteurs à plus haute température. Cette hétérogénéité peut s'expliquer d'une part par le fait que certaines formules sont extrapolées à hautes températures et d'autre part par l'utilisation de modèles inadaptés pour calculer l'énergie de gap.

D'après l'équation (1-3), le gap du CdZnTe vaut à 100 K^a (ce qui correspond à des photons de 771 nm) et vaut 1.613 eV à 80 K^b (soit des photons de 769 nm). Ainsi, par effet photoélectrique, le CdZnTe absorbe les photons ayant une énergie supérieure à l'énergie de bande interdite, autrement dit le CdZnTe est transparent aux longueurs d'onde supérieures à 771 nm.

Dans des conditions de luminescence, par désexcitation radiative des paires électron-trou, le matériau CdZnTe émet des photons d'énergie inférieure ou égale à son énergie de gap, laquelle est supérieure à l'énergie de bande interdite du HgCdTe. Par conséquent, les photons peuvent être détectés par la couche photosensible de HgCdTe. Ce sont ces photons qui sont suspectés d'être à l'origine de l'élévation du signal de fond des détecteurs IR sous rayonnement ionisant (voir la partie 3 du chapitre 0). Les paires électron-trou générées par le passage du proton se recombinent en émettant des photons qui sont ensuite détectés par la couche absorbante de HgCdTe.

^a Il s'agit de la température de fonctionnement nominale des détecteurs ALFA.

^b Il s'agit de la température d'utilisation des détecteurs utilisés et irradiés dans cette thèse.

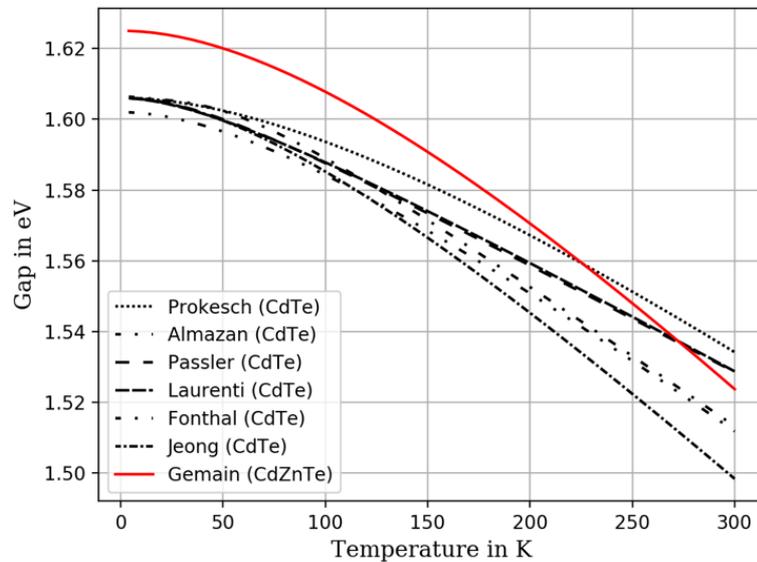


Figure 18 – Évolution en fonction de la température de l'énergie de gap du $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ (en rouge) [24] et du CdTe (en noir) selon différentes références [26], [28]–[31].

1.4.3 La couche absorbante de HgCdTe

1.4.3.1 Propriétés de l'alliage HgCdTe

Le HgCdTe (parfois appelé "MCT" pour Mercure Cadmium Tellure) est un alliage ternaire semi-conducteur composé de deux alliages binaires : le CdTe et le HgTe. Le cadmium (Cd) et le mercure (Hg) appartiennent à la colonne IIB du tableau périodique des éléments et le tellure (Te) appartient à la colonne VIA (voir Figure 16). Le HgCdTe appartient à la catégorie des matériaux semi-conducteurs II-VI. Lors de la croissance du cristal de HgCdTe, il est possible d'ajuster la composition en cadmium dans l'alliage afin de modifier l'énergie de gap du semi-conducteur. On note couramment $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, où x correspond à la concentration molaire de cadmium dans l'alliage.

La couche absorbante est obtenue par épitaxie (technique de croissance de cristaux) du HgCdTe sur le substrat (généralement du CdZnTe). Il existe différentes méthodes d'épitaxie parmi lesquelles on trouve l'épitaxie en phase liquide (LPE pour *Liquid Phase Epitaxy*) utilisée par Lynred et l'épitaxie par jet moléculaire (MBE pour *Molecular Beam Epitaxy*) utilisée par TIS.

Le HgCdTe cristallise en structure zinc blende, formée de deux réseaux cubiques à faces centrées imbriqués. Les liaisons entre les atomes du réseau cristallin sont principalement de nature ionique, on parle alors de cristal ionique. Une fois le cristal de HgCdTe crû, des jonctions PN sont créées par implantation de dopants pour former des jonctions p -sur- n ou n -sur- p selon la technologie choisie.

1.4.3.2 Énergie du gap et longueur d'onde de coupure du HgCdTe

Le HgCdTe est un semi-conducteur à gap direct ce qui favorise les transitions radiatives. L'un des avantages majeurs du HgCdTe réside dans la versatilité de son énergie de gap en fonction de la composition en cadmium, tout en gardant un paramètre de maille quasiment constant. Ainsi, le gap du matériau peut varier de -0.2 eV (à 300 K), correspondant au gap du semi-métal HgTe, à 1.51 eV (300 K), correspondant au gap du CdTe. Il couvre alors l'ensemble du domaine IR, du NIR au VLWIR.

La formule la plus couramment utilisée pour décrire l'évolution de l'énergie de gap $E_g^{HgCdTe}(x, T)$ du $Hg_{1-x}Cd_xTe$ en fonction de la composition en cadmium x et de la température T est celle d'Hansen [32], elle est donnée par l'équation (1-4) et est représentée sur la Figure 19. Dans cette expression, E_g s'exprime en eV et T en Kelvin. Elle est valide pour une composition de cadmium comprise entre 0.2 et 0.6.

$$E_g^{HgCdTe}(x, T) = -0.302 + 1.93x - 0.810x^2 + 0.832x^3 + 5.35 \times 10^{-4} T (1 - 2x) \quad (1-4)$$

Pour une composition x donnée, inférieure à 0.5, l'énergie de gap du $Hg_{1-x}Cd_xTe$ augmente avec la température : l'alliage suit le comportement du semi-métal HgTe. Un semi-métal est un matériau pour lequel certains états de basse énergie de la bande de conduction recouvrent partiellement les états les plus énergétiques de la bande de valence. En revanche, lorsque la composition en cadmium excède 50 %, le gap de l'alliage diminue avec la température (de manière analogue à ce qui a été observé dans le cas du CdTe).

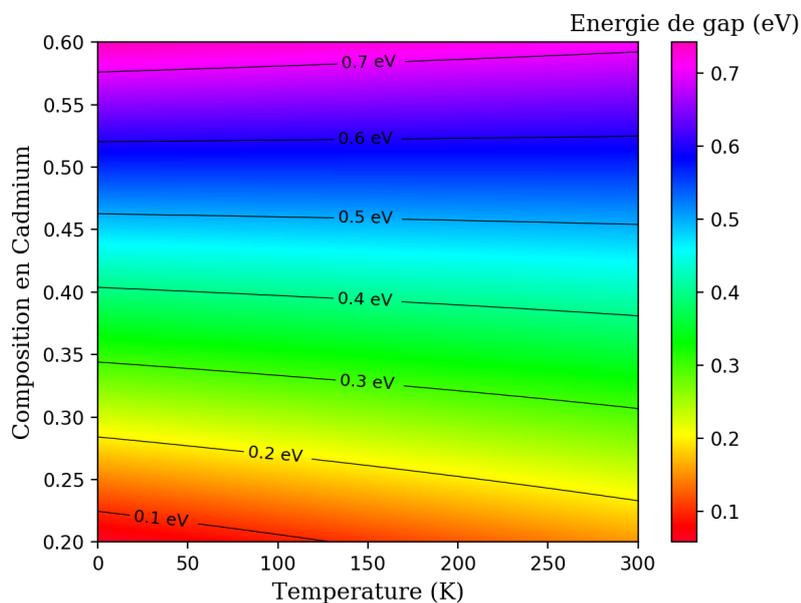


Figure 19 - Évolution de l'énergie de gap du $Hg_{1-x}Cd_xTe$ en fonction de la température T et de la composition x .

On peut associer une longueur d'onde à l'énergie de gap notée λ_g . Celle-ci est définie par l'équation (1-5), qui relie la longueur d'un photon à son énergie en considérant un photon d'énergie E_g . Dans le cas de l'alliage HgCdTe, celle-ci est définie pour une température et une composition en cadmium donnée. On appelle longueur d'onde de coupure notée λ_c la longueur d'onde à laquelle l'efficacité quantique du détecteur vaut la moitié de l'efficacité quantique maximale [15]. En pratique λ_c est

supérieure à λ_g bien que très proche. Autrement dit des photons dont l'énergie est inférieure au gap peuvent être absorbés par le matériau. En effet, la présence d'états dans la bande interdite conduit à l'absorption des photons dont l'énergie est inférieure à l'énergie de gap.

Dans le cas du détecteur ALFA, dont les spécifications requièrent une longueur d'onde de coupure de 2.1 μm à 100 K, la composition en cadmium dans l'alliage, calculée à partir de l'équation (1-4) en supposant $\lambda_g = \lambda_g$ est de 51.5 %.

$$\lambda_g(\text{en } \mu\text{m}) = \frac{hc}{E_g} = \frac{1.24}{E_g(\text{en eV})} \quad (1-5)$$

Lorsque les photons sont suffisamment énergétiques, ils sont absorbés par effet photoélectrique. Ils génèrent des porteurs dans le HgCdTe qui sont ensuite collectés grâce à la jonction PN. Le photocourant circulant dans un pixel est ensuite conduit vers le circuit de lecture grâce à une bille d'indium. Cette dernière assure une liaison électrique, mécanique et thermique entre le circuit de détection et le circuit de lecture. Celui-ci fait l'objet de la section suivante.

1.4.4 Le circuit de lecture

L'objectif du circuit de lecture (ROIC pour *ReadOut Integrated Circuit*) est de convertir le courant électrique circulant dans chaque pixel en une tension mesurable. Les charges collectées par la jonction sont intégrées dans une capacité, puis le signal est converti en tension, avant d'être multiplexé. Le multiplexage consiste à regrouper plusieurs signaux en un seul. Les ROICs sont basés principalement sur l'utilisation de MOSFETs (*Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor*). Ces derniers sont constitués d'un canal dopé dans lequel un courant peut circuler entre deux électrodes : la source et le drain. Une troisième électrode, la grille, module le courant circulant dans le canal en fonction de la tension appliquée sur cette électrode. Ainsi, lorsqu'un courant dépose des charges sur la grille, le courant circulant dans le canal est modifié. L'utilisation des MOSFETs permet ainsi d'amplifier le faible signal d'un détecteur afin de l'amener vers les amplificateurs de sortie, où le signal est multiplexé [33].

Il existe plusieurs architectures de ROIC dont l'utilisation dépend de l'application visée, à savoir :

- Injection direct (DI, *Direct Injection*)
- Amplificateur trans-impédance (CTIA, *Charge Transimpedance Amplifier*)
- Suiveur commuté (SFD, *Source Follower Per Detector*)

Pour les détecteurs IR de technologie HgCdTe, le circuit de lecture le plus utilisé pour les applications très bas flux, est le circuit SFD [34]. Celui-ci présente l'avantage d'avoir un bruit et une consommation électrique très faibles. Dans cette architecture, chaque pixel est relié à un transistor MOS en mode suiveur. Ce circuit présente tout de même des inconvénients intrinsèques à son architecture : une non-linéarité ainsi qu'une fréquence de lecture faible.

Les détecteurs IR utilisés dans cette thèse utilisent un circuit de lecture de type SFD. Dans les sous-sections précédentes j'ai présenté successivement les différents éléments constituant les détecteurs IR, allant du substrat au circuit de lecture. Dans la sous-section suivante, nous allons présenter les nouveaux axes de développement des détecteurs IR de technologie HgCdTe.

1.4.5 Nouveaux développements dans les détecteurs IR HgCdTe

Les axes de développement dépendent des applications. Ainsi, en astrophysique, pour répondre aux besoins scientifiques, il s'agit de développer des détecteurs IR de grand format. Teledyne propose des détecteurs au format 4096 × 4096 au pas pixel de 10 et 15 μm [35].

Une des problématiques majeures concernant la fabrication de ces détecteurs grands formats réside dans la production de substrat de CdZnTe de grande taille, avec une bonne stœchiométrie, une bonne qualité cristalline, une grande pureté tout en maintenant un coût de fabrication faible. Ces problématiques ont poussé les chercheurs à trouver des substrats alternatifs au CdZnTe.

Dès 1985, Olego et al. [19] ont proposé d'utiliser un substrat composite constitué d'un cristal massif de GaAs et d'un buffer de CdZnTe. Selon les auteurs d'une étude récente [36], l'utilisation du silicium comme substrat permettrait de produire des matrices de HgCdTe de très grand format (8k × 8k au pas de 15 μm). Cependant, l'important désaccord de maille entre le silicium et le HgCdTe (environ 19 %), crée de nombreux défauts qui génèrent un important courant d'obscurité et beaucoup de bruit. Dans le but de réduire le nombre de défauts, des couches tampons en CdTe ou CdZnTe (appelées aussi buffer) sont ajoutées afin de résorber les défauts. Les résultats obtenus sur les détecteurs fabriqués pour l'étude montrent néanmoins un courant d'obscurité élevé et une rémanence plus importante que les détecteurs HgCdTe crûs sur un substrat de CdZnTe [36].

Par ailleurs, les fabricants de détecteurs ont cherché à modifier la structure des détecteurs, en passant d'un dopage intrinsèque aux lacunes de mercure (structure n/p), à un dopage extrinsèque In/As (structure p/n). Ce changement d'architecture permet de réduire le courant d'obscurité des diodes et la création de grandes matrices de détecteurs. Toujours dans l'objectif de réduire le courant d'obscurité, des hétéro-structures nBn (semi-conducteur/barrière/semi-conducteur) permettant de réduire le courant de Génération-Recombinaison (courant G-R) dans la ZCE ont été développées [37].

Certains développements des détecteurs IR concernent l'ajout de nouvelles fonctionnalités. Ainsi, les détecteurs bi-spectraux (ou tri-spectraux) permettent d'observer simultanément une même scène dans deux (voire trois) domaines de longueur d'onde différents. Ces détecteurs sont obtenus par empilement de couches absorbantes aux longueurs d'onde de coupure différentes [38].

En outre, dans les détecteurs de technologie HgCdTe, la multiplication des porteurs sous fort champ électrique permet de détecter des signaux photoniques très faibles. Ce sont des détecteurs à avalanche qui s'appuient sur le phénomène d'ionisation par impact [39].

Enfin, une étude récente suggère que l'utilisation de nanostructures à la surface du détecteur permettrait d'augmenter l'absorption des détecteurs IR [40].

Dans cette première partie, j'ai introduit le rayonnement IR en astrophysique ainsi que sa détection. En particulier, j'ai décrit le principe de fonctionnement des détecteurs IR photovoltaïques basés sur le matériau HgCdTe. La technologie de ce type de détecteur est identique aux détecteurs développés dans le cadre du programme ALFA. Ce programme, financé par l'ESA, vise à doter l'Europe d'une filière de détecteurs IR de hautes performances afin d'équiper les instruments des observatoires spatiaux européens. Afin de préparer à la spatialisation de ces composants, il est essentiel de comprendre l'effet de l'environnement spatial sur ces détecteurs. Cette thèse s'intéresse en particulier aux effets induits par les particules ionisantes présentes en orbite.

2 Effets des particules chargées sur les détecteurs IR

Dans cette seconde partie, je vais présenter dans un premier temps l'environnement spatial radiatif puis dans un second temps j'introduirai les mécanismes physiques d'interactions rayonnement matière. Enfin, je discuterai des effets de la pénétration de ces particules ionisantes sur les composants électroniques en insistant sur les détecteurs IR de technologie HgCdTe qui sont au cœur de cette thèse.

2.1 L'environnement spatial radiatif

De manière générale, l'environnement spatial est un environnement hostile. Il est constitué de météorites, de débris (issus de l'activité humaine), d'oxygène atomique (entraînant des réactions d'oxydo-réduction à la surface des matériaux), de contaminants liés à l'équipement (à l'activité des moteurs par exemple), de neutrons, de rayonnement UV (favorisant la rupture de chaînes moléculaires), et de particules ionisantes, parmi lesquelles on distingue les particules piégées, les particules solaires et les rayons cosmiques [41]. Ces trois composantes sont décrites dans les sections suivantes. En fonction de l'altitude du satellite, l'environnement pourra être très différent. Au point de Lagrange L2 (position dans l'espace où de nombreux satellites scientifiques sont ou seront envoyés comme par exemple Herschel, JWST, Euclid ou ARIEL), le flux de protons continu en période de minimum solaire est typiquement d'environ 5 particules/s/cm² [42]. La période de minimum solaire correspond à la période de minimum d'activité du soleil pendant un cycle solaire [41].

2.1.1 Le rayonnement cosmique galactique

Le **rayonnement cosmique** (noté GCR pour *Galactic Cosmic Rays*) est un rayonnement composé de particules ionisées très énergétiques, originaires de l'extérieur de notre système solaire. Il est majoritairement constitué de protons (87 %), de noyaux d'hélium (12 %) et d'autres éléments plus lourds ne représentant que 1 % de l'ensemble du spectre [43]. Le rayonnement cosmique est composé d'éléments issus de réactions de nucléosynthèse stellaire (C, O, Mg, Si, Fe). Il est enrichi d'éléments plus légers (Li, Be, B), par fragmentation des éléments plus lourds lors d'interactions avec le milieu interstellaire, on parle de spallation des rayons cosmiques. Le spectre d'abondance relative des ions issus du GCR, pour des énergies de 2 GeV, par nucléon est donnée sur la Figure 20. Comme on peut le voir, l'abondance relative des particules dans le spectre GCR diminue rapidement avec les numéros atomiques Z croissants.

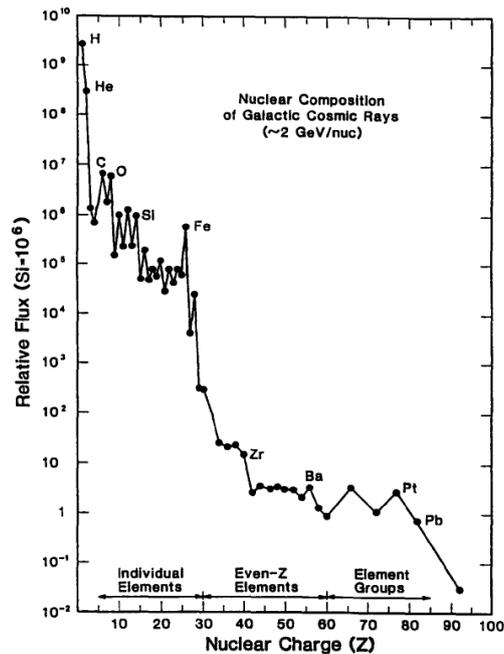


Figure 20 - Composition du rayonnement cosmique. Abondance relative à celle de du silicium pour une énergie de 2 GeV/nucléon en fonction du numéro atomique Z. Le spectre est tiré de [43].

L'énergie de ces particules varie de quelques MeV/A à plusieurs TeV/A [41]. Les ondes de chocs produites par les explosions de supernovas constitueraient l'un des processus d'accélération des ions du rayonnement cosmique [41]. Néanmoins, les processus d'accélération à l'origine des composantes les plus énergétiques (jusqu'à plus 10^{20} eV) restent débattus.

Le flux du GCR reste faible, seulement quelques particules par cm^2 et par seconde, malgré sa sensibilité à l'activité du soleil. Ainsi, en période de maximum solaire, le vent solaire diminue le flux de la composante de plus basse énergie (< 3 GeV/A) du spectre de GCR. En dehors de la magnétosphère, le flux du GCR est isotrope [41].

Afin d'estimer le flux reçu par un satellite et ses instruments lors des phases d'étude et de développement, les modèles de GCR les plus utilisés sont CREME, pour *Cosmic Ray Effects on Micro Electronics* (version 86 et 96) [44] et GCR ISO [41]. Dans l'environnement du soleil, des particules émises lors d'évènements solaires s'ajoutent aux GCRs.

2.1.2 Les évènements solaires

Le soleil est une sphère de gaz constituée à 73 % d'hydrogène, 25 % d'hélium et 2 % d'espèces chimiques plus lourdes. L'énergie produite est issue des nombreuses réactions nucléaires. Le soleil est une source de production de plusieurs sortes de particules : photons (dont les longueurs d'onde s'étalent des ondes radios aux rayons X), électrons et hadrons. L'activité du soleil varie au cours du temps. Cette activité cyclique a une période moyenne de $11 \text{ ans} \pm 2 \text{ ans}$ et modifie l'environnement spatial radiatif. L'activité solaire est estimée en comptant le nombre de tâches solaires (dont l'existence est associée à la génération de courants magnétiques à l'intérieur du soleil) et en mesurant le flux à la longueur d'onde 10.7 cm. L'émission de particules ionisantes par le soleil comprend deux composantes : une composante continue (le vent solaire) et une composante sporadique (les particules solaires).

Le **vent solaire** est un flux continu d'électrons et de hadrons faiblement énergétiques. Dans la couronne solaire, l'agitation thermique permet aux électrons d'échapper à l'attraction du soleil. Le déséquilibre électrique qui en résulte conduit à l'éjection de particules plus lourdes telles que des protons et des noyaux d'hélium. La vitesse des vents n'est pas uniforme, elle est d'environ 350 km.s^{-1} à l'équateur et d'environ 800 km.s^{-1} aux pôles.

Les particules solaires énergétiques (SEP pour *Solar Energetic Particles*) sont des particules de hautes énergies émises par le soleil qui s'ajoutent sporadiquement à la composante continue du vent solaire. On trouve parmi ces particules des électrons, des protons et des ions lourds, dont l'énergie varie de quelques keV à plusieurs GeV. Ces particules peuvent provenir de deux processus d'accélération : les **éjections de masses coronales** et les **éruptions solaires**. Ces deux événements conduisent à une élévation colossale du flux de particules [41].

Les **éruptions solaires** sont localisées au niveau des centres actifs appelés plus généralement les tâches solaires. Ces événements très localisés durent quelques heures, et conduisent à la libération très directionnelle d'une grande quantité d'énergie. Ils sont associés à la reconfiguration magnétique d'un groupe de taches solaires. Le nombre d'éruptions augmente lors des périodes de maximum d'activité solaire [41].

Les **éjections de masse coronale** (CME pour *Coronal Mass Ejection*) sont d'importantes éruptions de plasma (un gaz d'électrons et d'ions), dont les ondes de choc accélèrent les particules. Les CMEs sont riches en protons (environ 96 % du nombre total de particules) et peuvent durer quelques jours [41]. Ces CMEs peuvent être observées en utilisant un coronographe (technique permettant de masquer la partie centrale d'une étoile). L'image d'une CME acquise par le satellite SoHO (*Solar and Heliospheric Observatory*) est présentée sur la Figure 21.

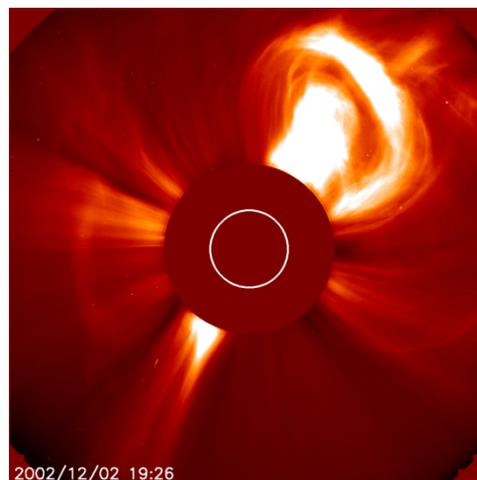


Figure 21 - Image d'une éjection de masse coronale acquise par le satellite SoHO de la NASA. Crédit SoHO.

Il est actuellement impossible de prédire de manière déterministe la date et l'intensité des événements solaires. Les modèles utilisés pour estimer la fluence (nombre de particules reçues par unité de surface) reçue par un satellite, s'appuient sur des études statistiques. On trouve par exemple les modèles SOLPRO, JPL 91 et ESP [41]. Outre ces particules solaires, à proximité de la Terre, on trouve des particules piégées dans les ceintures de radiations.

2.1.3 Les particules piégées

La Terre se trouve relativement protégée des particules issues du rayonnement cosmique et des événements solaires, grâce à la magnétosphère formée par l'interaction du champ géomagnétique (champ magnétique terrestre) et du vent solaire. Ce champ magnétique piège les particules ionisantes (principalement des électrons et des protons) dans des "ceintures de radiation", appelées "ceinture de Van Allen". Caractérisées par leur structure toroïdale, ces ceintures de radiation sont dynamiques et sont influencées par les cycles solaires. Des modèles tels que AE8 et AP8 (pour *Aerospace Electron version 8* et *Aerospace Proton 8*) sont utilisés pour estimer le nombre de particules piégées. Toutefois ces modèles négligent le comportement dynamique de ces ceintures [41], jusqu'à 10^5 protons/s/cm² [45]

Concernant les énergies, les électrons piégés ont une énergie allant de 1 keV à 30 MeV et se répartissent sur un rayon allant de 1 à 10 rayons terrestres (un rayon terrestre vaut 6 370 km). Quant aux protons, ils ont une énergie pouvant aller de quelques keV jusqu'à 100 MeV distribués sur une distance allant de 1 à 7 rayons terrestres.

2.1.4 Résumé des environnements radiatifs spatiaux et comparaison avec les environnements artificiels

Les énergies et les flux rencontrés en environnement spatial sont résumés dans le Tableau 5. Ces valeurs sont comparées à celles délivrées par les accélérateurs de particules utilisés pour tester la tenue des composants électroniques aux irradiations. Ces accélérateurs de particules (cyclotron ou tandem), ne peuvent fournir les énergies équivalentes aux composantes les plus énergétiques du spectre de particules ionisantes en orbite. On observe par ailleurs que les flux atteints par les installations sont souvent des ordres de grandeurs supérieurs aux flux les plus faibles auxquels sont soumis les satellites dans l'espace. Seule l'installation Arronax fait figure à part. La campagne d'irradiation que j'ai effectuée durant cette thèse a été réalisée dans l'installation Arronax. Les résultats de cette campagne d'irradiation sont présentés dans le chapitre 4.

Les environnements radiatifs artificiels permettent de tester expérimentalement la réponse des composants électroniques aux rayonnements ionisants. Outre ces tests expérimentaux, qui peuvent être difficiles à mettre en place et souvent coûteux, des outils de modélisation allant de l'interaction particule-matière au transport dans les structures semi-conductrices ont été développés. Dans la section suivante, je détaillerai les processus physiques d'interaction particule-matière à la base de ces outils de modélisation.

Tableau 5 - Résumé des environnements radiatifs naturels et comparaison aux environnements artificiels.

<i>Origine</i>	<i>Composante Principale</i>	<i>Énergie des particules</i>	<i>Flux (particules/s/cm²)</i>
<i>Environnement radiatif naturel</i>			
<i>GCR</i>	Protons (87 %)	De 10 MeV/A à 1 TeV/A	Quelques
<i>Vent solaire</i>	Électrons et protons	< 100 keV	10 ⁸ – 10 ¹⁰
<i>Particules solaires</i>	Protons et ions lourds	De 10 MeV/A à qq 100 MeV	Jusqu'à 10 ⁵
<i>Particules piégées</i>	Électrons et protons	< 7 MeV (pour les électrons) < 100 MeV (pour les protons)	Jusqu'à 10 ⁷
<i>Environnement radiatif artificiel</i>			
<i>Institut de Physique Nucléaire d'Orsay (France)</i>	Protons	De quelques MeV à 28 MeV	10 ³ – 10 ⁸
<i>Cyclotron Université Catholique de Louvain la Neuve (UCL, Belgique)</i>	Protons	De 30 MeV à 63 MeV	10 ³ – 10 ⁸
<i>Paul Scherer Institute (PSI, Suisse)</i>	Protons	De 6 à 230 MeV	10 ³ – 10 ⁸
<i>Grand Accélérateur d'ions lourds (GANIL, France)</i>	Du carbone à l'uranium	Pour le C (qq keV/A à 95 MeV/A) et l'U (de qq keV/A à 24 MeV/A)	10 ² – 10 ⁴
<i>Arronax (France)</i>	Protons	< 68 MeV	De quelques protons à 10 ⁸

2.2 Interaction particule matière

Dans cette section, les mécanismes physiques d'interaction d'une particule énergétique avec la matière sont présentés. On distingue quatre type d'interactions, à savoir [46] :

1. L'ionisation ou l'excitation des atomes du milieu cible
2. Le transfert d'énergie aux atomes du milieu cible
3. Les collisions nucléaires
4. L'émission de radiation

En pratique, la première interaction est caractérisée par le transfert d'énergie aux électrons du matériau, tandis que le deuxième et le troisième processus concernent l'interaction avec les noyaux du milieu cible. On classe alors ces interactions en deux catégories : les interactions avec le cortège électronique et les interactions avec le noyau.

Enfin, lorsque la particule approche la vitesse de la lumière, elle peut émettre un rayonnement appelé rayonnement continu de freinage ou Bremsstrahlung [46]. Ce rayonnement est émis lors de la déflexion d'une particule chargée par le champ électrique. Ce champ électrique peut être naturel (le champ électrique d'un noyau) ou artificiel (dans un accélérateur de particules par exemple).

Néanmoins ce processus de perte d'énergie est peu efficace dans le cas des protons (beaucoup plus lourd que les électrons ou les positrons), et ne sera pas considéré dans la suite. Les principaux mécanismes d'interaction des protons avec un matériau semi-conducteur et leurs effets sont présentés sur la Figure 22.

Dans cette section, je vais introduire dans un premier temps les concepts de transfert d'énergie linéique et de pouvoir d'arrêt. Puis, je détaillerai dans un deuxième temps les mécanismes d'interaction des particules avec les noyaux et dans un second temps les processus d'ionisation. Enfin, nous présenterons brièvement les effets de l'irradiation sur les composants électroniques.

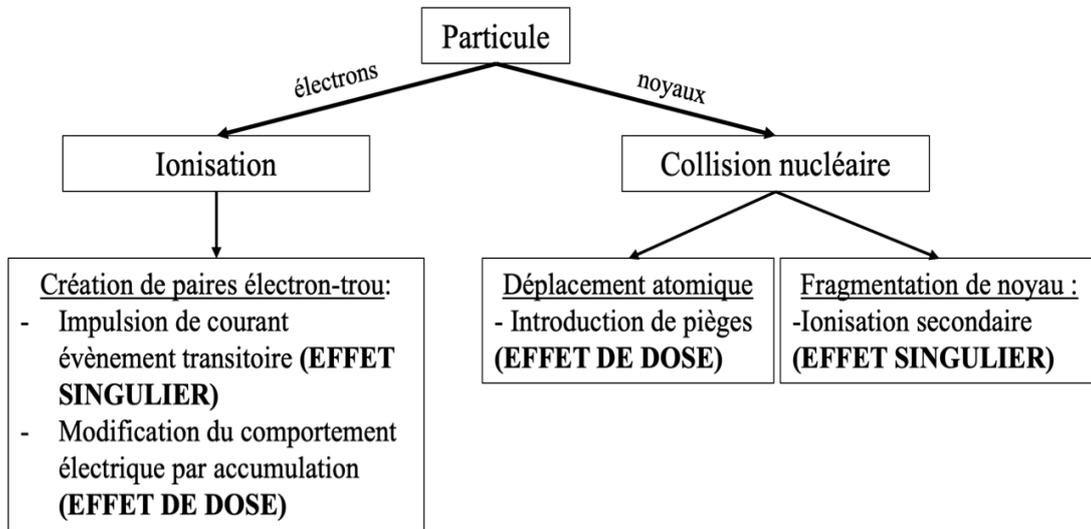


Figure 22 - Principaux mécanismes d'interaction de protons et leurs effets.

2.2.1 Introduction du LET et du pouvoir d'arrêt

Lorsqu'une particule traverse un milieu, elle cède toute ou seulement une partie de son énergie à travers les différents processus physiques susmentionnés. La quantité d'énergie perdue dépend non seulement des propriétés de la particule incidente, mais aussi des caractéristiques du matériau cible. **La quantité d'énergie transférée aux électrons et aux atomes de la matière par unité de distance est appelée pouvoir d'arrêt**, noté S , exprimé par l'équation (2-1).

$$S = \left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{électronique}} + \left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{nucléaire}} \quad (2-1)$$

S s'exprime soit en MeV/cm, il est alors appelé pouvoir d'arrêt linéaire, ou soit en MeV.cm²/g, dans ce cas il est appelé pouvoir d'arrêt massique. Dans la mesure où les mécanismes d'interaction diffèrent entre les interactions avec le noyau et les interactions avec le cortège électronique, on peut écrire S comme étant la somme d'une contribution électronique et une contribution nucléaire.

Bien que les interactions avec le noyau mettent en jeu des échanges d'énergie plus importants, la majeure partie de l'énergie perdue par un rayonnement ionisant particulaire est associée aux transferts d'énergie aux électrons du matériau [46].

Les pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique sont des grandeurs tabulées. Par exemple, la base de données NIST (*National Institute of Standards and Technology*) regroupe les pouvoirs d'arrêt de protons dans de nombreux matériaux. Sur la Figure 23, les pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire d'un proton dans du Silicium sont tracés en fonction de l'énergie du proton incident. Les valeurs sont issues de la base de données NIST, elles sont calculées à partir de modèles d'interaction particule-matière et complétées par des données expérimentales.

On observe sur la Figure 23 que le pouvoir d'arrêt électronique (courbe bleue) est plusieurs ordres de grandeur supérieur au pouvoir d'arrêt nucléaire. Cette différence s'accroît lorsque l'énergie de la particule incidente augmente.

En général, on parle de pouvoir d'arrêt lorsque l'on s'intéresse à la particule et de transfert d'énergie linéique (ou LET pour *Linear Energy Transfer*), lorsque l'on considère le milieu absorbant. **Le LET se définit par la quantité d'énergie déposée localement dans un milieu absorbant par une particule donnée qui traverse une distance donnée du milieu**^a. De manière analogue au pouvoir d'arrêt, on peut écrire que le LET résulte de la somme de deux contributions : électronique et nucléaire (voir l'équation (2-2)). Le $LET_{nucléaire}$ est aussi appelé NIEL pour *Non Ionizing Energy Loss*.

$$LET = LET_{electronique} + LET_{nucléaire} \quad (2-2)$$

Dans cette partie, nous avons introduit les concepts de LET et de pouvoir d'arrêt. La détermination de ces grandeurs repose notamment sur l'utilisation de modèles physiques d'interaction rayonnement matière. Ces derniers font l'objet des sections suivantes.

^a La notion de localité, définie par l'élément dx , vient du fait que dans certains cas la particule incidente peut fournir suffisamment d'énergie à un électron (appelé électron delta) qui dépose alors son énergie hors de l'intervalle dx . Par conséquent, on écrira : $LET = dE/dx - \sum E_\delta$, où le premier terme est le pouvoir d'arrêt et $\sum E_\delta$ est la somme des énergies de tous les électrons delta émis sur l'intervalle de distance dx . Cependant, dans la mesure où des électrons δ émis dans les éléments dx voisins peuvent déposer leur énergie dans l'élément dx considéré, la perte d'énergie $-\sum E_\delta$ associée à l'émission d'électrons delta dans ce volume est compensée. De sorte que l'on a $LET \approx dE/dx$.

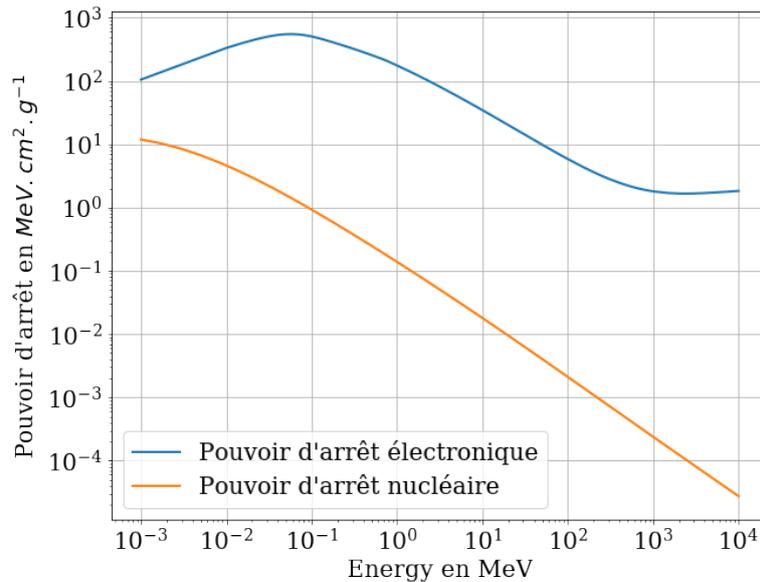


Figure 23 - Pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire d'un proton dans du silicium. Les courbes sont obtenues à partir de la base de données NIST

2.2.2 Interaction nucléaire entre une particule incidente et le milieu cible

Dans le cadre des interactions nucléaires, la particule incidente interagit directement avec les noyaux du matériau cible. Cette interaction peut induire un déplacement du noyau du réseau cristallin hors de son site cristallographique, créant alors des défauts. En quittant sa position, le noyau laisse derrière lui une lacune (parfois notée V pour *Vacancy*). Si ce noyau rejoint une position d'équilibre qui ne correspond pas à une position cristallographique, le défaut ainsi créé est appelé interstice (noté I). L'association d'une lacune et d'une interstice forme une paire de Frenkel [47]. Une fois que ces défauts sont créés ils peuvent se déplacer dans le matériau et ainsi sont susceptibles de former des défauts plus stables, en formant des complexes avec d'autres défauts ou avec des impuretés. En effet, ces défauts ponctuels sont très mobiles, ils peuvent migrer dans le cristal et disparaître en diffusant vers des interfaces, ou former des défauts durables. Cette nouvelle position brise la symétrie du cristal et conduit à la création d'états de pièges.

L'activité électrique de ces défauts dépend de leur nature. Ces déplacements atomiques surviennent à la suite d'interactions nucléaires élastiques ou coulombiennes entre la particule incidente et les atomes du matériau. Lorsque l'énergie de la particule incidente est suffisamment importante, elle peut induire une réaction de spallation en percutant un noyau générant alors des particules secondaires (neutron, gamma, alpha). Le produit de cette interaction interagit à son tour avec le matériau. **On parle d'ionisation secondaire.**

En principe, les photons ne peuvent pas directement générer ce genre de défauts. Cependant, les électrons secondaires énergétiques, produits par effet photo-électrique peuvent, eux, créer des paires de Frenkel en percutant les noyaux du matériau [48].

La quantité d'énergie perdue par la particule incidente, cédée au réseau cristallin, est appelée Non Ionizing Energy Loss (ou NIEL). Elle comprend deux composantes : l'interaction coulombienne et

l'interaction nucléaire. Cette dernière regroupe à la fois les interactions nucléaires élastiques et les interactions nucléaires inélastiques (réactions de fission nucléaires). Un exemple de l'évolution du NIEL avec l'énergie d'un proton incident dans un matériau de $\text{Hg}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Te}$ est tracé sur la Figure 24. La valeur du NIEL présentée est calculée à partir des travaux de Fodness et al. [49]. Le calcul de la contribution coulombienne est basé sur l'équation de diffusion de Rutherford, à laquelle des corrections sont ajoutées, pour tenir compte des effets d'écrantage des électrons, ainsi que des effets relativistes à plus hautes énergies [49]. Les sections efficaces d'interactions nucléaires sont calculées à partir de simulations s'appuyant sur des méthodes Monte Carlo. On retiendra de la Figure 24, que dans le cas du HgCdTe , l'interaction coulombienne domine à faible énergie (en dessous d'une dizaine de MeV), alors que les interactions nucléaires deviennent prépondérantes à partir de 30-50 MeV [50].

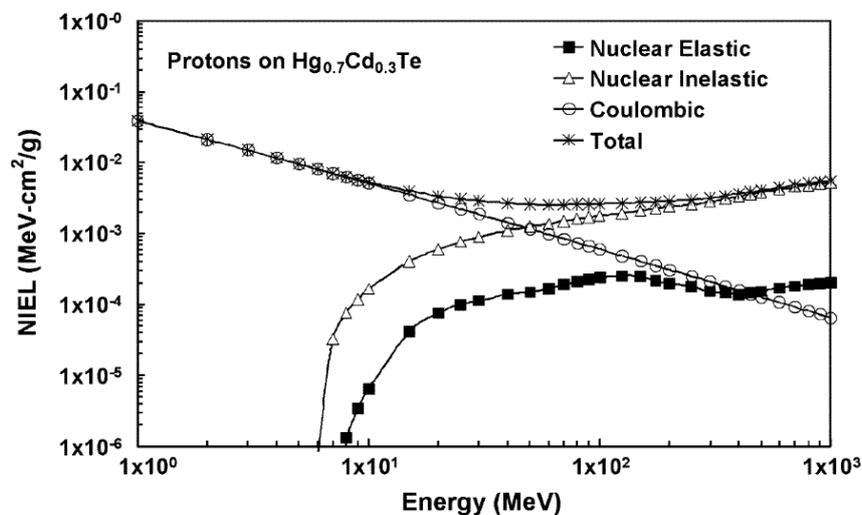


Figure 24 - Exemple de NIEL dans le cas du HgCdTe avec les différentes contributions : élastiques nucléaires, coulombienne et inélastiques nucléaires. Tiré de [50].

Outre les interactions avec les noyaux du réseau cristallin, les particules ionisantes incidente interagissent aussi, et, comme nous l'avons vu (voir Figure 23), principalement, avec le cortège électronique du matériau cible. Les processus physiques d'interactions entre la particule incidente et les électrons des atomes du milieu irradié sont décrits dans la section suivante.

2.2.3 Interaction de la particule incidente avec le cortège électronique du milieu cible

Une particule chargée interagit avec le cortège électronique via la force coulombienne. Nous l'avons déjà mentionné, en pénétrant dans un matériau semi-conducteur, la plus grande partie de l'énergie de la particule incidente est cédée aux électrons de valence. On parle **d'ionisation directe**^a. Si les électrons générés sont suffisamment énergétiques, ils vont à leur tour ioniser la matière.

Pour les photons X et gamma, trois types d'interactions sont possibles :

- L'effet photoélectrique
- L'effet Compton

^a Par opposition à l'ionisation secondaire déjà citée.

- La création de paires électron-positron

La section efficace de ces processus physiques dépend de l'énergie du photon incident et de la nature du milieu cible [48]. Ici, nous nous intéressons uniquement aux rayonnements de particules ionisantes. Les processus d'interactions des photons avec la matière ne seront donc pas détaillés.

Lorsque l'on considère une particule chargée, la quantité moyenne d'énergie perdue dE par unité élémentaire de distance traversée dans la matière dx , s'exprime par la formule de Bethe Bloch, exprimée par l'équation (2-3)^a.

$$\frac{dE}{dx} = Kz^2 \frac{Z}{A} \frac{1}{\beta^2} \left[\ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{I} \right) - \beta^2 \right] \rho \quad (2-3)$$

Où

$$K = 4\pi N_a r_e^2 m_e c^2 \quad (2-4)$$

Dans l'équation (2-3), Z est le nombre atomique du milieu cible, A sa masse atomique en unité de masse atomique ($1 \text{ u} = 1 \text{ g.mol}^{-1}$), I est l'énergie moyenne d'ionisation, ρ est la densité du matériau cible. La variable β désigne le rapport entre la vitesse de la particule, notée v , et la vitesse de la lumière, notée c . γ est le facteur de Lorentz exprimé par l'équation (2-5).

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (2-5)$$

m_e est la masse de l'électron et z est le nombre de charges de la particule incidente. La formule de Bethe Bloch est valable pour des énergies de particules allant de quelques MeV à une dizaine de GeV ($0.1 \leq \beta\gamma \leq 1000$).

Dans la mesure où $E \propto v^2$, avec E l'énergie de la particule incidente, on pourra retenir les dépendances exprimées par l'équation (2-6) du pouvoir d'arrêt électronique.

$$\frac{dE}{dx} \propto \frac{z^2 \rho Z}{E A} \quad (2-6)$$

Ainsi, la quantité d'énergie perdue par la particule incidente est proportionnelle au carré de sa charge (une particule alpha, He^{2+} , perdra son énergie 4 fois plus rapidement qu'un proton, H^+ , pour une énergie et un matériau cible donné). Elle varie aussi proportionnellement avec la densité électronique du matériau cible. Enfin, la perte d'énergie est inversement proportionnelle à l'énergie de la particule. En d'autres termes, plus l'énergie de la particule incidente est faible, plus la quantité d'énergie perdue sera grande. Cela peut s'expliquer par le fait que lorsque la particule ralentit, celle-ci passe plus de temps à proximité des électrons d'un atome et interagit donc plus longtemps avec ces derniers, cédant

^a En toute rigueur on devrait écrire $\left\langle \frac{dE}{dx} \right\rangle$, mais on néglige souvent les brackets.

une plus grande part de son énergie [51]. La section efficace d'interaction devient plus importante lorsque la vitesse de la particule incidente devient de l'ordre de celles des électrons.

Bien que la démonstration de la formule de Bethe-Bloch considère l'interaction d'une particule chargée avec un atome isolé, celle-ci est couramment utilisée pour simuler la quantité d'énergie perdue dans un matériau. Néanmoins, des termes correctifs sont ajoutés, comme le terme de correction associé aux effets de densité (tabulé par [52]), le terme de Barkas Andersen (tenant compte de la charge de la particule incidente), le terme de Bloch, et le terme de correction introduisant l'effet des orbitales atomiques (pour considérer le mouvement des électrons au sein du matériau) [53].

Dans un semi-conducteur, en cédant une partie de son énergie cinétique aux électrons de la bande de valence, la pénétration d'une particule ionisante provoque la transition des électrons de la bande de valence à la bande de conduction. Si l'énergie des électrons générés est suffisamment élevée, ils peuvent à leur tour ioniser la matière, générant une cascade d'électrons secondaires. L'énergie perdue par la particule incidente génère alors un nuage de charges le long de sa trajectoire.

Le nombre total de charges créées dépend de la quantité d'énergie déposée par la particule incidente (photon énergétique ou ion). Dans un semi-conducteur, ces paires électron-trou générées sont mobiles : elles sont soumises au champ électrique de la structure semi-conductrice ainsi qu'au processus physique de diffusion. Auquel cas, les charges diffusent vers les régions où elles sont minoritaires.

Ainsi, le dépôt d'énergie d'une particule ionisante dans un matériau semi-conducteur conduit à la génération de paires électron-trou qui, une fois collectées, contribuent au courant circulant dans le dispositif semi-conducteur. Ce courant parasite est la source d'évènements singuliers dont l'effet peut être permanent ou transitoire. Dans la section suivante, les effets de l'interaction (à la fois nucléaire et électronique) d'un rayonnement ionisant particulaire sur les composants électroniques sont discutés.

2.2.4 Les effets de l'interaction de particules ionisantes sur les composants électroniques

On différencie les effets de l'irradiation sur les composants électroniques en deux catégories : les effets de dose liés à l'accumulation de l'énergie déposée par les particules incidentes, et les effets singuliers associés au dépôt d'énergie d'une particule dans une partie sensible du composant.

Parmi les effets cumulatifs, on distingue la **dose ionisante** des **déplacements atomiques**. Dans le premier cas, c'est l'accumulation de charges générées par le passage de particules qui modifie le comportement du composant. On parle de **Dose Ionisante Cumulée** (ou TID pour *Total Ionizing Dose*). Dans un matériau isolant, une partie des électrons excités par interaction coulombienne avec la particule incidente va se relaxer rapidement. Tandis qu'une autre partie peut se trouver piégée sur des défauts présents dans l'isolant, pour lesquels les temps caractéristiques de relaxation sont très longs. Le piégeage de ces porteurs peut conduire à une modification du comportement électrique du composant, en créant au sein de la structure des plans électriquement chargés. Par exemple, dans les structures MOS (Metal-Oxyde Semi-conducteur) sous irradiation, des charges s'accumulent dans l'oxyde et modifient le comportement électrique du dispositif [54].

Dans le second cas, c'est l'augmentation du nombre de défauts, se traduisant par la création d'états de pièges dans le semi-conducteur, qui dégrade ses performances. C'est la **Dose de Défauts de Déplacement** (ou DDD pour *Displacement Damage Dose*). Dans les détecteurs, cet effet de dose détériore les temps de vie des porteurs (augmentant par exemple le courant d'obscurité) ainsi que la réponse optique du composant [55].

La dose s'exprime généralement en rad (pour *radiation absorbed dose*) bien que cette unité soit obsolète. Dans le système international d'unités, la dose s'exprime en Gray (Gy). On a la relation suivante :

$$1 \text{ Gy} = 1 \text{ J/kg} = 100 \text{ rad}$$

Comme susmentionné, outre les effets de dose, il existe aussi des effets singuliers associés au dépôt d'énergie dans les parties sensibles des composants. Certains ont des effets permanents (voir destructeurs), et d'autres ont des effets transitoires. Afin d'étudier les effets singuliers et de prédire l'effet du passage d'une particule ionisante dans une structure semi-conductrice, des outils de simulation de transport de particule dans la matière ont été développés. Couplés à des logiciels de transport dans les matériaux semi-conducteurs (TCAD, *Technology Computer Aid Design*), il est possible de prédire numériquement l'effet du dépôt d'une particule dans un dispositif.

Les outils de simulation actuels ne permettent pas de modéliser dans tous les matériaux le transport des électrons de leur génération jusqu'à la perte totale de leur énergie cinétique. Par conséquent, en pratique afin de déterminer le nombre de paires électron-trou créées dans un matériau, on utilise **l'énergie moyenne de création d'une paire électron-trou**, notée $E_{e-h} \sim 3E_g$ [56]. En divisant la quantité d'énergie déposée dans un matériau, notée $E_{déposée}$, par E_{e-h} , on obtient le nombre de paires électron-trou créées, N_{e-h} , comme exprimé par l'équation (2-7).

$$N_{e-h} = \frac{E_{déposée}}{E_{e-h}} \quad (2-7)$$

Ainsi, si une particule dépose quelques MeV dans le silicium, dans lequel $E_{e-h} = 3.6 \text{ eV}$, quelques millions de paires électron-trous seront créées dans le matériau. Plusieurs modèles ont été proposés pour déterminer l'énergie nécessaire à la création d'une paire électron-trou dans un matériau semi-conducteur. Le modèle phénoménologique de Klein [56] est le plus utilisé, il sera présenté dans le chapitre 2.

En revanche, pour des matériaux largement utilisés en microélectronique tels que le silicium [57] ou l'oxyde de silicium [58], des modèles détaillés ont été développés pour suivre les charges générées de leur génération jusqu'à la perte de leur énergie cinétique. Ces calculs de transport d'électrons de basse énergie dans un matériau s'appuient sur la théorie de Linhard [46], qui nécessite une connaissance fine des fonctions diélectriques, et sur des modèles d'interaction électron-phonon^a. Le développement de ces outils de simulation est poussé par le besoin de simuler finement les effets des radiations sur

^a Un phonon est une quasi-particule associée à une onde associée aux vibrations collectives des atomes dans un solide. L'énergie de ces modes vibratoires est quantifiée : le quantum d'énergie associé est appelé phonon.

des composants de plus en plus intégrés (ayant des tailles caractéristiques de quelques nanomètres). Ainsi, dans le silicium, Murat et al. ont développé un code de transport d'électrons secondaires valable jusqu'à une énergie de 1.5 eV [57].

Les détecteurs de technologie HgCdTe sont aussi sensibles aux effets de TID et DDD précédemment présentés [59]. Ceux-ci font l'objet de la section suivante. Nous évoquerons les effets de l'irradiation sur les détecteurs IR HgCdTe ainsi que la problématique du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe.

2.3 Effets des radiations sur les détecteurs IR HgCdTe et problématique du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe

2.3.1 Effets de dose dans la couche de HgCdTe

Les effets de doses ionisantes se manifestent via le dépôt d'énergie dans les passivations (voir Figure 15). Ces passivations sont des matériaux isolants qui assurent la stabilité électrique du composant. Bien que les effets de TID disparaissent après un recuit à 300 K, les détecteurs de technologie HgCdTe passivés avec du ZnS présentaient une dégradation de leur performance à de très faibles doses. Pendant longtemps, le matériau ZnS a été utilisé comme couche de passivation, avant d'être remplacé par du CdTe. L'utilisation du CdTe comme oxyde de passivation a permis de durcir les détecteurs de technologie HgCdTe vis-à-vis de la dose ionisante. En effet, des études ont montré que des détecteurs pouvaient supporter des doses de 1 Mrad [59]. A titre de comparaison, la dose ionisante sur la totalité de la mission spatiale ARIEL reçu par le détecteur IR de la voie grande longueur d'onde est évaluée à 150 rad.

Concernant les DDDs, le phénomène principal induit par l'irradiation de particules relève de l'introduction de niveaux donneurs dans la matériau massif (probablement des lacunes de mercure) [59]. Ces niveaux d'impuretés sont des centres de recombinaison SRH, et dégradent alors le temps de vie des porteurs. Ainsi, le taux d'introduction des donneurs correspond au taux d'introduction de centres de recombinaison dans le matériau. En fonction du dopage et la technologie utilisée (p/n ou n/p), les mécanismes de dégradations de la réponse des détecteurs seront différents. Côté n , l'introduction de niveaux donneurs modifie la concentration de porteurs libres. Côtés p , c'est le temps de vie des porteurs qui est modifié suite à l'introduction de centres SRH.

De manière générale, les détecteurs HgCdTe sont plus tolérants aux dégâts de déplacements en comparaison aux technologies III-V [60]. Le caractère ionique des liaisons dans le HgCdTe rend ce matériau plus tolérant aux changements de structure. Dans les matériaux III-V, dans lesquels les liaisons sont de natures covalentes, les défauts créés sont moins mobiles, et les liaisons pendantes peuvent créer des défauts stables et potentiellement plus actifs.

2.3.2 Effets transitoires dans la couche de HgCdTe

De par l'utilisation d'une jonction PN (dont l'objectif est de collecter des porteurs), outre les effets de dose, les détecteurs sont par construction extrêmement sensibles au dépôt d'énergie dans la structure du détecteur. Les porteurs générés par le passage d'une particule ionisante vont, indifféremment des

porteurs générés par des photons, être collectés et contribuer au courant mesuré. L'amplitude du pulse de courant induit par le dépôt d'énergie dépend du LET électronique de la particule incidente. Lors de l'irradiation d'une jonction PN par un ion, on peut distinguer trois étapes allant de la génération à la collection des porteurs [61]. Ces différentes étapes ainsi que le pulse de courant associé sont présentés sur la Figure 25.

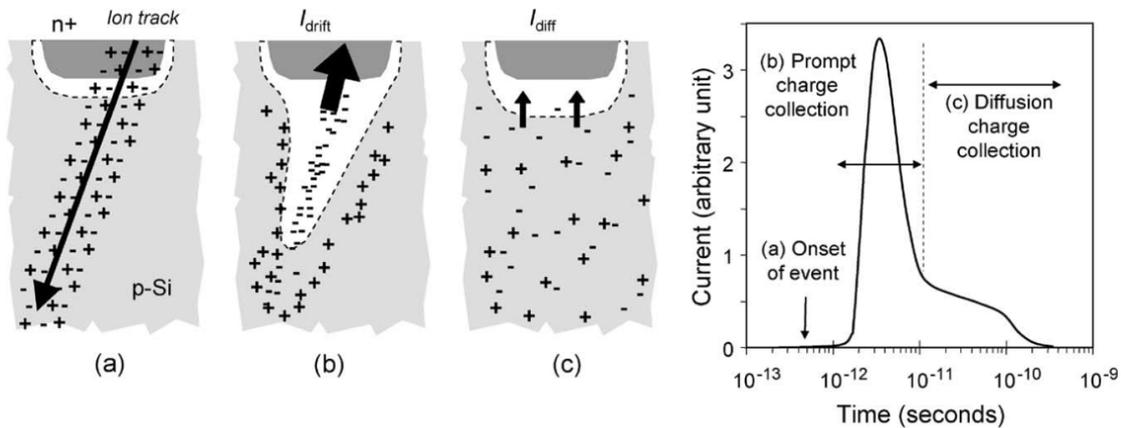


Figure 25 - Génération et collection de charges dans une jonction PN polarisée en inverse et le pulse de courant associé induit par le passage d'une particule ionisante. Tiré de [61].

La première étape concerne la génération des porteurs proche de la trajectoire du proton par ionisation. Ceux-ci sont distribués dans un cylindre au diamètre submicronique dans lequel la concentration des porteurs peut être élevée (plusieurs ordres de grandeurs au-dessus du dopage). Les porteurs générés proches de la jonction sont rapidement collectés. Cette collection est favorisée par la présence d'un fort champ électrique créant ainsi un pulse important de courant. De plus, la haute densité de porteurs induit une distorsion de la ZCE dans la direction de la trajectoire du proton : c'est l'effet *funneling* [62]. Cet effet d'entonnoir, augmente la taille de la ZCE et favorise la collection des porteurs par phénomène de dérive. Une fois que la densité de porteurs diminue, le champ électrique retrouve sa forme initiale, dans la mesure où une tension de polarisation est appliquée sur le semi-conducteur. Enfin, les porteurs restants diffusent, ils sont alors collectés lorsqu'ils atteignent une jonction ou bien se recombinent. En pratique, dans les matrices de HgCdTe, les jonctions PN sont proches les unes des autres, de sorte qu'un porteur généré par le passage d'une particule dans un pixel peut diffuser et être collecté par un pixel voisin.

Une image obtenue à partir de la moyenne d'évènements transitoires relevés sur l'instrument IR NICMOS (*Near Infrared Camera and Multi-Object Spectrometer*) d'Hubble [63] est présentée sur la Figure 26. On observe sur cette figure que l'impact d'un proton sur le détecteur affecte principalement le pixel directement percuté par le proton incident (ici le pixel central). Néanmoins, une partie des charges est partagée et collectée par les pixels voisins, les plus proches du pixel central^a. La faible extension radiale du cluster de pixels témoigne d'une collection rapide des porteurs, favorisée par la présence des diodes dans chaque pixel.

^a Le partage des charges est lié à la diffusion des porteurs ainsi qu'au phénomène d'IPC *InterPixel Capacitance*.

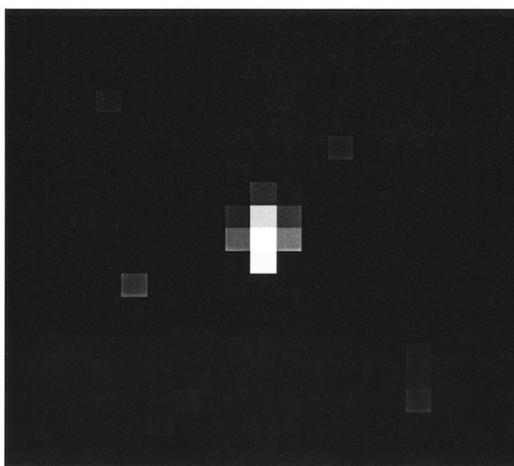


Figure 26 - Image moyenne d'évènements transitoires relevées dans l'instrument IR NICMOS d'Hubble, tiré de [63].

Enfin, mise à part l'interaction de la particule avec la couche de HgCdTe, il s'agit de s'intéresser à la problématique de l'interaction des ions avec le substrat (lorsque celui-ci n'est pas retiré après fabrication). C'est le sujet de la section suivante.

2.3.3 Problématiques du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe

De manière générale, le substrat de CdZnTe est retiré sur les matrices de détection HgCdTe en fin de fabrication avec des méthodes chimiques ou mécaniques. Cette étape supplémentaire dans la chaîne de fabrication des détecteurs permet d'étendre la gamme spectrale de réponse du détecteur. Ainsi, Gravrand et al. ont mesuré des réponses spectrales de détecteurs IR allant du LWIR à l'UV [64]. Les photons ayant une énergie supérieure au gap du CdZnTe, soit 1.608 eV à 100 K ou 771 nm, ne sont plus absorbés par le substrat et peuvent alors être détectés par la couche de HgCdTe. Par ailleurs, dans le NIR, des mesures effectuées sur des détecteurs H2RG de Teledyne fabriqués pour l'instrument *Wide Field Camera 3* (WFC3) du *Hubble Space Telescope*, dont le substrat a été retiré, ont montré une amélioration des performances des détecteurs (détection dans le domaine visible, meilleure sensibilité dans le proche infrarouge ainsi qu'une plus grande uniformité de la matrice de détection) [65].

D'autre part, le retrait complet du substrat permet de supprimer les effets d'interférences, ainsi que les effets induits par le dépôt d'énergie dans le substrat par des particules ionisantes. Ces derniers ont été introduits et discutés dans le chapitre 0, nous rappelons brièvement dans les paragraphes suivants les effets de l'irradiation sur ces composants IR lorsque le substrat n'est pas retiré.

Lors des phases de développement de la voie NIR de l'instrument WFC3, Johnson et al. ont irradié des détecteurs H1RG non amincis, avec une épaisseur de substrat $\sim 800 \mu\text{m}$. Outre l'effet du dépôt d'énergie dans le HgCdTe, l'étude des évènements transitoires a mis en évidence l'existence d'un signal de fond diffus au voisinage des pixels affectés par le passage de protons [66]. Une étude expérimentale menée par Waczynski et al. [67], associe cette élévation du signal de fond à la luminescence du substrat de CdZnTe. Une partie des porteurs générés dans le substrat se désexcite de manière radiative. Les photons émis seraient ensuite détectés par la couche de HgCdTe, ajoutant un signal photonique parasite au signal photonique utile issu des étoiles par exemple.

Le retrait complet du substrat résout radicalement le problème aussi bien dans le domaine NIR [68] que dans le domaine LWIR [69]. En revanche, le processus de retrait du substrat est une étape délicate dans le processus de fabrication des détecteurs. En effet, amincir mécaniquement la totalité du substrat fragilise la structure du détecteur dégradant ces performances. Un amincissement chimique complémentaire est donc nécessaire mais il est très difficile en pratique d'éliminer tout le substrat sans attaquer la couche de HgCdTe. Le retrait du substrat réduit le rendement de fabrications des détecteurs. Récemment, une étude a montré qu'un détecteur LWIR au substrat partiellement retiré (30 μm de substrat résiduel) ne manifestait pas d'élévation du signal de fond.

Néanmoins, les processus physiques mis en jeu ne sont pas bien compris. Par ailleurs, il n'existe pas de modèle décrivant l'effet du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe sur la réponse des détecteurs IR. Une meilleure compréhension du phénomène permettrait aux fabricants de déterminer une épaisseur de substrat assurant le fonctionnement du détecteur dans des conditions optimales en minimisant la pollution d'image sous irradiation de protons.

Bien que les outils de simulations ne tiennent pas compte de l'effet du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe, certains programmes ont été développés pour simuler l'effet de l'interaction des particules avec la région photosensible des imageurs. Ces programmes sont discutés dans la section suivante.

2.3.4 Outils de modélisation de l'effet des radiations sur les composants électroniques

Le signal induit par le passage d'une particule ionisante s'ajoute au signal provenant de la scène observée. Afin de mieux comprendre la réponse des détecteurs sous irradiation des outils de modélisation ont été développés et validés. Ces derniers simulent les événements transitoires induits par le passage des protons dans la structure des détecteurs. Ces modèles étaient d'abord dédiés aux CCDs (*Charge Coupled Device*) avant d'être étendus aux détecteurs IR [59].

Ces modèles sont utilisés pour simuler les images d'instruments en orbite spatiale, et permettent ainsi de tester les algorithmes de détections d'événements transitoires. Ils prennent en compte la géométrie du satellite afin de déterminer le flux et le spectre de particules (à la fois l'énergie et la nature de ces particules) reçu au niveau du plan focal. Dans un second temps, le LET est utilisé dans le but d'estimer le nombre de charges déposées dans la structure semi-conductrice. Dans ces simulations, l'architecture des pixels est simplifiée, elle est réduite à la superposition de deux couches. La première est une couche de déplétion électriquement parfaitement absorbante, elle correspond aux régions où règne un fort champ électrique). Dans la seconde couche les charges sont seulement soumises au processus de diffusion. Ces simplifications permettent d'utiliser des modèles analytiques, lesquels forts de leur rapidité d'exécution sont préférés aux méthodes d'éléments finis. Finalement, cette chaîne de modélisation permet d'obtenir des images sur lesquelles les effets transitoires induits par l'irradiation de protons sont observés.

Dans les régions dominées par la diffusion, les modèles analytiques s'appuient sur les calculs de diffusion effectués par Kirkpatrick [70]. L'équation de drift-diffusion est résolue en 3 dimensions. Puis la densité de courant, circulant à l'interface entre la région parfaitement absorbante et la région de diffusion, est intégrée pour obtenir un nombre de charges collectées par pixel. La quantité de paires électron-trou générées par la particule ionisante est calculée à partir du LET. Les charges sont toutes

supposées distribuées le long de la trajectoire de la particule. Dans les régions parfaitement absorbantes, les paires électron-trou générées sont directement collectées [71]. Ces outils de simulations sont utilisés pour modéliser la réponse de détecteurs IR sous irradiation [71].

3 Conclusions du chapitre

Dans ce chapitre, j'ai décrit les principes de bases du fonctionnement des détecteurs quantiques IR basés sur la technologie HgCdTe. Ces détecteurs sont constitués d'un substrat de CdZnTe sur lequel une couche photosensible de HgCdTe est crûe. Par implantation d'atomes dopants, des diodes sont formées dans cette couche semi-conductrice. Chaque diode est reliée électriquement et mécaniquement au circuit de lecture en silicium avec des billes d'indium.

En environnement spatial, ces détecteurs sont soumis à un flux de particules ionisantes. Or nous l'avons illustré dans le chapitre 0 au travers de l'exemple de la mission spatiale Euclid, l'effet de l'irradiation sur le substrat de CdZnTe de ces détecteurs conduit à une dégradation de leurs performances. Cette pollution serait associée à la création de porteurs dans le substrat de CdZnTe le long de la trajectoire de la particule ionisante. Les processus physiques mis en jeu dans la dégradation des performances du détecteur restent mal connus. L'objectif de cette thèse est de développer un modèle permettant de simuler l'effet de l'irradiation de protons sur les détecteurs IR de technologie HgCdTe lorsque le substrat de CdZnTe n'est pas complètement retiré. Ce modèle est présenté dans le chapitre suivant.

Références

- [1] T. F.-L. collaboration *et al.*, « Detection of the Characteristic Pion-Decay Signature in Supernova Remnants », *Science*, vol. 339, n° 6121, p. 807-811, févr. 2013, doi: 10.1126/science.1231160.
- [2] A. Rogalski, « History of infrared detectors », *Opto-Electron. Rev.*, vol. 20, n° 3, janv. 2012, doi: 10.2478/s11772-012-0037-7.
- [3] D. Ball, « The Electromagnetic Spectrum: A History », *Spectroscopy*, vol. 22, n° 3, p. 14-20, mars 2007.
- [4] A. Rogalski, « Next decade in infrared detectors », in *Electro-Optical and Infrared Systems: Technology and Applications XIV*, Warsaw, Poland, oct. 2017, p. 100, doi: 10.1117/12.2300779.
- [5] J. T. Longo, D. T. Cheung, A. M. Andrews, C. C. Wang, et J. M. Tracy, « Infrared Focal Planes in Intrinsic Semiconductors », *IEEE J. Solid-State Circuits*, vol. 13, n° 1, p. 139-158, févr. 1978, doi: 10.1109/JSSC.1978.1051008.
- [6] J. E. Huffman, A. G. Crouse, B. L. Halleck, T. V. Downes, et T. L. Herter, « Si:Sb blocked impurity band detectors for infrared astronomy », *J. Appl. Phys.*, vol. 72, n° 1, p. 273-275, juill. 1992, doi: 10.1063/1.352127.
- [7] B. F. Levine, « Quantum-well infrared photodetectors », *J. Appl. Phys.*, vol. 74, n° 8, p. R1-R81, oct. 1993, doi: 10.1063/1.354252.
- [8] A. Rogalski, P. Martyniuk, et M. Kopytko, « InAs/GaSb type-II superlattice infrared detectors: Future prospect », *Appl. Phys. Rev.*, vol. 4, n° 3, p. 031304, août 2017, doi: 10.1063/1.4999077.
- [9] C. Livache *et al.*, « A colloidal quantum dot infrared photodetector and its use for intraband detection », *Nat. Commun.*, vol. 10, n° 1, Art. n° 1, mai 2019, doi: 10.1038/s41467-019-10170-8.
- [10] C. L. Tan et H. Mohseni, « Emerging technologies for high performance infrared detectors », *Nanophotonics*, vol. 7, n° 1, p. 169-197, janv. 2018, doi: 10.1515/nanoph-2017-0061.
- [11] K. Minoglou *et al.*, « Infrared image sensor developments supported by the European Space Agency », *Infrared Phys. Technol.*, vol. 96, p. 351-360, janv. 2019, doi: 10.1016/j.infrared.2018.12.010.
- [12] A. Šimůnek et J. Vackář, « Hardness of Covalent and Ionic Crystals: First-Principle Calculations », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, n° 8, p. 085501, mars 2006, doi: 10.1103/PhysRevLett.96.085501.
- [13] H. Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et des composants optoélectroniques*. Paris: Dunod, 2004.
- [14] B. Fièque *et al.*, « Development of astronomy large focal plane array "ALFA" at Sofradir and CEA », in *High Energy, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy VIII*, Austin, United States, juill. 2018, p. 5, doi: 10.1117/12.2311713.
- [15] A. Rogalski, « HgCdTe infrared detector material: history, status and outlook », *Rep. Prog. Phys.*, vol. 68, n° 10, p. 2267-2336, oct. 2005, doi: 10.1088/0034-4885/68/10/R01.
- [16] D. Brellier *et al.*, « Bulk Growth of CdZnTe: Quality Improvement and Size Increase », *J. Electron. Mater.*, vol. 43, n° 8, p. 2901-2907, août 2014, doi: 10.1007/s11664-014-3146-x.
- [17] S. P. Tobin *et al.*, « A comparison of techniques for nondestructive composition measurements in CdZnTe substrates », *J. Electron. Mater.*, vol. 24, n° 5, p. 697-705, mai 1995, doi: 10.1007/BF02657981.
- [18] J. Franc *et al.*, « Determination of energy gap in Cd_{1-x}Zn_xTe (x = 0-0.06) », *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 15, n° 6, p. 561-564, juin 2000, doi: 10.1088/0268-1242/15/6/313.

- [19] D. J. Olego, J. P. Faurie, S. Sivananthan, et P. M. Raccah, « Optoelectronic properties of Cd_{1-x}Zn_xTe films grown by molecular beam epitaxy on GaAs substrates », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 47, n° 11, p. 1172-1174, déc. 1985, doi: 10.1063/1.96316.
- [20] N. Magnea, F. Dal'bo, J. L. Pautrat, A. Million, L. D. Cioccio, et G. Feuillet, « Molecular Beam Epitaxial Growth of Cd_{1-x}Zn_xTe Matched to HgCdTe Alloys », *MRS Online Proc. Libr. Arch.*, vol. 90, ed 1986, doi: 10.1557/PROC-90-455.
- [21] K. Oettinger, D. M. Hofmann, Al. L. Efros, B. K. Meyer, M. Salk, et K. W. Benz, « Excitonic line broadening in bulk grown Cd_{1-x}Zn_xTe », *J. Appl. Phys.*, vol. 71, n° 9, p. 4523-4526, mai 1992, doi: 10.1063/1.350798.
- [22] J. L. Reno et E. D. Jones, « Determination of the dependence of the band-gap energy on composition for CdZnTe », *Phys. Rev. B*, vol. 45, n° 3, p. 1440-1442, janv. 1992, doi: 10.1103/PhysRevB.45.1440.
- [23] A. R. Denton et N. W. Ashcroft, « Vegard's law », *Phys. Rev. A*, vol. 43, n° 6, p. 3161-3164, mars 1991, doi: 10.1103/PhysRevA.43.3161.
- [24] F. Gemain, « Etudes spectroscopiques du dopage dans les matériaux II-VI pour les détecteurs infrarouge et les cellules photovoltaïques », phdthesis, Université de Grenoble, 2012.
- [25] 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.
- [26] M. Prokesch et C. Szeles, « Accurate measurement of electrical bulk resistivity and surface leakage of CdZnTe radiation detector crystals », *J. Appl. Phys.*, vol. 100, n° 1, p. 014503, juill. 2006, doi: 10.1063/1.2209192.
- [27] R. Pässler, « Temperature dependence of fundamental band gaps in group IV, III-V, and II-VI materials via a two-oscillator model », *J. Appl. Phys.*, vol. 89, n° 11, p. 6235-6240, juin 2001, doi: 10.1063/1.1369407.
- [28] J. P. Laurenti, J. Camassel, A. Bouhemadou, B. Toulouse, R. Legros, et A. Lusson, « Temperature dependence of the fundamental absorption edge of mercury cadmium telluride », *J. Appl. Phys.*, vol. 67, n° 10, p. 6454-6460, mai 1990, doi: 10.1063/1.345119.
- [29] G. Fonthal, L. Tirado-Mejía, J. I. Marín-Hurtado, H. Ariza-Calderón, et J. G. Mendoza-Alvarez, « Temperature dependence of the band gap energy of crystalline CdTe », *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 61, n° 4, p. 579-583, avr. 2000, doi: 10.1016/S0022-3697(99)00254-1.
- [30] F. G. Sánchez-Almazan *et al.*, « Temperature dependence of the band gap of Cd_{1-x}Zn_xTe alloys of low zinc concentrations », *J. Appl. Phys.*, vol. 79, n° 10, p. 7713-7717, mai 1996, doi: 10.1063/1.362374.
- [31] T. S. Jeong et P. Y. Yu, « Temperature dependence of the photocurrent in p-type CdTe », *J. Korean Phys. Soc.*, vol. 43, n° 6, p. 1101-1104, 2003.
- [32] G. L. Hansen, J. L. Schmit, et T. N. Casselman, « Energy gap versus alloy composition and temperature in Hg_{1-x}Cd_xTe », *J. Appl. Phys.*, vol. 53, n° 10, p. 7099-7101, oct. 1982, doi: 10.1063/1.330018.
- [33] G. H. Rieke, « Infrared Detector Arrays for Astronomy », *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, vol. 45, n° 1, p. 77-115, 2007, doi: 10.1146/annurev.astro.44.051905.092436.
- [34] L. Tauziede, B. Fièque, H. Geoffray, O. Gravrand, et A. Bardoux, « CNES infrared detector development for space missions: status and roadmap », in *International Conference on Space Optics – ICSSO 2016*, Biarritz, France, sept. 2017, p. 272, doi: 10.1117/12.2296234.

- [35] M. Zandian *et al.*, « Performance of science grade HgCdTe H4RG-15 image sensors », in *High Energy, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy VII*, juill. 2016, vol. 9915, p. 99150F, doi: 10.1117/12.2233664.
- [36] J. Y. Lee, D. Figer, E. Corrales, J. Getty, et L. Mears, « HgCdTe detectors grown on silicon substrates for observational astronomy », in *High Energy, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy VIII*, Austin, United States, juill. 2018, p. 83, doi: 10.1117/12.2313401.
- [37] M. Kopytko et A. Rogalski, « HgCdTe barrier infrared detectors », *Prog. Quantum Electron.*, vol. 47, p. 1-18, mai 2016, doi: 10.1016/j.pquantelec.2016.03.001.
- [38] P. Norton, « HgCdTe infrared detectors », *Opto-Electron. Rev.*, vol. 10, janv. 2002.
- [39] J. Beck *et al.*, « The HgCdTe electron avalanche photodiode », *J. Electron. Mater.*, vol. 35, n° 6, p. 1166-1173, juin 2006, doi: 10.1007/s11664-006-0237-3.
- [40] N. Vanamala, K. C. Santiago, et N. C. Das, « Enhanced MWIR absorption of HgCdTe (MCT) via plasmonic metal oxide nanostructures », *AIP Adv.*, vol. 9, n° 2, p. 025113, févr. 2019, doi: 10.1063/1.5088590.
- [41] A. Claret, « Effets des radiations sur les observatoires spatiaux, de la conception à l'exploitation », 2010.
- [42] G. Giardino *et al.*, « The impact of cosmic rays on the sensitivity of JWST/NIRSpec », *Publ. Astron. Soc. Pac.*, vol. 131, n° 1003, p. 094503, sept. 2019, doi: 10.1088/1538-3873/ab2fd6.
- [43] R. A. Mewaldt, « Galactic cosmic ray composition and energy spectra », *Adv. Space Res.*, vol. 14, n° 10, p. 737-747, oct. 1994, doi: 10.1016/0273-1177(94)90536-3.
- [44] A. J. Tylka *et al.*, « CREME96: A Revision of the Cosmic Ray Effects on Micro-Electronics Code », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, p. 11, 1997.
- [45] M. Xapsos et S. Bourdarie, « RADECS Short Course Session I: The Space Radiation Environment », 2007.
- [46] P. Sigmund, *Particle Penetration and Radiation Effects: General Aspects and Stopping of Swift Point Charges*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2006.
- [47] 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.
- [48] C. Claeys et E. Simoen, *Radiation Effects in Advanced Semiconductor Materials and Devices*, vol. 57. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2002.
- [49] B. Fodness *et al.*, « Monte Carlo Treatment of Displacement Damage in Bandgap Engineered HgCdTe Detectors », *ESASP*, vol. 536, p. 479, oct. 2004.
- [50] C. J. Marshall *et al.*, « Comparison of Measured Dark Current Distributions With Calculated Damage Energy Distributions in HgCdTe », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 54, n° 4, p. 1097-1103, août 2007, doi: 10.1109/TNS.2007.895804.
- [51] M. Short, « Introduction to Nuclear Engineering and Ionizing Radiation ». 2016, Consulté le: oct. 06, 2020. [En ligne]. Disponible sur: <https://ocw.mit.edu/courses/nuclear-engineering/22-01-introduction-to-nuclear-engineering-and-ionizing-radiation-fall-2016/>.
- [52] R. M. Sternheimer, M. J. Berger, et S. M. Seltzer, « Density effect for the ionization loss of charged particles in various substances », *At. Data Nucl. Data Tables*, vol. 30, n° 2, p. 261-271, mars 1984, doi: 10.1016/0092-640X(84)90002-0.
- [53] J. F. Ziegler, « The Stopping of Energetic Light Ions in Elemental Matter », *J Appl Phys*, p. 51, 1999.
- [54] 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.

- [55] G. R. Hopkinson, « Radiation effects on solid state imaging devices », *Radiat. Phys. Chem.*, vol. 43, n° 1-2, p. 79-91, janv. 1994, doi: 10.1016/0969-806X(94)90203-8.
- [56] C. A. Klein, « Bandgap Dependence and Related Features of Radiation Ionization Energies in Semiconductors », *J. Appl. Phys.*, vol. 39, n° 4, p. 2029-2038, mars 1968, doi: 10.1063/1.1656484.
- [57] M. Murat, A. Akkerman, et J. Barak, « Electron and Ion Tracks in Silicon: Spatial and Temporal Evolution », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 55, n° 6, p. 3046-3054, déc. 2008, doi: 10.1109/TNS.2008.2007646.
- [58] M. Murat, A. Akkerman, et J. Barak, « Ion track structure and dynamics in SiO₂ », in *2007 9th European Conference on Radiation and Its Effects on Components and Systems*, sept. 2007, p. 1-9, doi: 10.1109/RADECS.2007.5205478.
- [59] « 2004 - HARDNESS ASSURANCE AND PHOTONICS CHALLENGES FOR SPACE SYSTEMS », p. 412.
- [60] G. D. Jenkins, C. P. Morath, et V. M. Cowan, « Empirical Study of the Disparity in Radiation Tolerance of the Minority-Carrier Lifetime Between II–VI and III–V MWIR Detector Technologies for Space Applications », *J. Electron. Mater.*, vol. 46, n° 9, p. 5405-5410, sept. 2017, doi: 10.1007/s11664-017-5628-0.
- [61] R. C. Baumann, « Radiation-induced soft errors in advanced semiconductor technologies », *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.*, vol. 5, n° 3, p. 305-316, sept. 2005, doi: 10.1109/TDMR.2005.853449.
- [62] C. M. Hsieh, P. C. Murley, et R. R. O'Brien, « A field-funneling effect on the collection of alpha-particle-generated carriers in silicon devices », *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 2, n° 4, p. 103-105, avr. 1981, doi: 10.1109/EDL.1981.25357.
- [63] R. Ladbury *et al.*, « Characteristics of the hubble space telescope's radiation environment inferred from charge--collection modeling of near-infrared camera and multi-object spectrometer darkframes », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 49, n° 6, p. 2765-2770, déc. 2002, doi: 10.1109/TNS.2002.805384.
- [64] O. Gravrand et J. Rothman, « HgCdTe Quantum Detection: from Long-Wave IR down to UV », *J. Electron. Mater.*, vol. 40, n° 8, p. 1781-1784, août 2011, doi: 10.1007/s11664-011-1691-0.
- [65] E. C. Piquette, D. D. Edwall, H. Arnold, A. Chen, et J. Auyeung, « Substrate-Removed HgCdTe-Based Focal-Plane Arrays for Short-Wavelength Infrared Astronomy », *J. Electron. Mater.*, vol. 37, n° 9, p. 1396-1400, sept. 2008, doi: 10.1007/s11664-008-0421-8.
- [66] S. D. Johnson *et al.*, « Radiation effects in WFC3 IR detectors », in *Focal Plane Arrays for Space Telescopes*, janv. 2004, vol. 5167, p. 243-257, doi: 10.1117/12.508443.
- [67] A. Waczynski *et al.*, « Radiation induced luminescence of the CdZnTe substrate in HgCdTe detectors for WFC3 », in *Focal Plane Arrays for Space Telescopes II*, San Diego, California, USA, août 2005, p. 59020P, doi: 10.1117/12.617716.
- [68] R. Smith *et al.*, « Noise and zero point drift in 1.7µm cutoff detectors for SNAP », in *High Energy, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy II*, juin 2006, vol. 6276, p. 62760R, doi: 10.1117/12.672616.
- [69] M. L. Dorn *et al.*, « Proton irradiation results for long-wave HgCdTe infrared detector arrays for Near-Earth Object Camera », *J. Astron. Telesc. Instrum. Syst.*, vol. 2, n° 3, p. 036002, août 2016, doi: 10.1117/1.JATIS.2.3.036002.
- [70] S. Kirkpatrick, « Modeling diffusion and collection of charge from ionizing radiation in silicon devices », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 26, n° 11, p. 1742-1753, nov. 1979, doi: 10.1109/T-ED.1979.19680.
- [71] J. C. Pickel *et al.*, « Radiation-induced charge collection in infrared detector arrays », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 49, n° 6, p. 2822-2829, déc. 2002, doi: 10.1109/TNS.2002.805382.

Chapitre 2

Modélisation de la réponse des détecteurs IR non amincis sous irradiation de protons

Table des matières

1	DESCRIPTION GENERALE DE L'APPROCHE DE MODELISATION.....	75
1.1	STRUCTURES DES DETECTEURS IR SIMULES	75
1.1.1	<i>Description de la géométrie des détecteurs</i>	<i>75</i>
1.1.2	<i>Diagramme de bande des détecteurs.....</i>	<i>76</i>
1.2	DESCRIPTION GENERALE DU MODELE	77
2	MODELISATION DE LA TRACE DES PROTONS DANS LE CDZnTE ET LE HgCdTe	80
2.1	MODELISATION DE LA TRACE DES PROTONS ET DETERMINATION DU PROFIL D'ENERGIE DEPOSEE.....	80
2.1.1	<i>Modèles analytiques de dépôt d'énergie.....</i>	<i>80</i>
2.1.2	<i>Présentation des logiciels de calcul Monte Carlo.....</i>	<i>81</i>
2.1.3	<i>Présentation de la structure utilisée dans GEANT4</i>	<i>85</i>
2.1.4	<i>Exemple et validation des traces d'ions.....</i>	<i>87</i>
2.2	DETERMINATION DE LA DENSITE DE PAIRES ELECTRON-TROU	91
2.2.1	<i>Énergie de création d'une paire électron-trou.....</i>	<i>91</i>
2.2.2	<i>Détermination de la densité de paires électron-trou générées par le passage d'un proton.....</i>	<i>95</i>
3	MODELISATION ANALYTIQUE DE LA LUMINESCENCE ET DE LA DIFFUSION DES PORTEURS DANS LE CDZnTE	97
3.1	MODELE DE DIFFUSION DES PORTEURS ET HYPOTHESES	97
3.1.1	<i>Équation de diffusion ambipolaire.....</i>	<i>97</i>
3.1.2	<i>Conditions aux limites.....</i>	<i>100</i>
3.2	RESOLUTION ANALYTIQUE DE L'EQUATION DE DIFFUSION DANS LE CdZnTe.....	100
3.3	MODELISATION DU COURANT DE DIFFUSION DES PORTEURS DU CdZnTe VERS LE HgCdTe	102
3.3.1	<i>Description mathématique du modèle de courant de diffusion</i>	<i>102</i>
3.3.2	<i>Exemple d'application</i>	<i>104</i>
3.4	MODELISATION DE LA LUMINESCENCE DANS LE SUBSTRAT DE CdZnTe	105

3.4.1	<i>Description mathématique du modèle analytique de luminescence</i>	105
3.4.2	<i>Exemple d'application</i>	109
3.5	CONCLUSION ET IMPORTANCE DES PROPRIETES MATERIAUX.....	110
4	MODELISATION DE LA COLLECTE DES PORTEURS DANS LE HgCdTe	111
4.1	MODELE DE DIFFUSION DANS LE HgCdTe	111
4.2	EXEMPLE D'APPLICATION POUR UN PROTON DE 63 MeV	112
5	DISCUSSION	113
5.1	RECYCLAGE PHOTONIQUE ET CHAINE DE MARKOV	113
5.1.1	<i>Introduction de la notion de recyclage photonique</i>	114
5.1.2	<i>Résultat et discussion</i>	114
5.2	HYPOTHESES SUR LE DEPOT D'ENERGIE	115
5.3	HYPOTHESES DES MODELES DE TRANSPORT	116
6	CONCLUSIONS DU CHAPITRE	117
	REFERENCES	118

Dans le chapitre précédent, nous avons introduit les différents concepts utilisés dans cette thèse allant des détecteurs IR de technologie HgCdTe à l'interaction de particules ionisantes avec la matière et ses effets sur les imageurs. En conclusion, nous avons alors rappelé la problématique de la thèse, illustrée dans le chapitre 0, qui concerne les effets de l'interaction de particules ionisantes avec le substrat de CdZnTe dans les détecteurs IR HgCdTe.

L'objectif de cette thèse est de modéliser la réponse de ces détecteurs IR non amincis (détecteurs pour lesquels le substrat de CdZnTe n'est pas retiré) sous irradiation de protons. Par conséquent, je me propose dans ce chapitre, de présenter le modèle développé dans cette thèse qui s'attache à décrire l'effet du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe.

Dans la première section, je vais présenter le modèle de détecteur ainsi que l'ensemble de la démarche que j'ai adoptée. La démarche exposée servira ensuite de fil conducteur à ce chapitre. Ainsi, la deuxième section s'attachera à décrire l'approche choisie afin de décrire le profil d'énergie déposée au sein de la structure semi-conductrice. Cette distribution de paires électron-trou est ensuite utilisée comme paramètre d'entrée à la résolution des équations de transport dans les semi-conducteurs. La troisième section, s'appuie sur ces calculs de distribution de paires électron-trou afin de déterminer l'effet du dépôt d'énergie dans le CdZnTe sur la réponse des détecteurs IR de technologie HgCdTe. Puis, dans la quatrième section, je présenterai la démarche adoptée pour simuler le transport et la collection des porteurs au sein de la couche photosensible de HgCdTe à l'aide de méthodes d'éléments finis. Dans la cinquième section, je discute des hypothèses du modèle.

1 Description générale de l'approche de modélisation

1.1 Structures des détecteurs IR simulés

1.1.1 Description de la géométrie des détecteurs

Nous l'avons vu dans le chapitre 1, les détecteurs IR de technologie HgCdTe sont constitués d'une couche détectrice hybridée à un ROIC en silicium. Dans cette thèse, l'effet des radiations sur le circuit de lecture n'est pas pris en compte dans le modèle. Seule l'interaction des radiations avec la couche de détection est modélisée. La structure des détecteurs simulés correspond à celle des détecteurs irradiés par la suite. Elle est identique à celle des détecteurs ALFA. Il s'agit de détecteurs de plus petit format 640×512 pixels, de technologie p-sur-n avec un pas pixel de 15 μm , utilisés à 80 K. Néanmoins, le modèle peut facilement être étendu à des géométries de détecteurs différentes. Par ailleurs, nous verrons que son application à d'autres températures de fonctionnement est uniquement conditionnée par la connaissance des propriétés matériaux du CdZnTe et du HgCdTe.

Rappelons ici que lorsqu'un proton pénètre au sein d'un matériau semi-conducteur, il interagit avec le cortège électronique et génère ainsi des paires électron-trou. Ces porteurs se propagent ensuite dans la structure du détecteur sous l'effet de différents processus (diffusion et dérive). Lorsque ces charges sont collectées, celles-ci contribuent au signal mesuré par le détecteur. Le détail de la structure simulée est présenté sur la Figure 27, accompagné des différents processus de transport.

Dans notre modèle, on considère que le CdZnTe est une région sans champ électrique. Ainsi, les porteurs sont soumis au seul processus de diffusion. Dans le HgCdTe, en revanche, chaque pixel est divisé en deux régions : une 1^{ère} zone, appelée région de déplétion où les porteurs sont soumis à un fort champ électrique, et une 2nd zone, appelée région de diffusion, dans laquelle le champ électrique est faible. Dans la première, les trous générés^a sont immédiatement collectés. Dans la seconde région le champ électrique moins intense sera négligé de sorte que le transport des porteurs sera supposé dominé par la diffusion [1].

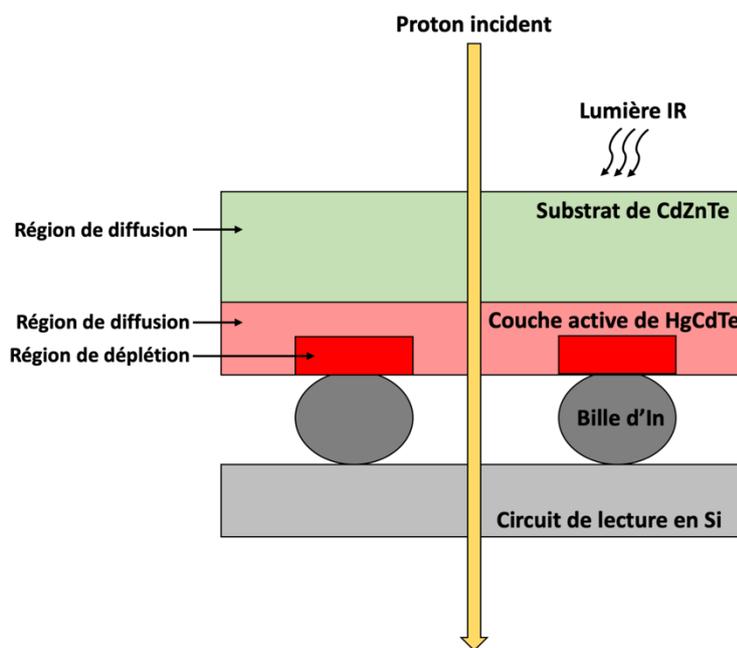


Figure 27 - Schéma de l'architecture des détecteurs considérés dans cette thèse.

1.1.2 Diagramme de bande des détecteurs

Comme on l'a vu précédemment, un semi-conducteur est caractérisé par ses bandes d'énergie qui définissent une énergie de gap, notée E_g . On appelle **diagramme de bande** l'évolution du minimum de la BC et du maximum de la BV en fonction de la position dans une structure semi-conductrice. Il traduit l'évolution de l'énergie potentielle pour les trous et les électrons et permet de décrire le comportement électrique d'un composant semi-conducteur. Dans un diagramme de bande, les électrons de la BC vont rejoindre les zones de minimum d'énergie potentielle. Tandis que dans la BV, les trous rejoignent les régions dans lesquelles l'énergie potentielle est la plus élevée^b. En d'autres termes, les électrons de la BC « descendent » et les trous de la BV « montent »^c.

Le diagramme de bande typique d'une jonction de détecteur IR de technologie HgCdTe est donné sur la Figure 28 dans le cas d'une jonction de type p-sur-n. Cette représentation correspond à une coupe verticale de la couche de détection au niveau d'une jonction. On observe sur cette figure, une variation

^a ALFA est un détecteur de type p/n, dans une telle structure ce sont les trous qui sont collectés.

^b Pour rappel, un trou est marqué par l'absence d'électron : un trou qui rejoint un état de plus haute énergie potentielle dans la BV signifie qu'un électron a rejoint un état de moins grande énergie potentielle.

^c Un peu à la manière de bulles qui cherchent à remonter à la surface.

de l'énergie potentielle au niveau de l'interface entre le substrat de CdZnTe et la couche absorbante de HgCdTe. Cette modification du potentiel électrique crée un champ électrique à cette interface. Celle-ci est le fruit de la différence d'énergie de gap entre les deux matériaux ainsi que de l'interdiffusion des atomes des deux cristaux lors de la fabrication des détecteurs. Par conséquent, si des trous sont générés dans le substrat de CdZnTe, ils peuvent diffuser jusqu'à l'interface avec le HgCdTe, puis être propulsés par le champ électrique dans la couche détectrice de HgCdTe où ils seront collectés. Par conséquent dans la suite nous supposons que la densité de porteurs à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe est nulle.

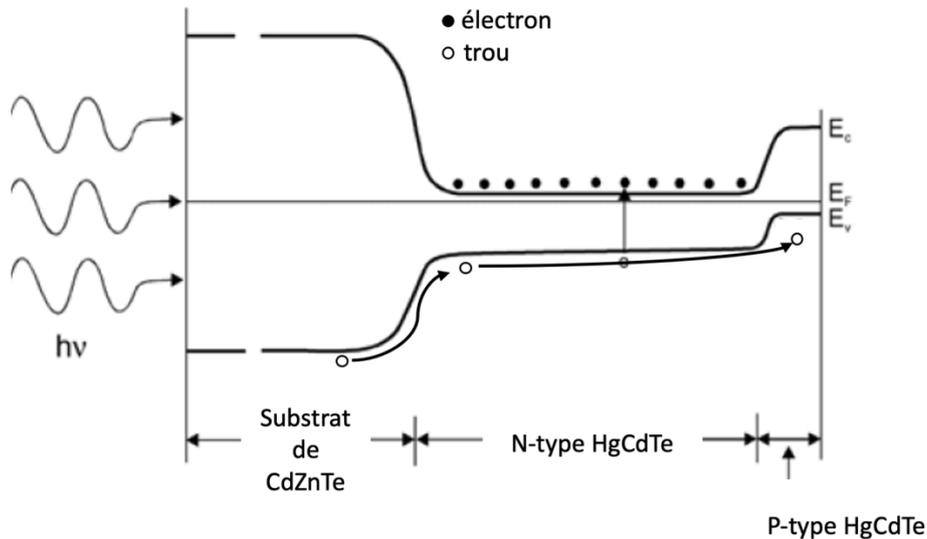


Figure 28 - Diagramme de bande d'un détecteur HgCdTe dans le cas d'une hétérojonction p-sur-n. Adaptée de [2]. Les flèches illustrent le transport des trous générés dans le CdZnTe vers la jonction dans le HgCdTe où ils sont collectés.

Dans le cas d'une structure de type n-sur-p, les propriétés électriques de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe sont similaires : les électrons créés dans le substrat sont envoyés vers la couche absorbante avant d'être collectés.

1.2 Description générale du modèle

Dans le but d'étudier la réponse de détecteurs IR sous irradiation en fonction de l'épaisseur du substrat, j'ai adopté une approche de modélisation dont le schéma général est donné sur la Figure 29. La pénétration du proton dans la structure du détecteur est modélisée avec le code de calcul Monte Carlo GEANT4 (*Geometry and Tracking 4*) [3]. Le résultat de cette simulation est une densité de porteurs dans le substrat de CdZnTe et dans la couche photosensible de HgCdTe. Le détail des simulations GEANT4 est présenté dans la section 2.

Cette densité de porteurs sert ensuite d'entrée aux modèles de transport dans la structure semi-conductrice. Dans le CdZnTe, les porteurs générés par le passage du proton diffusent et se recombinent de manière radiative et non-radiative. De sorte qu'à la fois la diffusion et la luminescence, produits de l'interaction du proton avec le substrat, pollueront le signal collecté par le HgCdTe. En effet, les photons émis par transition radiative dans le CdZnTe peuvent se propager jusqu'à la couche

photosensible où ils seront détectés. Afin d'étudier l'influence de l'épaisseur du substrat sur la réponse des détecteurs IR sous irradiation, ces deux contributions sont calculées analytiquement.

Le transport des porteurs dans le HgCdTe est simulé avec l'aide de méthodes d'élément finis. L'équation de diffusion dépendante du temps est résolue en considérant des conditions aux limites mixtes de Dirichlet et Neumann [1].

Ce chapitre suit précisément cette démarche, à partir de la modélisation du dépôt d'énergie dans la structure semi-conductrice, j'ai déterminé la contribution de l'effet de l'interaction du proton avec le substrat ainsi que la contribution du dépôt d'énergie dans le HgCdTe sur la réponse de détecteurs IR sous irradiation de protons. Ainsi, je développe dans un premier temps les différentes étapes de la modélisation (étapes grisées sur la Figure 29). Puis les hypothèses du modèle sont discutées, dans un second temps.

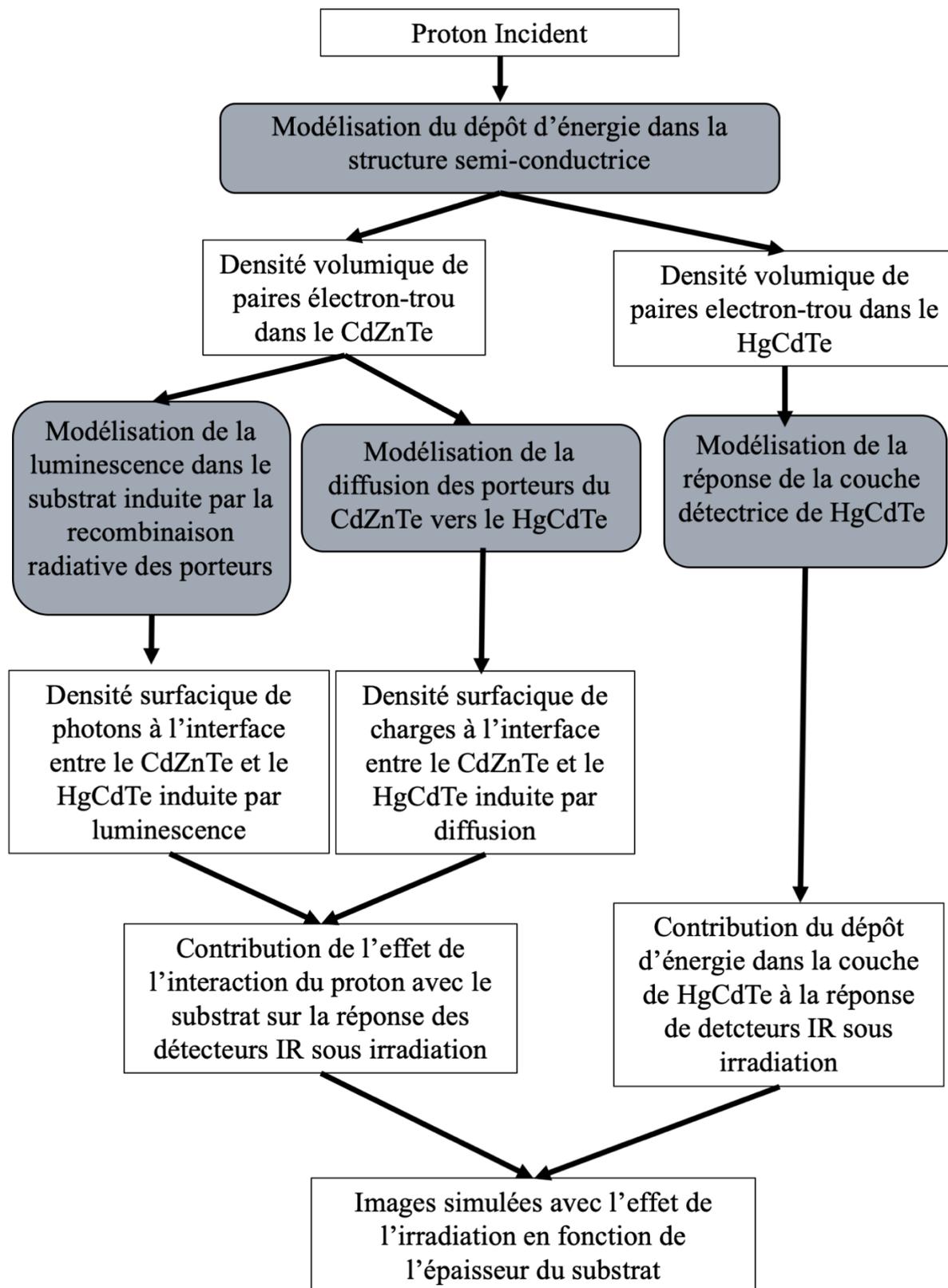


Figure 29 - Schéma de l'approche de modélisation adoptée pour étudier l'effet des radiations sur la réponse des détecteurs IR.

2 Modélisation de la trace des protons dans le CdZnTe et le HgCdTe

Le profil radial d'énergie déposée au sein du matériau semi-conducteur est appelé trace (densité volumique d'énergie déposée) exprimée en eV/cm^3 . Celle-ci peut être calculée selon différentes méthodes. Nous évoquerons d'abord des modèles analytiques de trace avant de décrire l'approche Monte-Carlo utilisée dans cette thèse. Ensuite, nous discuterons de l'utilisation de l'énergie moyenne de création de paires dans la détermination de la densité de porteurs.

2.1 Modélisation de la trace des protons et détermination du profil d'énergie déposée

Différentes stratégies de calcul de trace sont évoquées dans cette section. Nous verrons que les méthodes analytiques ne permettent pas de décrire la trace dans les matériaux qui nous concernent, i.e. le CdZnTe et le HgCdTe. Celles-ci s'appliquent seulement à quelques matériaux particuliers tels que le silicium [4] ou les milieux aqueux [5]. Nous présenterons alors la méthode Monte Carlo de calcul de trace utilisée dans cette thèse. Ces différentes stratégies de détermination du profil radial d'énergie déposée sont discutées ci-dessous.

2.1.1 Modèles analytiques de dépôt d'énergie

Le modèle analytique le plus simple de dépôt d'énergie considère un dépôt linéaire le long de la trajectoire du proton sans extension radiale du profil d'énergie déposée. La quantité d'énergie déposée par unité de longueur est définie par le LET (exprimé en eV/cm). Cette approche est utilisée dans les modèles de Rolland [6] et Kirkpatrick [7]. Néanmoins, cela reste une approche approximative, puisqu'elle suppose que le volume dans lequel l'énergie est déposée est très inférieur aux dimensions caractéristiques de la structure considérée.

Il existe néanmoins des modèles analytiques plus complexes utilisés afin de décrire la répartition spatiale de l'énergie déposée par le passage d'un ion dans la matière. Lorsque la particule incidente est suffisamment énergétique le principal processus physique qui intervient lors de l'interaction avec un matériau est l'interaction coulombienne avec les électrons (excitation ou ionisation). La particule transfère son énergie aux électrons qui à leur tour, dans la mesure où ils sont suffisamment énergétiques, ionisent la matière. Ces électrons sont appelés **électrons deltas** ou *delta-ray* (voir chapitre 1). Le modèle de Kobetich et Katz [8], établi dans les années 60, supposent que ce sont ces électrons qui sont à l'origine de l'extension radiale du profil d'énergie déposée. Cette hypothèse sera reprise par de nombreux auteurs. Leurs travaux serviront notamment de base au modèle semi-empirique de Zhang, Dunn et Katz [9], proposé en 1985. D'autres modèles analytiques ont été développés pour être utilisés dans des milieux aqueux [5] et dans le silicium [4]. En revanche, aucun modèle n'a été développé et publié pour décrire analytiquement la distribution d'énergie déposée dans les deux matériaux qui nous concernent le HgCdTe et le CdZnTe^a. Ainsi, afin de déterminer le profil d'énergie déposée, j'ai utilisé des méthodes de calcul Monte Carlo.

^a Le modèle de Zhang Dunn et Katz pourrait être utilisé au premier ordre afin de déterminer les profils radiaux en tenant compte de la contribution stœchiométrique des différents éléments constituant les alliages de CdZnTe

2.1.2 Présentation des logiciels de calcul Monte Carlo

Le principe des simulations Monte Carlo est de suivre toutes les particules (primaires et secondaires) successivement. Les interactions des particules sont tirées au sort, pondérées par leur probabilité d'occurrence. Sur la Figure 30, est présenté un schéma général illustrant le processus de génération et de relaxation des électrons excités suite au passage d'une particule ionisante dans la matière. L'objectif de cette figure est d'illustrer de manière qualitative les différents processus mis en jeu.

Les électrons sont envoyés de la bande de valence à la bande de conduction. Lorsqu'ils sont suffisamment énergétiques, ces électrons génèrent d'autres paires électron-trou en interagissant avec le cortège électronique : c'est le phénomène appelé « cascade » sur la Figure 30. Lorsque leur énergie n'est plus assez élevée, ces électrons perdent leur énergie par thermalisation en émettant des phonons. On obtient au bout d'un certain temps, typiquement supérieur à quelques picosecondes [10] des électrons et des trous thermalisés dans la bande de conduction et dans la bande de valence respectivement.

Idéalement, dans une simulation Monte Carlo il faudrait suivre l'ensemble des particules de leur génération jusqu'à la perte complète de leur énergie cinétique. Néanmoins, ceci suppose une connaissance fine de l'ensemble des propriétés matériaux. Un code de calcul Monte Carlo a été développé pour simuler la trace de particules chargées dans le silicium et l'oxyde de silicium par Akkerman et al. [11], [12]. Il permet de suivre les électrons jusqu'à une énergie de 1.5 eV. Il n'existe pas de code équivalent pour simuler la trace de particules ionisantes dans le CdZnTe ni le HgCdTe. Ces modèles très détaillés trouvent leur application en micro-électronique dans l'étude de l'effet des radiations sur des technologies fortement intégrées.

et HgCdTe. Néanmoins ce modèle a été développé initialement pour les milieux aqueux. Par conséquent j'ai fait le choix de ne pas utiliser ce modèle.

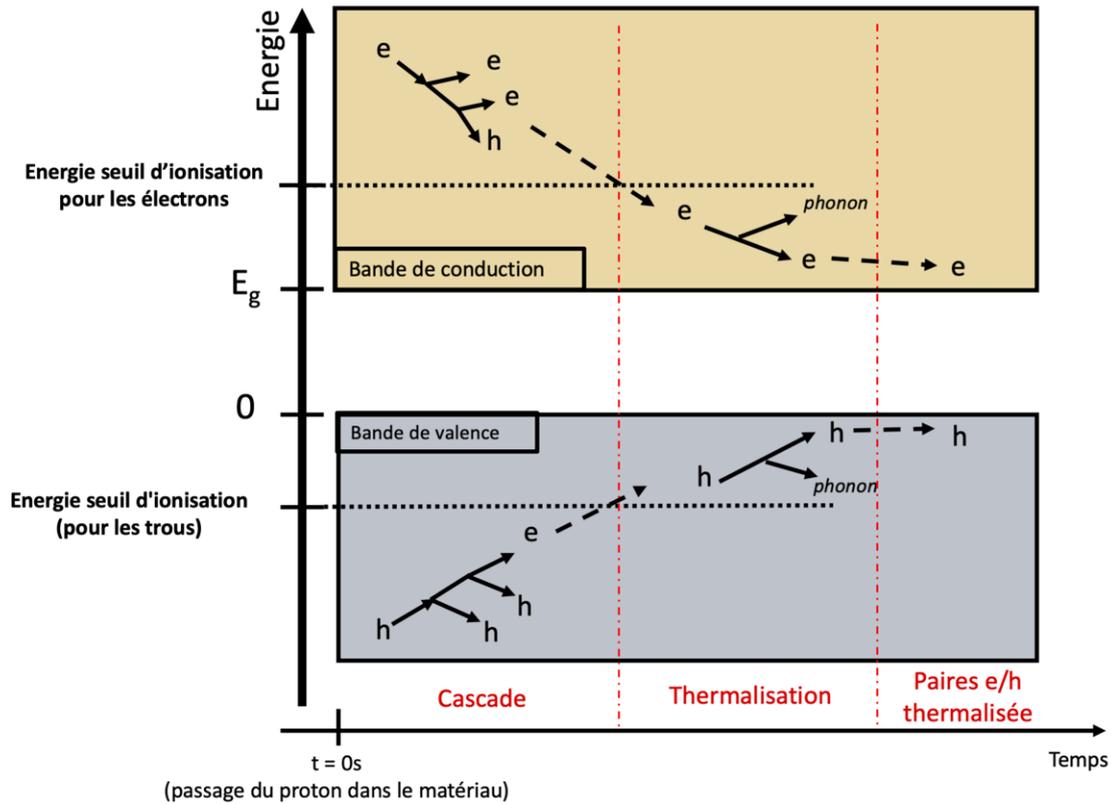


Figure 30 - Schéma illustrant la génération, le processus de cascade et la thermalisation des électrons dans un semi-conducteur suite au passage d'une particule ionisante

Dans les sections suivantes, je présente deux logiciels de simulation Monte Carlo utilisés dans cette thèse : SRIM (*Stopping and Range of Ion in Matter*) et GEANT4. En pratique, ces logiciels de calcul Monte Carlo ne permettent pas d'obtenir directement une concentration de paires électron-trou thermalisées. Ces codes Monte Carlo permettent seulement d'obtenir un profil de répartition de l'énergie déposée par la particule incidente dans un matériau, à partir duquel on obtient la densité de paires électron-trou en s'appuyant sur l'énergie moyenne de création de paires introduite dans le chapitre 1. En adoptant cette démarche, je fais l'hypothèse que la vitesse de thermalisation des porteurs est très rapide en regard de la vitesse des autres phénomènes étudiés, à savoir la diffusion, luminescence et la collection des porteurs dont les temps caractéristiques correspondent au temps de vie des porteurs soient quelques dizaines voire centaines nanosecondes

2.1.2.1 *Stopping and Range of Ion in Matter (SRIM)*

Le programme SRIM (*Stopping and Range of Ion in Matter*) a été développé en 1985 et est continuellement amélioré depuis. C'est un code qui repose sur des méthodes Monte Carlo et qui calcule différentes caractéristiques du transport d'ions dans la matière [13]. Il est, par exemple, possible d'obtenir la distance de pénétration d'un ion dans la matière ainsi que la dispersion (ou *straggling*) associée à cette implantation. Par ailleurs, SRIM permet de déterminer le nombre d'atomes pulvérisés ainsi que le nombre de lacunes créées suite au bombardement d'ions. Enfin, ce code de calcul permet d'accéder au pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire d'un ion dans un matériau cible donné.

La physique est décrite par la théorie de Bethe-Bloch^a (habillée de termes correctifs) à laquelle s'ajoutent des corrections issues des données expérimentales. L'utilisateur peut définir la nature ainsi que l'énergie de la particule incidente. Quant au matériau cible, il est réduit à un empilement de couches en 2 dimensions. A chacune de ces couches, l'utilisateur attribue un matériau, supposé amorphe, défini par sa stœchiométrie et sa densité.

Ce code de calcul présente quelques limitations : par exemple, la structure particulière des matériaux cristallin n'est pas prise en considération. La définition de la géométrie est limitée à un assemblage de couches homogènes, si bien que la construction de structures complexes est rapidement inenvisageable. Enfin, dans SRIM les électrons secondaires ne sont pas explicitement simulés lors d'une simulation Monte Carlo. Par conséquent, il n'est pas possible de déterminer le profil radial d'énergie déposé à partir du logiciel SRIM. Cette donnée est pourtant essentielle afin de déterminer la distribution des paires électron-trou générées dans le matériau semi-conducteur sous irradiation. Par conséquent, afin de répondre à ce besoin, nous avons utilisé le code de calcul GEANT4.

2.1.2.2 GEometry And Tracking 4

GEANT4 (pour *GEometry And Tracking 4*) [14] est un logiciel de calcul Monte Carlo, codé en C++, qui permet de simuler le passage et l'interaction de particules élémentaires (protons, neutrons, électrons, positrons, pions, muons, etc...) à travers la matière. Le code GEANT4 résulte de la collaboration de nombreux chercheurs à travers le monde. Destiné au départ au domaine de la physique des hautes énergies, GEANT4 est aujourd'hui utilisé dans différents domaines tels que la médecine ou le spatial, où il est utilisé pour effectuer des simulations de dosimétrie (quantité d'énergie reçu par unité de volume). GEANT4 s'utilise comme une boîte à outils avec laquelle l'utilisateur construit sa simulation.

Afin de réaliser une simulation GEANT4, l'utilisateur doit définir 3 éléments indispensables :

- La géométrie et les matériaux utilisés
- Le type de particules incidentes (nature, direction, énergie, ...)
- La nature des interactions physiques mises en jeu.

L'utilisateur spécifie ensuite quelles grandeurs il souhaite enregistrer lors de la simulation. Dans cette thèse c'est la version de GEANT4 10.04 qui a été utilisée.

Dans GEANT4, les matériaux sont supposés homogènes et uniformes, ils sont définis par la fraction massique de chacun de leurs constituants et par leur densité. Les propriétés matériaux sont issues de la base de données NIST (*National Insitute of Standards and Technology*) [15]. Dans ces simulations, la définition des matériaux ne tient pas compte de la structure cristalline des semi-conducteurs. Par ailleurs, l'effet de la température est seulement pris en considération à travers la modification des propriétés matériaux.

Les processus de perte d'énergie dans la matière comprennent deux composantes : l'une continue et l'autre discrète. Lorsqu'une particule primaire d'énergie E interagit avec un atome, elle peut conduire à l'éjection d'une particule secondaire d'énergie cinétique T . Si cette énergie est supérieure à une énergie seuil T_{cut} , les particules sont effectivement produites dans la simulation GEANT4 et seront

^a Voir chapitre 1

alors suivies jusqu'à la perte totale de leur énergie cinétique. Il s'agit du processus de perte d'énergie discret. En revanche, si l'énergie de la particule secondaire est inférieure à T_{cut} , la particule n'est pas produite et l'énergie est supposée déposée localement, c'est la composante continue.

Nous l'avons vu dans le chapitre 1, lorsque l'énergie de la particule est suffisante, le principal processus physique auquel celle-ci est soumise est le processus d'ionisation. Dans GEANT4, il existe plusieurs modèles permettant de modéliser ces processus, lesquels s'appuient sur différentes valeurs de seuil de production T_{cut} . Ainsi, le modèle électromagnétique standard, utilise une énergie seuil de 1 keV alors que le modèle électromagnétique de basse énergie de Livermore utilise une énergie seuil de 250 eV pour les électrons, les gammas et les positrons. Dans les deux cas, au-dessus de l'énergie seuil, l'énergie perdue par la particule primaire conduit à la génération explicite de particules secondaires. Des modèles théoriques, complétés par des résultats de mesures expérimentales, sont utilisés pour déterminer la section efficace d'éjections des électrons secondaires.

Dans le cas du modèle électromagnétique standard, cette section efficace est exprimée théoriquement à partir de la formule de Bethe-Bloch complétée par des termes correctifs (évoqués dans le chapitre 1) paramétrée à des mesures expérimentales [16]. A basse énergie en revanche, les couches atomiques jouent un rôle plus important dans les processus d'interactions. C'est pourquoi le modèle de Livermore s'appuie à la fois sur des modèles théoriques et sur l'utilisation de données expérimentales pour calculer les sections efficaces d'interactions des électrons et des gammas avec la matière. Celles-ci sont issues de bibliothèques telles que EEDL (*Evaluated Electron Data Library*) pour les données de processus d'ionisation. Afin de produire des traces d'ions les plus détaillées possibles, nous utiliserons alors le modèle de basse énergie de Livermore. Le détail des modèles physiques utilisés est explicité dans le manuel de référence de physique de GEANT4 [16].

Durant la phase d'initialisation d'une simulation GEANT4, les sections efficaces d'interactions et la variation moyenne d'énergie perdue par unité de distance sont calculées puis tabulées. Par défaut, ces calculs sont effectués pour des énergies cinétiques allant de 100 eV à 10 TeV.

Le pouvoir d'arrêt, S , est égal au produit de la section efficace d'interaction avec la densité électronique du matériau [17]. Dans GEANT4, le pouvoir d'arrêt d'un alliage est calculé à partir de la règle d'additivité de Bragg, qui suppose que le pouvoir d'arrêt d'un matériau composé de plusieurs éléments s'exprime selon une combinaison linéaire du pouvoir d'arrêt de chacun de ses constituants (voir équation (2-1)).

$$\frac{S_{alliage}}{\rho_{alliage}} = \sum_i w_i \left(\frac{S_i}{\rho_i} \right) \text{ avec } S_i = \left(\frac{dE}{dx} \right)_i \quad (2-1)$$

Dans cette équation, w_i est la fraction massique du composant i dans le matériau, ρ_i est la densité du matériau i , $\rho_{alliage}$ est la densité du matériau final, S_i correspond au pouvoir d'arrêt du matériau i et $S_{alliage}$ est défini par l'équation (2-2).

$$S_{alliage} = \frac{dE}{dx} \quad (2-2)$$

Cette loi est valable pour les matériaux lourds pour lesquels $Z > 12$. Lorsque l'on considère des matériaux composés d'éléments légers, il faut corriger cette loi de Bragg, en ajoutant des termes correctifs liés aux effets de liaisons [18]. Dans ces matériaux aux éléments légers, la part d'électrons contribuant aux liaisons chimiques avec les atomes voisins est importante, résultant en une modification plus grande de la loi de Bragg. En revanche pour les atomes lourds, la part d'électrons impliqués dans les liaisons est plus faible. La déviation par rapport à la loi de Bragg est donc moins importante [19]. Cette loi reste approximative puisqu'elle suppose que les propriétés d'excitations des éléments au sein d'un alliage sont identiques à celle de l'élément isolé.

En résumé, GEANT4 est un code de calcul Monte Carlo, qui permet de simuler l'interaction de particules avec la matière. Les matériaux sont définis par leur stœchiométrie et leur densité. En outre, le modèle d'ionisation de Livermore permet de produire explicitement les électrons ayant une énergie supérieure à 250 eV. Cette énergie seuil n'est pas problématique dans notre étude. En effet, la distance maximale de pénétration d'un électron à cette énergie est seulement de quelques nanomètres dans le silicium [11]. Or le CdZnTe et le HgCdTe étant plus dense que le silicium, on peut s'attendre à ce que la distance maximale de pénétration d'un électron de 250 eV soit inférieure au nanomètre, ce qui est bien inférieure à la taille caractéristique des pixels (15 μm). Par conséquent, considérer que le dépôt d'énergie est continu (lorsque l'énergie des électrons est inférieure à 250 eV) est une approximation acceptable dans notre cas.

Dans la suite, nous allons voir comment obtenir le profil d'énergie déposée à partir d'une simulation Monte Carlo réalisée avec GEANT4.

2.1.3 Présentation de la structure utilisée dans GEANT4

Lorsqu'un proton pénètre au sein d'un matériau, il perd une partie de son énergie en éjectant des électrons de leur atome le long de sa trajectoire. Ces porteurs peuvent à leur tour ioniser la matière produisant d'autres électrons plus éloignés du point d'impact du proton. L'objectif de la simulation GEANT4 est de déterminer le profil d'énergie déposée au sein du substrat et de la couche absorbante. Pour ce faire, une géométrie particulière a été construite dans la simulation Monte Carlo, la structure est présentée sur la Figure 31.

Ici, j'ai simulé l'impact de protons mono-énergétiques normalement incidents sur une structure simplifiée de détecteurs IR. Le CdZnTe et le HgCdTe sont définis par leur stœchiométrie et leur densité. La quantité de zinc dans le substrat étant faible (quelques %), la densité du CdZnTe est approximée par celle de l'alliage binaire du CdTe, soit $\rho^{CdZnTe} = 5.85 \text{ g/cm}^3$ [20], [21]^a. Par ailleurs, la densité du $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, exprimée en g/cm^3 , est donnée par l'expression de Higgins [22] (voir l'équation (2-3)), où x représente le taux de Cd dans l'alliage.

^a Un calcul effectué à partir de la structure cristallographique et de la masse des différents éléments constituant le matériau donne une densité similaire.

$$\rho = 8.076 - 2.23 x$$

(2-3)

Bien que cette expression soit valide à 300 K et pour une fraction en cadmium comprise entre 0.18 et 0.25, nous utiliserons cette formule pour estimer la valeur de la densité du HgCdTe. Dans les détecteurs ALFA, la quantité de cadmium dans l'alliage est d'environ 0.515 (calculée à partir de la formule d'Hansen [23], voir chapitre 1), ainsi $\rho_{ALFA}^{HgCdTe} = 6.93 \text{ g/cm}^3$.

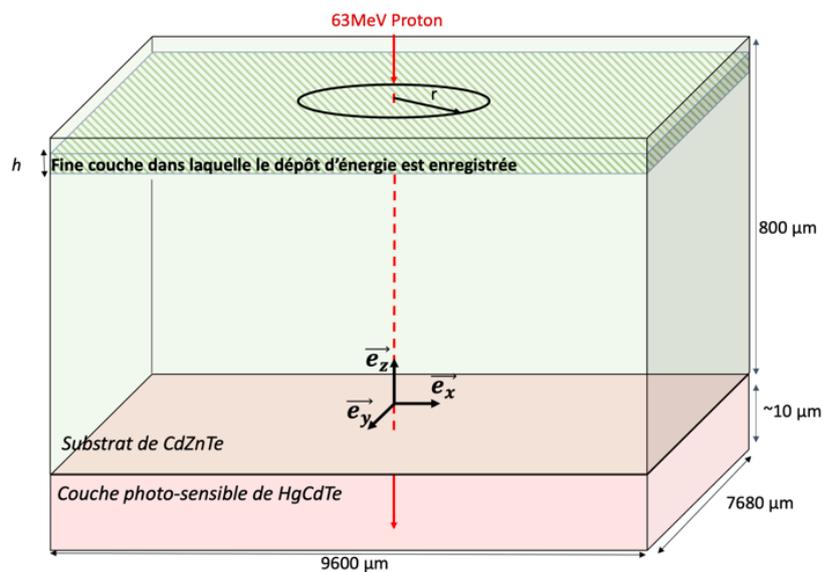


Figure 31 - Schéma de la structure utilisée dans GEANT4 (pas à l'échelle). Une couche fine d'épaisseur h est construite dans laquelle la distribution d'énergie déposée est enregistrée. Les dimensions sont représentatives des dimensions d'un détecteur de format 640x512 avec un pas pixel de 15 μm .

Comme nous l'avons vu, les simulations GEANT4, ne permettent pas de suivre les particules depuis leur génération jusqu'à leur thermalisation. Dans cette simulation, le modèle de Livermore est utilisé. Lorsque l'énergie des particules secondaires est inférieure à 250 eV, l'énergie est supposée déposée localement.

Cette énergie déposée par la particule incidente et par les particules secondaires est enregistrée dans deux histogrammes : l'un pour le CdZnTe et le second pour le HgCdTe. La quantité d'énergie déposée et sa position par rapport au point d'impact du proton sont enregistrées dans un film d'épaisseur h construit dans GEANT4 (voir Figure 31). L'épaisseur du film doit être suffisamment petite pour considérer que le pouvoir d'arrêt est constant le long de la trajectoire. Typiquement, le film fait 5 μm d'épaisseur. Cette géométrie a été précédemment utilisée par Raine et al. [24] pour simuler la réponse de transistors silicium sur isolant sous irradiation d'ions lourds. Une étude de la position du film est présentée en annexe A.

Dans la simulation Monte Carlo, la trajectoire de chaque particule est découpée. La taille de ces subdivisions varie. Elle est déterminée de manière aléatoire à partir des longueurs caractéristiques d'interaction des différents processus physiques mis en jeu. L'énergie déposée est repérée par ces coordonnées cartésiennes (x, y) . Ces points sont choisis de manière aléatoire entre les deux points extrêmes délimitant un segment de la trajectoire du proton. La distance radiale, r , est ensuite calculée en prenant la norme du vecteur défini par les coordonnées (x, y) , soit $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Ici on suppose que le proton pénètre dans le détecteur au point $x = 0, y = 0$ et se propage dans le sens opposé au

vecteur \vec{e}_z (voir Figure 31). De plus, avec cette description on fait l'hypothèse que le dépôt d'énergie est isotrope. Cette hypothèse sera vérifiée dans la section suivante. Cette géométrie nous permet de définir un volume V_r , décrit par l'équation (2-4).

$$V_r = \pi ((r + dr)^2 - r^2)h \quad (2-4)$$

Dans cette équation, V_r est le volume défini pour un point de l'histogramme, dr représente un bin de l'histogramme et r représente la distance radiale à la trajectoire du proton. Les densités d'énergie déposée (exprimées en eV/cm³) dans les couches de HgCdTe et de CdZnTe, $F(r)$, sont ensuite exprimées par l'équation (2-5),

$$F(r) = E_r \frac{1}{N_{proton}} \frac{1}{V_r} \quad (2-5)$$

Dans cette expression, E_r est la quantité totale d'énergie déposée et N_{proton} est le nombre de protons envoyés dans une simulation GEANT4. Ce nombre doit être suffisamment élevé pour avoir une bonne statistique. Il vaut typiquement 10⁵. Cette distribution d'énergie est ensuite ajustée avec une somme de fonctions Gaussiennes. On obtient alors l'expression de la densité d'énergie déposée exprimée par l'équation (2-6).

$$F(r) = \sum_j^M F_j \exp\left(-\frac{r^2}{b_j^2}\right) \quad (2-6)$$

où M est le nombre de fonctions Gaussiennes utilisées dans l'ajustement, F_j et b_j sont la densité volumique d'énergie déposée et la largeur de la j -ème fonction Gaussienne, respectivement. Les paramètres F_j et b_j sont extraits de l'ajustement de la distribution d'énergie déposée. Dans ce modèle nous considérons uniquement les protons ayant un pouvoir d'arrêt constant le long de la trajectoire. Ainsi, $F(r)$ est indépendant de la direction de propagation z . L'équation (2-6) sera ensuite utilisée comme paramètre d'entrée aux modèles analytiques développés pour simuler la diffusion et la recombinaison des porteurs dans le substrat de CdZnTe ainsi qu'aux modèles de transport utilisés dans la couche photosensible de HgCdTe.

Dans cette sous-section, nous avons présenté la démarche adoptée dans GEANT4 afin de déterminer la distribution d'énergie déposée dans le substrat de CdZnTe et dans la couche détectrice de HgCdTe. Les résultats de cette démarche sont présentés dans la section suivante.

2.1.4 Exemple et validation des traces d'ions

Les simulations GEANT4 ont été réalisées pour trois énergies de protons différentes :

- 1 GeV dont le LET dans le CdZnTe est de 0.76 MeV/mm
- 63 MeV dont le LET dans le CdZnTe est de 3.3 MeV/mm
- 30 MeV dont le LET dans le CdZnTe est de 5.70 MeV/mm

La valeur du pouvoir d'arrêt a été calculée avec le logiciel SRIM. La première énergie a été introduite dans le chapitre 0 de ce manuscrit, elle correspond à l'énergie des protons les plus abondants reçus par le satellite Euclid au point de Lagrange L2. La seconde énergie correspond à l'énergie couramment utilisée lors des campagnes d'irradiations effectuées sur les détecteurs Hawaï de Teledyne [25]–[28]. Cette énergie correspond aussi à l'énergie utilisée dans la qualification des composants pour le spatial. Enfin la troisième énergie correspond à l'énergie des protons reçus par le détecteur H1RG d'ARIEL lors de la campagne d'irradiation effectuée en février 2020. Les résultats de cette campagne expérimentale seront présentés et analysés en détail dans le chapitre 4 de ce manuscrit.

Un exemple de localisation de l'énergie déposée dans le plan orthogonal à la direction de propagation d'un proton d'énergie 63 MeV normalement incident sur un substrat de CdZnTe est présenté sur la Figure 32. On observe que la majorité de l'énergie est déposée proche de la trajectoire du proton, et s'étend au maximum dans un rayon d'une vingtaine de nanomètres. Par ailleurs, on vérifie que ce dépôt d'énergie est isotrope, aucune direction n'est privilégiée.

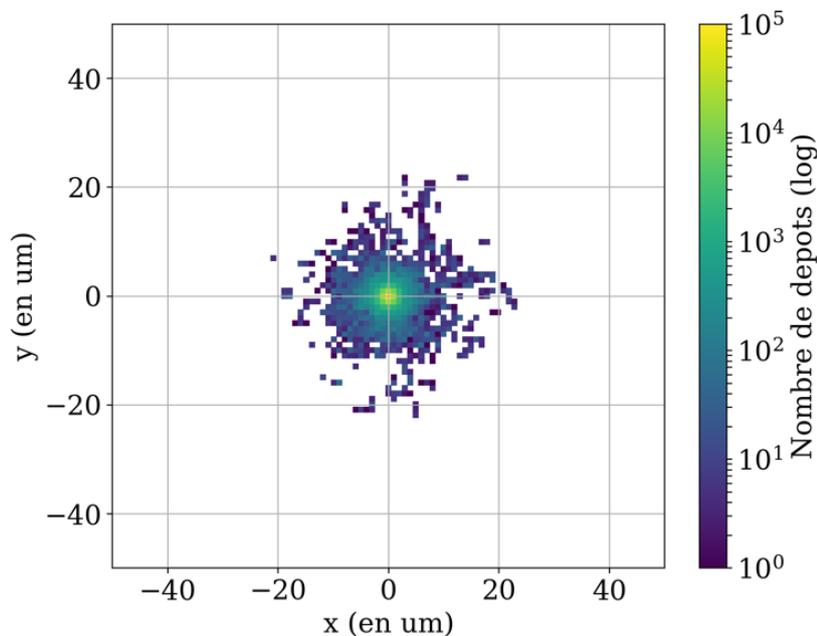


Figure 32 - Localisation de l'énergie déposée dans le plan (x,y) pour un proton de 63 MeV normalement incident à la surface d'un substrat de CdZnTe en $(0,0)$. L'échelle de couleur est en échelle log.

Je vais maintenant appliquer la démarche introduite dans la section précédente pour les trois énergies de protons susmentionnées. Les résultats de profil d'énergie déposée sont exposés sur la Figure 33. On observe que les profils varient en fonction de l'énergie (et donc du LET) de l'ion incident. En cœur de trace ($r < 10 \text{ nm}$), la densité volumique d'énergie est plus élevée dans le cas d'un proton de 1 GeV. Cependant, pour des distances radiales comprises entre 10 nm et 10 μm , cette concentration d'énergie déposée est plus importante pour les protons de basses énergies (30 MeV et 63 MeV). En revanche, ce profil s'étend d'autant plus loin de l'impact que l'énergie du proton incident est élevée. En effet, l'énergie maximale transmissible à un électron libre est directement proportionnelle à l'énergie de la particule incidente. Ces électrons, plus énergétiques, parcourent alors une plus grande distance dans le matériau.

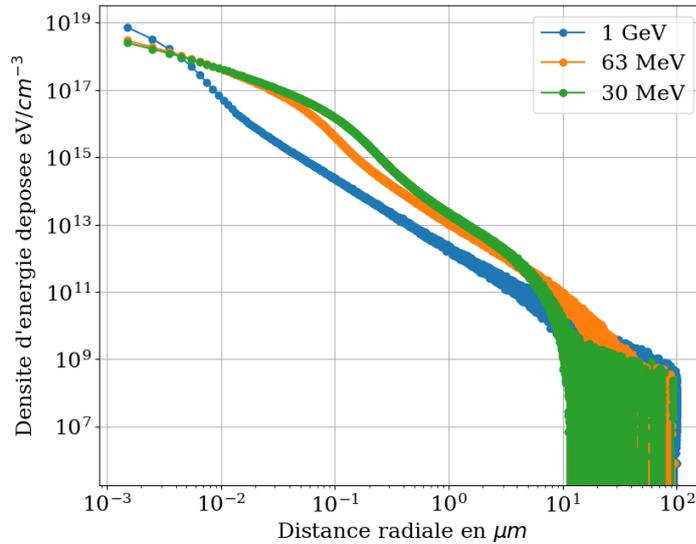


Figure 33 - Évolution de la densité d'énergie déposée dans le CdZnTe en fonction de la distance à la trajectoire du proton, pour les trois énergies considérées, obtenue avec GEANT4.

A partir de ces courbes de densité volumique d'énergie déposée on peut obtenir la densité totale de charge cumulée en fonction de la distance à la trajectoire du proton. Les résultats sont tracés sur la Figure 34. On constate que la majeure partie de l'énergie (environ 90 %) est déposée dans un cercle de rayon inférieur à 1 μm centré sur le point d'impact du proton. Cette distance est à comparer aux dimensions caractéristiques de la structure semi-conductrice simulée. Lorsque les dimensions du dispositif sont très supérieures à ce rayon, l'extension radiale du profil d'énergie déposée peut être négligée.

En revanche, dans la suite, afin d'obtenir une description détaillée de la trace, je vais utiliser l'approche proposée dans la sous-section 2.1.3, comme exprimé par l'équation (2-6). La distribution d'énergie déposée sera ajustée avec une somme de fonctions Gaussiennes. Un exemple de courbe de distribution d'énergie ajustée avec 50 fonctions Gaussiennes est présenté sur la Figure 35. Cet ajustement avec une somme de fonctions Gaussiennes, présente seulement un aspect pratique et ne revêt pas de caractère physique. En effet, j'utilise cette représentation afin de calculer analytiquement la contribution de la diffusion et de la luminescence sur le signal mesuré par le HgCdTe induit par le dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe. Ce calcul est présenté dans la section 3.

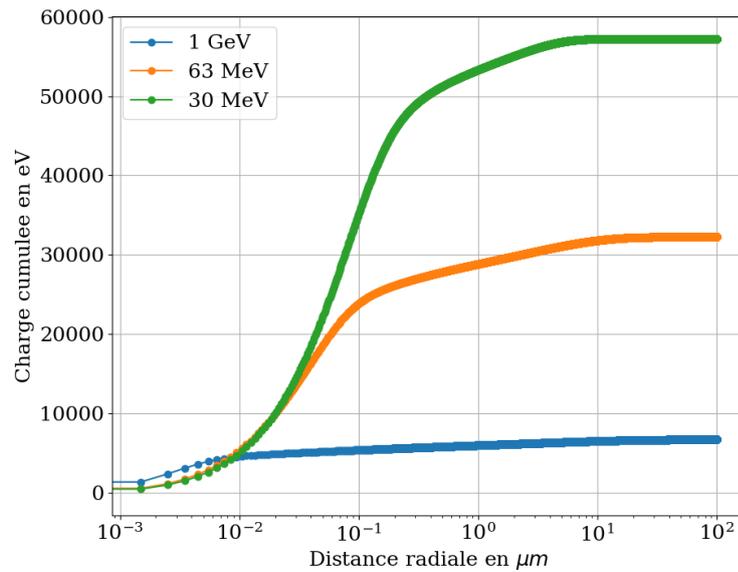


Figure 34 - Évolution de la charge cumulée en fonction de la distance au proton incident dans le substrat de CdZnTe.

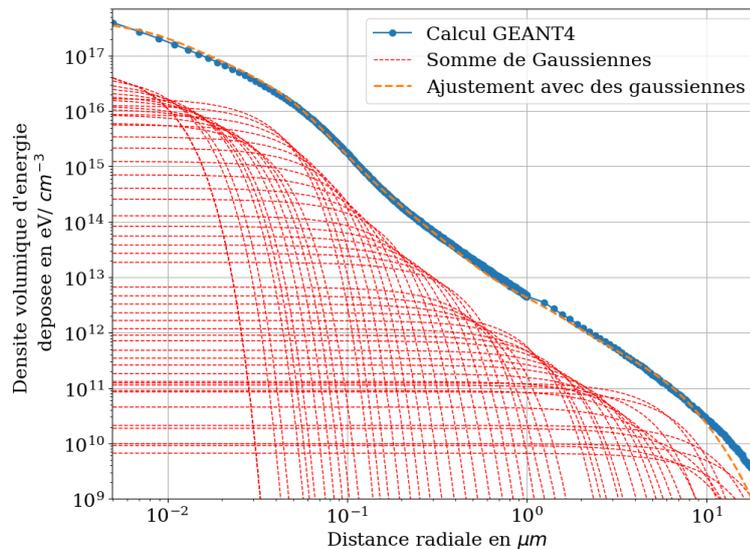


Figure 35 - Simulation de la densité d'énergie déposée dans le CdZnTe, pour un proton incident d'énergie 63 MeV. (•) représente le résultat de simulation GEANT4. (--) représente le résultat de l'ajustement effectué avec 50 gaussiennes.

Afin de valider cette démarche, le pouvoir d'arrêt calculé à partir des simulations GEANT4 est comparé à celui extrait des simulations SRIM. Le résultat de cette comparaison est présenté dans le Tableau 6. Dans les deux simulations Monte Carlo, le pouvoir d'arrêt s'appuie sur la loi d'additivité de Bragg [19]. Le pouvoir d'arrêt est extrait à partir des simulations GEANT4 selon deux méthodes : la première à partir de la courbe de charge cumulée et la seconde avec l'intégration de (2-6) sur la surface (x, y) normale à la direction de propagation comme exprimée par l'équation (2-7).

$$S = \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} rF(r)drd\theta \quad (2-7)$$

Tableau 6 - Comparaison entre le pouvoir d'arrêt calculé avec SRIM et à partir des résultats de simulation GEANT4 dans le cas du CdZnTe.

Energie du proton incident en MeV	SRIM(MeV/mm)	Estimation du LET à partir de la charge cumulée (GEANT4) (MeV/mm)	Erreur relative	Integration des fonctions gaussiennes	Erreur relative
Cas du CdZnTe					
1000	0.76	0.73	3.9 %	0.725 (30 Gaussiennes)	4.6 %
63	3.3	3.23	2.1 %	3.21 (50 Gaussiennes)	2.7 %
30	5.70	5.72	0.3 %	5.63 (100 Gaussiennes)	1.2 %

Comme on le voit dans le Tableau 6, l'estimation du pouvoir d'arrêt réalisée à partir des résultats de simulation GEANT4 est en bon accord avec les données de SRIM (l'erreur relative est de quelques pourcents) ce qui valide l'approche adoptée. Des résultats similaires sont obtenus dans le cas du HgCdTe.

A ce stade du modèle, il est possible de décrire le profil radial d'énergie déposée par un proton normalement incident dans le CdZnTe et dans le HgCdTe. Cependant, l'objectif de cette section est d'obtenir une densité volumique de paires électron-trou, utilisée ensuite comme paramètre d'entrée aux modèles de transport dans les structures semi-conductrices. La conversion énergie déposée – paires électron-trou est discutée dans la section suivante.

2.2 Détermination de la densité de paires électron-trou

Ainsi, la démarche proposée dans cette thèse permet d'obtenir le profil radial d'énergie déposée. Cependant, les modèles de transport dans les semi-conducteurs, requièrent en entrée une densité de paires électron-trou (des porteurs thermalisés). Or nous l'avons vu, le code de simulations Monte Carlo GEANT4 ne permet pas de suivre les électrons de leur génération à la perte totale de leur énergie cinétique. Ils permettent néanmoins de localiser l'énergie déposée par les particules primaires et les particules secondaires. Afin d'obtenir une densité volumique de paires électron-trou utilisée ensuite comme entrée aux modèles de transport dans les semi-conducteurs, nous allons utiliser **l'énergie moyenne de création d'une paire électron trou, notée E_{e-h}** . Celle-ci permet de s'affranchir des difficultés imposées par le suivi complet des électrons secondaires depuis leur génération jusqu'à leur thermalisation, en convertissant directement la quantité d'énergie déposée en densité de porteurs. Cette énergie est présentée dans la section suivante.

2.2.1 Énergie de création d'une paire électron-trou

Plusieurs modèles ont été proposés pour déterminer la valeur de E_{e-h} . Le modèle le plus utilisé est le modèle de Klein, il s'agit d'un des premiers modèles développés, il est présenté dans la section suivante.

2.2.1.1 Description du modèle d'énergie de création de paires électron-trou : modèle de Klein

En 1951, McKay [29] détermine expérimentalement l'énergie moyenne nécessaire à la création d'une paire électron-trou, notée E_{e-h} , dans le germanium en irradiant une jonction PN avec des particules alpha. Dans sa discussion, l'auteur met en lumière l'importance des pertes énergétiques liées aux modes de vibrations du cristal (appelés phonons) lors de la génération de ces paires électron-trou. Dix ans plus tard, en 1961, Shockley propose un modèle phénoménologique pour calculer E_{e-h} en tenant compte explicitement des pertes énergétiques associées à l'émission des phonons [30]. Selon ces travaux, on peut dissocier les pertes énergétiques liées à la création de paires électron-trou en trois catégories :

1. Perte par ionisation par impact
2. Perte par émission de phonons optiques
3. Perte par thermalisation

Ces hypothèses sont reprises en 1968 par Klein [10]. De plus, il suppose que la génération de paires électron-trou s'effectue en deux étapes consécutives :

- (1) D'abord l'énergie cinétique libérée dans le cristal par la particule ionisante incidente crée une distribution de porteurs chauds hors équilibre, en induisant des transitions (supposées instantanées) de la bande de valence à la bande de conduction.
- (2) La seconde phase concerne la thermalisation, qui est beaucoup plus longue (de l'ordre de la picoseconde [10]). Il s'agit du transfert de l'excès d'énergie cinétique des porteurs chauds dans le réseau cristallin.

Klein propose alors l'expression donnée par l'équation (2-8) pour E_{e-h} .

$$E_{e-h} = E_g + \langle W_L \rangle \quad (2-8)$$

Où E_g est l'énergie du gap et $\langle W_L \rangle$ représente l'énergie perdue dans le cristal. Ce terme est composé de deux contributions : l'émission de phonons optiques $\langle E_R \rangle$ et celles des phonons thermiques $\langle E_K \rangle$. De sorte que l'on écrira l'équation (2-9).

$$\langle W_L \rangle = \langle E_R \rangle + \langle E_K \rangle \quad (2-9)$$

L'énergie perdue par émission de phonons optiques est exprimée par l'équation (2-10), où $\hbar\omega_R$ est l'énergie d'un phonon optique et λ_r est le nombre moyen de phonons émis par paire électron-trou générée.

$$\langle E_R \rangle = \lambda_r \hbar\omega_R \quad (2-10)$$

Afin d'évaluer la quantité d'énergie perdue par thermalisation des porteurs, notée $\langle E_K \rangle$, il faut déterminer dans un premier temps l'énergie de seuil E_i . Celle-ci correspond à l'énergie au-dessus de laquelle un porteur peut générer une paire électron-trou par ionisation (voir Figure 30). En dessous de cette énergie, la totalité de l'énergie cinétique des porteurs est perdue par thermalisation. En supposant que les bandes sont paraboliques et que les porteurs générés ont la même vitesse, on peut démontrer à partir des équations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement l'équation (2-11)

$$E_i = \frac{3}{2} E_g \quad (2-11)$$

Ce résultat est démontré dans [31]. Lorsque l'énergie des électrons et des trous est inférieure à E_i , l'énergie moyenne des porteurs est donnée par E_f . Cette énergie est ensuite perdue par thermalisation. En supposant que les bandes sont paraboliques^a (la densité d'état varie proportionnellement à la racine carrée de l'énergie) et que les porteurs générés sont distribués uniformément dans l'espace des phases, jusqu'à l'énergie seuil E_i , on peut montrer que E_f s'exprime selon l'équation (2-12) [32] :

$$E_f = \frac{\int_0^{E_i} E \sqrt{E} dE}{\int_0^{E_i} \sqrt{E} dE} = \frac{3}{5} E_i \quad (2-12)$$

Ainsi, on obtient l'expression de $\langle E_K \rangle$ donnée par l'équation (2-13), en utilisant les expressions de E_f et de E_i données par l'équation (2-12) et l'équation (2-11) respectivement.

$$\langle E_K \rangle = 2E_f = 2 \frac{3}{5} E_i = \frac{9}{5} E_g \quad (2-13)$$

Finalement, en substituant $\langle E_R \rangle$ et $\langle E_K \rangle$ par leurs expressions, respectivement équation (2-10) et équation (2-13), dans l'équation (2-9) on obtient d'après l'équation (2-8), l'expression donnée par l'équation (2-14) pour E_{e-h} . Celle-ci est tracée sur la Figure 36.

$$E_{e-h} = E_g + \frac{9}{5} E_g + \lambda_r \hbar \omega_R = \frac{14}{5} E_g + \lambda_r \hbar \omega_R \quad (2-14)$$

^a C'est vrai dans le cas du CdTe, mais il s'agit d'une approximation dans le cas du HgCdTe

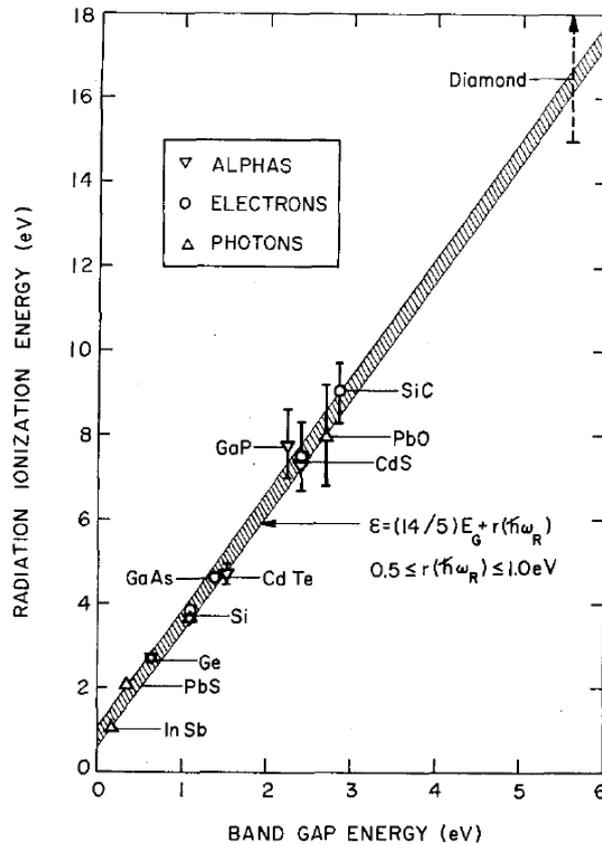


Figure 36 - Évolution de l'énergie moyenne de création de paires (Radiation Ionization Energy) en fonction de l'énergie de gap (Band Gap Energy) des semi-conducteurs. Des mesures expérimentales pour différents semi-conducteur sont représentées. Ce graphique est tiré de [10].

On retiendra comme règle générale que $E_{e-h} \sim 3E_g$. L'énergie E_{e-h} est largement utilisée en physique des radiations, que ce soit pour simuler la réponse d'imageurs sous irradiation (CCD, IR [33], [34]), de composants électroniques (transistor SOI [35]) ou la réponse de détecteurs X et gamma (CdTe caliste [36]). L'expression de Klein pour E_{e-h} est une expression phénoménologique. Elle met néanmoins en lumière, les différents processus de désexcitation mis en jeu. Dans les sections suivantes, la valeur de E_{e-h} dans le cas du CdZnTe et du HgCdTe est présentée puis discutée.

2.2.1.2 Énergie de création de paires dans le CdZnTe

Dans le CdTe, E_{e-h} a été mesurée par Mayer en 1967 et vaut 4.65 eV à 300 K [37]. D'autres mesures donnent une valeur de 4.43 eV et 4.45 eV à température ambiante et 4.75 eV à 77 K [38]. A notre connaissance, il n'existe pas de données dans la littérature, concernant E_{e-h} pour le CdZnTe avec la proportion de zinc correspondant à ALFA à 100 K^a. Toutefois, la faible quantité de zinc dans l'alliage nous permet d'approximer sa valeur à celle du CdTe. Ainsi, dans la suite nous prendrons $E_{e-h}^{CdZnTe} = 4.75 \text{ eV}$.

^a Pour rappel, il s'agit de la température nominale de fonctionnement des détecteurs ALFA.

2.2.1.3 Énergie de création de paires dans le HgCdTe

Dans le HgCdTe, plusieurs formules reliant E_{e-h}^{HgCdTe} à E_g^{HgCdTe} ont été proposées. Ces expressions s'appuient sur des données expérimentales. Par exemple, E_{e-h}^{HgCdTe} a été déterminée expérimentalement par Price [39] en effectuant des mesures d'EBIC (*Electron Beam Induced Current*) sur des hétérojonctions de HgCdTe pour différentes énergies de gap de 0.28 eV à 0.47 eV. Son expression est donnée par l'équation (2-15), où E_g^{HgCdTe} est l'énergie de gap du HgCdTe.

$$E_{e-h}^{HgCdTe} = 3.4 E_g^{HgCdTe} + 0.95 \text{ eV} \quad (2-15)$$

Outre la formule de Price, il existe d'autres formules qui relient l'énergie E_{e-h}^{HgCdTe} à l'énergie de gap E_g^{HgCdTe} . Celles-ci ont été revues par Bruce et al. [40] et sont reportées sur la Figure 37, extraite de [40]. Dans la mesure où la disparité entre les formules est grande, nous utiliserons la formule de Klein pour déterminer la valeur de l'énergie de création de paires dans le HgCdTe, en supposant que le terme $\lambda_r(\hbar\omega_R)$ dans l'équation(2-14) est égal 0.75 eV [40].

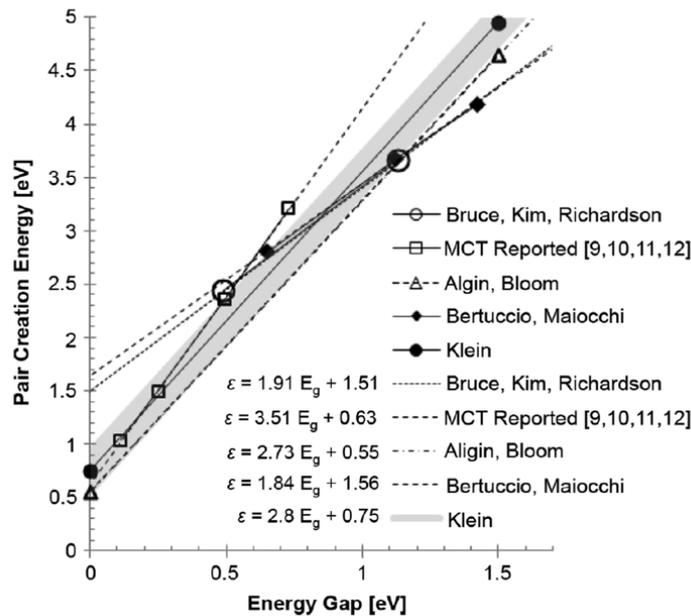


Figure 37 - Évolution de l'énergie moyenne de création de paires (Pair Creation Energy) en fonction de l'énergie de gap (Energy Gap) pour le HgCdTe. Extrait de [40].

2.2.2 Détermination de la densité de paires électron-trou générées par le passage d'un proton

Le but de cette section est de déterminer la densité de paires électron-trou créées suite au passage d'un proton incident dans les détecteurs IR. Ceci s'inscrit dans un cadre de modélisation plus large visant à modéliser la réponse de détecteur IR sous irradiation.

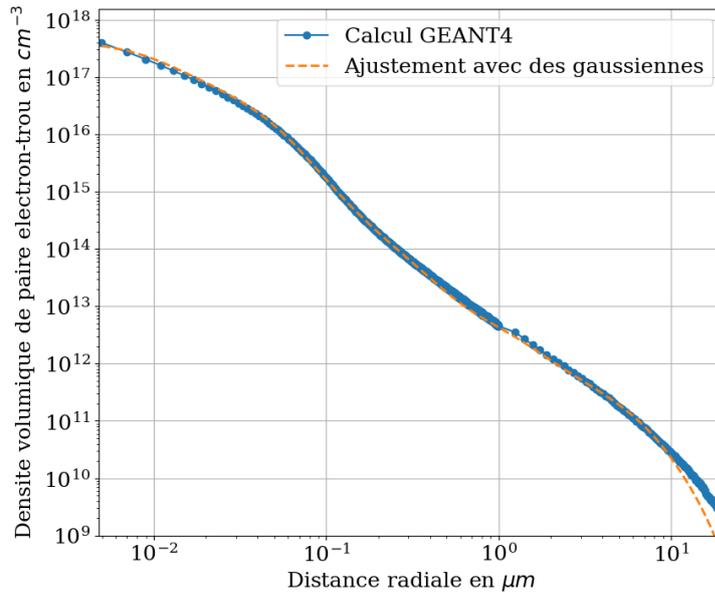


Figure 38 - Densité de paires électron-trou calculée à partir des résultats de simulations de GEANT4 en utilisant l'énergie moyenne de création de paires dans le CdZnTe à 100 K. Il s'agit de la même courbe que celle de la Figure 35, divisée par E_{e-h}^{CdZnTe} .

A partir du profil de densité volumique d'énergie déposée issu des résultats de simulation GEANT4 et avec l'utilisation de l'énergie moyenne de création de paires, nous avons vu qu'il était possible d'obtenir la distribution de paires électron-trou générées dans le substrat de CdZnTe et dans le HgCdTe, suite au passage d'un proton dans un détecteur IR. Celle-ci est exprimée par l'équation (2-16), où $F(r)$ est donné par l'équation (2-6). Un exemple représentatif de la densité de paires électron-trou est donné sur la Figure 38 dans le cas du CdZnTe en considérant un proton incident de 63 MeV. Cette méthode peut néanmoins être adaptée à différents matériaux dans la mesure où leur stœchiométrie ainsi que leur densité sont connues. Par ailleurs, elle peut être étendue à différents type de particules incidentes, comme des alphas ou des ions lourds. Néanmoins, nous rappelons que cette approche est valide pour des particules ionisantes normalement incidentes dont le LET ne varie pas dans la structure considérée.

$$k(r) = \frac{F(r)}{E_{e-h}} \quad (2-16)$$

Un fois que les porteurs sont thermalisés, ils vont diffuser et se recombiner dans les matériaux semi-conducteurs qui constituent le détecteur. Dans la section suivante, les modèles analytiques de diffusion et de luminescence dans le substrat sont présentés. Ces modèles s'appuient directement sur la densité de porteurs calculée dans cette section à partir des simulations Monte Carlo.

3 Modélisation analytique de la luminescence et de la diffusion des porteurs dans le CdZnTe

Dans cette section, je vais présenter l'approche de modélisation analytique que j'ai développée pour décrire l'effet de la génération de porteurs dans le substrat de CdZnTe sur la réponse des détecteurs IR. Deux effets sont pris en compte : **la recombinaison radiative de ces porteurs thermalisés (luminescence)** et **la diffusion des porteurs du CdZnTe vers le HgCdTe** (voir Figure 29). Ce modèle tient compte de la diffusion des porteurs au sein du substrat. En comparaison des méthodes d'éléments finis ou des méthodes Monte Carlo, l'utilisation d'un modèle analytique est moins coûteuse en temps de calcul. En revanche, je vais négliger la contribution des transitions intra-bandes des porteurs chauds [41].

Cette section débute avec la présentation du modèle de diffusion et des hypothèses associées. La résolution de l'équation de diffusion permet d'obtenir la distribution spatiale et temporelle des porteurs au sein du semi-conducteur. Celle-ci est déterminée en résolvant analytiquement l'équation de diffusion. Puis, cette distribution est utilisée pour modéliser la luminescence du CdZnTe et la diffusion des porteurs du substrat vers la couche détectrice de HgCdTe. Enfin, nous verrons au travers de cette étude que les propriétés matériaux du substrat de CdZnTe sont des paramètres clés du modèle.

3.1 Modèle de diffusion des porteurs et hypothèses

3.1.1 Équation de diffusion ambipolaire

La géométrie considérée dans cette section est présentée sur la Figure 39. L'étude est effectuée en coordonnées cartésiennes. L'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe est localisée en $z = 0$. Le transport des porteurs dans le substrat est gouverné par **la diffusion ambipolaire** de manière similaire à ce qui a été réalisé par Rolland [6], qui s'attache à résoudre l'équation de diffusion ambipolaire pour modéliser les courants de diffusion induits par l'irradiation de particules ionisantes dans les détecteurs CCDs [6].

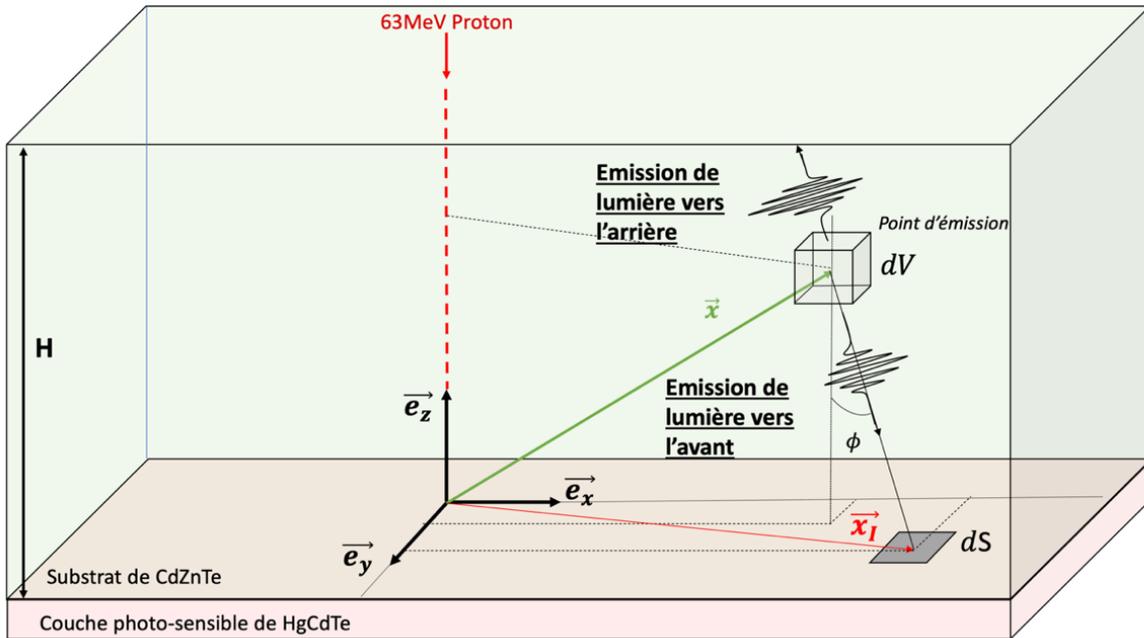


Figure 39 - Schéma de la structure du détecteur utilisé dans le modèle analytique. Le point d'émission est localisé par le vecteur \vec{x} et la fluence (nombre de photons par unité de surface) est estimé au point de la surface repéré par le vecteur \vec{x}_1 .

L'hypothèse de diffusion ambipolaire suppose que le temps de relaxation diélectrique d'un matériau est beaucoup plus court que le temps nécessaire aux porteurs pour se recombiner. Autrement dit la neutralité électrique est établie en un temps plus bref que le retour à l'équilibre du semi-conducteur. Ceci est illustré sur la Figure 40. Sur le schéma de gauche, une distribution initiale (à $t = 0$ s) de paires électron-trou est représentée en 1 dimension. Les trous et les électrons ont été générés dans les mêmes proportions : il n'y pas de champ électrique au sein du matériau semi-conducteur. Cependant, à $t > 0$ s, les porteurs commencent à diffuser avec des vitesses différentes. Ici les électrons diffusent plus rapidement que les trous. Cette différence conduit à l'apparition de régions chargées dans le semi-conducteur, ce qui crée alors un champ électrique dans le matériau. Une force opposée à la direction de diffusion des électrons apparaît : les électrons sont ralentis et les trous sont accélérés. Ce champ électrique favorise le retour à l'équilibre électrique du matériau, si bien que l'on peut supposer que la concentration d'électrons en excès, $dn(\vec{x}, t)$, est égale à la concentration excédentaire de trous, $dp(\vec{x}, t)$, en tout point du matériau et à tout moment, comme exprimé par l'équation (3-1).

$$dn(\vec{x}, t) = dp(\vec{x}, t) = \Pi(\vec{x}, t) \quad (3-1)$$

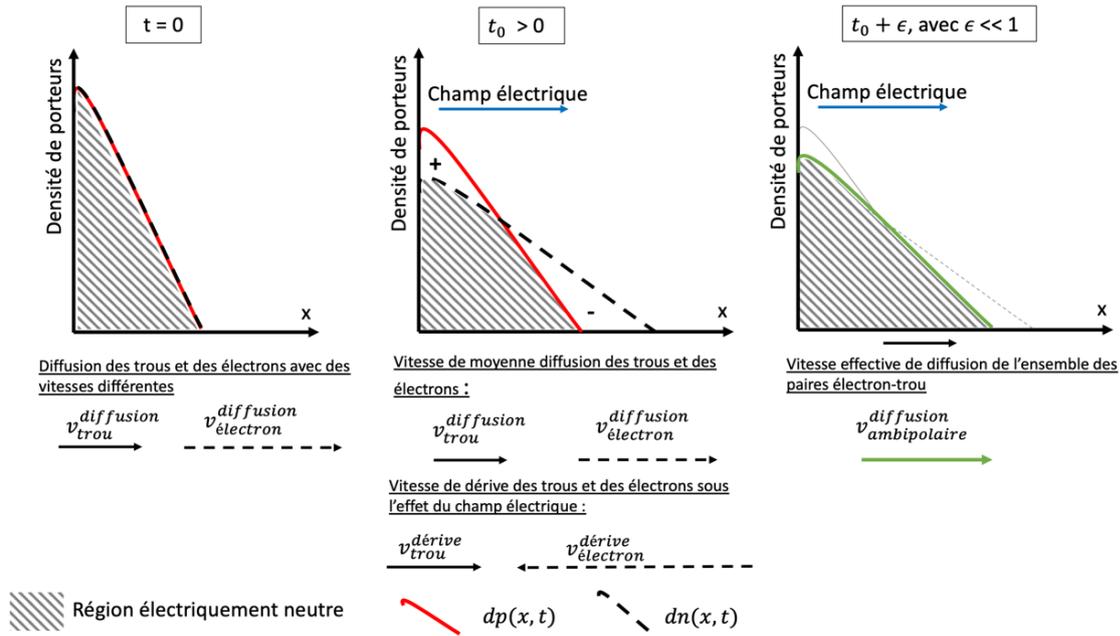


Figure 40 - Schéma illustrant la diffusion ambipolaire.

L'évolution de la concentration de porteurs en excès, notée $\Pi(\vec{x}, t)$, dans l'épaisseur du substrat est décrite par l'équation de diffusion ambipolaire dépendante du temps. Le calcul permettant d'obtenir l'équation de diffusion ambipolaire est donné en annexe B. Celle-ci est donnée en l'absence de champ électrique par l'Eq (3-2) [31].

$$\left[D^* \Delta - \frac{1}{\tau} - \frac{\partial}{\partial t} \right] \Pi(\vec{x}, t) = -\Gamma(\vec{x}, t) \quad (3-2)$$

L'équation (3-2) est définie sur $\mathbb{R}^3 \times [0, +\infty[$ (où $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ et $t \in [0, +\infty[$), et où $\Pi(\vec{x}, t)$ est la concentration de porteurs en excès, $\Gamma(\vec{x}, t)$ est le terme source qui représente la distribution des paires électron-trou générées par le passage du proton dans le détecteur. τ est le temps de vie des porteurs. Dans des conditions de diffusion ambipolaire, on fait l'hypothèse que les trous et les électrons ont le même temps de vie τ . On suppose ainsi qu'il n'y a ni pièges à électrons ni pièges à trous dans le matériau. D^* est le coefficient de diffusion ambipolaire, son expression est donnée par (3-3) [31]. D^* s'obtient à partir des équations de diffusion des trous et des électrons.

$$D^* = \frac{(p + n)D_n D_p}{pD_p + nD_n} \quad (3-3)$$

Dans cette expression, D_n et D_p sont les constantes de diffusion des électrons et des trous respectivement, et p et n représentent la concentration de trous et d'électrons dans le matériau. La concentration des trous et des électrons s'écrit $p = p_0 + dp$ et $n = n_0 + dn$, respectivement. Avec n_0 et p_0 les concentrations de porteurs à l'équilibre, déterminés par le niveau de dopage du semi-conducteur. dp et dn représentent la concentration de porteurs en excès. Lorsque $dp \gg p_0$ et $dn \gg n_0$, on dit que le semi-conducteur est en régime de forte injection. En pratique, le dopage du CdZnTe est de l'ordre de 10^{14} cm^{-3} , ce qui est bien inférieur à la concentration de porteurs en excès générés

par une particule ionisante (Figure 38). Ainsi, quand les conditions de forte injection sont satisfaites, D^* se réduit à l'équation (3-3).

$$D^* = \frac{2D_n D_p}{D_n + D_p} = 2D_{\text{espèce la plus lente}} \quad (3-4)$$

L'objectif de la sous-section suivante est de définir les conditions aux limites nécessaires à la résolution de l'équation de diffusion exprimée par l'équation (3-2).

3.1.2 Conditions aux limites

Au niveau de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe ($z = 0$ sur la Figure 39), les conditions aux limites sont dictées par les propriétés électriques de l'interface. Comme nous l'avons déjà vu (voir Figure 28), il y a un champ électrique au niveau de cette interface qui propulse les électrons et les trous du substrat vers la couche de HgCdTe. Ainsi, pour cette interface, on pourra considérer que la densité de porteurs sera nulle, soit :

$$\Pi(\vec{x}, t)|_{z=0} = 0 \quad (3-5)$$

A l'interface entre le CdZnTe et le vide, la situation est moins explicite. Lorsque les détecteurs sont fabriqués, cette surface est préparée optiquement. Elle ne subit pas de traitement de passivation électrique. Ainsi, l'état de surface électrique est mal connu. La vitesse à laquelle les porteurs se recombinent à une interface est caractérisée par la vitesse de recombinaison de surface, notée S_{recomb} . A ma connaissance, cette valeur n'a pas été reportée dans la littérature pour une concentration en zinc proche 4 % à des températures cryogéniques. Dans le CdTe, cette valeur s'étend sur plusieurs ordres de grandeur, de 200 cm/s à 10^5 cm/s [42]. Une vitesse de recombinaison élevée caractérise une mauvaise qualité d'interface. Dans la mesure où il n'existe pas de données pour S_{recomb} dans le cas du CdZnTe et étant donné que cette surface n'est pas traitée électriquement lors de la fabrication, je supposerai que la vitesse de recombinaison est infinie. Ainsi, on considère que la densité de porteurs au niveau de cette interface est nulle. Cette hypothèse se traduit mathématiquement par l'équation(3-6).

$$\Pi(\vec{x}, t)|_{z=H} = 0 \quad (3-6)$$

Après avoir présenté les conditions aux limites utilisées dans le modèle, nous allons présenter la résolution analytique de l'équation de diffusion dans la section suivante.

3.2 Résolution analytique de l'équation de diffusion dans le CdZnTe

La résolution de l'équation de diffusion (équation (3-2)) présentée ici repose sur sa linéarité. De manière similaire à ce qui a été proposé par Rolland [6], celle-ci s'appuie sur l'utilisation **des fonctions de Green**. On suppose alors que les paramètres matériaux D^* et τ , sont indépendants de la

concentration de porteurs en excès $\Pi(\vec{x}, t)$. Cette hypothèse sera discutée dans la section 5. La fonction de Green est solution de l'équation de diffusion en considérant un terme source ponctuel généré au temps t_0 et au point \vec{y}_0 , et satisfaisant les conditions aux limites de Dirichlet précédemment introduites. Cette équation est donnée par l'équation (3-7).

$$\left[D^* \Delta - \frac{1}{\tau} - \frac{\partial}{\partial t} \right] G(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t_0) = -\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}_0) \delta(t - t_0) \quad (3-7)$$

Où \vec{x} est la position où la fonction de Green, G , est évaluée, \vec{y}_0 correspond à la position du point source et $\delta: t \rightarrow \delta(t)$ est la fonction de Dirac. Afin d'obéir aux conditions aux limites de Dirichlet, on utilise la méthode des images, qui permet grâce à l'utilisation de sources ponctuelles fictives d'obtenir la solution de Green du problème. On obtient alors l'équation (3-8) [6].

$$G(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t_0) = \sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} g(\vec{x}, t, \vec{y}_{0m}^+, t_0) - g(\vec{x}, t, \vec{y}_{0m}^-, t_0) \quad (3-8)$$

Où \vec{y}_{0m}^{\pm} est la position du point source fictif m et est donné par l'équation (3-9).

$$\vec{y}_{0m}^{\pm} = x_0 \vec{e}_x + y_0 \vec{e}_y + (\pm z_0 + 2mH) \vec{e}_z \quad (3-9)$$

où $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$ sont les vecteurs unitaires définissant le repère cartésien comme illustré sur la Figure 39. $g(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t_0)$, exprimée par l'équation (3-10)), est solution de l'équation de diffusion en considérant un milieu infini dans les trois dimensions de l'espace (\vec{e}_x, \vec{e}_y et \vec{e}_z).

$$g(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t_0) = U(t - t_0) \frac{1}{(4\pi D^*(t - t_0))^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{t - t_0}{\tau}\right) \exp\left(-\frac{|\vec{x} - \vec{y}_0|^2}{4D^*(t - t_0)}\right) \quad (3-10)$$

Dans l'équation (3-10), $U: t \rightarrow U(t - t_0)$ est une fonction marche, égale à 0 si t est strictement plus petit que t_0 et 1 si t est supérieur à t_0 . L'évolution de cette courbe pour $\tau = 100 \text{ ns}$ et deux valeurs de D^* ($2.50 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ et $22.50 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) est tracée sur la Figure 41 pour différentes valeurs de t . On observe que plus le coefficient de diffusion est élevé plus la fonction de Green s'étend. Par ailleurs, l'amplitude maximale de la fonction diminue avec le temps, ceci étant associé aux phénomènes de diffusion et de recombinaison.

Si l'on considère $m = 0$ dans l'équation (3-8), on retrouve l'expression de Kirkpatrick [43], qui a déterminé la solution de l'équation de diffusion en considérant un milieu semi-infini.

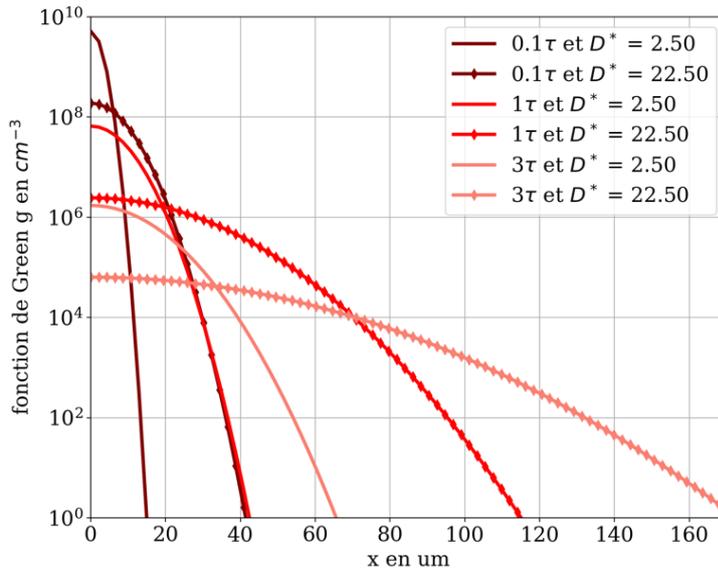


Figure 41 - Fonction de Green $g(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t_0)$ en fonction de la distance $||\vec{x}||$ au point source localisé en \vec{y}_0 en $\vec{0}$. Deux configurations sont considérées à $\tau = 100$ ns constant $D^* = 2.50$ $cm^2.s^{-1}$ et $D^* = 22.50$ $cm^2.s^{-1}$. Le temps est ici un paramètre, il vaut 0.1τ , 1τ et 3τ .

La linéarité de l'équation de diffusion nous permet de définir la densité de porteurs en excès $\Pi(\vec{x}, t)$ en fonction de l'expression de la fonction de Green $G(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t_0)$ (équation (3-8)) et du terme source $\Gamma(\vec{y}_0, t_0)$. L'expression de $\Pi(\vec{x}, t)$ est donnée par (3-11).

$$\Pi(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}^3} G(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t_0) \Gamma(\vec{y}_0, t_0) d^3 y_0 dt_0 \quad (3-11)$$

Cette approche analytique nous permet de déterminer la concentration de porteurs en excès à tout moment, n'importe où dans le substrat de CdZnTe à partir du terme source $\Gamma(\vec{x}, t)$. Ce terme correspond à la distribution de porteurs générés par le passage du proton dans le matériau. Celui-ci est défini à partir des résultats de simulation GEANT4. Cependant, l'expression (3-11) reste générale, si bien qu'elle est applicable à toute forme de terme de génération $\Gamma(\vec{x}, t)$. Dans les sections suivantes, nous allons utiliser cette concentration de porteurs $\Pi(\vec{x}, t)$ pour déterminer la valeur du courant de diffusion circulant à l'interface entre le substrat de CdZnTe et la couche sensible de HgCdTe ainsi que pour déterminer la fluence (nombre de photons reçus par unité de surface) à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe.

3.3 Modélisation du courant de diffusion des porteurs du CdZnTe vers le HgCdTe

3.3.1 Description mathématique du modèle de courant de diffusion

L'expression du nombre total d'électrons diffusant du CdZnTe vers le HgCdTe est calculée à partir des fonctions de Green. Cette démarche est similaire à celle proposée par Rolland [6], qui a calculé une expression identique dans le cas des détecteurs CCD (*Charge Couple Device* ou dispositif à transfert de

charges). Dans sa démarche, Rolland [6] suppose que les porteurs sont générés le long de la trajectoire du proton, sans extension radiale du dépôt d'énergie. Nous l'avons vu dans le cadre des simulations GEANT4, cette approximation est valide dans la mesure où la taille des pixels est supérieure à l'extension radiale du dépôt d'énergie (typiquement autour d'un micromètre). Ce code a été intégré au logiciel STARDUST [44], développé par le Centre National des Études Spatiales (CNES) pour simuler l'effet des radiations sur les détecteurs CCDs.

Dans cette thèse, nous allons utiliser la densité de paires électron-trou calculée à partir des simulations GEANT4, afin d'estimer la contribution de la diffusion au signal collecté par la couche de HgCdTe. Par définition, le courant de diffusion s'exprime selon l'équation (3-12), soit :

$$J_{diff}(\vec{x}_I, t) = -D^* \overrightarrow{grad}(\Pi(\vec{x}_I, t)) \cdot \vec{e}_z \quad (3-12)$$

Où D^* est la constante de diffusion ambipolaire, $\Pi(\vec{x}_I, t)$ est la concentration de porteurs en excès, et \vec{x}_I est le point appartenant à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe (voir Figure 39). Nous l'avons vu, l'utilisation des fonctions de Green permet d'exprimer $\Pi(\vec{x}_I, t)$ sous forme de produit de convolution (voir équation (3-11)). Celui-ci fait intervenir l'expression de la fonction de Green, $G(\vec{x}_I, t, \vec{y}_0, t_0)$, exprimée par l'équation (3-8), et le terme source $\Gamma(\vec{x}, t)$. Le gradient de $\Pi(\vec{x}_I, t)$ peut se calculer à partir du gradient de seulement un des deux termes du produit de convolution. On obtient alors l'équation (3-13) :

$$\overrightarrow{grad}(\Pi(\vec{x}_I, t)) = \overrightarrow{grad}(G(\vec{x}_I, t, \vec{y}_0, t_0) * \Gamma(\vec{x}, t)) = \overrightarrow{grad}(G(\vec{x}_I, t, \vec{y}_0, t_0)) * \Gamma(\vec{x}, t) \quad (3-13)$$

Le gradient de la fonction de Green est donné par l'équation (3-14). Il s'exprime en fonction de $g(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t)$, équation (3-10), solution de l'équation de diffusion en considérant un milieu infini [6].

$$\overrightarrow{grad}(G(\vec{x}_I, t, \vec{y}_0, t_0)) \cdot \vec{e}_z = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{z_0 + 2mH}{tD^*} g(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t) \quad (3-14)$$

En considérant un terme source défini à partir de la somme de M fonctions gaussiennes, avec F_i et b_i les paramètres de la i -ième gaussienne, le courant de diffusion s'écrit alors selon l'équation (3-15).

$$\begin{aligned} J_{diff}(\vec{x}_I, t) &= \sum_{i=1}^M \sum_{m=-\infty}^{+\infty} U(t) \sqrt{\frac{D^*}{\pi t}} \frac{F_i}{E_{e-h}} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \frac{b_i^2}{b_i^2 + 4D^*t} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{b_i^2 + 4D^*t}\right) \left[\exp\left(-\frac{(2mH)^2}{4D^*t}\right) \right. \\ &\quad \left. - \exp\left(-\frac{(2m+1)^2H^2}{4D^*t}\right) \right] \end{aligned} \quad (3-15)$$

où $U: t \rightarrow U(t)$ est une fonction marche introduite dans l'équation (3-10).

Puis le courant de diffusion $J_{diff}(\vec{x}_I, t)$ est intégré par rapport à la variable temporelle. On obtient le nombre total de trous^a par unité de surface à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe, noté $Q(\vec{x}_I)$. Ce dernier s'exprime selon l'Eq (3-16), soit :

$$Q(\vec{x}_I) = \int_0^{t_{int}} J_{diff}(\vec{x}_I, t) dt \quad (3-16)$$

Où t_{int} est le temps d'intégration du détecteur. En pratique, le temps de vie des porteurs, τ , est beaucoup plus court que la durée d'une acquisition. La durée de vie des porteurs peut être de quelques centaines de nanosecondes voire quelques microsecondes alors que la durée d'une acquisition est de l'ordre de la seconde^b. On peut alors supposer que $t_{int} = +\infty$.

Si l'on considère seulement une gaussienne dans l'expression de $J_{diff}(\vec{x}_I, t)$ (équation (3-15)), en faisant tendre $b_{i=1}$ vers zéro, on obtient la même expression pour $Q(\vec{x}_I, t)$ que celle déterminée par Rolland [6]. En prenant, une unique gaussienne avec une largeur nulle, on retrouve en effet une distribution de type Dirac, sans extension du profil d'énergie déposée. Cependant l'expression de $J_{diff}(\vec{x}_I, t)$, utilisée dans cette thèse s'appuie sur une description plus réaliste du profil d'énergie déposée grâce à l'utilisation de plusieurs fonctions gaussiennes.

3.3.2 Exemple d'application

Ainsi, le nombre de charges par unité de surface s'exprime selon l'équation (3-16). L'évolution de cette fonction pour deux jeux de paramètres matériaux est présentée sur la Figure 42. Le premier jeu de paramètres est représenté par la courbe bleue, avec $\tau = 100 \text{ ns}$ et $D^* = 2.50 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ (soit une longueur de diffusion de $5 \mu\text{m}$). Tandis que le second jeu de paramètres est décrit par la courbe orange, avec $\tau = 100 \text{ ns}$ et $D^* = 22.50 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ (soit une longueur de diffusion de $15 \mu\text{m}$). On observe que plus le coefficient de diffusion est important, plus la densité surfacique de charges est importante pour une distance au point d'impact r , donnée.

^a Pour rappel, on s'intéresse aux trous dans la mesure où ALFA est un détecteur de structure p/n dans laquelle se sont les trous qui sont collectés.

^b Ceci est particulièrement vrai dans le cas du SWIR. Dans le VLWIR, les temps d'intégration peuvent être de l'ordre de la ms voire de quelques dizaines de μs à cause du courant d'obscurité élevé, l'approximation $t_{int} = +\infty$ peut devenir fautive. Dans ce cas, l'intégrale doit être calculée numériquement.

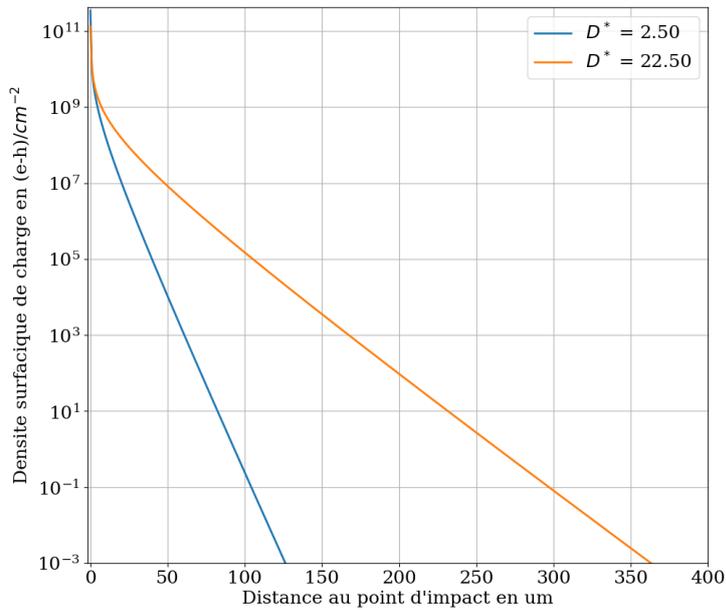


Figure 42 - Évolution de la densité surfacique de charges à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe en fonction de la distance radiale à l'impact du proton. En bleu : les paramètres matériaux sont les suivants : $\tau = 100 \text{ ns}$ et $D^* = 2.50 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. En orange : les paramètres matériaux sont les suivants $\tau = 100 \text{ ns}$ et $D^* = 22.50 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

Dans cette section, j'ai décrit le modèle analytique permettant de calculer la diffusion des porteurs du CdZnTe vers le HgCdTe. Cependant, nous l'avons présenté au début de ce chapitre, une autre source de pollution doit être prise en compte afin de modéliser la réponse des détecteurs IR sous irradiation, il s'agit de la luminescence du substrat sous irradiation (voir Figure 29). Le modèle mathématique qui permet de décrire cette contribution est exposé dans la sous-section suivante.

3.4 Modélisation de la luminescence dans le substrat de CdZnTe

Pour estimer la fluence (nombre de photons reçus par unité de surface) à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe, **le nombre total de photons émis par recombinaison radiative en tout point du substrat de CdZnTe est considéré**. Les pertes par propagation ainsi que l'émission isotrope dans 4π stéradians permettent d'obtenir la fluence recherchée. La sous-section suivante détaille le modèle analytique décrivant le phénomène de luminescence dans le substrat de CdZnTe. Puis un exemple d'application est présenté.

3.4.1 Description mathématique du modèle analytique de luminescence

3.4.1.1 Détermination du nombre total de photons émis en tout point du substrat de CdZnTe

L'expression du nombre total de photons dN_{ph} émis dans le volume dV au point $\vec{x} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z$ dans l'intervalle spectral $d(h\nu)$ et pendant la période dt est donnée par l'équation (3-17). Cette

approche est adaptée des travaux de Kuriyama et al. [45] dans lesquels les auteurs cherchent à modéliser l'effet de recyclage photonique dans des hétéro-structures de AlGaAs-GaAs. **Le recyclage photonique caractérise la photo-génération de porteurs par l'absorption de photons générés par recombinaison radiative dans un matériau.** La section 5.1 de ce chapitre est dédiée à l'étude de ce phénomène dans le CdZnTe dans le cadre de la problématique étudiée ici.

$$dN_{ph}(\vec{x}, t, h\nu) = \frac{\eta_{in}}{\tau} \Pi(\vec{x}, t) \gamma_{spont}(h\nu) dV d(h\nu) dt \quad (3-17)$$

Dans l'équation (3-17), $\eta_{in} = \tau/\tau_R$ est appelé l'efficacité quantique interne, elle caractérise la fraction de porteurs qui se recombinent de manière radiative. τ est le temps vie des porteurs et τ_R est le temps de vie radiatif. $\Pi(\vec{x}, t)$ représente la concentration de porteurs en excès évaluée au point \vec{x} et $\gamma_{spont}(h\nu)$ est le spectre d'émission spontanée du matériau, normalisé sur l'ensemble des longueurs d'onde d'émission, comme exprimé par l'équation (3-18).

$$\int_0^{+\infty} \gamma_{spont}(h\nu) d(h\nu) = 1 \quad (3-18)$$

Afin de déterminer le nombre total de photons émis, dN_{ph}^{TOT} sur l'ensemble de la durée d'une acquisition, notée t_{int} , réalisée avec un détecteur il faut intégrer $dN_{ph}(\vec{x}, t, h\nu)$ de $t = 0$ à $t = t_{int}$, selon l'expression donnée par l'équation (3-19).

$$dN_{ph}^{TOT}(\vec{x}, h\nu) = \int_0^{t_{int}} dN_{ph}(\vec{x}, t, h\nu) = \int_0^{t_{int}} \frac{\eta_{in}}{\tau} \Pi(\vec{x}, t) \gamma_{spont}(h\nu) dV d(h\nu) dt \quad (3-19)$$

Nous l'avons déjà mentionné dans la sous-section précédente, le temps de vie des porteurs est plusieurs ordres de grandeur inférieur au temps d'intégration t_{int} si bien que celui-ci sera supposé tendre vers $+\infty$. Ainsi, l'intégrale, exprimée par l'équation (3-19), peut s'écrire selon équation (3-20).

$$dN_{ph}^{TOT}(\vec{x}, h\nu) = \int_0^{+\infty} dN_{ph}(\vec{x}, t, h\nu) = \frac{\eta_{in}}{\tau} \left(\int_0^{+\infty} \Pi(\vec{x}, t) dt \right) \gamma_{spont}(h\nu) dV d(h\nu) \quad (3-20)$$

Dans l'équation (3-20), l'intégrale par rapport au temps de la concentration de porteurs en excès $\Pi(\vec{x}, t)$ peut s'écrire selon l'équation (3-21), en substituant $\Pi(\vec{x}, t)$ par son expression donnée par l'équation (3-11).

$$\int_0^{+\infty} \Pi(\vec{x}, t) dt = \int_0^{+\infty} \left(\int_{\mathbb{R}^+} dt_0 \int_{\mathbb{R}^3} d^3y_0 G(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t_0) \Gamma(\vec{y}_0, t_0) \right) dt \quad (3-21)$$

En supposant que la génération de porteurs est instantanée, le terme source $\Gamma(\vec{x}, t)$ s'écrit alors comme le produit de deux fonctions : une fonction des variables d'espace $k: \vec{x} \rightarrow k(\vec{x})$ et une fonction de Dirac δ . On obtient alors l'équation (3-22).

$$\Gamma(\vec{x}, t) = k(\vec{x}) \delta(t) \quad (3-22)$$

En m'appuyant sur l'énergie moyenne de création de paires électron-trou, je néglige les étapes de cascade et de thermalisation (voir Figure 30), je fais alors l'hypothèse que ces processus sont instantanés. Ainsi, je suppose que ces processus sont beaucoup plus rapides que les processus de recombinaison. On peut alors réécrire l'expression de l'équation (3-21) afin d'obtenir l'équation (3-23).

$$\int_0^{+\infty} \Pi(\vec{x}, t) dt = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\int_0^{+\infty} G(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t_0) dt \right) k(\vec{y}_0) d^3 y_0 \quad (3-23)$$

En utilisant les transformées de Laplace [46], on obtient une expression analytique pour l'intégrale temporelle de la fonction de Green. Son expression est donnée par l'équation (3-24).

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} G(\vec{x}, t, \vec{y}_0, t_0) dt \\ = \frac{1}{4\pi D^*} \sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} \left[\frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}_{0m}^+|} \exp\left(-\frac{|\vec{x} - \vec{y}_{0m}^+|}{L_d}\right) \right. \\ \left. - \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}_{0m}^-|} \exp\left(-\frac{|\vec{x} - \vec{y}_{0m}^-|}{L_d}\right) \right] \end{aligned} \quad (3-24)$$

Dans cette équation, $L_d = \sqrt{D^* \tau}$ est la longueur de diffusion ambipolaire dans le CdZnTe. Cette grandeur caractérise la distance moyenne parcourue par une paire électron-trou dans le CdZnTe avant de se recombiner. Par conséquent, le nombre total de photons émis dans le substrat de CdZnTe au point \vec{x} est donné par l'équation (3-25), en substituant l'équation (3-24) et l'équation (3-23) dans l'équation (3-20).

$$\begin{aligned} dN_{ph}^{TOT}(\vec{x}, hv) = \frac{\eta_{in}}{\tau} \frac{1}{4\pi D^*} \int_{\mathbb{R}^3} \left[\sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} \left[\frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}_{0m}^+|} \exp\left(-\frac{|\vec{x} - \vec{y}_{0m}^+|}{L_d}\right) \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}_{0m}^-|} \exp\left(-\frac{|\vec{x} - \vec{y}_{0m}^-|}{L_d}\right) \right] k(\vec{y}_0) d^3 y_0 \right] \gamma_{spon}(hv) dV d(hv) \end{aligned} \quad (3-25)$$

3.4.1.2 Détermination de la fluence

A partir de l'expression de $dN_{ph}^{TOT}(\vec{x}, hv)$ donnée par l'équation (3-25), nous allons calculer la fluence (nombre de photons par unité de surface) à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe, notée $d\psi$. Celle-ci est la somme de deux contributions (voir Figure 39). Il faut prendre en compte à la fois la contribution des photons qui sont émis directement vers la couche sensible de HgCdTe (il s'agit du terme d'émission vers « l'avant » noté $d\psi^F(\vec{x}, \vec{x}_I, hv)$ avec F pour *forward*, et ceux qui sont émis dans la direction opposée et qui se trouvent réfléchis sur l'interface entre le CdZnTe et le vide (l'émission vers « l'arrière », notée $d\psi^B(\vec{x}, \vec{x}_I, hv)$ avec B pour *backward*). La fluence totale s'écrit alors à partir de l'addition de ces deux contributions comme exprimée par l'équation (3-26) :

$$d\psi(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu) = d\psi^F(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu) + d\psi^B(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu) \quad (3-26)$$

Le premier terme est explicité dans l'équation (3-27).

$$\begin{aligned} & d\psi^F(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu) \\ &= dN_{ph}^{TOT}(\vec{x}, h\nu) \frac{\exp(-\alpha(h\nu)((x_I - x)^2 + (y_I - y)^2 + z^2)) \cos(\phi)}{4\pi((x_I - x)^2 + (y_I - y)^2 + z^2)} T_{mct}(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu) \end{aligned} \quad (3-27)$$

$d\psi^F(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu)$ représente la contribution des porteurs localisés au point \vec{x} à la fluence totale évaluée au point \vec{x}_I . $h\nu$ est l'énergie du photon incident. Le nombre total de photons émis par recombinaison radiative est défini par $dN_{ph}^{TOT}(\vec{x}, h\nu)$. Cette expression prend en compte les pertes par propagation, avec le terme en exponentiel, où $\alpha(h\nu)$ est le coefficient d'absorption du CdZnTe. Par ailleurs, on considère une émission isotrope dans 4π stéradians avec le troisième terme. Enfin, $T_{mct}(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu)$ est le coefficient de Fresnel de transmission à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe. La part des photons émis vers « l'arrière » (la fluence totale $d\psi^B(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu)$) s'exprime de manière analogue selon l'équation (3-28).

$$\begin{aligned} & d\psi^B(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu) \\ &= dN_{ph}^{TOT}(\vec{x}, h\nu) \frac{\exp(-\alpha(h\nu)((x_I - x)^2 + (y_I - y)^2 + (2H - z)^2)) \cos(\phi)}{4\pi((x_I - x)^2 + (y_I - y)^2 + (2H - z)^2)} R_{vide}(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu) T_{mct}(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu) \end{aligned} \quad (3-28)$$

où $R_{vide}(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu)$ est le coefficient de réflexion à l'interface entre le CdZnTe et le vide. Le calcul des coefficients de transmission et de réflexion s'appuie sur les équations de Maxwell ainsi que sur les équations de continuité des composantes tangentielle des champs électrique et magnétique [47].

Le nombre total de photons reçus au point \vec{x}_I s'obtient en sommant la contribution de l'ensemble des points sources localisés dans le substrat, repérés par le vecteur \vec{x} en tenant compte de l'ensemble des longueurs d'onde d'émission. Ceci se traduit par l'équation (3-29) :

$$\Psi(\vec{x}_I, h\nu) = \int_{\mathbb{R}^3} d\psi^F(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu) + d\psi^B(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu) \quad (3-29)$$

Les dépendances spectrales des paramètres optiques ($R_{vide}(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu)$, $T_{mct}(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu)$ and $\alpha(h\nu)$) peuvent être moyennées sur le spectre d'émission du CdZnTe. Cette hypothèse sera discutée dans la section 5. Étant donné que $\gamma_{spon}(h, \nu)$ est normalisé (voir équation (3-18)), la dépendance de la fluence avec la longueur d'onde disparaît. Finalement, **le nombre de photons à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe induit par la luminescence du substrat** peut se réécrire selon l'équation (3-30).

$$\Psi(\vec{x}_I) = \int_{\mathbb{R}^3} d\psi^F(\vec{x}, \vec{x}_I) + d\psi^B(\vec{x}, \vec{x}_I) \quad (3-30)$$

Cette intégrale a été calculée numériquement avec le module Scipy de Python [48].

3.4.2 Exemple d'application

L'évolution de la fluence (exprimée par la fonction (3-30)) en fonction de la distance radiale au point d'impact est donnée sur la Figure 43. La courbe est obtenue pour les propriétés matériaux données dans la Tableau 7. La dépendance spectrale des paramètres est négligée. La valeur de l'absorption correspond à l'absorption typique d'un semi-conducteur à gap direct [49]. Sur la Figure 43, on observe que la fluence diminue à mesure que l'on s'éloigne du point d'impact. On observe que l'amplitude de la fluence est plusieurs ordres de grandeur inférieure à la densité surfacique de charges induite par diffusion des porteurs. Ainsi, d'après ce modèle avec les propriétés matériaux données, la diffusion des charges du substrat de CdZnTe vers le HgCdTe est la principale source de pollution associée à l'interaction d'un proton dans le substrat de CdZnTe.

Tableau 7 - Données matériaux utilisés dans la simulation

Paramètres	Valeurs
$\alpha(h\nu)$	10^4 cm^{-1}
$T_{mct}(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu)$	1.0
$R_{vide}(\vec{x}, \vec{x}_I, h\nu)$	1.0
L_d	15 μm
η_{in}	1

Je m'intéresse dans ce modèle au détecteur HgCdTe de technologie p-sur-n. Aussi, c'est le nombre de trous collectés qu'il faut chercher à estimer. Celui-ci se calcule en intégrant l'expression de la fluence sur la surface du pixel, comme exprimée par l'équation (3-31).

$$N_{e^- \text{ collected}} = \eta_{qe} \int_{S_{\text{pixel}}} \Psi(\vec{x}_I) dS_{\text{pixel}} \quad (3-31)$$

Dans cette équation η_{qe} est l'efficacité quantique du détecteur. Celle-ci a été introduite dans le chapitre 0, elle traduit l'efficacité de conversion des photons en paires électron-trou.

Dans cette sous-section, j'ai détaillé le modèle qui permet de déterminer la valeur de la fluence au niveau de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe à partir d'une distribution de porteurs générée de manière instantanée dans le substrat. Ce modèle permet ainsi de décrire le phénomène de luminescence du substrat, suspecté d'être à l'origine des dégradations de performances sous irradiation des détecteurs IR. [26]–[28], [33]

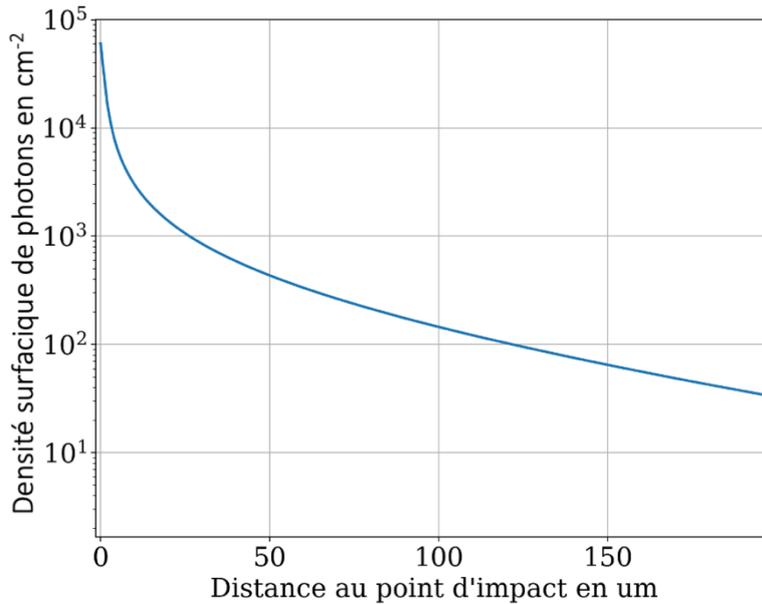


Figure 43 - Évolution de la fluence (nombre de photons par unité de surface) à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe en fonction de la distance radiale à l'impact du proton. L'absorption utilisée vaut ici 10^4 cm^{-1} .

3.5 Conclusion et importance des propriétés matériaux

Pour conclure, dans cette section, nous avons décrit analytiquement quelle sera la contribution du dépôt d'énergie dans le substrat à la fois en termes d'émission de photons (équation (3-31)) et de diffusion des porteurs (équation (3-16)). **Ces deux équations dépendent fortement des propriétés matériaux, à la fois optique (coefficient d'absorption, indices optiques) et électriques (temps de vie, coefficient de diffusion).** Ces données sont inexistantes dans la littérature pour le CdZnTe dans le domaine de longueur concerné (775 nm), à la température de 100 K et pour la composition en zinc qui nous concerne ($\sim 4 \%$). C'est pourquoi, j'ai fait une série de mesures sur des substrats de CdZnTe afin d'extraire ces paramètres matériaux. Ces mesures sont présentées et analysées dans le chapitre 3 et les résultats de simulations effectuées à partir de ce modèle et des propriétés matériaux sont présentés dans le chapitre 4.

Les hypothèses relatives au développement de ce formalisme mathématique sont discutées dans la section 5. En particulier, le modèle présenté ci-dessus ne prend pas en compte le phénomène de recyclage photonique. Celui-ci fait l'objet d'une discussion particulière dans la section 5.1 de ce chapitre. J'ai développé un premier modèle basé sur les chaînes de Markov afin d'estimer l'importance de ce phénomène. Néanmoins, avant de discuter des hypothèses du modèle, il s'agit de modéliser la troisième et dernière contribution au signal collecté par le HgCdTe, à savoir le dépôt d'énergie dans la couche détectrice de HgCdTe (voir Figure 29). En effet, en traversant la structure du détecteur, le proton génère aussi des paires électron-trou dans le HgCdTe, lesquelles vont être collectées rapidement. Le transport et la collection de ces porteurs sont simulés à l'aide de méthodes d'éléments finis. L'approche est détaillée dans la section suivante.

4 Modélisation de la collecte des porteurs dans le HgCdTe

4.1 Modèle de diffusion dans le HgCdTe

L'objectif de cette section est d'estimer, avec des méthodes d'éléments finis, le nombre total de porteurs collectés par la couche de HgCdTe sous irradiation de protons normalement incidents. Pour rappel, dans cette thèse, on fait l'hypothèse que le transport des porteurs est gouverné seulement par le processus de diffusion en dehors de la zone déplétée (voir Figure 27). Dans le but de modéliser la réponse de la couche de HgCdTe, il est nécessaire de résoudre l'équation de diffusion dépendante du temps, donnée par l'équation (4-1). Cette résolution s'appuie sur une méthode d'éléments finis en trois dimensions. Dans cette équation, $dp(\vec{x}, t)$ est la concentration de porteurs en excès, τ_{mct} est le temps de vie des porteurs dans le HgCdTe, D_{mct}^* est la constante de diffusion ambipolaire dans le HgCdTe, $\Gamma_{mct}(\vec{x}, t)$ est le terme source extrait des simulations GEANT4, et \vec{x} est la position dans la couche de HgCdTe.

$$\left[D_{mct}^* \Delta - \frac{1}{\tau_{mct}} - \frac{\partial}{\partial t} \right] dp(\vec{x}, t) = \Gamma_{mct}(\vec{x}, t) \quad (4-1)$$

Cette équation différentielle est résolue en 3D, en utilisant des conditions aux limites mixtes. De manière analogue à ce qui a été fait sur des architectures similaires de détecteurs [1], les conditions aux limites de Dirichlet sont appliquées au niveau de la jonction, soit $dp|_{jonction} = 0$. Tous les porteurs sont collectés lorsqu'ils atteignent la jonction. Des conditions aux limites de Neumann sont utilisées sur l'ensemble des autres interfaces ($\partial p / \partial x = 0$). Ainsi, on fait l'hypothèse que les surfaces sont électriquement parfaitement réfléchissantes. Ces conditions aux limites sont explicitées sur la Figure 44. L'équation (4-1) est résolue avec le logiciel FreeFem ++ [50] : un outil développé pour résoudre numériquement des équations aux dérivées partielles.

Pour ce faire, une matrice de 5×5 pixels a été simulée (voir Figure 45). Une fois que la solution est déterminée, le courant circulant dans chaque jonction est calculé par intégration du gradient de la concentration de porteurs sur la surface de la jonction. Puis, l'intégration du courant au cours du temps, permet d'obtenir le nombre de porteurs collectés par chaque pixel.

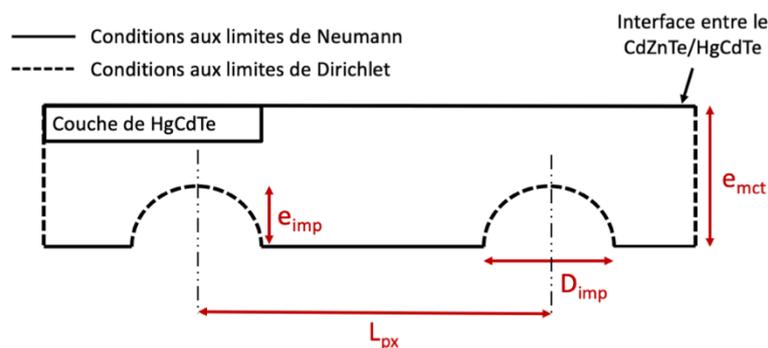


Figure 44 - Coupe 2D de la structure utilisée dans FreeFem ++ afin de résoudre l'équation de diffusion. Les conditions aux limites sont précisées. L_{pix} est la dimension du pixel. e_{imp} et D_{imp} sont les profondeurs et les tailles d'implantation de la jonction. e_{mct} est l'épaisseur de HgCdTe considérée.

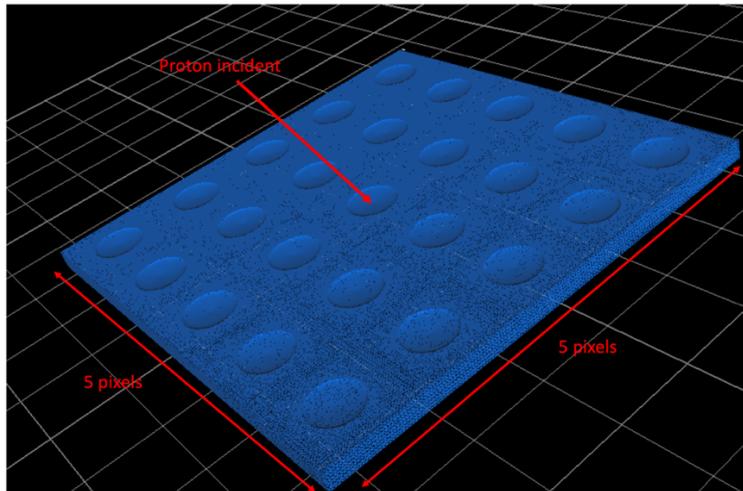


Figure 45 - Schéma de la structure de 5x5 pixels simulée dans FreeFem++.

Les caractéristiques géométriques de la structure simulée dans FreeFem ainsi que les paramètres matériaux utilisés sont donnés dans le Tableau 8.

Tableau 8 - Valeur des paramètres géométriques et des paramètres matériau utilisés dans la simulation FreeFem ++.

Paramètres géométriques	
e_{imp}	0.5 μm
e_{mct}	3 μm
D_{imp}	8 μm
L_{pix}	15 μm
Paramètres matériaux	
Constante de diffusion D_{mct}	6.7 cm^2/s
Temps de vie τ_{mct}	1 μs
Longueur de diffusion ambipolaire L_{mct}	15 μm

4.2 Exemple d'application pour un proton de 63 MeV

Considérons maintenant, un proton de 63 MeV normalement incident sur la couche de HgCdTe. Le terme source dans l'équation de diffusion est calculé à partir des résultats de simulations GEANT4. Le résultat de la modélisation est présenté sur la Figure 46. Le proton est incident au centre du pixel (2,2) au centre de la matrice simulée. Sur la Figure 46, le nombre de trous collectés par pixel est indiqué en rouge. Comme on peut le voir sur la Figure 44, le pixel central collecte plus de 85 % du nombre total de trous générés. Le reste des charges est partagé entre les pixels voisins^a. Plus on s'éloigne du pixel central, plus la quantité de trous collectés est faible. On observe que la répartition des charges

^a Dans cette simulation le partage des charges est simplement lié à la diffusion des porteurs dans la couche de HgCdTe.

présente une symétrie cylindrique. Celle-ci s'explique par l'isotropie du dépôt d'énergie et des propriétés matériau de la couche de HgCdTe.

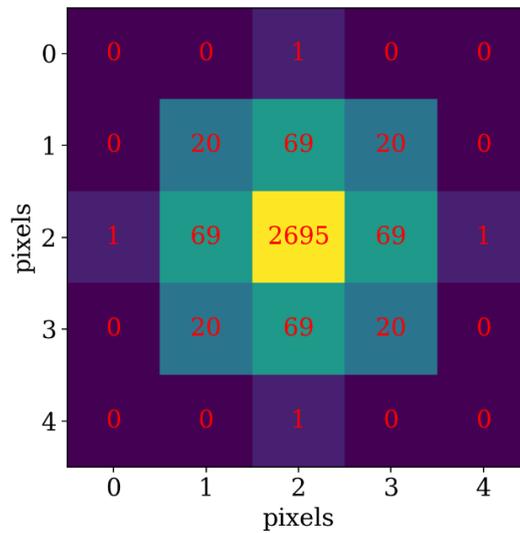


Figure 46 - Nombre de trous collectés (en rouge) par chaque pixel (chaque cellule représente un pixel) en considérant un proton incident de 63 MeV au niveau du pixel (2,2). Le calcul a été réalisé avec FreeFem++.

Dans cette section, nous avons vu que les méthodes d'éléments finis permettent de modéliser le transport des porteurs dans la couche de HgCdTe. A partir du résultat de ces simulations, il est possible de calculer le nombre de trous collectés par chaque pixel. Nous avons vu ensuite que la majorité des porteurs (environ 88%) était collectée dans le pixel frappé par le proton. Dans la section suivante, les différentes hypothèses utilisées au cours du développement du modèle sont résumées et discutées. Une attention particulière est portée au phénomène de recyclage photonique.

5 Discussion

Dans ce chapitre, l'influence de l'épaisseur du substrat sur la réponse d'un détecteur IR sous irradiation a été présentée. Par ailleurs, un modèle de recyclage photonique a été développé afin d'estimer l'influence de ce phénomène sur la réponse de détecteur IR sous irradiation. L'objectif de cette section est de revenir sur les différentes hypothèses utilisées au cours du développement du modèle et de discuter leurs impacts.

5.1 Recyclage photonique et chaîne de Markov

Dans les sections 3 et 4, nous avons présenté le modèle de transport des porteurs libres dans le CdZnTe et le HgCdTe, développé au cours de cette thèse. Cependant, comme nous l'avons déjà mentionné, l'effet des photons de luminescence émis dans le CdZnTe et absorbés dans le CdZnTe lui-même n'est pas simulé. Ce phénomène peut avoir une influence importante sur la longueur de diffusion des porteurs. Ce phénomène est appelé **recyclage photonique**, et est étudié dans la section suivante.

Comme précisé précédemment, le modèle de luminescence et de diffusion dans le CdZnTe, ne prend pas en compte la génération de porteurs induite par photo-absorption de photons qui sont émis par transition radiative au sein même du CdZnTe.

5.1.1 Introduction de la notion de recyclage photonique

Le recyclage photonique, que l'on peut appeler aussi auto-absorption, caractérise l'absorption des photons par le matériau dans lequel ils ont été émis par recombinaison radiative. Une nouvelle paire électron-trou est créée dans le matériau semi-conducteur. Ce phénomène est illustré sur la Figure 47. D'un point de vue effectif tout se passe comme si le temps de vie des paires électron-trou était rallongé.

En pratique, ce phénomène peut devenir important, notamment dans le cadre du problème qui nous concerne. En effet, en prolongeant le temps de vie des porteurs de manière artificielle, le phénomène de recyclage photonique va permettre aux paires électron-trou de diffuser sur des distances plus importantes, provoquant ainsi un élargissement de la région de pixels affectée par le dépôt d'énergie dans le substrat. Le détail du formalisme est présenté en annexe C. Les résultats issus de ce modèle sont développés ci-dessous.

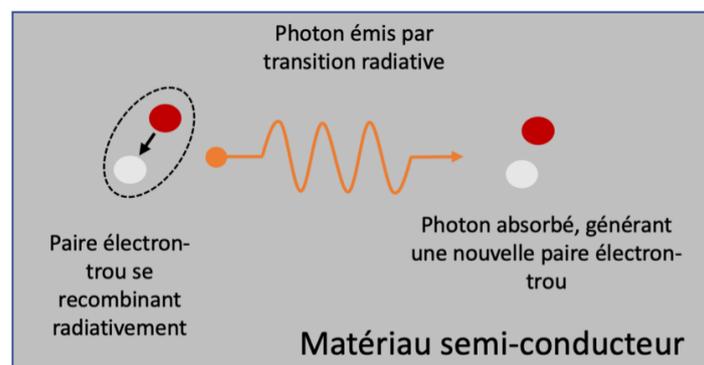


Figure 47 - Illustration schématique du phénomène de recyclage photonique

5.1.2 Résultat et discussion

A partir du formalisme des chaînes de Markov, il est possible d'estimer l'effet du recyclage photonique sur le nombre de porteurs collectés par la couche de HgCdTe suite à la diffusion des charges du CdZnTe vers le HgCdTe. Les probabilités pour que le porteur diffuse vers cette interface en fonction de sa position dans le substrat sont données sur la Figure 48 avec et sans recyclage photonique (courbe bleue et orange respectivement). On observe que la probabilité pour que le porteur diffuse du CdZnTe vers le HgCdTe est plus importante avec la prise en compte du recyclage photonique. Ce résultat est attendu puisque les photons émis proche de l'interface vont photo-générer de nouveaux porteurs qui seront ensuite susceptibles de diffuser vers la couche de HgCdTe. La courbe rouge sur la Figure 48, représente le ratio entre la probabilité de diffuser hors du CdZnTe avec recyclage photonique et la probabilité de diffuser sans recyclage photonique. Ce rapport augmente lorsqu'on s'éloigne de l'interface (en $z = 0$) et atteint un plateau. La probabilité pour que le porteur diffuse est multipliée

par deux loin de l'interface en tenant compte du recyclage photonique. En revanche, celle-ci reste très faible, de l'ordre de 10^{-6} à $z = 200 \mu\text{m}$.

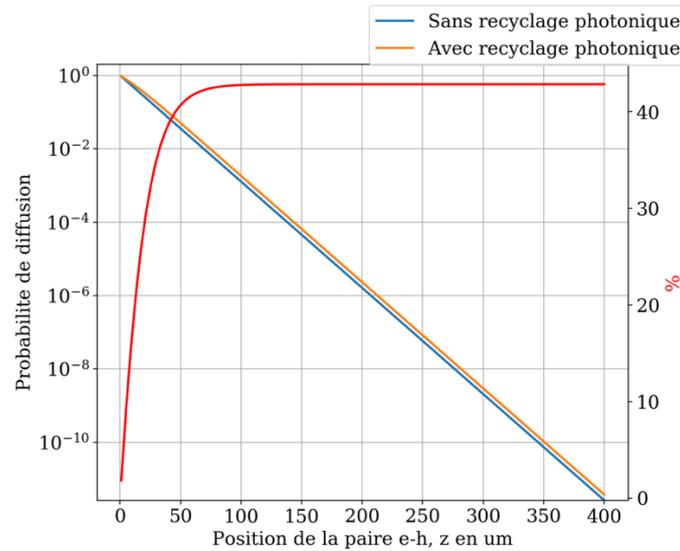


Figure 48 - Tracé de l'évolution de la probabilité pour que le porteur diffuse vers l'interface entre le HgCdTe et le CdZnTe en fonction de la position du porteur dans le substrat ($z=0$ = Interface entre le CdZnTe et le HgCdTe). En rouge tracé, en %, du rapport d'augmentation des probabilités de diffusion avec et sans recyclage photonique, en considérant un substrat de $800 \mu\text{m}$.

A partir d'un modèle basé sur les chaînes de Markov, nous avons vu que négliger ce phénomène conduit à une sous-estimation de la probabilité pour que le porteur diffuse hors du matériau. Par conséquent, ces résultats préliminaires permettent de conclure qu'omettre le recyclage photonique conduit à une sous-estimation de la densité surfacique de charges à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe. Dans la section suivante, les hypothèses liées à la modélisation du dépôt d'énergie sont présentées.

5.2 Hypothèses sur le dépôt d'énergie

Dans ce modèle, nous considérons seulement les protons normalement incidents. Les particules ionisantes ayant une trajectoire inclinée parcourons une distance plus importante au sein du détecteur, créant alors plus de porteurs susceptibles de polluer le signal collecté par le HgCdTe. Afin de modéliser la trace de ces protons, il est nécessaire de décrire la trace avec plusieurs variables, la symétrie cylindrique est brisée. A partir de cette nouvelle expression, le modèle de diffusion et de luminescence reste valable. L'utilisation des fonctions de Green permet d'adapter le modèle à différentes formes de fonctions sources.

En outre, la détermination de la densité de porteurs générée par le passage d'une particule ionisante repose sur l'utilisation de l'énergie moyenne de création de paires, E_{e-h} . Bien que celle-ci soit couramment utilisée dans le domaine des radiations, elle s'appuie sur l'hypothèse suivante : cette énergie, E_{e-h} , reste identique quelque soit le nombre de porteurs créés. Ainsi, on fait l'hypothèse que quel que soit le nombre de porteurs créés, il faut toujours la même quantité d'énergie pour créer une paire électron-trou. Autrement dit, lorsque plusieurs paires sont créées, on néglige leurs interactions.

5.3 Hypothèses des modèles de transport

Le modèle de diffusion dans le CdZnTe, décrit dans la section III, néglige les effets de hautes densités de porteurs. Lorsque le semi-conducteur est sous irradiation, la concentration de porteurs peut être localement très élevée. Dans ces conditions, les propriétés matériaux du semi-conducteur dépendent de la concentration de paires électron-trou. En outre, le semi-conducteur peut être localement dégénéré. Cependant, ces effets de très hautes densités de porteurs s'appliqueront seulement sur des périodes de temps courtes et localisées dans un très faible volume. Ces effets sont visibles lorsque la concentration de porteur devient plusieurs ordres de grandeur supérieurs au niveau de dopage. Néanmoins, ce régime de dégénérescence concerne seulement un cylindre de rayon très faible (inférieur à quelques nanomètres). Celui-ci comprend une très faible fraction du nombre total de charge générées. Par ailleurs, la concentration de porteurs décroît rapidement avec le temps (voir équation (5-1)), de sorte que ce régime sera atteint pendant une période de temps très courte. Ainsi, il semble acceptable de négliger, au premier ordre, les effets de ces hautes densités de porteurs. Afin de modéliser finement leurs effets l'utilisation de méthodes d'éléments finis ou Monte Carlo semble indispensable.

$$\Pi(\vec{x}, t) \propto \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (5-1)$$

Outre ces effets de haute densité, la luminescence des porteurs chauds est négligée. Ici, on suppose que les porteurs se thermalisent avant de se recombiner et de diffuser. Par ailleurs, nous avons supposé que les dépendances spectrales des coefficients de transmission et de réflexion ainsi que du coefficient d'absorption pouvaient être négligées. Ceci suggère que les photons sont émis dans une bande spectrale dans laquelle la valeur de ces coefficients varie peu. Afin de vérifier cette hypothèse, il s'agit de mesurer expérimentalement, l'énergie des photons de luminescence de cristaux de CdZnTe à 80 K. Cette mesure est effectuée dans le chapitre 3.

Par ailleurs, le modèle présenté dans la section 3, qui décrit la modélisation analytique de la diffusion et de la luminescence des porteurs dans le substrat de CdZnTe sous irradiation, ne prend pas en compte le phénomène de recyclage photonique. Or nous l'avons vu, dans la section 5.1, le recyclage photonique conduit à une sous-estimation de la densité surfacique de charges à l'interface entre le HgCdTe et le CdZnTe. Dans une perspective plus lointaine, il semble pertinent de développer un modèle plus complet de modélisation de réponse de détecteurs IR sous irradiation en tenant compte de ce phénomène de recyclage photonique dans le substrat de CdZnTe.

Enfin, dans le but d'appliquer le modèle aux température cryogénique d'utilisation des détecteurs IR, il est essentiel de mesurer les propriétés matériaux optiques et électriques du CdZnTe. Ces données sont inexistantes dans la littérature. Les résultats d'une série de mesures de propriétés matériaux, effectuées sur des échantillons de substrat de CdZnTe, sont présentés dans le chapitre suivant.

6 Conclusions du chapitre

Dans ce chapitre j'ai successivement abordé les différentes étapes de l'approche de modélisation, allant de la détermination du profil d'énergie déposée à la modélisation du transport des porteurs dans le substrat de CdZnTe et dans la couche de HgCdTe.

Dans le HgCdTe, le transport et la collection des paires électron-trou sont modélisés avec l'aide de méthodes d'élément finis. En revanche, la recombinaison radiative dans le substrat ainsi que la diffusion des porteurs du CdZnTe vers le HgCdTe ont été modélisées analytiquement. Nous avons alors constaté que les propriétés matériaux du CdZnTe étaient des paramètres clés de la modélisation. Cependant, ceux-ci sont inexistant dans la littérature aux températures cryogéniques qui nous intéressent (100 K pour les détecteurs ALFA et 80 K pour les détecteurs irradiés dans cette thèse). Ainsi, afin de poursuivre l'objectif de modélisation, une série de mesures de propriétés matériau optique et électrique a été effectuée sur des substrats représentatifs de CdZnTe. Les dispositifs expérimentaux ainsi que les résultats de ces mesures sont présentés dans le chapitre suivant. Dans le chapitre 4, les propriétés matériaux ainsi déterminées sont appliquées au modèle développé dans ce chapitre dans le but de modéliser la réponse sous irradiation de détecteurs IR de technologie HgCdTe non amincis.

Références

- [1] O. Gravrand, J. C. Desplanches, C. Delbègue, G. Mathieu, et J. Rothman, « Study of the spatial response of reduced pitch Hg_{1-x}Cd_xTe dual-band detector arrays », *Journal of Elec Materi*, vol. 35, n° 6, p. 1159-1165, juin 2006, doi: 10.1007/s11664-006-0236-4.
- [2] A. Rogalski, « HgCdTe infrared detector material: history, status and outlook », *Rep. Prog. Phys.*, vol. 68, n° 10, p. 2267-2336, oct. 2005, doi: 10.1088/0034-4885/68/10/R01.
- [3] S. Agostinelli *et al.*, « Geant4—a simulation toolkit », *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 506, n° 3, p. 250-303, 2003, doi: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- [4] O. Fageeha, J. Howard, et R. C. Block, « Distribution of radial energy deposition around the track of energetic charged particles in silicon », *Journal of Applied Physics*, vol. 75, n° 5, p. 2317-2321, mars 1994, doi: 10.1063/1.356274.
- [5] M. P. R. Waligórski, R. N. Hamm, et R. Katz, « The radial distribution of dose around the path of a heavy ion in liquid water », *International Journal of Radiation Applications and Instrumentation. Part D. Nuclear Tracks and Radiation Measurements*, vol. 11, n° 6, p. 309-319, janv. 1986, doi: 10.1016/1359-0189(86)90057-9.
- [6] G. Rolland, « New analytical solutions of the diffusion equation available to radiation induced substrate currents Modeling », in *2007 9th European Conference on Radiation and Its Effects on Components and Systems*, sept. 2007, p. 1-8, doi: 10.1109/RADECS.2007.5205502.
- [7] S. Kirkpatrick, « Modeling diffusion and collection of charge from ionizing radiation in silicon devices », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 26, n° 11, p. 1742-1753, nov. 1979, doi: 10.1109/T-ED.1979.19680.
- [8] E. J. Kobetich et R. Katz, « Energy Deposition by Electron Beams and δ Rays », *Phys. Rev.*, vol. 170, n° 2, p. 391-396, juin 1968, doi: 10.1103/PhysRev.170.391.
- [9] Z. Chunxiang, D. E. Dunn, et R. Katz, « Radial Distribution of Dose and Cross-Sections for the Inactivation of Dry Enzymes and Viruses », p. 5, 1985.
- [10] C. A. Klein, « Bandgap Dependence and Related Features of Radiation Ionization Energies in Semiconductors », *Journal of Applied Physics*, vol. 39, n° 4, p. 2029-2038, mars 1968, doi: 10.1063/1.1656484.
- [11] M. Murat, A. Akkerman, et J. Barak, « Electron and Ion Tracks in Silicon: Spatial and Temporal Evolution », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 55, n° 6, p. 3046-3054, déc. 2008, doi: 10.1109/TNS.2008.2007646.
- [12] M. Murat, A. Akkerman, et J. Barak, « Ion track structure and dynamics in SiO₂ », in *2007 9th European Conference on Radiation and Its Effects on Components and Systems*, sept. 2007, p. 1-9, doi: 10.1109/RADECS.2007.5205478.
- [13] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, et M. D. Ziegler, *SRIM: the stopping and range of ions in matter*. Chester, Md: SRIM Co, 2008.
- [14] S. Agostinelli *et al.*, « Geant4—a simulation toolkit », *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 506, n° 3, p. 250-303, juill. 2003, doi: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- [15] V. Shen, « Standard Reference Simulation Website, NIST Standard Reference Database 173 ». National Institute of Standards and Technology, 2006, doi: 10.18434/T4M88Q.
- [16] « Physics Reference Manual », p. 446.
- [17] P. Sigmund, *Particle Penetration and Radiation Effects: General Aspects and Stopping of Swift*

Point Charges. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2006.

- [18] J. F. Ziegler, « The Stopping of Energetic Light Ions in Elemental Matter », *J. Appl. Phys.*, p. 51, 1999.
- [19] D. I. Thwaites, « Bragg's Rule of Stopping Power Additivity: A Compilation and Summary of Results », *Radiation Research*, vol. 95, n° 3, p. 495, sept. 1983, doi: 10.2307/3576096.
- [20] S. Adachi, *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors: Adachi/Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd, 2005.
- [21] P. Capper, *Properties of Narrow Gap Cadmium-based Compounds*. IET, 1994.
- [22] W. M. Higgins, G. N. Pultz, R. G. Roy, R. A. Lancaster, et J. L. Schmit, « Standard relationships in the properties of Hg_{1-x}CdxTe », *Journal of Vacuum Science & Technology A*, vol. 7, n° 2, p. 271-275, mars 1989, doi: 10.1116/1.576110.
- [23] G. L. Hansen, J. L. Schmit, et T. N. Casselman, « Energy gap versus alloy composition and temperature in Hg_{1-x}CdxTe », *Journal of Applied Physics*, vol. 53, n° 10, p. 7099-7101, oct. 1982, doi: 10.1063/1.330018.
- [24] M. Raine, M. Gaillardin, J.-E. Sauvestre, O. Flament, A. Bournel, et V. Aubry-Fortuna, « Effect of the Ion Mass and Energy on the Response of 70-nm SOI Transistors to the Ion Deposited Charge by Direct Ionization », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 57, n° 4, p. 1892-1899, août 2010, doi: 10.1109/TNS.2010.2048926.
- [25] M. L. Dorn *et al.*, « Proton irradiation results for long-wave HgCdTe infrared detector arrays for Near-Earth Object Camera », *Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems*, vol. 2, n° 3, p. 036002, 2016, doi: 10.1117/1.JATIS.2.3.036002.
- [26] S. D. Johnson *et al.*, « Radiation effects in WFC3 IR detectors », in *Focal Plane Arrays for Space Telescopes*, janv. 2004, vol. 5167, p. 243-257, doi: 10.1117/12.508443.
- [27] A. Waczynski *et al.*, « Radiation induced luminescence of the CdZnTe substrate in HgCdTe detectors for WFC3 », in *Focal Plane Arrays for Space Telescopes II*, San Diego, California, USA, août 2005, p. 59020P, doi: 10.1117/12.617716.
- [28] R. Smith *et al.*, « Noise and zero point drift in 1.7 μ m cutoff detectors for SNAP », in *High Energy, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy II*, juin 2006, vol. 6276, p. 62760R, doi: 10.1117/12.672616.
- [29] K. G. McKay, « Electron-Hole Production in Germanium by Alpha-Particles », *Phys. Rev.*, vol. 84, n° 4, p. 829-832, nov. 1951, doi: 10.1103/PhysRev.84.829.
- [30] W. Shockley, « Problems related to p-n junctions in silicon », *Solid-State Electronics*, vol. 2, n° 1, p. 35-67, janv. 1961, doi: 10.1016/0038-1101(61)90054-5.
- [31] H. Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et des composants optoélectroniques*. Paris: Dunod, 2004.
- [32] R. C. Alig et S. Bloom, « Electron-Hole-Pair Creation Energies in Semiconductors », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 35, n° 22, p. 1522-1525, déc. 1975, doi: 10.1103/PhysRevLett.35.1522.
- [33] M. L. Dorn *et al.*, « Proton irradiation results for long-wave HgCdTe infrared detector arrays for Near-Earth Object Camera », *JATIS*, vol. 2, n° 3, p. 036002, août 2016, doi: 10.1117/1.JATIS.2.3.036002.
- [34] J. C. Pickel *et al.*, « Radiation-induced charge collection in infrared detector arrays », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 49, n° 6, p. 2822-2829, déc. 2002, doi: 10.1109/TNS.2002.805382.
- [35] M. Raine, A. Valentin, M. Gaillardin, et P. Paillet, « Improved Simulation of Ion Track Structures Using New Geant4 Models—Impact on the Modeling of Advanced Technologies Response », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 59, n° 6, p. 2697-2703, déc. 2012, doi: 10.1109/TNS.2012.2220783.
- [36] S. Abbaspour, B. Mahmoudian, et J. P. Islamian, « Cadmium Telluride Semiconductor Detector

- for Improved Spatial and Energy Resolution Radioisotopic Imaging », *World J Nucl Med*, vol. 16, n° 2, p. 101-107, 2017, doi: 10.4103/1450-1147.203079.
- [37] J. W. Mayer, « Evaluation of CdTe by Nuclear Particle Measurements », *Journal of Applied Physics*, vol. 38, n° 1, p. 296-301, janv. 1967, doi: 10.1063/1.1708970.
- [38] A. A. Quaranta, C. Canali, G. Ottaviani, et K. R. Zanio, « Electron-hole pair ionization energy in CdTe between 85 °K and 350 °K », *Lett. Nuovo Cimento*, vol. 4, n° 19, p. 908-910, nov. 1970, doi: 10.1007/BF02755175.
- [39] S. L. Price, « Electron-beam induced current measurement of HgCdTe heterojunction infrared detectors », in *1984 International Electron Devices Meeting*, 1984, p. 560-563, doi: 10.1109/IEDM.1984.190781.
- [40] C. F. Bruce, W. Kim, et B. Richardson, « Interactions of Energetic Particle Radiation With a MCT $(x=0.48)$ P on N Detector Array », *IEEE Transactions on Nuclear Science*, vol. 59, n° 2, p. 456-461, avr. 2012, doi: 10.1109/TNS.2012.2188041.
- [41] J. Bude, N. Sano, et A. Yoshii, « Hot-carrier luminescence in Si », *Phys. Rev. B*, vol. 45, n° 11, p. 5848-5856, mars 1992, doi: 10.1103/PhysRevB.45.5848.
- [42] D. Kuciauskas, A. Kanevce, P. Dippo, S. Seyedmohammadi, et R. Malik, « Minority-Carrier Lifetime and Surface Recombination Velocity in Single-Crystal CdTe », *IEEE J. Photovoltaics*, vol. 5, n° 1, p. 366-371, janv. 2015, doi: 10.1109/JPHOTOV.2014.2359738.
- [43] S. Kirkpatrick, « Modeling Diffusion and Collection of Charge from Ionizing Radiation in Silicon Devices », *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 26, n° 11, p. 1742-1753, 1979, doi: 10.1109/T-ED.1979.19680.
- [44] G. Rolland, L. Pinheiro da Silva, C. Inguibert, J.-P. David, R. Ecoffet, et M. Auvergne, « STARDUST: A Code for the Simulation of Particle Tracks on Arrays of Sensitive Volumes With Substrate Diffusion Currents », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 55, n° 4, p. 2070-2078, août 2008, doi: 10.1109/TNS.2008.920427.
- [45] T. Kuriyama, T. Kamiya, et H. Yanai, « Effect of Photon Recycling on Diffusion Length and Internal Quantum Efficiency in $Al_x Ga_{1-x} As$ -GaAs Heterostructures », *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 16, n° 3, p. 465-477, mars 1977, doi: 10.1143/JJAP.16.465.
- [46] A. Erdelyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, et F. G. Tricomi, *Tables of Integral Transforms. I*. 1954.
- [47] J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, 3rd ed. New York: Wiley, 1999.
- [48] T. E. Oliphant, « Python for Scientific Computing », *Comput. Sci. Eng.*, vol. 9, n° 3, p. 10-20, 2007, doi: 10.1109/MCSE.2007.58.
- [49] P. Y. Yu et M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [50] F. Hecht, « New development in freefem++ », *Journal of Numerical Mathematics*, vol. 20, n° 3-4, janv. 2012, doi: 10.1515/jnum-2012-0013.

Chapitre 3

Mesures des propriétés optiques et électriques du CdTe et du CdZnTe et application du modèle

Table des matières

1	PRINCIPES DES MESURES DE LUMINESCENCE ET D'ELLIPSOMETRIE.....	124
1.1	CARACTERISATION OPTIQUE DES ECHANTILLONS : MESURE DE LUMINESCENCE	125
1.1.1	<i>Principe des caractérisations de luminescence.....</i>	<i>125</i>
1.1.2	<i>Recombinaisons radiatives dans un semi-conducteur.....</i>	<i>126</i>
1.1.2.1	Recombinaisons bande à bande	126
1.1.2.2	Recombinaisons de type bande niveau.....	127
1.1.2.3	Recombinaisons de paires.....	128
1.1.2.4	Annihilations excitoniques	128
1.1.2.5	Répliques phonons.....	131
1.1.2.6	Résumé des différents processus de recombinaison	131
1.1.3	<i>Description des bancs de luminescence.....</i>	<i>132</i>
1.1.3.1	Banc de photoluminescence	132
1.1.3.2	Banc de cathodoluminescence	134
1.2	CARACTERISATION PAR ELLIPSOMETRIE DE SURFACE	135
1.2.1	<i>Objectif et principe de mesure de l'ellipsométrie de surface.....</i>	<i>135</i>
1.2.2	<i>Description du banc de test d'ellipsométrie et préparation des échantillons.....</i>	<i>137</i>
1.2.3	<i>Calcul de propagation d'erreur sur l'estimation des propriétés optiques.....</i>	<i>139</i>
1.3	DESCRIPTION DES ECHANTILLONS	140
2	RESULTATS ET INTERPRETATION DES MESURES DE PHOTOLUMINESCENCE DE 4 K A 50 K.....	142
2.1	INTERPRETATION DES SPECTRES DE PHOTOLUMINESCENCE DU CdTe ET DU CdZnTe DE 4 K A 50 K	142
2.1.1	<i>Étude du bord de bande de 4 K à 50 K.....</i>	<i>143</i>
2.1.1.1	Échantillon de CdTe.....	144

2.1.1.2	Échantillons de CdZnTe A et B.....	145
2.1.1.3	Comparaison du CdTe et du CdZnTe.....	147
2.1.2	Étude de la région DAP des spectres des échantillons de CdTe et de CdZnTe de 4 K à 50 K.....	149
2.1.3	Étude de la bande de défauts profonds dans les échantillons de CdTe et CdZnTe.....	151
2.2	RESUME DES MESURES DE PL DE 4K A 50 K.....	152
3	RESULTATS DES MESURES DE PROPRIETES OPTIQUES DU CDTE ET DU CDZNTA A 80 K ET A 100 K.....	153
3.1	INTERPRETATION DES SPECTRES DE LUMINESCENCE A 80 K ET 100 K.....	154
3.1.1	Spectres de cathodoluminescence du CdTe à 80 K et 100 K.....	154
3.1.2	Spectres de cathodoluminescence du CdZnTe à 80 K et 100 K.....	155
3.1.3	Résumé des mesures de CL effectuées à 80 K et 100 K dans le CdTe et le CdZnTe.....	156
3.2	RESULTATS DES MESURES D'ELLIPSOMETRIE SUR LE CDTE ET LE CDZNTA A 80 K ET 100 K.....	157
3.2.1	Résultats des mesures des fonctions optiques du CdTe à 80 K et 100 K.....	157
3.2.2	Résultats des mesures des fonctions optiques du CdZnTe à 80 K et 100 K.....	160
3.3	RECAPITULATIFS DES MESURES DE PROPRIETES OPTIQUES DU CDTE ET DU CDZNTA A 80 K ET 100 K.....	162
4	VERS UNE MESURE DE LA LONGUEUR DE DIFFUSION DANS LE CDZNTA.....	164
4.1	PRINCIPE DE MESURE DE LA LONGUEUR DE DIFFUSION DES PORTEURS.....	164
4.2	RESULTATS PRELIMINAIRES DE LA MESURE DE LONGUEUR DE DIFFUSION DES PORTEURS DANS LE CDZNTA.....	165
5	APPLICATION DU MODELE A PARTIR DES MESURES DE PROPRIETES MATERIAUX.....	166
5.1	RAPPELS DE LA DEMARCHE GENERALE.....	166
5.1.1	Propriétés matériaux du CdZnTe à 80 K.....	167
5.1.2	Propriétés matériaux du HgCdTe à 80 K.....	169
5.2	APPLICATION DU MODELE.....	169
5.2.1	Comparaison de la contribution photonique et de diffusion.....	169
5.2.2	Image simulée : en considérant un proton de 63 MeV incident sur un détecteur ayant 800 µm d'épaisseur de substrat.....	170
6	CONCLUSIONS DU CHAPITRE.....	172
	RÉFÉRENCES.....	174

Nous l'avons vu dans le chapitre précédent, les propriétés optiques et électriques du substrat de CdZnTe sont des paramètres clés du modèle. En effet, ces grandeurs apparaissent directement dans les équations du modèle. Elles sont listées ci-dessous :

- Longueur de diffusion (propriété électrique)
- Coefficient d'absorption (propriété optique)
- Indice optique (propriété optique)
- Énergies des photons émis par recombinaison radiative, spectre de luminescence (propriété optique)

Cependant, à la température de fonctionnement des détecteurs (soit 80 K et 100 K dans notre cas), pour la composition en zinc qui nous intéresse (~4 %) ces données sont absentes de la littérature. Ainsi, pour pallier cette problématique, j'ai effectué des mesures de propriétés matériaux sur des échantillons de substrat de CdZnTe. Ces échantillons ont été fabriqués au CEA-LETI, ainsi ils sont représentatifs des substrats utilisés dans la fabrication des détecteurs IR. Plusieurs mesures ont été effectuées afin d'extraire les propriétés optiques : des mesures de photoluminescence (PL), de cathodoluminescence (CL) et d'ellipsométrie.

La connaissance de l'énergie des photons émis par recombinaison radiative dans le substrat de CdZnTe est une information capitale dans l'estimation de la pollution des images acquises par les détecteurs IR de technologie HgCdTe sous irradiation de proton. La problématique associée est présentée sur la Figure 49. La couche photosensible de HgCdTe (en rouge sur la figure) détecte les photons dont l'énergie est supérieure à l'énergie de gap notée E_g^{HgCdTe} ^a. Si l'énergie du photon émis par recombinaison radiative dans le substrat de CdZnTe est proche de l'énergie de gap du CdZnTe, le photon sera rapidement absorbé par le matériau CdZnTe et la pollution sera moins importante (cas 1). En revanche, si l'énergie du photon est plus faible que le gap du CdZnTe (dans ce cas la transition implique des pièges présents dans la bande interdite) le photon sera très peu absorbé par le CdZnTe et sera une source plus importante de pollution (cas 2). Par conséquent, il est essentiel de bien connaître les propriétés optiques du matériaux semi-conducteur CdZnTe utilisé comme substrat dans la fabrication des détecteurs de technologie HgCdTe à la température de fonctionnement des détecteurs étudiés dans cette thèse. Deux températures nous concernent 100 K et 80 K. La première correspond à la température de fonctionnement des détecteurs ALFA, et la seconde correspond à la température d'opération des détecteurs irradiés durant cette thèse.

^a Pour rappel, $E_g^{HgCdTe}(80 K) = 0.59 eV$, et $E_g^{CdZnTe}(80 K) = 1.608 eV$ (voir chapitre 1).

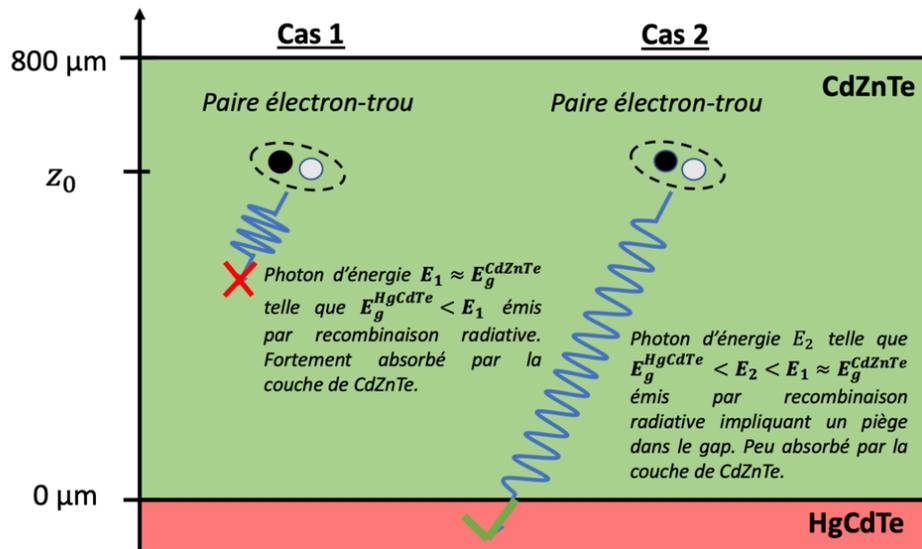


Figure 49 - Illustration de la problématique associée à l'énergie des photons émis par recombinaison radiative dans le substrat de CdZnTe.

Dans ce chapitre, je présente d'abord le principe des mesures de luminescence et d'ellipsométrie. Ensuite, les spectres issus des mesures de photoluminescence sont présentés de manière plus approfondie sur une gamme de température plus large allant de 4 K à 50 K. Cette étude des spectres de luminescence sur une plage de température inférieure à 80 K a pour objectif de déterminer la nature des transitions radiatives observées à 80 K et 100 K. L'interprétation des mesures de CL et des indices optiques effectuées à 300 K est présentée en annexe F. Ces mesures à 300 K permettent de comparer mes résultats obtenus aux données de la littérature. Puis dans la section suivante, les résultats des mesures à 80 K et 100 K sont présentés. Ensuite, je présenterai une première mesure de longueur de diffusion dans le CdZnTe qui s'appuie sur la collection des photons de luminescence. Enfin, j'appliquerai le modèle en utilisant les propriétés matériaux mesurées dans ce chapitre afin de simuler une image sous irradiation de protons de 63 MeV d'un détecteur de technologie HgCdTe ayant 800 μm d'épaisseur de substrat.

Dans ce chapitre, les photons sont caractérisés par leur énergie. Pour rappel, le lien entre l'énergie d'un photon, E , et sa longueur d'onde, λ , est donné par l'Eq (0-1).

$$E(\text{eV}) \approx \frac{1.24}{\lambda(\mu\text{m})} \quad (0-1)$$

1 Principes des mesures de luminescence et d'ellipsométrie

Dans cette section, je présente le principe des expériences de luminescence et d'ellipsométrie. De plus, les bancs de mesure utilisés sont décrits. Enfin, les échantillons de CdZnTe et de CdTe sur lesquels j'ai effectués les mesures sont présentés.

1.1 Caractérisation optique des échantillons : mesure de luminescence

Après avoir présenté le principe des caractérisations de luminescence, je décrirai les différents processus de recombinaison radiatifs dans un semi-conducteur.

1.1.1 Principe des caractérisations de luminescence

Les mesures de luminescence sont des moyens de caractérisation non destructifs de matériaux. Ces méthodes consistent à exciter des paires électron-trou (abrégé dans la suite par e-h) avec une source externe d'énergie. Dans une expérience de **photoluminescence**, les paires e-h sont créées avec des photons monochromatiques, dont l'énergie est supérieure à l'énergie de gap. Un schéma simplifié du principe de photoluminescence est illustré sur la Figure 50. Tandis que dans une expérience de **cathodoluminescence**, les paires e-h sont générées par l'interaction d'électrons énergétiques avec le matériau. Dans les deux cas, on obtient un semi-conducteur hors équilibre avec des paires e-h excitées. Puis ces porteurs se thermalisent, en émettant des phonons avant de se recombiner. Par conséquent, les processus de luminescence impliquent trois étapes distinctes [1] :

- *Excitation* : les paires e-h doivent être excitées par une source d'énergie extérieure
- *Thermalisation* : les paires e-h se relaxent en émettant des phonons
- *Recombinaison* : les paires e-h se recombinent de manière radiative

Plusieurs transitions radiatives sont possibles dans un semi-conducteur. Les défauts cristallins ou la présence d'impuretés (intrinsèques ou dopage) conduisent à la création de niveaux d'énergie dans la bande interdite d'un semi-conducteur. A très basse température (4 K), ces niveaux sont des centres recombinants favorables. Lorsque la température augmente, les états donneurs ou accepteurs dans le gap deviennent ionisés, les porteurs localisés sur ces impuretés rejoignent les bandes de conduction dans le cas des atomes donneurs et la bande de valence dans le cas des accepteurs grâce à l'agitation thermique. Ces états sont alors moins propices aux recombinaisons radiatives. Dans une expérience de luminescence, il s'agit de collecter les photons émis par désexcitation radiative des paires e-h. L'analyse de l'énergie de ces photons permet d'obtenir des informations sur la nature des défauts présents dans le matériau semi-conducteur. Dans la mesure où les processus de luminescence impliquent des porteurs thermalisés, l'énergie des photons émis est indépendante du type d'excitation [1]. **Ainsi, on peut supposer que les photons de luminescence émis sous irradiation de protons ont la même énergie que les photons de photoluminescence ou cathodoluminescence.**

Il existe plusieurs types de recombinaisons radiatives : les recombinaisons bande à bande, les recombinaisons excitoniques, les recombinaisons de paires et les répliques phonons. Ces transitions ont été observées dans le CdTe et le CdZnTe. Ces différents processus sont revus dans la sous-section suivante.

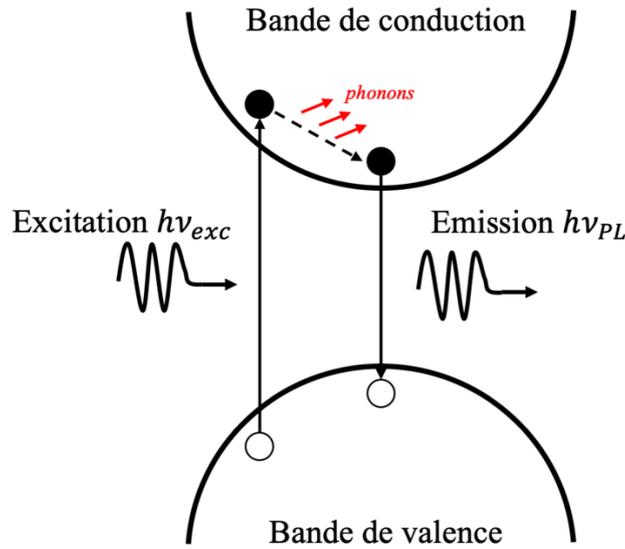


Figure 50 - Schéma simplifié du principe de photoluminescence dans un semi-conducteur idéal (sans défaut).

1.1.2 Recombinaisons radiatives dans un semi-conducteur

1.1.2.1 Recombinaisons bande à bande

Dans un semi-conducteur idéal, les porteurs thermalisés vont s'accumuler au niveau des extrema de la BV pour les trous et de la BC pour les électrons. Puis ces paires e-h vont se recombiner de manière radiative (en émettant un photon) ou non radiative. Les probabilités de transitions sont décrites par la physique quantique. De manière générale, les processus de recombinaisons radiatifs sont plus favorables dans les semi-conducteurs à gap direct (tel que le CdZnTe et le HgCdTe). On parle de **recombinaisons bande à bande** lorsque celles-ci impliquent des électrons et des trous libres dans la BC et dans la BV respectivement [1].

La forme du signal de luminescence, dominé par les recombinaisons bande à bande, peut être décrite par l'équation (1-1) dans le cas d'un semi-conducteur avec des bandes paraboliques [2]. Dans cette équation, $I_{PL}^b(\hbar\omega)$ est l'intensité du signal de luminescence, $\hbar\omega$ est l'énergie des photons, E_g est l'énergie de gap du semi-conducteur, k_B est la constante de Boltzmann, A est un coefficient de proportionnalité et T_e est la température effective du matériau. Lorsque les concentrations de porteurs excités deviennent importantes l'interaction électron-électron et trou-trou est plus importante que l'interaction porteur-phonon de sorte que la température des porteurs est plus élevée que la température du cristal [1].

$$I_{PL}^b(\hbar\omega) = \begin{cases} A(\hbar\omega)^2(\hbar\omega - E_g)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\hbar\omega - E_g}{k_B T_e}\right) & \text{si } \hbar\omega > E_t \\ 0 & \text{si } \hbar\omega < E_t \end{cases} \quad (1-1)$$

Par ailleurs, selon l'équation (1-1), le signal de PL doit être nul en dessous de E_t . Cette énergie est égale, dans un cas idéal, à l'énergie de gap. Cependant, dans les expériences de luminescence, des

photons sont toujours émis en dessous de l'énergie de gap. Cette émission est associée à la présence d'états proches du bord de bande induits par des fluctuations dans la stœchiométrie de l'alliage ou par la présence de défauts [2]^a. L'expression de l'intensité correspondant à l'émission de ces photons de luminescence est donnée par l'équation (1-2), où N_e est un paramètre proportionnel à la densité d'états dans le gap. Le paramètre E_0 décrit la répartition des états dans le gap [2].

$$I_{PL}^e(\hbar\omega) = \begin{cases} 0 & \text{si } \hbar\omega > E_t \\ \frac{N_e}{E_0} \exp\left(\frac{\hbar\omega - E_g}{E_0}\right) & \text{si } \hbar\omega < E_t \end{cases} \quad (1-2)$$

Finalement, l'intensité de luminescence émise par un semi-conducteur, dominé par des recombinaisons de type bande à bande est la somme de deux contributions et s'exprime à partir de l'équation (1-1) et de l'équation (1-2), afin d'obtenir l'équation (1-3).

$$I_{PL}(\hbar\omega) = I_{PL}^b(\hbar\omega) + I_{PL}^e(\hbar\omega) \quad (1-3)$$

Un exemple de spectre de luminescence que nous avons mesuré sur un échantillon de CdTe à 300 K superposé à un fit de l'équation (1-3) est présenté sur la Figure 51. Les paramètres A , E_g , T_e , N_e , E_t et E_0 sont les paramètres du fit.

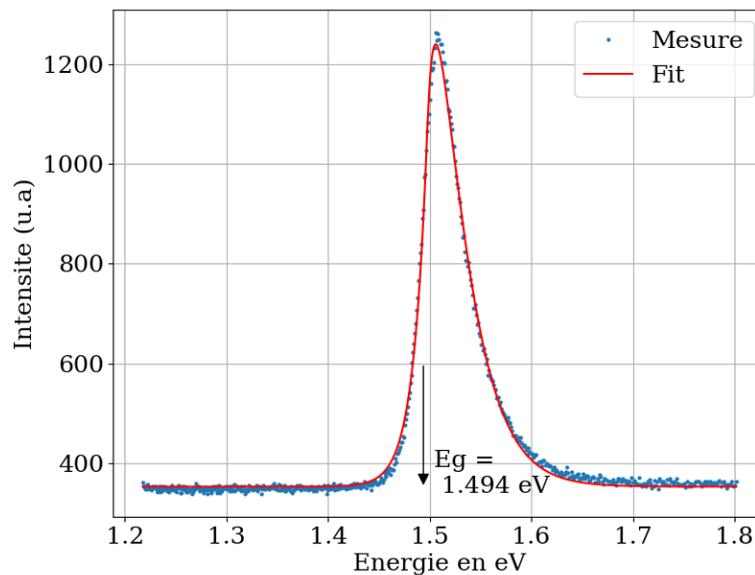


Figure 51 - Spectre de luminescence d'un échantillon de CdTe à 300 K ajusté avec l'équation (1-3).

1.1.2.2 Recombinaisons de type bande niveau

A température ambiante, les impuretés sont ionisées dans le matériau. Le spectre de luminescence est dominé par des transitions de type bande à bande. A plus basse température en revanche, certains

^a Ces états dans la bande interdite des semi-conducteurs sont à l'origine de la queue d'Urbach observée dans la région du bord de bande dans les spectres d'absorption optique.

porteurs se trouvent piégés par les impuretés. Ainsi des transitions radiatives impliquant des niveaux dans le gap et des porteurs libres peuvent exister. Les transitions notées eA° , impliquent un électron libre dans la BC et un trou d'un accepteur neutre. Les transitions de type $D^\circ h$ mettent en jeu un trou dans la BV et un électron piégé sur un donneur. On parle alors de **transition bande-niveau** (voir Figure 53). L'énergie des photons émis par une recombinaison de type eA° est donnée par l'équation (1-4) [1].

$$E_{eA^\circ} = E_g - E_A \quad (1-4)$$

Dans cette équation E_A est l'énergie d'ionisation de l'accepteur impliqué dans la transition. Elle correspond à l'énergie qu'il faut fournir pour faire passer un électron de la BV au niveau accepteur. Pour une recombinaison $D^\circ h$ l'énergie du photon est donnée par l'équation (1-5), dans laquelle E_D est l'énergie d'ionisation du donneur [1].

$$E_{D^\circ h} = E_g - E_D \quad (1-5)$$

1.1.2.3 Recombinaisons de paires

De manière générale, dans un semi-conducteur, on trouve à la fois des états donneurs et des états accepteurs. Sous excitation, des électrons sont créés dans la BC et des trous dans la BV. Ces porteurs peuvent ensuite être piégés sur des donneurs et des accepteurs ionisés, notés respectivement D^+ et A^- . Ces états deviennent neutres. Puis lors du retour à l'équilibre, un électron piégé sur un donneur neutre peut se recombiner avec un trou piégé sur un accepteur neutre (voir Figure 53). On parle de **transitions de paires donneur-accepteur**, noté DAP (pour *donor-acceptor pair*). L'énergie des photons, E_{DAP} , émis par ces transitions radiatives est donnée par l'équation (1-6) [1], où e est la charge élémentaire, R est la distance entre l'atome donneur et l'atome accepteur impliqués dans la transition, et ϵ est la constante diélectrique du matériau.

$$E_{DAP} = E_g - E_A - E_D + \frac{e^2}{\epsilon R} \quad (1-6)$$

Le dernier terme représente l'énergie d'interaction coulombienne entre les états de la DAP. Dans la mesure où la concentration de défauts est faible ($R \gg 1$), ce dernier terme pourra être négligé.

1.1.2.4 Annihilations excitoniques

Les excitons libres

A basse température, dans les cristaux de bonne qualité cristalline, on s'attend à ce que les électrons et les trous excités dans la BC et dans la BV respectivement s'attirent pour former **des excitons**. Les excitons sont des quasi-particules formées par un électron libre dans la bande de conduction lié par attraction coulombienne à un trou libre dans la bande de valence. L'électron chargé négativement est attiré par le trou chargé positivement. On distingue deux types d'excitons, les excitons de Frenkel et

les excitons de Wannier-Mott [1]. Dans le cas des excitons de Frenkel, le couplage entre le trou et l'électron est fort. Tandis que dans le cas des excitons de Wannier-Mott, les électrons de valence écrantent l'interaction entre le trou et l'électron, réduisant la force d'attraction entre les électrons et les trous. Ceux-ci sont les plus communs dans les semi-conducteurs. Dans la suite, nous rencontrerons uniquement ce type d'exciton. Lorsqu'un matériau est excité par un rayonnement ionisant, on peut alors observer des photons émis par annihilation de ces excitons. Nous verrons dans la suite que ces émissions sont notamment visibles à 4 K dans nos échantillons de CdTe et de CdZnTe.

Cette quasi-particule présente une structure similaire au modèle standard de l'atome d'hydrogène. Une charge négative légère orbite autour d'une charge positive plus lourde. Ainsi, de manière analogue à l'atome d'hydrogène, on associe une constante de Rydberg à l'électron, notée R^* . En utilisant le modèle hydrogénoïde on peut déterminer la valeur de cette énergie de liaison. Celle-ci est exprimée par l'équation (1-7) [1].

$$R^* = \frac{m_X e^4}{8h^2 \epsilon_0^2 \epsilon_r^2} \quad (1-7)$$

Où e est la charge de l'électron, h est la constante de Planck, ϵ_0 est la permittivité du vide, ϵ_r est la constante diélectrique du matériau, et m_X est la masse réduite de la masse effective de l'électron et du trou, notées m_e^* et m_h^* respectivement dans l'équation (1-8).

$$m_X = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \quad (1-8)$$

De manière similaire, à l'atome d'hydrogène l'exciton peut être dans différents états d'énergies, caractérisés par le nombre quantique n , de sorte que l'énergie de liaison de l'exciton $(E_x)_n$ est donnée par la formule (1-9).

$$(E_x)_n = E_g - \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - \frac{R^*}{n^2} \quad (1-9)$$

Dans cette équation, $M = m_e^* + m_h^*$ est la masse de l'exciton, $\vec{K} = \vec{k}_e + \vec{k}_h$ est son vecteur d'onde, et \hbar est la constante de Planck réduite. \vec{k}_e est le vecteur d'onde des électrons, et \vec{k}_h est le vecteur d'onde des trous. Les états d'énergie d'un exciton de type Wannier-Mott sont représentés sur la Figure 52.

Dans l'équation (1-9), lorsque $n = 1$, on dit que l'exciton est dans l'état fondamental. On observe que lorsque n augmente, l'énergie des états de l'exciton augmente, et tend vers l'énergie de gap lorsque $n \rightarrow \infty$.

De manière concrète, lorsqu'un exciton s'annihile il émet un photon dont l'énergie est donnée par l'équation (1-10). Ces processus de recombinaisons radiatives seront notés FX dans la suite.

$$\hbar\omega = (E_x)_n \quad (1-10)$$

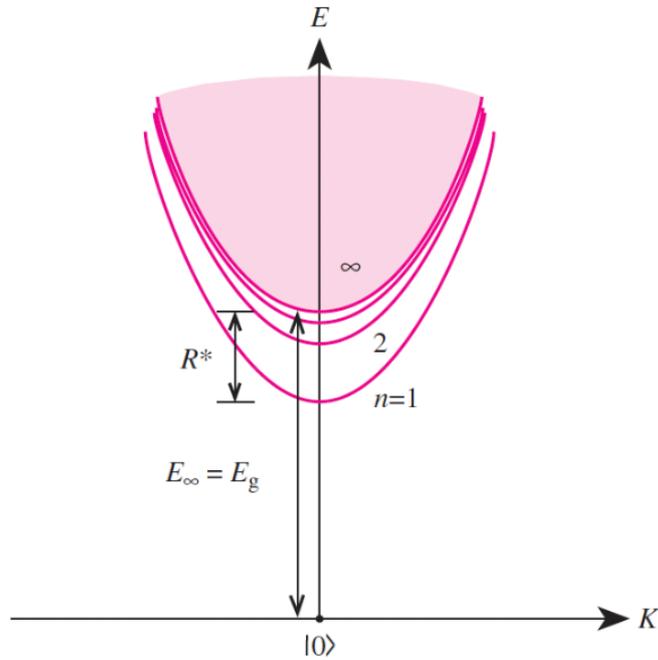


Figure 52 - Évolution des états d'énergies d'un exciton de type Wannier Mott en fonction du vecteur d'onde K . Issu de [1]. E_∞ correspond à l'énergie de l'exciton lorsque $n \rightarrow \infty$.

Dans le cas du CdTe, plusieurs valeurs pour l'énergie de liaison de l'exciton ont été reportées dans la littérature. Celles-ci sont présentées dans le Tableau 9. On constate que toutes les valeurs sont proches de 10.6 meV. Dans la suite, je supposerai que l'énergie de liaison du CdTe, notée E_x^{CdTe} , est égale à 10.6 meV. Dans le $Cd_{1-y}Zn_yTe$, l'énergie de liaison de l'exciton dépend de la concentration en Zinc, notée y dans l'alliage. Cependant, la quantité de zinc attendue dans l'alliage étant faible, je supposerai que l'énergie de liaison de l'exciton dans l'alliage ternaire de CdZnTe est égale à celle du CdTe, E_x^{CdTe} . La valeur de l'énergie de liaison de l'exciton dans le ZnTe est proche de 13 meV (des énergies de 12.8 meV [3] et 12.7 meV [4] ont été reportées pour le ZnTe). Les énergies de liaison de l'exciton dans le CdTe et le ZnTe sont proches. Ainsi, approximé l'énergie de liaison du $Cd_{1-y}Zn_yTe$, avec un faible taux de zinc, avec celle du CdTe est une hypothèse acceptable.

Tableau 9 - Valeurs de l'énergie de liaison du CdTe reportées dans la littérature

Énergie de liaison de l'exciton	Référence bibliographique
10.6 meV	[5]
10.5 meV	[6]
10 meV	[7], [8]
10.6 meV	Calculé à partir de l'équation (1-7)

Les excitons liés

Jusqu'à présent, nous avons considéré des excitons libres. Cependant, lorsqu'un cristal contient des atomes de type donneurs ou accepteurs, l'exciton peut être attiré par ces impuretés par des forces de Van der Waals [1]. Cette attraction est efficace et offre un état favorable énergétiquement à l'exciton.

Ainsi, à basse température, des excitons liés se forment dans les semi-conducteurs. On notera A^{\times}

lorsque l'exciton est lié à un accepteur neutre et D°X lorsqu'il est lié à un exciton lié (voir Figure 53). L'énergie des photons associés à ces processus radiatifs est donnée par l'équation (1-11).

$$E = E_g - E_x - E_{loc} \quad (1-11)$$

Où E_x est l'énergie de liaison de l'exciton et E_{loc} est l'énergie de localisation de l'exciton sur l'impureté, elle correspond à l'énergie perdue par un exciton libre lorsque celui-ci est lié à une impureté.

1.1.2.5 Répliques phonons

Toutes les transitions radiatives présentées dans les sous-sections précédentes peuvent s'accompagner de l'émission d'un ou plusieurs phonons^a. Si k phonons sont émis lors d'un processus radiatif, l'énergie du photon est réduite de k fois l'énergie d'un phonon [1]. Dans le CdZnTe, c'est le couplage avec le phonon optique longitudinal qui est principalement observé [9]. On notera alors *transition d'origine-kLO*. Par exemple, dans le cas d'une réplique phonon émise lors d'une transition DAP, on notera DAP-1LO pour la première réplique phonon, et DAP-2LO pour la deuxième. L'observation de ces répliques phonons traduit une bonne qualité cristalline. Par ailleurs, selon l'intensité du couplage entre les éléments impliqués dans la transition et les phonons la probabilité d'émission de phonons varie. Dans le CdTe, l'énergie d'un phonon optique est égale à 21.3 meV [2], [10]–[12]. Dans la suite, dans la mesure où la valeur de l'énergie d'un photon optique dans le CdZnTe est absente de la littérature, je l'approximerai à celle du CdTe^b.

1.1.2.6 Résumé des différents processus de recombinaison

L'ensemble des transitions susmentionnées a été observé dans les échantillons de CdTe et de CdZnTe étudiés dans cette thèse. Cette étude était motivée par la recherche de défauts profonds dans le gap du CdZnTe, qui pourraient être le siège de processus radiatifs. Ces photons dont l'énergie serait inférieure au gap du matériau CdZnTe seraient susceptibles de se propager sur de grandes distances dans le substrat (voir Figure 49). Les transitions radiatives présentées dans la section suivante sont résumées sur la Figure 53. Dans la suite, les bancs de PL et CL sont présentés.

^a Les phonons sont des oscillations collectives des atomes du cristal. Plusieurs modes de vibrations peuvent être observés.

^b L'énergie d'un phonon optique dans le ZnTe est égale à 26 meV [4].

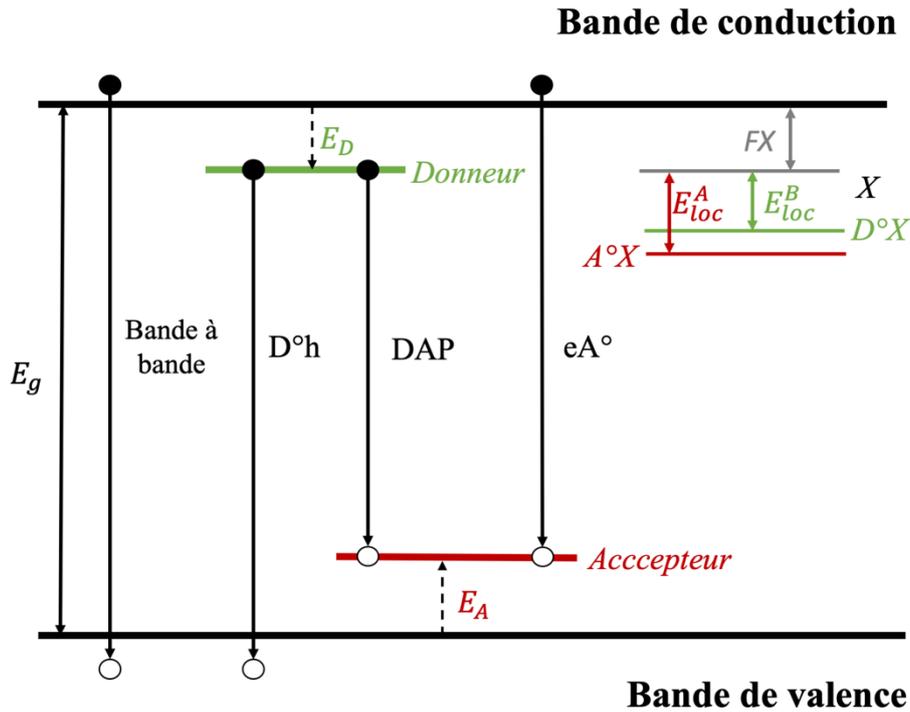


Figure 53 - Résumé des processus de processus radiatifs dans un semi-conducteur.

1.1.3 Description des bancs de luminescence

Pour étudier les différents processus de recombinaison susmentionnés, il faut observer la désexcitation radiative des porteurs (termes désignant les trous et les électrons) dans le semi-conducteur. Par conséquent, les bancs expérimentaux de mesure de luminescence sont constitués de deux parties : un dispositif d'excitation et un dispositif de collecte et d'analyse du signal de luminescence. Dans une expérience de photoluminescence, les électrons et les trous sont excités avec des photons dont l'énergie est supérieure au gap du matériau. En cathodoluminescence, ce sont des électrons qui sont utilisés pour exciter les porteurs dans le semi-conducteur.

1.1.3.1 Banc de photoluminescence

Les mesures de photoluminescence (PL) ont été effectuées dans le cadre d'une collaboration avec le laboratoire du GEMaC (Groupe d'Étude la Matière Condensée). C'est un laboratoire de recherche mixte entre le Centre National de Recherche Scientifique (CNRS) et l'Université Versailles Saint-Quentin. Le banc de PL utilisé a été développé par le chercheur Alain Lusson avec qui j'ai collaboré pour réaliser ces mesures. Il est présenté dans le paragraphe suivant. Un schéma est exposé sur la Figure 54.

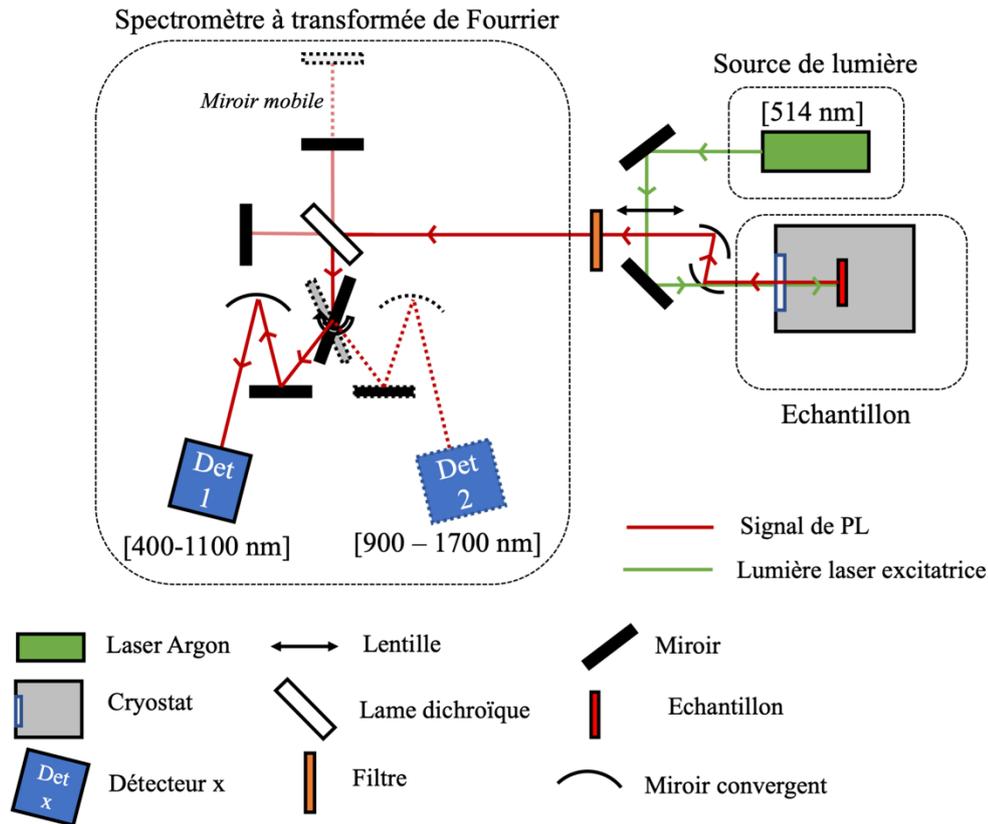


Figure 54 - Schéma du banc de PL au GEMaC utilisé pour effectuer les mesures de PL sur les échantillons de CdTe et CdZnTe de 4 K à 50 K.

Les échantillons sont installés dans un cryostat, ils sont fixés à un doigt froid et une résistance, attachée au support, permet de contrôler leur température. Ainsi, la température des échantillons peut varier de 4 K à 300 K. Le signal de PL émis par l'échantillon mesuré passe à travers la fenêtre en verre du cryostat puis est focalisé à l'entrée du spectromètre. Un laser vert Argon, émettant à 514 nm, est utilisé pour exciter les porteurs dans l'échantillon. La puissance du laser a été mesurée avec un puissance-mètre, elle est de 10 mW. Des mesures régulières de la puissance du laser ont montré que celle-ci restait stable pendant les mesures. Le faisceau laser est focalisé avec une lentille sur l'échantillon. Les émissions harmoniques du laser sont supprimées avec un filtre en orange sur la figure. Des miroirs convergents sont utilisés afin de collecter et focaliser le signal de PL à l'entrée du spectromètre. Le spectromètre est un Spectromètre à Transformée de Fourier (FTIR, *Fourier Transform Infrared*) de type Michelson. Celui-ci est composé de deux miroirs orthogonaux, d'une lame séparatrice et d'un miroir mobile qui permet de choisir entre un détecteur en silicium et un détecteur germanium. Le premier est un détecteur CCD en silicium sensible aux photons émis dans le visible et dans le proche infrarouge, soit $400 \text{ nm} < \lambda < 1100 \text{ nm}$. Le second détecteur est un photoconducteur en germanium, refroidi à l'azote liquide, détectant les photons ayant une longueur d'onde comprise entre 900 nm et 1700 nm. L'énergie des photons les plus énergétiques est étudiée avec le détecteur CCD^a. Les photons les moins énergétiques, associés à la présence de défauts profonds dans la bande d'énergie interdite, sont analysés avec le détecteur germanium. L'étude de ces défauts profonds dans

^a Pour rappel on a vu dans le chapitre 1, que l'énergie du gap du CdZnTe avec 4 % de zinc à 100 K était de 771 nm.

les échantillons est réalisée en détection synchrone : l'excitation laser est modulée avec un hacheur optique^a. Finalement, le spectre de PL est obtenu à partir de la transformée inverse de l'interférogramme de PL. La résolution en énergie d'un spectre de PL est de 0.2 meV.

Un spectre de PL typique mesuré à 4 K sur une échantillon de CdTe est présenté sur la Figure 55. On observe sur ce spectre différentes raies d'émission correspondant à différents processus radiatifs. Ce spectre sera étudié en détail dans la section 2.1.

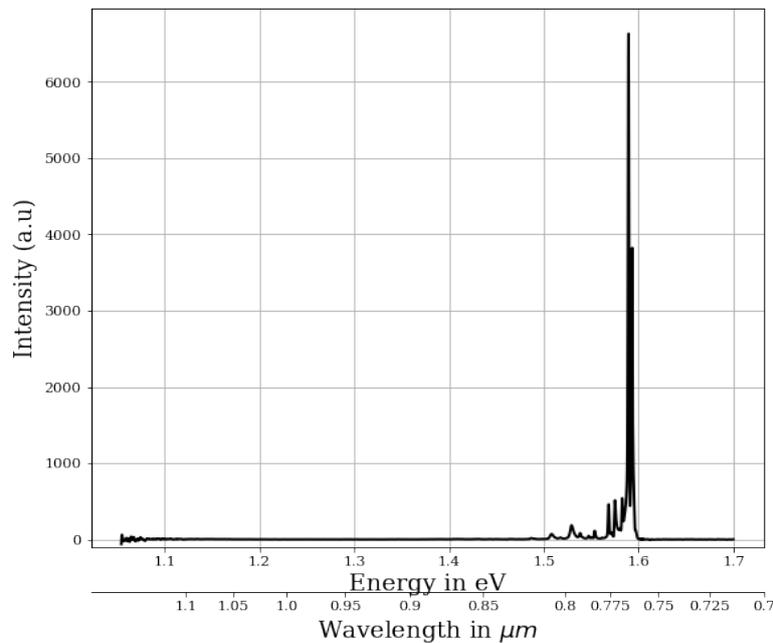


Figure 55 – Exemple de spectre de photoluminescence de CdTe à mesuré 4 K en échelle linéaire.

1.1.3.2 Banc de cathodoluminescence

Le banc de cathodoluminescence est un équipement de la compagnie Attolight. Il est constitué d'un microscope électronique à balayage et d'un spectromètre. Le microscope électronique est composé de lentilles électroniques et d'une ouverture variable afin de contrôler le courant circulant dans la sonde électronique. Les photons sont collectés grâce à un microscope optique monté le long de l'axe du microscope électronique. Les photons de luminescence induit par l'irradiation avec les électrons sont ensuite envoyés dans un spectromètre. Puis les photons sont détectés avec une caméra CCD. Un schéma du dispositif est présenté sur la Figure 56.

Les échantillons ont été clivés afin d'obtenir des morceaux de moins de 5 mm de côté. Ces morceaux ont ensuite été collés sur un porte échantillon avec de la laque d'argent. La température des échantillons est contrôlée et peut varier de 4 K à 300 K.

^a On fait alors l'hypothèse que les processus physiques mis en jeu sont linéaires.

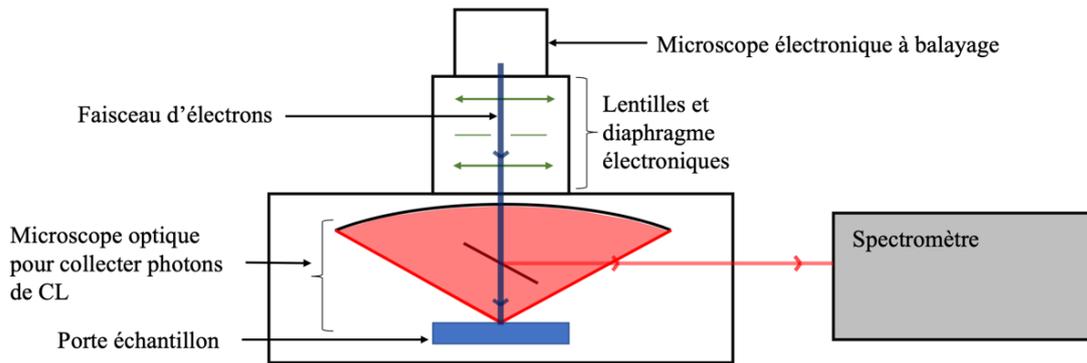


Figure 56 - Schéma du banc de CL.

1.2 Caractérisation par ellipsométrie de surface

Dans le modèle développé dans cette thèse, outre la connaissance de l'énergie des photons émis par désexcitation des porteurs dans le substrat, il est essentiel de connaître le comportement des photons dans le matériau. Celui-ci est décrit par les propriétés optiques qu'il est possible de mesurer grâce à des mesures d'ellipsométrie.

1.2.1 Objectif et principe de mesure de l'ellipsométrie de surface

La réponse linéaire d'un matériau soumis à un champ électromagnétique est décrite par le tenseur diélectrique. Celui-ci se réduit à une fonction scalaire complexe de la longueur d'onde dans un matériau isotrope, on parle alors de **fonction diélectrique**, notée $\epsilon(E)$. Dans la suite, on notera $\epsilon_1(E)$ et $\epsilon_2(E)$ les parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique, de sorte que l'on notera $\epsilon(E)$ sous la forme de l'équation (1-12).

$$\epsilon(E) = \epsilon_1(E) + i\epsilon_2(E) \quad (1-12)$$

Les propriétés macroscopiques d'un matériau semi-conducteur isotrope^a peuvent se définir à partir de l'**indice de réfraction complexe**, noté \tilde{n} . La partie réelle, notée n , est appelée **indice de réfraction** tandis que la partie imaginaire notée k est appelée **coefficient d'extinction**. Ce dernier est relié au **coefficient d'absorption** α par la formule donnée par l'équation (1-13).

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda_0} \quad (1-13)$$

Où λ_0 est la longueur d'onde des photons dans le vide. L'indice de réfraction complexe est relié à la fonction diélectrique par l'équation (1-14). De sorte que l'indice de réfraction et le coefficient

^a Dans la mesure, où le matériau n'est pas isotrope, l'indice de réfraction s'exprime sous forme de tenseur.

d'extinction s'expriment en fonction des parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique (voir équation (1-15) et équation (1-16)).

$$\epsilon(E) = \tilde{n}(E)^2 \quad (1-14)$$

$$n(E) = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_1(E)^2 + \epsilon_2(E)^2} + \epsilon_1(E)}{2}} \quad (1-15)$$

$$k(E) = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_1(E)^2 + \epsilon_2(E)^2} - \epsilon_1(E)}{2}} \quad (1-16)$$

Il existe plusieurs méthodes qui permettent de déterminer les fonctions optiques d'un matériau, **l'ellipsométrie de surface spectroscopique** en est une^a.

Cette méthode permet de déterminer la fonction diélectrique des matériaux par réflexion. L'échantillon est éclairé avec une onde incidente polarisée. On mesure ensuite les coefficients de réflectance, R_s et R_p , des composantes perpendiculaire et parallèle^b de l'onde électromagnétique respectivement. Ces coefficients de réflectance sont directement reliés à l'indice de réfraction complexe de l'échantillon par les formules de Fresnel exprimées par l'équation (1-17) et l'équation (1-18), où N_0 est l'indice optique de l'environnement, N_1 est l'indice optique de l'échantillon et ϕ_0 est l'angle d'incidence de l'onde incidente.

$$r_p = \frac{N_1 \cos(\phi_0) - N_0 \cos(\phi_1)}{N_1 \cos(\phi_0) + N_0 \cos(\phi_1)} = \frac{N_1 \cos(\phi_0) - N_0 \sqrt{1 - \left(\frac{N_0 \sin(\phi_0)}{N_1}\right)^2}}{N_1 \cos(\phi_0) + N_0 \sqrt{1 - \left(\frac{N_0 \sin(\phi_0)}{N_1}\right)^2}} \quad (1-17)$$

$$r_s = \frac{N_0 \cos(\phi_0) - N_1 \cos(\phi_1)}{N_0 \cos(\phi_0) + N_1 \cos(\phi_1)} = \frac{N_0 \cos(\phi_0) - N_1 \sqrt{1 - \left(\frac{N_0 \sin(\phi_0)}{N_1}\right)^2}}{N_0 \cos(\phi_0) + N_1 \sqrt{1 - \left(\frac{N_0 \sin(\phi_0)}{N_1}\right)^2}} \quad (1-18)$$

En pratique, une mesure d'ellipsométrie détermine le rapport complexe entre le coefficient de réflexion r_s et r_p , noté ρ . Celui-ci est exprimé par l'équation (1-19).

^a Lorsque l'énergie des photons est inférieure au gap, k est très proche de zéro (voire nulle), ainsi il est plus pertinent de mesurer n , en mesurant par exemple des franges d'interférences. Au-dessus du gap en revanche, des mesures de transmission permettent de déterminer précisément la valeur du coefficient d'absorption [1].

^b L'indice « s » vient de *senkrecht* qui signifie perpendiculaire en allemand. L'indice « p » vient de *parallel*.

$$\rho = \frac{r_p}{r_s} = \tan(\psi) e^{i\Delta} \quad (1-19)$$

Ainsi, $\tan(\psi)$ est le rapport des amplitudes après réflexion tandis que Δ correspond au déphasage induit par la réflexion de l'onde sur l'échantillon. A partir de ces deux grandeurs, il est alors possible de déterminer les propriétés optiques d'un matériau. Un schéma illustrant le principe de fonctionnement d'un ellipsomètre est présenté sur la Figure 57.

1.2.2 Description du banc de test d'ellipsométrie et préparation des échantillons

Afin d'effectuer les mesures des fonctions optiques du CdTe et du CdZnTe, un ellipsomètre ^a a été remis en état de fonctionnement. Ce travail a été effectué sur la plateforme de caractérisation du CEA Grenoble en collaboration avec le chercheur Giacomo Badano. Il s'agit d'un ellipsomètre de type Woolam. Les échantillons sont installés dans un cryostat qui est équipé de deux fenêtres l'une traversée par l'onde incidente et l'autre par l'onde réfléchie. La température des échantillons est contrôlée avec un contrôleur Lakeshore et peut être ajustée entre 77 K et 500 K. Les échantillons sont refroidis à l'azote liquide. L'onde est incidente avec un angle de 70° sur l'échantillon. Une photo de l'échantillon sur le doigt froid ainsi qu'une photo de l'ellipsomètre sont présentées sur la Figure 58.

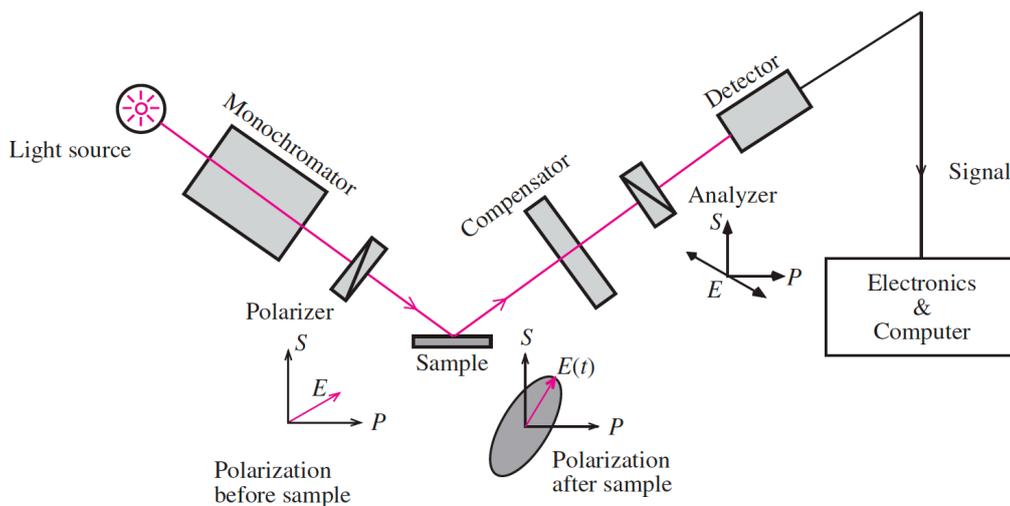


Figure 57 - Schéma illustrant le principe de fonctionnement d'un ellipsomètre. Issu de [1].

Comme expliqué précédemment, la mesure des propriétés optiques grâce à l'ellipsométrie repose sur la réflexion d'une onde incidente sur l'échantillon. De fait, cette mesure dépend fortement de la qualité de surface. En particulier, il se forme un oxyde de tellure sur la surface des échantillons de CdTe et CdZnTe modifiant ainsi les propriétés optiques de surface des matériaux. Par conséquent, avant les mesures, pour se débarrasser de cet oxyde, les échantillons ont été plongés dans un bain d'acide chlorhydrique (HCl) avant d'être rincés à l'eau dé-ionisée afin d'éliminer cet oxyde.

^a Cette ellipsomètre est situé sur la plate-forme de Nanocaractérisation (PFNC) de Minatec à Grenoble.

Par ailleurs, un autre sujet de préoccupation concerne la réflexion de l'onde incidente sur la face arrière de l'échantillon^a. Celle-ci est atténuée par un dépoli mécanique de la face concernée. Elle n'est donc pas prise en compte dans la suite d'étude.

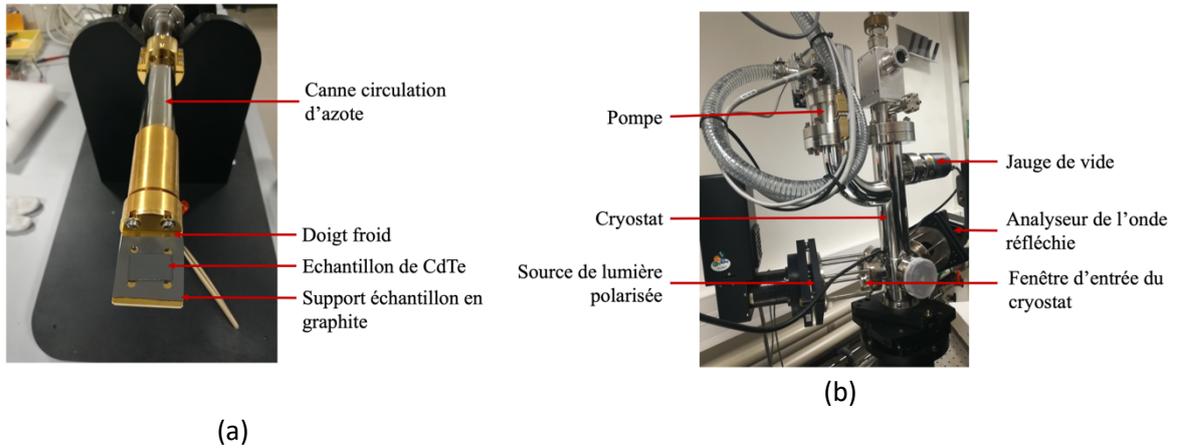


Figure 58 - (a) Photo de l'échantillon sur le doigt froid de l'ellipsomètre. (b) photo de l'ellipsomètre utilisé pour les mesures.

Un exemple d'évolution de la partie réelle ϵ_1 et de la partie imaginaire ϵ_2 de la fonction diélectrique du CdTe à 80 K est tracé sur la Figure 59 sur le domaine spectral [1.25 eV-3.1 eV]. Cette mesure sera présentée en détail dans la section 3.2. On observe que ϵ_1 et ϵ_2 présentent une variation rapide dans la région spectrale proche de l'énergie de gap. Au-delà de 1.6 eV, ces deux grandeurs augmentent avec l'énergie. Il faut noter que la qualité optique de l'ellipsomètre n'était pas optimale, de sorte que certaines parties du spectre des fonctions optiques sont plus bruitées.

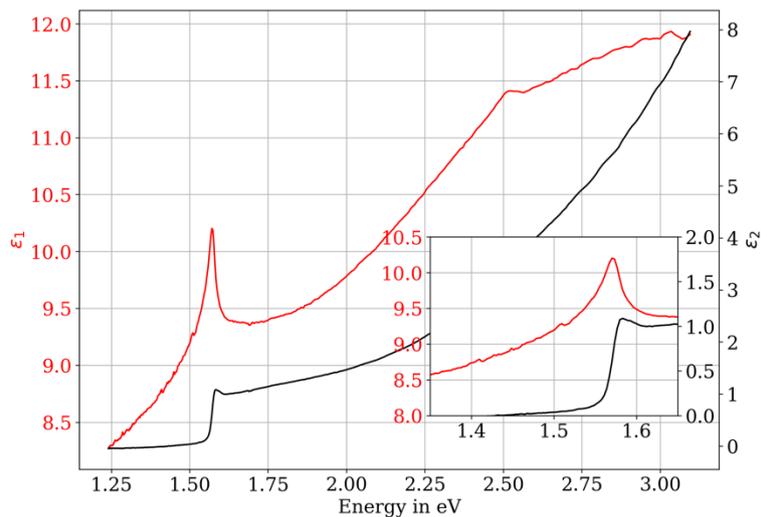


Figure 59 - Évolution de la partie réelle et imaginaire de la fonction diélectrique du CdTe à 80 K en fonction de l'énergie. Dans l'encart un zoom est réalisé dans la région proche du gap du matériau.

^a La réflexion sur la face arrière de l'échantillon peut conduire à une mauvaise estimation des propriétés optiques dans le domaine de transparence du matériau.

1.2.3 Calcul de propagation d'erreur sur l'estimation des propriétés optiques

Plusieurs éléments du dispositif expérimental présenté dans la section précédente sont susceptibles d'induire des erreurs dans la mesure des indices optiques. Par conséquent, il est important d'évaluer l'influence de ces paramètres sur la mesure des fonctions optiques. Une première source d'incertitude est associée aux passages à travers les fenêtres en verre du cryostat qui induit un déphasage parasite de l'onde incidente et réfléchi. Par ailleurs, la position de l'échantillon n'est pas complètement maîtrisée. En effet, celui-ci peut se trouver légèrement incliné sur son support, introduisant ainsi une incertitude sur la valeur de l'angle d'incidence. Je présente alors un calcul de propagation d'erreur sur la mesure de l'indice de réfraction complexe.

Si l'on écrit l'indice optique de l'échantillon N_1 sous la forme $N_1 = n + ik$, on peut écrire l'équation (1-20), dans laquelle $d\phi_0$ est l'incertitude sur l'angle d'incidence de l'onde, $d\Delta$ est l'erreur de déphasage induite par les fenêtres du cryostat et $d\psi$ est l'incertitude associée au calcul de l'amplitude.

$$dN_1 = a_1 d\phi_0 + a_2 d\Delta + a_3 d\psi \quad (1-20)$$

Les termes a_1 , a_2 et a_3 sont définis par l'équation (1-21), l'équation (1-22) et l'équation (1-23), respectivement.

$$a_1 = \frac{N_1^2 \left(1 + \frac{1}{\cos^2(\phi_0)}\right) + N_0^2 \left(1 - \frac{1}{\cos^2(\phi_0)}\right)}{N_1 \tan(\phi_0)} \quad (1-21)$$

$$a_2 = \frac{2i\rho(\rho - 1)}{N_1(1 + \rho^3)} n_0^2 \sin^2(\phi_0) \tan^2(\phi_0) \quad (1-22)$$

$$a_3 = \frac{2(\rho - 1)}{N_1(1 + \rho)^3} N_0^2 \tan^4(\phi_0) e^{i\Delta} \quad (1-23)$$

Le détail des calculs est présenté en annexe D. L'incertitude sur la valeur de n et k est déterminée en prenant la partie réelle et imaginaire de dN_1 . Les valeurs des incertitudes estimées à partir des mesures effectuées sur l'échantillon de référence d'oxyde de silicium (SiO_2) sont les suivantes :

- $d\Delta = 0.05$
- $d\phi = 0.1^\circ$
- $d\psi = 0$

Ces valeurs sont ensuite utilisées pour estimer la valeur des incertitudes sur la mesure des propriétés optiques des échantillons de CdTe et CdZnTe.

L'ellipsomètre a été calibré avec un échantillon d'oxyde de silicium. Cette calibration permet d'estimer l'effet des fenêtres sur la mesure des fonctions optiques. Néanmoins, en passant d'un échantillon à un autre ou en diminuant en température, la lumière ne traverse pas la même partie de la fenêtre si bien que des incertitudes persistent sur l'estimation des fonctions optiques.

1.3 Description des échantillons

Nous l'avons vu dans le chapitre 1, le $\text{Cd}_{1-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ est un alliage semi-conducteur ternaire. Il appartient à la famille des semi-conducteurs II-VI. Au CEA Leti, ces cristaux sont fabriqués par la méthode de *Vertical Gradient Freeze* ou VGF [13]. Cette méthode permet de fabriquer des monocristaux de grand diamètre. Afin d'obtenir des cristaux de grande qualité cristalline, la croissance doit s'effectuer dans un environnement fermé. Il est difficile d'obtenir une bonne stœchiométrie dans les cristaux de $\text{Cd}_{1-y}\text{Zn}_y\text{Te}$ avec un faible taux de défauts de seconde phase (inclusions de tellure, précipités).

Deux processus de croissance, notés A et B, ont été utilisés pour fabriquer quatre échantillons de CdZnTe, chaque processus donnant lieu à la fabrication de deux échantillons. Les échantillons A proviennent de la fin d'un lingot tandis que les échantillons B sont issus du début. Nous verrons que le taux de zinc des échantillons B est effectivement plus élevé que celui des échantillons A. Les échantillons de CdZnTe sont orientés dans la direction cristalline $\langle 111 \rangle$ puis polis. Enfin une gravure chimique permet d'éliminer les dommages proches de la surface à la fin du processus de fabrication. Les propriétés des différents échantillons ainsi que les mesures effectuées sont résumées dans le Tableau 10.

Tableau 10 - Résumé des propriétés des différents échantillons ainsi que les mesures effectuées sur chacun des échantillons. Seuls les résultats des échantillons encadrés en rouge sont présentés dans la suite.

	CdZnTe	CdZnTe	CdZnTe	CdZnTe	CdTe
	Process A		Process B		Process C
<i>Propriétés des cristaux</i>					
<i>Orientation</i>	<111>	<111>	<111>	<111>	<100>
<i>Épaisseur origine</i>	745µm ± 10µm	745µm ± 10µm	745µm ± 10µm	745µm ± 10µm	? ^a
<i>État de surface de la face avant</i>	Polie	Polie	Polie	Polie	Polie
<i>État de surface de la face arrière</i>	Dépolie	Polie	Dépolie	Polie	Ondulée
<i>Traitement chimique (brome/méthanol)</i>	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui
<i>Traitement HCl</i>	Oui	Non	Oui	Non	Oui
<i>Mesures effectuées</i>					
<i>Photoluminescence</i>	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui
<i>Cathodoluminescence</i>	Oui	Oui	Oui	Oui	Oui
<i>Ellipsométrie</i>	Oui	Non	Non ^b	Non	Oui

Par ailleurs, les échantillons ont subi différents traitements chimiques de façon à les préparer aux différentes expériences d'optique (photoluminescence, cathodoluminescence et ellipsométrie). En effet, seuls les résultats de mesure obtenus sur les échantillons encadrés en rouge dans le Tableau 10 sont présentés dans la suite. Seuls ces échantillons ont été préparés pour les mesures d'ellipsométrie avec un dépolie de la face arrière et une préparation chimique de la face avant. Les cristaux fabriqués à partir du processus B présentent moins de défauts de seconde phase, ils sont de meilleure qualité. L'objectif subsidiaire de cette campagne de mesure est aussi d'observer au travers des mesures de luminescence cette différence de qualité cristalline, dans le but d'obtenir à plus long terme une méthode de catégorisation des cristaux de CdZnTe basée sur une mesure de luminescence.

Dans cette section, j'ai présenté le principe des mesures de luminescence et d'ellipsométrie. J'ai par ailleurs décrit les bancs de mesures ainsi que les échantillons sur lesquels les mesures ont été effectuées. Dans la section suivante, je vais présenter les mesures de photoluminescence effectuées de 4 K à 50 K. En effet, afin de comprendre l'origine des bandes d'émission observées dans les spectres de CL à 80 K et 100 K, il est pertinent d'étudier la luminescence des échantillons à 4K, où il est possible d'identifier les différents processus de recombinaison. A basse température, les impuretés présentes ne sont pas ionisées si bien que l'on peut observer des transitions optiques impliquant des niveaux pièges dans le gap. Ces mesures s'intègrent dans un cadre plus large de caractérisation par PL d'échantillons de CdZnTe. Ces résultats sont interprétés et analysés dans la section suivante. Par

^a L'échantillon de CdTe est issu d'un lot de fabrication différent, et son épaisseur n'est pas connue.

^b L'échantillon aurait dû être mesuré. Il s'est cassé lors de son installation sur le doigt froid du cryostat.

ailleurs, les mesures de fonctions optiques ont été réalisées à 300 K et comparées à la littérature, les résultats sont présentés en annexe F.

2 Résultats et interprétation des mesures de photoluminescence de 4 K à 50 K

2.1 Interprétation des spectres de photoluminescence du CdTe et du CdZnTe de 4 K à 50 K

Dans cette section, je présente les spectres de PL des échantillons de CdTe et CdZnTe obtenus entre 4 K et 50 K. L'objectif est de déterminer la nature des recombinaisons impliquées dans les mécanismes de luminescence dans les substrats de CdZnTe des détecteurs IR de technologie HgCdTe. Afin d'interpréter les spectres de luminescence des échantillons de CdZnTe, des mesures de luminescence ont été effectuées sur un échantillon de CdTe. Celui-ci provenant de la même ligne de production que les échantillons de CdZnTe, il est utilisé comme référence, l'alliage binaire CdTe étant plus largement étudié dans la littérature.

L'étude des spectres de PL est effectuée en découpant les spectres en plusieurs régions d'émission, comme explicité sur la Figure 60. Une première région regroupant les émissions dites bords de bande (proche du gap), puis la région d'émission DAP (voir Figure 53), enfin la région d'émission de défauts profonds. Ces trois régions d'émission sont explicitement présentées sur la Figure 60. Sur la Figure 60, les spectres à 4 K des trois échantillons de CdTe et CdZnTe sont représentés. Ils sont décalés verticalement pour des raisons de clartés.

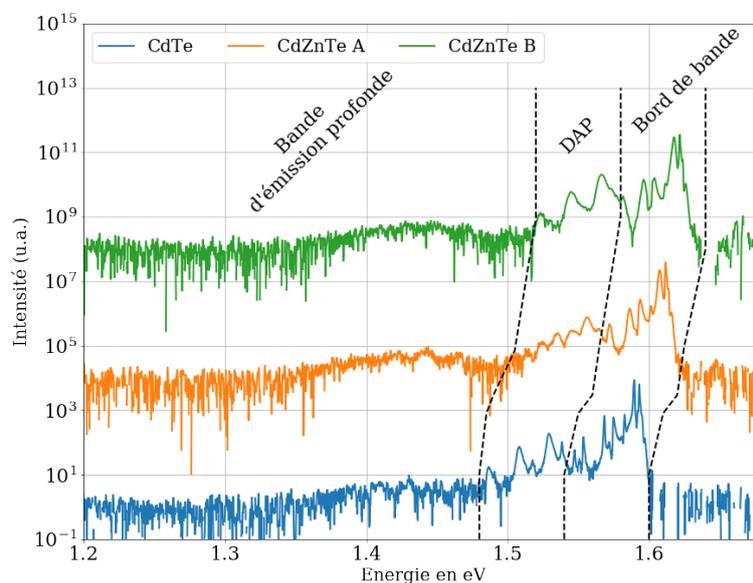


Figure 60 - Spectres de photoluminescence du CdTe et du CdZnTe à 4 K mesurés avec un détecteur CCD, en échelle log. Les spectres sont décalés verticalement pour des raisons de lisibilité.

On observe sur la Figure 60 des points communs aux trois spectres. Pour chacun des échantillons, la majorité du signal de luminescence à 4 K est émis dans la région appelée bord de bande, laquelle est dominée par des recombinaisons de nature excitonique. A plus basse énergie, la région d'émission nommée DAP est visible dans les trois échantillons à 4 K. Enfin, en dessous de la région DAP, vient la

région d'émission associée aux défauts profonds. Bien que celle-ci soit large, son intensité est très faible, près de 1000 fois inférieure au maximum d'émission.

En revanche, quelques différences sont aussi visibles entre le spectre de l'échantillon de CdTe et ceux de CdZnTe. Premièrement, les raies d'émission sont plus larges dans le cas des alliages ternaires de CdZnTe, ceci étant associé aux effets d'alliages [14]. Par ailleurs, concernant la région DAP, son allure est similaire dans le spectre de CdTe et dans le spectre de l'échantillon B de CdZnTe. En revanche, celle-ci est différente dans l'échantillon de CdZnTe A, ce qui suggère des processus de recombinaison différents.

Les spectres de PL ont été obtenus à des températures comprises entre 4 K et 50 K. Au-delà de 50 K, le signal de PL était trop faible et ne pouvait pas être distingué du bruit. Les spectres de PL des échantillons de CdTe et de CdZnTe obtenus pour différentes températures sont présentés sur la Figure 61. Pour des raisons de visibilité, seules les régions DAP et bord de bande sont présentées et les spectres sont décalés verticalement. En effet, pour chacun des échantillons, la bande correspondant à la région d'émission de défauts profonds est faible et son intensité décroît rapidement avec la température. On observe sur la Figure 61, que les spectres de PL sont dominés par la région de bord de bande à chaque température.

Dans la suite, l'analyse des spectres de luminescence est effectuée en considérant successivement les trois régions d'émission susmentionnées présentées sur la Figure 60. L'étude débute avec la région correspondant au bord de bande.

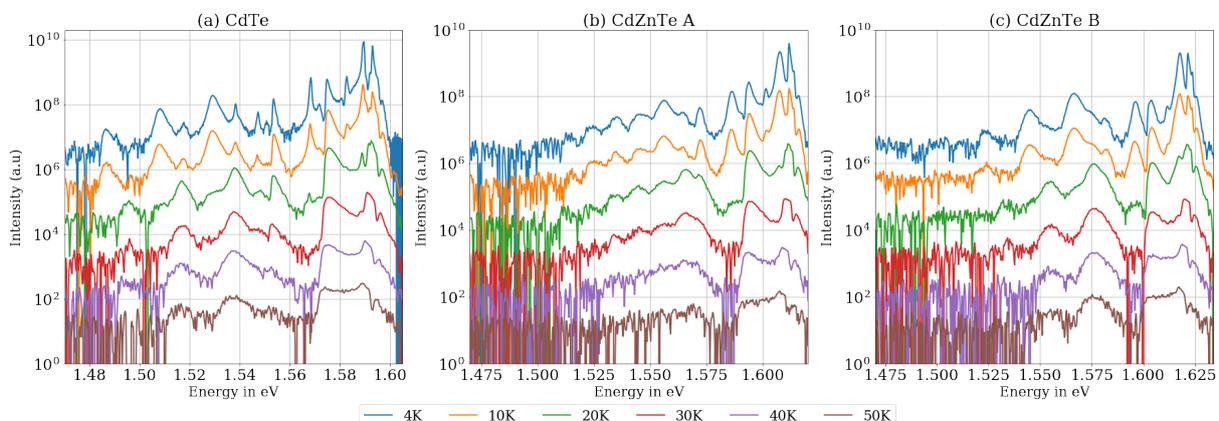


Figure 61 - Spectres de photoluminescence de CdTe et CdZnTe (échantillon A et B) acquis à différentes températures, en échelle log. Les spectres sont décalés verticalement pour des raisons de clarté.

2.1.1 Étude du bord de bande de 4 K à 50 K

La région d'émission de bord de bande est principalement composée de l'annihilation d'excitons liés ou libres accompagnés de leur répliques phonons. Dans ce manuscrit, les lignes d'émission associées à la recombinaison d'exciton libre seront notés FX. Les mécanismes radiatifs impliquant des excitons liés seront notée A°X lorsqu'ils mettent en jeu un atome accepteur et D°X lorsqu'un atome donneur entre en jeu.

2.1.1.1 Échantillon de CdTe

Dans la mesure où le CdTe est plus largement étudié dans la littérature, je me concentre d'abord sur cet échantillon. Le spectre de bord de bande du CdTe à 4 K que j'ai mesuré est présenté sur la Figure 62 (il s'agit d'un zoom sur la région bord de bande du spectre de CdTe de la Figure 60). On observe différentes lignes d'émission associées à différents processus recombinant, celles-ci sont numérotés à partir du pic d'énergie le plus élevé. Les énergies correspondant aux différents processus de recombinaison identifiés sont présentées dans le Tableau 11.

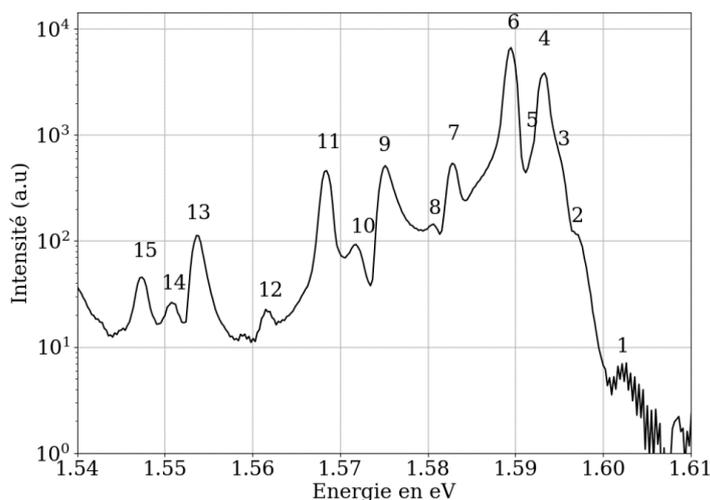


Figure 62 - Région de bord de bande du spectre de PL de l'échantillon de CdTe à 4K en échelle log. Les différents chiffres réfèrent à différents processus de recombinaison, lesquels sont listés dans le Tableau 11.

Tableau 11 - Énergies correspondant aux processus de recombinaisons excitoniques identifiés dans la Figure 62, pour le CdTe à 4K.

Numéro de la raie de luminescence	Énergie en eV	Processus de recombinaison associé	Référence
1	1.6026	FX (n=2) ?	[7]
2	1.5969	X _L	[15]
3	1.5950	X _T	[15]
4	1.5931	D ₁ [°] X	[16]
5	1.5921	D ₂ [°] X	[17][18]
6	1.5896	A ₁ [°] X	[19][12]
7	1.5828	A ₂ [°] X	[20]
8	1.5806	FX (n=2)-1LO ?	
9	1.5749	FX-1LO	
10	1.5718	D ₁₋₂ X -1LO	
11	1.5685	AX-1LO	
12	1.5618	? -1LO	
13	1.5536	FX-2LO	
14	1.5508	D ₁₋₂ X-2LO	
15	1.5475	AX-2LO	

Dans la région d'émission du bord de bande, certaines raies d'émission sont dues à la présence d'impuretés ou de défauts natifs dans le matériau semi-conducteur. Dans la littérature, différentes études ont été menées afin d'identifier ces différents accepteurs et donneurs dans le CdTe. Les données de la littérature sont récapitulées dans le Tableau 12 et le Tableau 13. Cependant, à partir du spectre de la Figure 62, il est difficile de déterminer avec exactitude les impuretés ou les défauts présents dans l'échantillon. Ainsi, concernant la raie d'émission numéro 6 ($A_1^{\circ}X$), il n'est pas clair s'il s'agit de lithium, de sodium ou de défauts intrinsèques à l'origine de cette transition. En effet, les énergies des pics reportées dans la littérature sont très proches les unes des autres. Les mêmes observations tiennent pour les recombinaisons $D^{\circ}X$.

Tableau 12 - Récapitulation des positions énergétiques des raies liées à des impuretés ou des défauts accepteurs dans les spectres de luminescence du CdTe à 4 K mentionnée dans la littérature.

$A^{\circ}X$ (en eV) – Raie de PL	Impuretés identifiées	Référence
1.5896	Cu	Chamonal [19]
1.5885	Ag (sur un site de Cd)	Chamonal [19]
1.58848	Ag	Hamann [21]
1.58916	Na	Molva [12]
1.58923	Li	Molva [12]
1.58897	P	Molva [22]
1.57606	Au	Capper [5]
1.5892	N	Capper [5]
1.58970	As	Capper [5]
1.589	V_{Cd-2D}	Shin [18]
1.5896	$(V_{Cd}^{2-} - D^+)^-$	Seto [23]
1.589	V_{Cd}	Shin [24]

Tableau 13 - Récapitulation des positions énergétiques des raies liées à des impuretés ou défauts dans les spectres de PL mentionnées dans la littérature dans le CdTe.

$D^{\circ}X$ (en eV) – Raie de PL	Impuretés identifiées	Référence
1.59309	Ga	Francou [16]
1.59302	In	Francou [16]
1.59296	Cl	Francou [16]
1.59314	F*	Francou [16]
1.59305	Al*	Francou [16]

2.1.1.2 Échantillons de CdZnTe A et B

Les régions d'émission du bord de bande des échantillons A et B de CdZnTe sont présentées sur la Figure 63. Il s'agit d'un zoom sur la région du bord de bande des spectres de la Figure 60. De manière analogue à ce qui a été observé pour le CdTe, cette région d'émission est dominée par des recombinaisons excitoniques. Puisque l'échantillon de CdTe provient de la même fonderie, il est

possible d'identifier par analogie les pics d'émission. Les raies d'émission sont numérotées sur la Figure 63 et listées dans le Tableau 14. Dans les deux échantillons de CdZnTe, la raie d'émission numéro 4 ($A_1^\circ X$) est large et peut englober différentes impuretés acceptrices. Ce sont les fluctuations statistiques dans la concentration en zinc (effet d'alliage) qui sont à l'origine de l'élargissement des raies d'émission.

Dans cette région du spectre de PL, la seule différence entre les deux échantillons de CdZnTe observée relève de la différence entre l'intensité relative des pics d'émission 4 et 3. En effet, alors que l'intensité des excitons liés ($D^\circ X$ et $A_1^\circ X$) est équivalente dans l'échantillon B, la raie d'émission $A_1^\circ X$ est moins intense que la raie d'émission $D^\circ X$ dans l'échantillon A. Bien que la région d'émission de bord de bande des échantillons de CdZnTe présente des caractéristiques similaires à celle de l'échantillon de CdTe, les secondes répliques phonon des excitons liés ($D^\circ X - 2LO$ et $A_{1-2}^\circ X - 2LO$) ne sont pas observées dans les alliages ternaires.

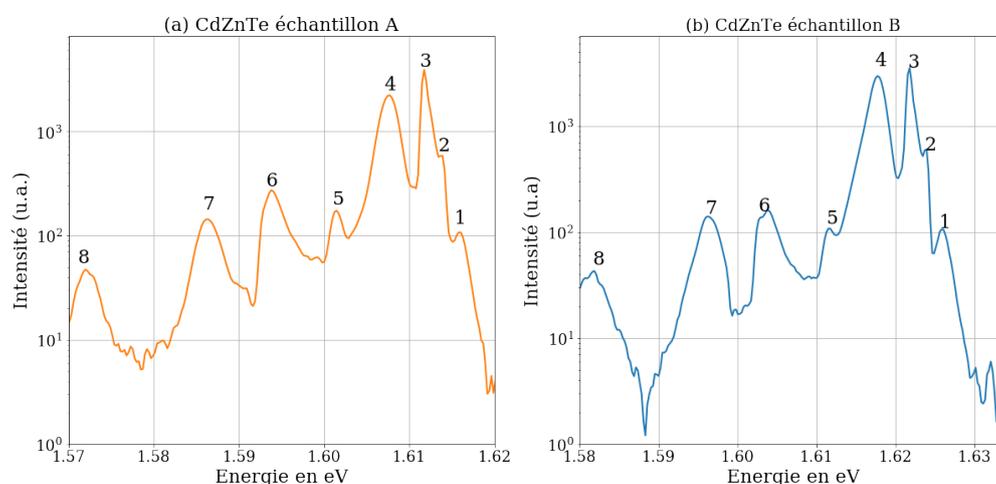


Figure 63 - Région de bord de bande du spectre de PL des échantillons A et B de CdZnTe à 4 K en échelle log. Les différents chiffres réfèrent à différents processus de recombinaison, lesquels sont listés dans le Tableau 14.

Tableau 14 - Énergies des raies d'émission observées dans la région du bord dans les échantillons de CdZnTe A et B.

Numéro de la raie de luminescence	Énergie en eV	Processus de recombinaison associé	Processus de recombinaison associé	
			Énergie en eV	
			CdZnTe A	
1	1.6158	X_L	1.6256	X_L
2	1.6138	X_T	1.6239	X_T
3	1.6118	$D^\circ X$	1.6218	$D^\circ X$
4	1.6076	$A_1^\circ X$	1.6177	$A_1^\circ X$
5	1.6015	$A_2^\circ X$	1.6115	$A_2^\circ X$
6	1.5938	FX-1LO	1.6039	FX-1LO
7	1.5905	DX -1LO	1.5962	AX-1LO
8	1.5749	AX-1LO	1.5820	FX-2LO
9	1.5718	FX-2LO		

2.1.1.3 Comparaison du CdTe et du CdZnTe

Comme mentionné, différentes recombinaisons excitoniques sont visibles dans les trois échantillons (CdTe, CdZnTe A et CdZnTe B). Bien que l'identification des impuretés ou des défauts mis en jeu soit difficile, il est possible de calculer l'énergie de localisation E_{loc} de l'exciton sur les donneurs et les accepteurs à partir de l'équation (2-1) [1]. Dans cette équation, E_g est l'énergie de gap, E_x est l'énergie de liaison de l'exciton et E est l'énergie correspondant à la raie d'émission dans le spectre de luminescence.

$$E = E_x - E_{loc} \quad (2-1)$$

Les énergies de localisation des excitons sur les donneurs et les accepteurs ont été calculées pour les trois échantillons à partir des données extraites des spectres de PL à 4K. Ces valeurs sont reportées dans le Tableau 15. Les énergies de localisation des donneurs sont proches dans les échantillons de CdTe et CdZnTe ce qui suggère la présence d'un donneur commun. En revanche, bien que les énergies de localisation des accepteurs soient identiques dans les deux échantillons de CdZnTe, celles-ci sont différentes de celle calculée dans l'échantillon de CdTe.

Tableau 15 – Énergies de localisation de l'exciton sur des donneurs et les accepteurs extraites des mesures de PL.

	CdTe		CdZnTe sample A		CdZnTe sample B	
	Peak number	E_{loc} en meV	Peak number	E_{loc} en meV	Peak number	E_{loc} en meV
Energie de localisation sur les donneurs	4	2.4	3	2.9	3	3.0
	5	3.4				
Energie de localisation sur les accepteurs	6	5.9	4	7.1	4	7.1
	7	12.7	5	13.2	5	13.3

Dans la littérature, une raie d'émission spécifique à environ 24 meV en dessous de la bande de conduction a été reportée pour le CdZnTe par Hjelt et al. [20]. Celle-ci est suspectée d'être associée à la recombinaison d'excitons liés à un complexe accepteur formé de lacunes de cadmium, notée V_{Cd} . D'après nos mesures, dans les échantillons de CdZnTe A et B, la raie d'émission numéro 5 se situe 23.8 meV et 23.0 meV en dessous l'énergie de gap, respectivement. Ces valeurs sont très proches de la valeur reportée par Hjelt et al. [20], ce qui permet de suggérer que l'accepteur A_2 est un complexe accepteur profond composé d'une V_{Cd} . Dans le CdTe, la ligne d'émission n°7 à 1.5828 eV à 4 K n'est pas mentionnée dans la littérature. Cependant, puisqu'elle est localisée 23.3 meV en dessous l'énergie de gap, je peux l'associer aux mêmes mécanismes de recombinaison que la raie d'émission n°5, observée dans les échantillons de CdZnTe.

Pour les différents processus de recombinaisons identifiés dans les trois échantillons (CdTe, CdZnTe A, CdZnTe B), l'évolution avec la température de la position du pic et de son intensité (en unité arbitraire) est présentée sur les Figure 64 et Figure 65. On observe qu'à 4 K, dans le CdTe et l'échantillon B de CdZnTe B, le bord de bande du spectre de PL est dominé par l'annihilation d'exciton lié à un accepteur.

Lorsque la température augmente, les contributions $D^{\circ}X$ s'intensifient avant de dominer le spectre de PL à partir de 15 K environ. Dans l'échantillon de CdZnTe A, le processus de recombinaison $D^{\circ}X$ domine à 4 K et reste la principale source d'émission lorsque la température augmente.

Outre l'étude des recombinaisons associées à l'annihilation d'exciton lié, une analyse de la recombinaison d'exciton libre en fonction de la température a été effectuée. Celle-ci permet d'obtenir des informations sur l'énergie de gap des matériaux. Dans la mesure où ces résultats n'interviennent pas directement dans la problématique de la thèse, je les présente en Annexe E.

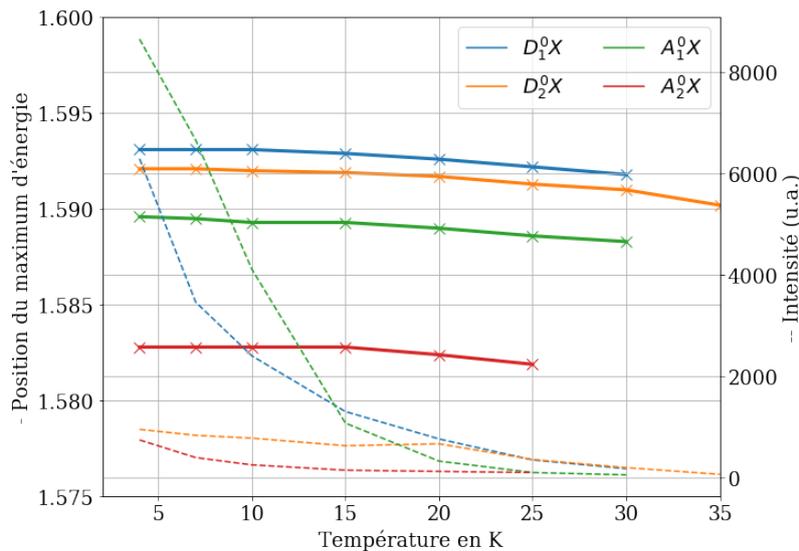


Figure 64 – Évolution de la position des raies identifiées dans le CdTe d'émission et de leur intensité en fonction de la température.

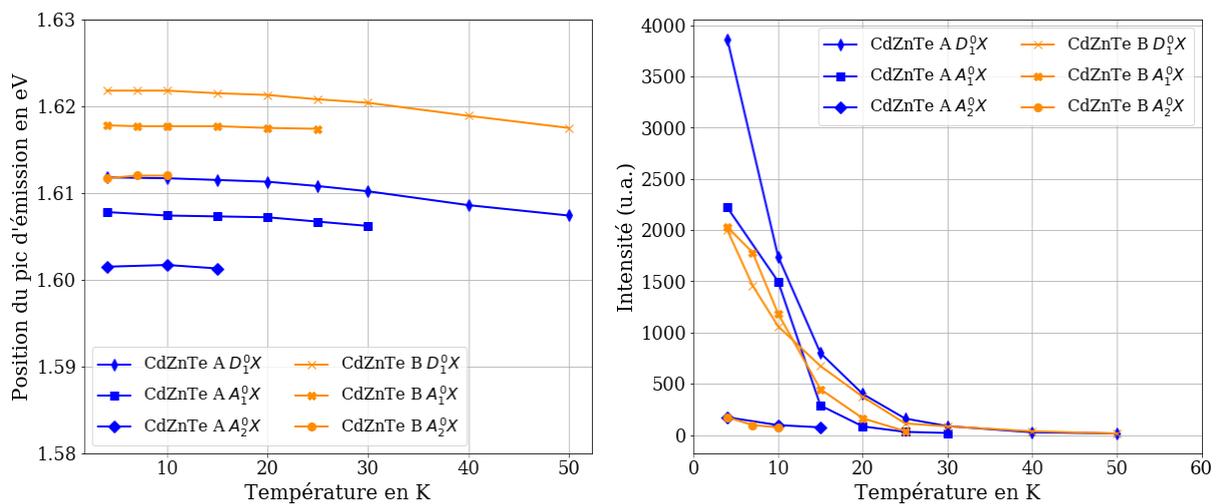


Figure 65 - Évolution de la position (à gauche) et de l'intensité (à droite) des raies identifiées dans les échantillons de CdZnTe A et B en fonction de la température.

Dans cette partie, j'ai présenté la région qui constitue la principale source d'émission dans les trois échantillons : la région du bord de bande. Dans la suite, je me concentre spécifiquement sur la région DAP.

2.1.2 Étude de la région DAP des spectres des échantillons de CdTe et de CdZnTe de 4 K à 50 K

Le spectre de PL du CdTe à 4 K est présenté sur la Figure 60 (courbe bleue). A cette température, une transition Donneur-Accepteur Paire (ou DAP) ainsi que ses répliques phonon sont observables, et sont clairement identifiées sur la Figure 66 (a). Une transition bande-niveau accepteur (eA°) peut aussi être observée, accompagnée de ses deux premières répliques phonons ($eA^\circ-1LO$ et $eA^\circ-2LO$). Les spectres de PL acquis jusqu'à 50 K sont reportés sur la même figure. Sur la Figure 66 les spectres sont décalés verticalement pour des raisons de lisibilité.

La région d'émission DAP des échantillons A et B de CdZnTe est représentée sur la Figure 66 (b) et (c) respectivement. Les spectres obtenus à plus haute températures sont reportés sur la même figure. On observe que la forme de la région DAP est différente dans les deux échantillons. L'allure de la région DAP dans l'échantillon B de CdZnTe est identique à celle du CdTe. Ceci suggère que la qualité cristalline de l'échantillon A est moins bonne que celle de l'échantillon B. Ce résultat est attendu dans la mesure où ce dernier présente moins de défauts de seconde phase^a.

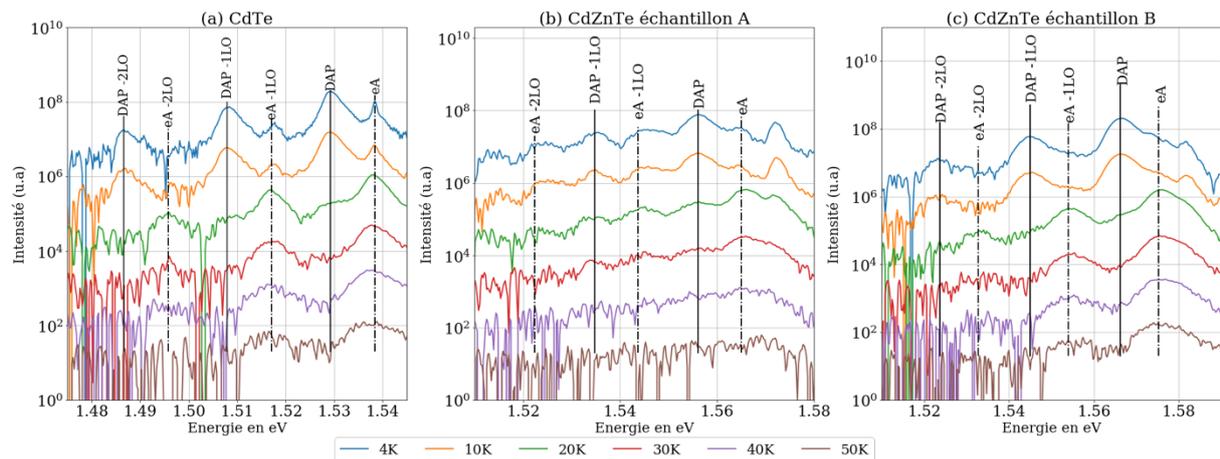


Figure 66 – Région d'émission DAP des spectres de PL des échantillons de CdTe et CdZnTe acquis à différentes températures. Les spectres sont décalés verticalement pour des raisons de visibilité.

L'évolution avec la température de l'intensité des pics d'émission eA° et DAP de l'échantillon de CdTe est présentée sur la Figure 67. On observe que lorsque la température augmente, l'intensité de la raie d'émission eA° augmente à mesure que le donneur impliqué dans la transition DAP se ionise. Les mêmes observations sont réalisées sur les échantillons de CdZnTe (voir Figure 66). Ce phénomène a été observé par d'autres groupes de recherche dans le CdTe et le CdZnTe [17],[25][18].

D'après la Figure 66, la différence en énergie entre ces deux pics d'émission E_{eA° et E_{DAP} est égale à 9 meV dans le cas du CdTe, ce qui donne directement l'énergie d'activation du donneur impliqué dans la recombinaison DAP selon les équations (1-4) et (1-6)^b. On trouve une énergie d'activation identique

^a Cette information a été fournie par le CEA Leti.

^b On fait l'hypothèse que la distance moyenne entre les donneurs et les accepteurs impliqués dans la recombinaison DAP est très grande. Autrement dit la densité de pièges est faible.

pour les échantillons A et B de CdZnTe (calculée de manière analogue), ce qui laisse supposer que le donneur impliqué dans la transition DAP est commun aux trois échantillons.

Par ailleurs, à partir de la position de la raie d'émission eA° , à une température donnée, il est possible de calculer la valeur de l'énergie d'activation E_A , en s'appuyant sur l'équation (1-4). En considérant l'échantillon de CdTe, on obtient alors à partir du spectre acquis à 4 K ($E_g^{CdTe}(4 K) = 1.606 eV$ voir l'annexe E), une énergie d'activation pour l'accepteur de 67.7 meV. Cette énergie est proche des énergie d'activation de l'antimoine et du phosphate (égale à 65 meV et 68.2 meV respectivement [22]). Bien que proche, on ne peut pas attribuer l'une ou l'autre de ces impuretés acceptrices avec celles relevées dans mes mesures. Les énergies du donneur et de l'accepteur impliqués dans la transition DAP, déterminées dans cette thèse, sont différentes de celles mesurées par Lee et al. ($E_A=56.4$ meV, $E_D=7$ meV) [17] et Shin et al. ($E_A=56.4$ meV, $E_D=7$ meV) [18] dans des cristaux de CdTe.

En adoptant la même démarche que pour le CdTe, il est possible de déterminer la valeur des énergies d'activation du donneur et de l'accepteur impliqués dans les recombinaisons DAP observées dans les échantillons de CdZnTe. Ces énergies sont reportées dans le Tableau 16. Tandis que les valeurs de E_A sont identiques dans les deux échantillons de CdZnTe (égales à 60 meV environ), celles-ci sont inférieures à celle déterminée dans le cas du CdTe. En revanche, elles sont très proches de l'énergie d'activation calculée par Gemain dans le CdZnTe [25]^a. Dans ces travaux, l'accepteur reste non-identifié et le donneur est suspecté d'être associé à la présence d'atome alcalins en position interstitielle.

Tableau 16 – Valeur de l'énergie d'ionisation du donneur et de l'accepteur impliqués dans la transition DAP dans l'échantillon de CdTe et les échantillons de CdZnTe A et B.

	CdTe	CdZnTe sample A	CdZnTe sample B
E_A	67.7 meV	60.7 meV	60 meV
E_D	9.0 meV	8.8 meV	9.1 meV

^a Les mesures de Gemain ont été effectuées sur des échantillons de CdZnTe fabriqués au CEA-LETI avec la méthode VGF et avec une quantité de zinc de 4 %.

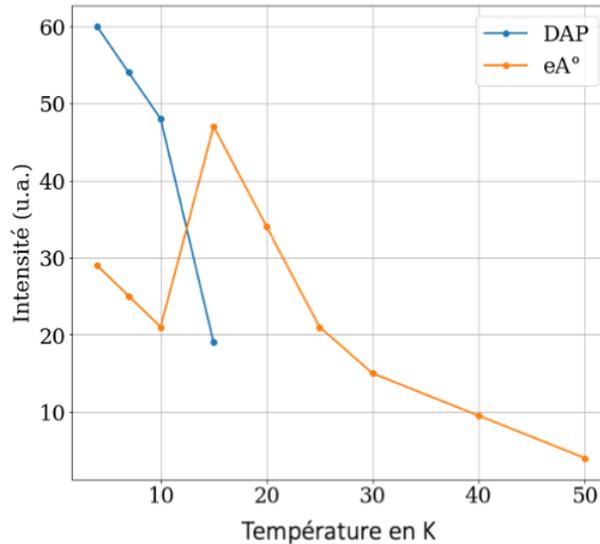


Figure 67 – Évolutions avec la température de l'intensité de la raie associée à la recombinaison DAP et de l'intensité de la raie eA° dans le CdTe.

Dans cette section, j'ai étudié la région d'émission DAP. Les énergies d'activation des donneurs et des accepteurs ont été calculées pour les trois échantillons. Par ailleurs, l'évolution avec la température de l'intensité d'émission des pics de luminescence DAP et eA° a été analysée. La section suivante, je m'attache à étudier la 3^{ème} et la dernière région d'émission, celle des défauts profonds.

2.1.3 Étude de la bande de défauts profonds dans les échantillons de CdTe et CdZnTe

Dans la littérature, deux bandes ont été observées dans la région d'émission profonde dans le CdTe : la première est centrée autour de 1.4 eV et la seconde autour de 1.1 eV.

Cette bande d'émission profonde a été largement étudiée dans la littérature [26], elle est appelée « A-center ». Elle est associée à la formation d'un complexe formé à partir d'un défaut natif (une lacune de cadmium notée V_{Cd}) et d'un donneur peu profond [26]. La formation de ce défaut a été observée pour différents types de donneur tel que In, Cl et Ga [27]. Cependant, Krustok et al. [28] ont souligné le fait que cette bande était probablement composée d'au moins trois sous-bandes, induite par différents défauts.

Une autre bande proche de la bande à 1.4 eV est relevée dans la littérature. Parfois appelé « bande Y », elle présente une *Zero Phonon Line* (ZPL) à 1.475 eV, suivie de plusieurs répliques phonons. Cette bande a été observée par Lischka et al. [29] dans des échantillons de CdTe dopés au fer. Cependant, d'autres études attribuent la bande Y à la recombinaison d'excitons liés à des défauts étendus, de type glissements de dislocations [30], [31]. Cette bande d'émission autour de 1.4 eV n'est pas très intense dans les spectres de PL des échantillons de CdZnTe et CdTe. Elle est plusieurs ordres de grandeurs moins intense que la région du bord de bande. Cette région d'émission est présentée pour les trois échantillons à 4 K sur la Figure 68. Cette bande à 1.4 eV est légèrement décalée vers les hautes énergies dans les échantillons de CdZnTe. Ce décalage est induit par la présence de zinc dans les alliages ternaires, qui augmente la valeur de l'énergie de gap (voir chapitre 1). Ainsi, cette bande est centrée autour de 1.44 eV et 1.45 eV dans l'échantillon A et l'échantillon B respectivement.

A plus basse énergie, une autre bande d'émission à 1.1 eV a été identifiée dans le CdTe dans la littérature. Lischka et al. [32] ont corrélé la présence de ce pic d'émission avec la présence de fer dans le matériau semi-conducteur. Alors que Castaldini et al. [33] associent sa présence avec celle de lacunes de tellure. Cependant, sur la Figure 68, cette bande n'est pas observable. Des mesures effectuées sur l'échantillon A avec le second détecteur en germanium du banc de PL (dont le domaine spectral de détection s'étend de 900 nm à 1700 nm) n'ont pas permis de mettre en évidence clairement la présence d'une bande d'émission dans ce domaine spectral. Par conséquent, cette bande d'émission n'a pas été étudiée plus en détail.

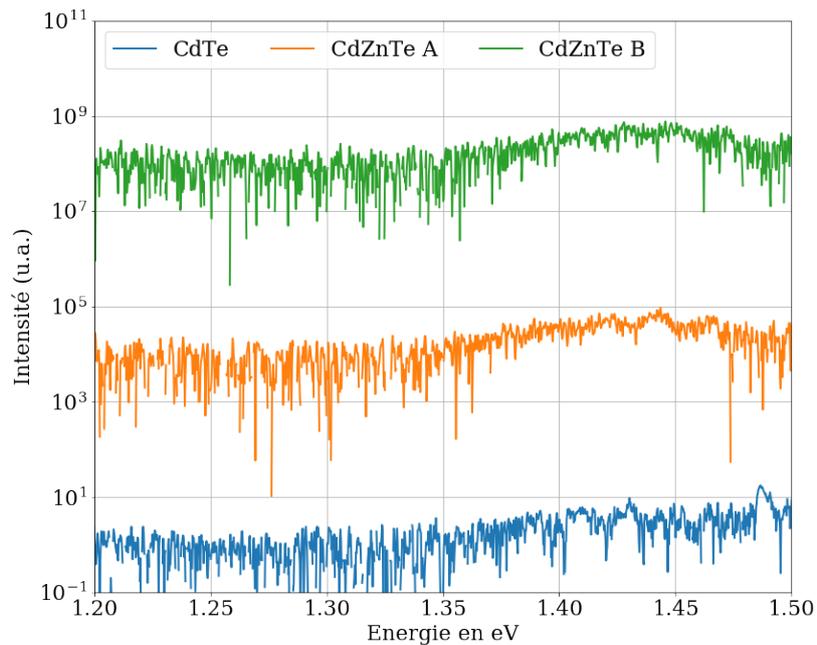


Figure 68 – Région d'émission associée à la présence de défauts profonds dans les échantillons de CdTe, CdZnTe A et CdZnTe B à 4 K, en échelle log. Les spectres sont décalés pour des raisons de clarté.

2.2 Résumé des mesures de PL de 4K à 50 K

Dans cette section, je résume les résultats obtenus à partir des mesures de PL effectuées de 4 K à 50 K. Les énergies de localisation des excitons ainsi que les énergies d'activation des donneurs et des accepteurs mesurées à partir des spectres de PL sont reportées dans le Tableau 17. Comme on peut le voir, les énergies de localisation des donneurs à la fois dans le CdTe et le CdZnTe (échantillons A et B) sont identiques. Les accepteurs sont probablement différents dans l'alliage binaire et dans l'alliage ternaire, puisque les énergies de localisation des excitons et les énergies d'activation sont différentes. Seul l'accepteur avec une énergie de localisation importante (12.7 meV) est potentiellement présent dans les trois échantillons. Cet accepteur est attribué à la présence de V_{Cd} [20]. Par ailleurs, dans chacun des échantillons, la bande d'émission de défauts profonds (proches de 1.4 eV) était présente, bien que très peu intense.

Tableau 17 – Résumé des énergies caractéristiques extraites des mesures de PL à 4 K.

	CdTe	CdZnTe échantillon A	CdZnTe échantillon B
E_g à 4 K	1.6061 eV	1.6253 eV	1.6354 eV
Énergie de localisation de l'exciton sur les accepteurs	2.4 meV 3.4 meV	2.9 meV	3.0 meV
Énergie de localisation de l'exciton sur les accepteurs	5.9 meV 12.7 meV	7.1 meV 13.2 meV	7.1 meV 13.3 meV
E_A	67.7 meV	60.7 meV	60 meV
E_D	9.0 meV	8.8 meV	9.1 meV
Région d'émission profonde	Oui	Oui	Oui

En conclusion, les spectres de PL ont été étudiés et présentés pour les trois échantillons. L'objectif principal de cette campagne de mesures expérimentales était de déterminer les propriétés optiques du CdZnTe utilisé comme substrat dans la fabrication des détecteurs IR de technologie HgCdTe. Pour rappel, les détecteurs utilisés et étudiés dans cette thèse ont une température nominale de fonctionnement de 100 K et 80 K. Cependant, le signal de PL devenant trop faible au-delà de 50 K, j'ai réalisé des mesures de cathodoluminescence (CL) afin d'obtenir les propriétés de luminescence du matériau CdZnTe à ces températures.

Les mesures à basses températures ont permis de mieux connaître la nature des recombinaisons mises en jeu dans les échantillons. Nous avons observé qu'au-dessus de 50 K, les recombinaisons excitoniques sont les principaux processus de recombinaison. Un objectif subsidiaire était de discriminer via les mesures de luminescence les échantillons de CdZnTe de bonne et de mauvaise qualité. Nous avons vu dans cette section que la région de bord de bande et la région des défauts profonds étaient identiques dans les échantillons A et B. En revanche, l'allure de la région d'émission DAP était différente dans les deux échantillons, ce qui permet de suggérer que cette région d'émission est un marqueur de la qualité cristalline.

Dans la section suivante, les mesures de propriétés optiques effectuées à 100 K et 80 K sont présentées. De plus, des mesures de cathodoluminescence et d'ellipsométrie ont été effectuées à 300 K, celles-ci permettent de confronter nos mesures à la littérature. Cependant, les résultats de ces mesures, bien qu'utiles à la communauté, dépassent la problématique de cette thèse et sont présentés en annexe F.

3 Résultats des mesures de propriétés optiques du CdTe et du CdZnTe à 80 K et à 100 K

Les deux températures 80 K et 100 K correspondent respectivement aux températures d'opération des détecteurs caractérisés et irradiés dans cette thèse ainsi qu'à la température nominale de fonctionnement des détecteurs ALFA. Je présente dans un premier temps les résultats des mesures de luminescence puis les résultats de mesures des fonctions optiques à ces températures.

3.1 Interprétation des spectres de luminescence à 80 K et 100 K

Dans le cadre de la modélisation du phénomène de luminescence du substrat de CdZnTe induit par l'irradiation de protons dans les détecteurs de technologie HgCdTe, il est primordial de connaître l'énergie de ces photons émis par transitions radiatives. En particulier, l'étude des centres de recombinaison radiative profonds est cruciale. Les photons impliqués dans ces transitions ont une énergie plus petite que l'énergie de gap et sont alors très peu absorbés (voir Figure 49). Ceux-ci sont susceptibles de se propager sur de très longues distances dans le substrat de CdZnTe. Ils peuvent alors polluer le signal collecté par les pixels sur une importante partie du détecteur. Cependant, je montrerai dans les sous-sections suivantes que les spectres de luminescence des échantillons de CdTe et CdZnTe étudiés dans cette thèse ne présentent pas de raie d'émission à basse énergie à 80 K et 100 K (domaine spectral dans lequel l'absorption des photons est faible). Par ailleurs, nous verrons que dans les échantillons de bonne qualité l'ensemble des photons est émis à une énergie proche de l'énergie de gap du matériau. Dans la suite, je présente successivement les spectres de CL des échantillons de CdTe et CdZnTe à 80 K et 100 K.

3.1.1 Spectres de cathodoluminescence du CdTe à 80 K et 100 K

Les spectres du CdTe à 80 K et 100 K sont présentés en échelle logarithmique sur la Figure 69. On observe que les spectres sont dominés par une bande d'émission intense, et que l'intensité maximale du spectre diminue alors que la température augmente. A 80 K celle-ci est centrée à 1.579 eV (788 nm), ce qui est en dessous des énergies de gap mentionnées dans la littérature, qui s'étalent dans la gamme d'énergie [1.590 eV, 1.607 eV] [7], [34]–[38]. Ceci suggère que à 80 K le processus principal de recombinaison n'est pas de type bande à bande.

Par ailleurs, on observe sur le spectre à 80 K, une bande d'émission peu intense proche centrée autour de 1.42 eV, 150 fois moins intense que le pic principal d'émission. Elle représente moins de 3 % de l'intensité totale intégrée. L'origine de cette bande de luminescence, observée à 4 K dans les spectres de PL, a été discutée dans la section 2.1.3. Elle serait associée à la présence d'un complexe composé d'une lacune de cadmium.

A 100 K, le spectre de CL présente les mêmes caractéristiques jusqu'à 80 K. Une bande principale d'émission domine le spectre d'émission et une bande de plus faible intensité est aussi visible. La ligne d'émission principale est localisée à 1.574 eV (785 nm), soit en dessous des énergies de gap reportées dans la littérature qui sont comprises entre 1.584 eV et 1.596 eV. De nouveau, comme nous l'avons observé à 80 K, il semblerait que le processus principal de recombinaison à 100 K ne soit pas de type bande à bande. La conclusion issue de cette observation est détaillée dans le paragraphe suivant dans le cas du CdZnTe.

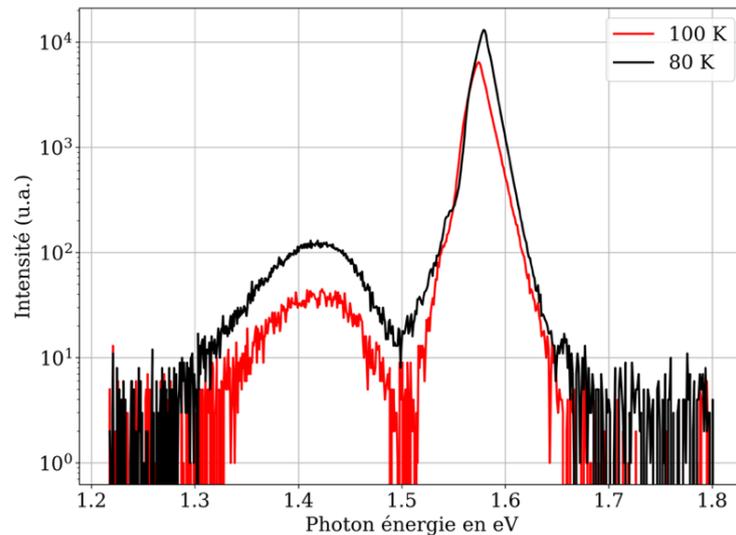


Figure 69 - Spectres mesurés de CL de l'échantillon de CdTe à 80 K et 100 K, en échelle log.

3.1.2 Spectres de cathodoluminescence du CdZnTe à 80 K et 100 K

Les spectres de CL des échantillons A et B de CdZnTe sont présentés sur les graphes (a) et (b) de la Figure 70. On observe dans les deux cas, les spectres d'émission sont dominés par un pic de luminescence. Les positions des pics de CL pour les deux échantillons aux deux températures sont retranscrites dans le Tableau 18. Par ailleurs, la position de ces maxima de luminescence est comparée aux positions des pics de CL du CdTe. On constate que l'écart entre l'énergie maximale d'émission des échantillons de CdZnTe et l'énergie maximale d'émission dans le CdTe est identique à 80 K et 100 K, soit 19 meV pour l'échantillon A et 30 meV pour l'échantillon B de CdZnTe. De manière analogue au CdTe, on associe le pic principal de luminescence à des transitions radiatives de bord de bande. D'après les mesures de PL effectuées (présentées dans la section 2), par analogie on peut conclure que ces transitions radiatives sont de natures excitoniques.

Le modèle que j'ai développé dans le chapitre 2 considère des porteurs libres dans les bandes de conduction et de valence. Or, il apparaît d'après les mesures de CL que le CdZnTe est dominé par un comportement de type excitonique à 80 K et 100 K. Ainsi, l'application du modèle à partir des mesures que j'ai effectuée et des données de la littérature, décrit le comportement effectif du semi-conducteur CdZnTe. Le modèle pourra être complété pour tenir compte des effets excitoniques.

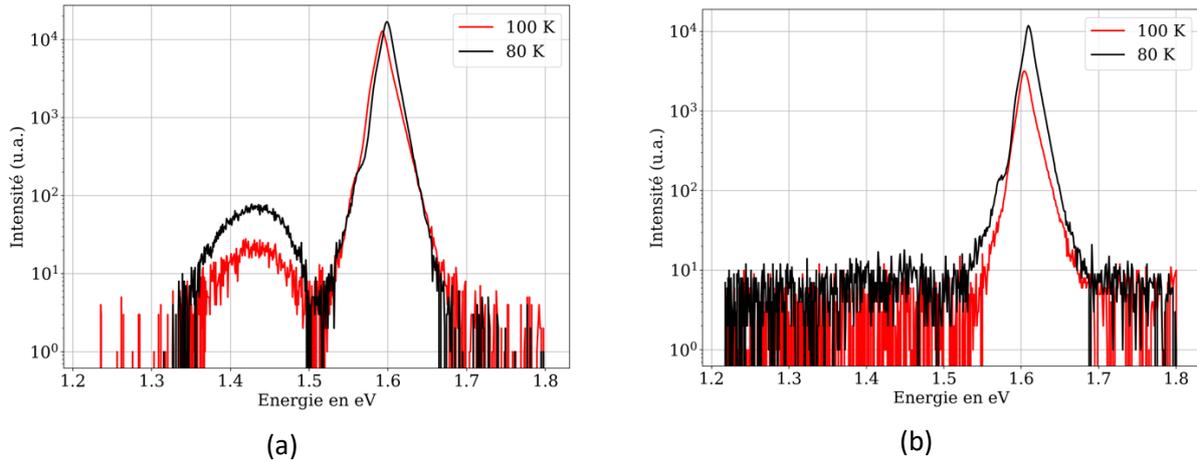


Figure 70 - Spectres de cathodoluminescence à 80 K et à 100 K : (a) échantillon A de CdZnTe et (b) échantillon B de CdZnTe.

Dans l'échantillon A de CdZnTe, on observe de manière analogue à l'échantillon de CdTe, une bande d'émission centrée autour de 1.440 eV à 80 K et 100 K. Par comparaison avec l'échantillon de CdTe, on attribue cette bande au centre recombinant appelé « A-center ». Cette bande d'émission représente moins de 5 % de l'intensité intégrée à 80 K. En revanche, dans l'échantillon B de CdZnTe, cette bande est inexistante. Pour rappel, cet échantillon a été sélectionné du fait qu'il présentait un très faible taux de défauts de seconde phase, ce qui semble être mis en évidence sur les mesures de CL.

Tableau 18 - Positions du pic de luminescence sur les échantillons de CdZnTe A et B à 80 K et 100 K, et comparaison à la position du pic de luminescence du CdTe.

	$E_{CdZnTe A}^{pic}$	$ E_{CdTe}^{pic} - E_{CdZnTe A}^{pic} $	$E_{CdZnTe B}^{pic}$	$ E_{CdTe}^{pic} - E_{CdZnTe B}^{pic} $
100 K	1.593 eV	19 meV	1.604 eV	30 meV
80 K	1.598 eV	19 meV	1.609 V	30 meV

3.1.3 Résumé des mesures de CL effectuées à 80 K et 100 K dans le CdTe et le CdZnTe

Ainsi, nous avons vu que dans les échantillons de très bonne qualité cristalline tels que l'échantillon B de CdZnTe, les photons de luminescence à 80 K et 100 K sont émis proche du gap du matériau semi-conducteur. En revanche, dans le second échantillon de CdZnTe (échantillon A) et dans l'échantillon de CdTe, outre la présence d'un pic dominant, on observe une faible bande d'émission centrée autour de 1.440 eV et 1.420 eV respectivement. Celle-ci représente moins de 3% de l'intensité intégrée du spectre de CdTe et moins des 5 % de l'intensité intégrée du spectre de l'échantillon A de CdZnTe. Les principales données extraites de ces mesures de CL à 80 K et 100 K sont présentées dans le Tableau 19.

L'objectif à travers ces mesures de luminescence était d'obtenir l'énergie des photons émis par transitions radiatives au sein du matériau semi-conducteur CdZnTe aux températures cryogéniques de fonctionnement des détecteurs IR. Nous portons une attention particulière à l'émission de photons de basse énergie, émis dans une région spectrale où l'absorption est faible (voire nulle). Ces photons

de grandes longueurs d'onde seront susceptibles de se propager sur de grandes distances dans le substrat de CdZnTe. Nous avons constaté grâce aux mesures effectuées que les échantillons de bonne qualité cristalline (échantillon B de CdZnTe) ne présentent pas de région d'émission de photons de basse énergie. De plus, cette région d'émission reste peu intense dans les échantillons de CdTe et CdZnTe A.

Tableau 19 – Résumé des caractéristiques extraites des mesures de CL à 80 K et 100 K du CdTe et du CdZnTe.

	CdTe	CdZnTe A	CdZnTe B
80 K			
<i>Position du pic d'émission</i>	1.580 eV	1.598 eV	1.609 eV
<i>Bande d'émission à 1.4 eV</i>	Oui	Oui	Non
100 K			
<i>1.574 eV</i>	1.574 eV	1.593 eV	1.604 eV
<i>Bande d'émission à 1.4 eV</i>	Oui	Oui	Non

Afin de déterminer les pertes optiques dues à la propagation des photons émis par recombinaison radiative dans le substrat de CdZnTe, il faut connaître le coefficient d'absorption du matériau en question. Dans la section suivante, je présente des mesures de fonctions optiques qui permettent d'obtenir la valeur du coefficient d'absorption du CdTe et du CdZnTe à 80 K et 100 K.

3.2 Résultats des mesures d'ellipsométrie sur le CdTe et le CdZnTe à 80 K et 100 K

Seules les fonctions diélectriques de deux échantillons ont été mesurées. Il s'agit de l'échantillon de CdTe et de l'échantillon A de CdZnTe. Malheureusement, le second échantillon de CdZnTe (échantillon B) s'est brisé lors de sa mise en place sur le doigt froid de l'ellipsomètre. Ceci n'est pas problématique. Dans la mesure où l'ellipsométrie est une méthode de mesure peu locale, je ne m'attendais pas à observer l'influence de la qualité cristalline sur les mesures de fonction optique.

3.2.1 Résultats des mesures des fonctions optiques du CdTe à 80 K et 100 K

Dans cette sous-section je présente les résultats des mesures des propriétés optiques de l'échantillon de CdTe à 80 K et 100 K. L'indice optique, n , ainsi que le coefficient d'extinction, k , du CdTe à 80 K sont présentés sur la Figure 71 en fonction de l'énergie des photons incidents. Les barres d'erreurs déterminées à partir d'un calcul théorique de propagation d'erreur (voir l'équation (1-20)) sont ajoutées au graphique. On observe que l'indice de réfraction varie de 2.8 à 3.6 environ. Dans la région spectrale proche du bord de bande n varie rapidement. Quant au coefficient d'extinction il est très proche de 0 en dessous de 1.50 eV, puis sa valeur augmente jusqu'à 1.0 lorsque l'énergie des photons augmente.

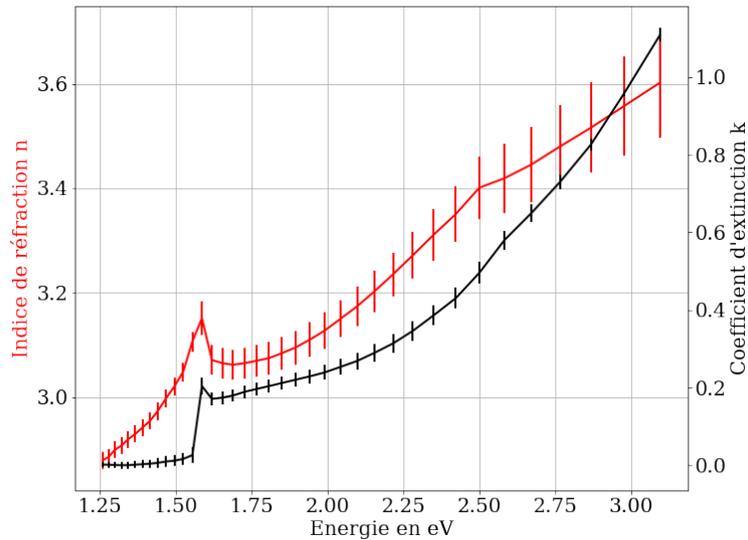


Figure 71 - Indice de réfraction, n (courbe rouge), et coefficient d'extinction, k (courbe noire), du CdTe mesuré à 80 K.

A partir de la valeur du coefficient d'extinction, le coefficient d'absorption a été calculée d'après l'équation (1-13). L'évolution du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie des photons est représentée sur la Figure 72. Dans l'encart de la figure, un zoom est effectué sur la région correspond au bord de bande du CdTe à 80 K et 100 K. On observe que l'écart entre la valeur du coefficient d'absorption à 100 K et 80 K est faible.

Lorsque la température de l'échantillon est suffisamment faible, des excitons se forment dans l'échantillon. Ce comportement excitonique du semi-conducteur est observé à 100 K et à 80 K. Celui-ci est mis en évidence dans l'encart sur la Figure 72. Sur cette figure, le coefficient d'absorption du CdTe, mesuré à 80 K et 100 K, est présenté. Il est calculé à partir de l'équation (1-13). La caractéristique excitonique dans le spectre d'absorption est due à la densité d'état des excitons qui offrent des états accessibles dans le gap du semi-conducteur. L'interaction coulombienne entre les électrons et les trous favorisent l'absorption des photons, c'est l'effet Sommerfeld [1]. Ce phénomène a été observé précédemment par Quijada et al. [39] ainsi que par Horodysky et al. [6] dans le CdZnTe et le CdTe respectivement. Horodysky et al. ont effectué des mesures de transmission à travers des échantillons de CdTe (dont l'épaisseur est de quelques microns) de 4 K à 500 K. Ils observent cette caractéristique excitonique jusqu'à 200 K.

Finalement l'énergie de gap du CdTe peut être estimée à partir de la position de l'exciton extrait du coefficient d'absorption en γ en ajoutant la valeur de l'énergie de l'exciton. Celle-ci est supposée indépendante de la température, et vaut 10.6 meV. Ainsi, les énergies de gap extraites de ces mesures de fonctions optiques sont les suivantes : 1.597 à 80 K et 1.591 à 100 K. Ces valeurs sont dans la gamme d'énergie mentionnées dans la littérature [7], [34]–[38] (voir section 3.1.1).

Sur la Figure 73, un zoom de la Figure 71 est réalisé sur la région d'émission correspondant au bord de bande. La mesure est par ailleurs comparée aux données de la littérature. La valeur du coefficient d'absorption mesurée en dessous du gap est très supérieure aux données de la littérature [40] (voir Figure 73). Ceci peut s'expliquer par une mauvaise qualité de surface de l'échantillon ou la qualité

optique détériorée de l'ellipsomètre^a. Cette forte absorption en dessous du gap n'est pas escomptée. En effet, dans un semi-conducteur idéal l'absorption doit être nulle en dessous de l'énergie de gap du matériau. Les photons dont l'énergie est inférieure au gap ne fournissent pas suffisamment d'énergie aux électrons de la bande de valence pour franchir la barrière de potentiel que constitue la bande interdite (voir chapitre 1). Ils ne sont donc pas absorbés.

Ainsi, dans l'application du modèle développé dans le chapitre 2, en considérant un coefficient d'absorption élevé en dessous l'énergie de gap, on réduit la contribution des photons de faibles énergies à la pollution des images acquises sous irradiation. Par conséquent, dans le cadre de la modélisation du phénomène de luminescence induit par l'irradiation de protons dans les détecteurs IR, je vais considérer que l'absorption est nulle en dessous de 1.56 eV dans le CdTe (voir Figure 72). Ceci constitue alors le pire cas, au regard de la pollution des images sous irradiation, puisque les photon émis en dessous de cette énergie se propageront sur d'importantes distances dans le substrat de CdZnTe, de l'ordre de la centaine de micron, avant d'être détectés par la couche photosensible de HgCdTe.

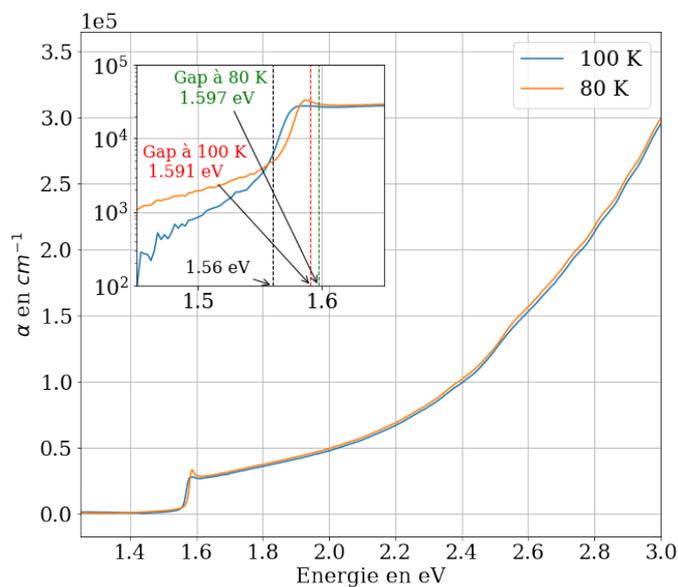


Figure 72- Évolution du coefficient d'absorption du CdTe à 80 K et 100 K, déterminée à partir des indices optiques mesurés (voir Figure 71).

^a Le coefficient d'absorption calculé dans le CdZnTe et le CdTe à 300 K par Adachi et Kimura [41] est lui aussi nul en dessous de l'énergie de gap (voir Annexe F).

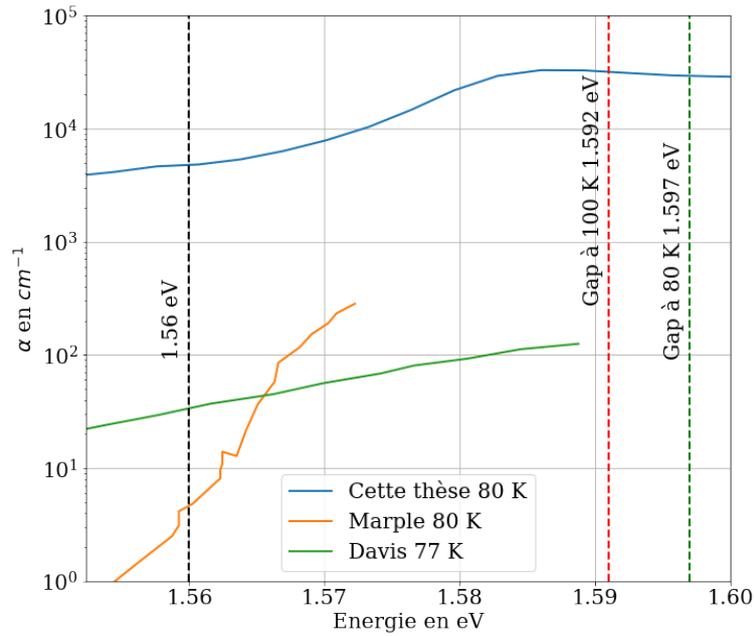


Figure 73 - Coefficient d'absorption du CdTe à 80 K comparé à des données de la littérature [40], zoom sur la bande d'énergie [1.55 eV, 1.60 eV].

3.2.2 Résultats des mesures des fonctions optiques du CdZnTe à 80 K et 100 K

Dans cette sous-section je présente les résultats de mesures d'ellipsométrie sur l'échantillon de CdZnTe à 80 K et 100 K. La valeur de l'indice de réfraction et la valeur du coefficient d'extinction à 80 K sont tracées sur la Figure 74 avec les barres d'erreur associées à la mesure. Alors que le coefficient d'extinction, k , devrait être nul (ou très proche de 0) en dessous du gap, on observe que sa valeur reste grande pour des énergies inférieures à 1.58 eV. Cette observation est d'autant plus marquante dans l'encart de la Figure 75. Sur cette figure, le coefficient d'absorption à 100 K et à 80 K de l'échantillon de CdZnTe est tracé. De manière analogue à ce qui a été effectuée dans le cas du CdTe, on peut estimer la valeur de l'énergie de gap à partir de la position de l'exciton, en supposant que l'énergie de liaison de l'exciton est égale à celle du CdTe, soit 10.6 meV. Ainsi, la valeur de l'énergie de gap du CdZnTe vaut 1.604 eV à 80 K et 1.600 eV à 100 K.

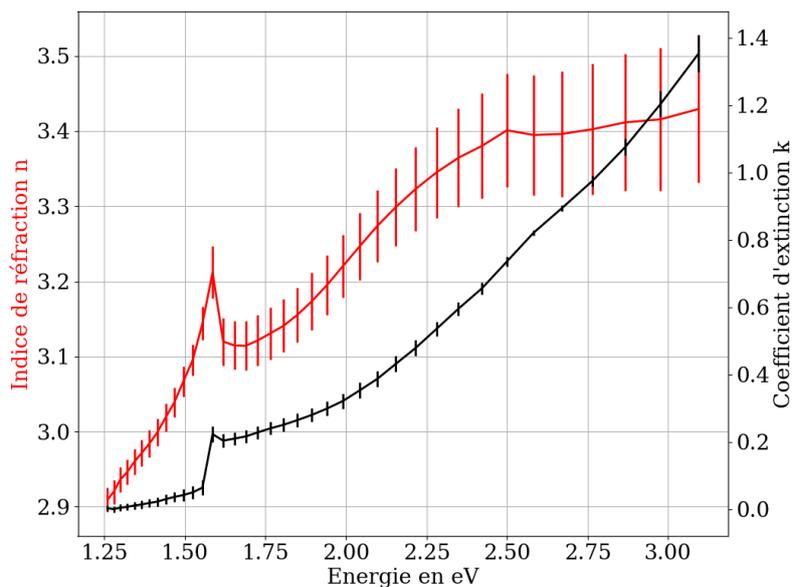


Figure 74 – Mesure d’ellipsométrie de l’indice de réfraction, n (courbe rouge), et coefficient d’extinction, k (courbe noire), du CdZnTe à 80 K

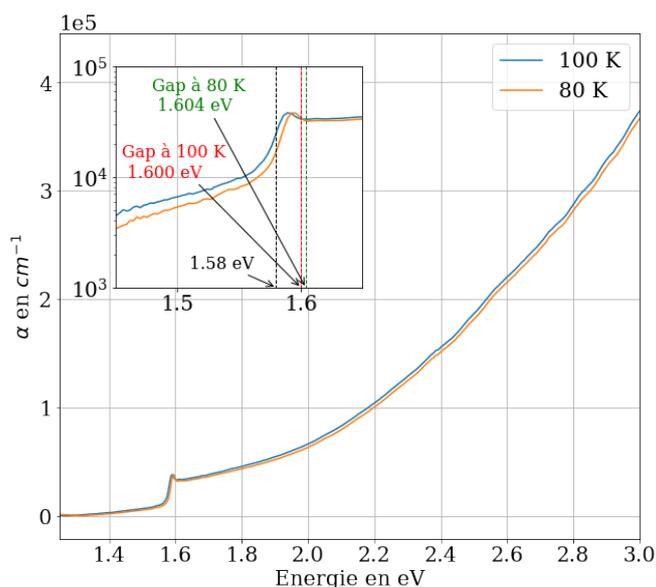


Figure 75 - Évolution du coefficient d'absorption du CdZnTe à 80 K et 100 K, déterminée à partir des indices optiques présentées sur la Figure 74. Dans l’encart un zoom est effectué sur le domaine énergétique suivante [1.45 eV-1.64 eV].

Cette forte absorption en dessous du gap est probablement liée à une erreur de mesure.^a Celle-ci a déjà été observée sur l’échantillon de CdTe, et est plus marquée sur la mesure effectuée sur l’échantillon de CdZnTe. Plusieurs hypothèses peuvent expliquer cette erreur de mesure. Notamment la qualité de la surface de l’échantillon qui n’était probablement pas suffisamment bonne malgré le bain au HCl (voir section 1.2.2) augmentant alors les pertes par absorption. Pour tenter de se

^a Le résultat n’est pas physique, puisque s’il était réaliste, les détecteurs IR avec 800 μm d’épaisseur de substrat ne détecteraient pas de photons dont l’énergie est comprise entre 1.55 eV (800 nm) et environ 1.2 eV (1033 nm). Or ce n’est pas le cas.

débarrasser d'un éventuel oxyde présent en surface, l'échantillon a été chauffé à 450 K avant de redescendre à 80 K. Ce cycle thermique n'a pas permis d'améliorer la mesure. Par ailleurs, l'échantillon de CdZnTe était de plus petite taille que l'échantillon de CdTe. Ainsi, une partie du spot incident de l'ellipsomètre tombait peut-être hors de l'échantillon. On constate néanmoins, que le pic caractéristique du comportement excitonique du matériau est aussi observé sur l'échantillon de CdZnTe (voir l'encart de la Figure 75).

3.3 Récapitulatifs des mesures de propriétés optiques du CdTe et du CdZnTe à 80 K et 100 K

Sur la Figure 76, est tracé le coefficient d'absorption (en bleu) superposé avec le spectre de CL (en noir) mesurés pour le CdTe à 80 K. On constate que l'absorption est forte au niveau du maximum d'émission identifié sur le spectre de CL, et vaut $3.2 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$. Ce qui suggère que ces photons ne se propageront pas sur d'importantes distances dans le substrat de CdZnTe.

Le spectre de CL sur cette est divisé en deux régions. La première comprend 90.6 % de l'intensité intégrée du signal de CL. Elle correspond à la région où l'absorption est forte, et vaut en moyenne sur ce domaine spectral $2.1 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$. Ainsi la longueur d'absorption de ces photons, défini comme l'inverse du coefficient d'absorption, sera très courte pour ces photons, 470 nm. Autrement dit les photons émis dans ce domaine spectral parcourront en moyenne 470 nm avant d'être absorbés.

La seconde région correspond à la région d'émission associée à la présence de défauts profonds dans la bande d'énergie interdite, elle représente 9.4 % de l'intensité intégrée. Ce second domaine spectral se situe en dessous de l'énergie de gap, là où l'absorption devrait être faible. Or, comme nous l'avons vu, l'absorption mesurée dans cette gamme d'énergie est élevée. C'est pourquoi dans la suite de notre étude, dans le cadre de l'application du modèle développé dans cette thèse et présenté dans le chapitre 2, **je vais considérer que dans ce domaine d'énergie le coefficient d'absorption est nul.**

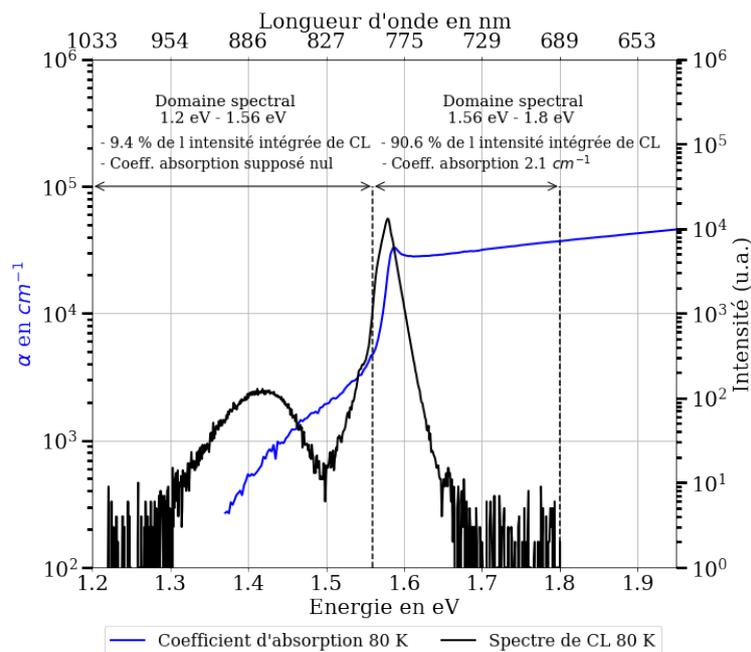


Figure 76 - Superposition du spectre de CL (en noir) et du spectre d'absorption du CdTe (en bleu) mesuré à 80 K.

Les mesures des fonctions diélectriques effectuées sur l'échantillon de CdTe semblent être meilleures. En effet, l'absorption mesurée sous l'énergie de gap était particulièrement élevée dans le cas du CdZnTe. Ainsi dans la suite, j'utiliserai les fonctions diélectriques du CdTe pour remplacer celles du CdZnTe dans l'application du modèle. Celles-ci seront décalées de 19 meV lorsqu'il s'agira de l'échantillon de A et de 30 meV lorsqu'il s'agira de l'échantillon B, afin de tenir compte du décalage de gap entre le CdTe et le CdZnTe (voir Tableau 18). Par ailleurs la quantité de zinc dans l'alliage étant faible, il est acceptable d'approximer les données du CdZnTe avec celle du CdTe. Les spectres de CL du CdZnTe à 80 K des deux échantillons A et B superposés au coefficient d'absorption du CdTe décalé de 19 meV et 30 meV respectivement en énergie sont présentés sur la Figure 77. De manière analogue à ce qui a été observé dans le cas du CdTe, l'absorption est forte dans la région principale d'émission. **Seule une fraction des photons de luminescence, 5.7 % pour l'échantillon A et 3 % pour l'échantillon B, sont émis dans un domaine spectral où l'absorption sera supposée nulle dans la suite de cette thèse.**

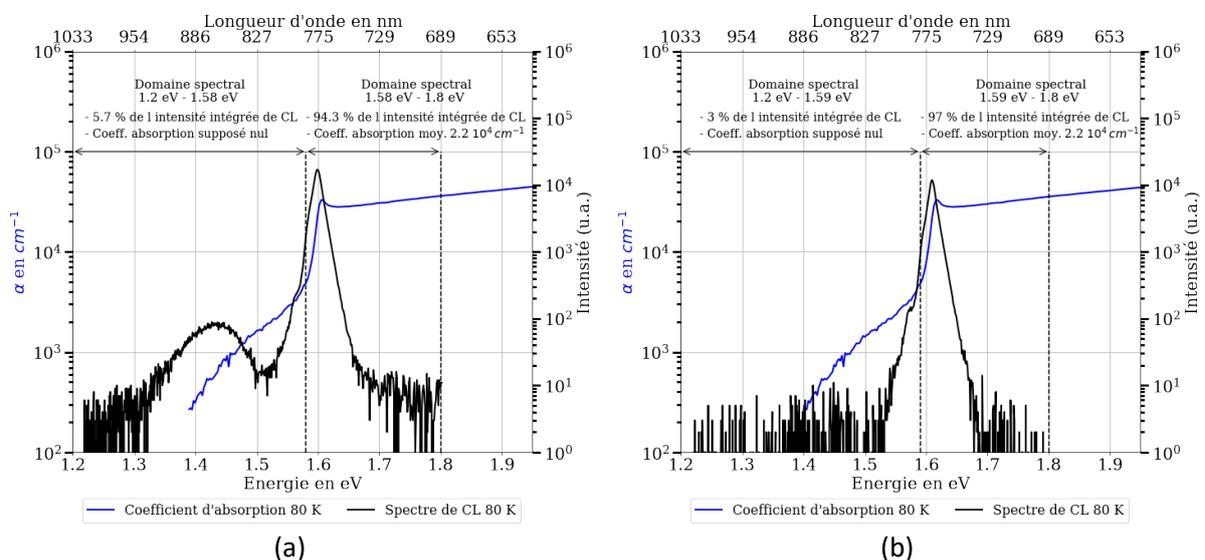


Figure 77 – (a) Superposition du spectre de CL de l'échantillon A de CdZnTe et du spectre d'absorption du CdTe à 80 K décalé de 19 meV pour tenir compte du décalage de gap. (b) Superposition du spectre de CL de l'échantillon B de CdZnTe et du spectre d'absorption du CdTe à 80 K décalé de 30 meV pour tenir compte du décalage de gap.

Dans le modèle développé et décrit dans le chapitre 2, outre les propriétés optiques, les propriétés électriques (en particulier la longueur de diffusion des porteurs) jouent un rôle majeur dans l'estimation de la pollution d'images sous irradiation. C'est une grandeur clefs dans la modélisation de la diffusion des porteurs dans le substrat. En effet, la longueur de diffusion caractérise la distance moyenne parcourue par un porteur avant de se recombiner. Ces données sont absentes de la littérature aux températures de fonctionnement des détecteurs IR qui nous intéressent. C'est pourquoi, j'ai effectué des mesures de longueur de diffusion sur ces échantillons de CdTe et CdZnTe. Les résultats de ces mesures ne sont pas encore suffisamment matures étant donné que les mesures ont été effectuées en fin de thèse. Seuls des résultats préliminaires sont présentés dans la section suivante.

4 Vers une mesure de la longueur de diffusion dans le CdZnTe

4.1 Principe de mesure de la longueur de diffusion des porteurs

L'objectif de cette expérience est de déterminer expérimentalement la longueur de diffusion des porteurs dans des échantillons de CdZnTe représentatifs des substrats utilisés dans la fabrication des détecteurs IR HgCdTe. Cette grandeur sera ensuite utilisée comme paramètre d'entrée du modèle développé dans cette thèse. Le principe de la mesure est illustré sur la Figure 78. La mesure a été effectuée avec le banc expérimental utilisé pour les mesures CL. La température des échantillons peut alors varier de 4 K à 300 K (voir 1.1.3.2).

Cette méthode s'appuie sur la collection de photons de luminescence générés par l'interaction des électrons du canon à électrons avec le matériau pour différentes positions du canon à électrons. Une partie de l'échantillon est masquée avec un dépôt métallique ; suffisamment fine pour laisser passer des électrons mais aussi suffisamment épaisse pour absorber les photons de luminescence. Sur l'échantillon de CdZnTe sur lequel la mesure a été effectuée, ce dépôt métallique fait environ 25 nm d'épaisseur. Celui-ci est en platine et a été déposé avec une méthode de lithographie. La préparation de l'échantillon a été réalisée au CEA-LETI par Julie Abergel.

Avec ce dispositif expérimental, en balayant avec le canon à électrons, dans la direction transverse à l'interface entre le dépôt métallique et la partie non masquée de l'échantillon, on peut extraire la valeur de la longueur de diffusion. Elle s'obtient à partir des courbes d'intensité de luminescence en fonction de la position du canon à électrons. En effet, ce dernier génère des porteurs dans le CdZnTe sous la partie masquée. Ces porteurs générés vont diffuser puis se recombiner. Une partie de cette recombinaison est radiative. En fonction de la distance à l'interface entre la région masquée et la région non masquée, la fraction de photons collectés par le détecteur lors de la désexcitation des paires électron-trou varie.

Loin de l'interface, les porteurs générés par le canon à électrons sous le masque métallique vont diffuser puis se recombiner de manière radiative. Ces photons seront absorbés par la couche métallique et ne seront pas détectés. En revanche, en s'approchant de l'interface, les paires électron-trou générées par les électrons énergétiques vont diffuser, puis une fraction des photons émis par recombinaison radiative va être collectée par le détecteur. La probabilité pour que les photons soient collectés augmente à mesure que le canon à électrons s'approche de l'interface. Ceci est illustré sur la courbe à droite sur la Figure 78, où on observe que l'intensité lumineuse mesurée par le détecteur augmente lorsque l'on s'approche de l'interface positionnée en $z = 0$.

Les premiers résultats obtenus avec ce dispositif expérimental sont présentés dans la section suivante.

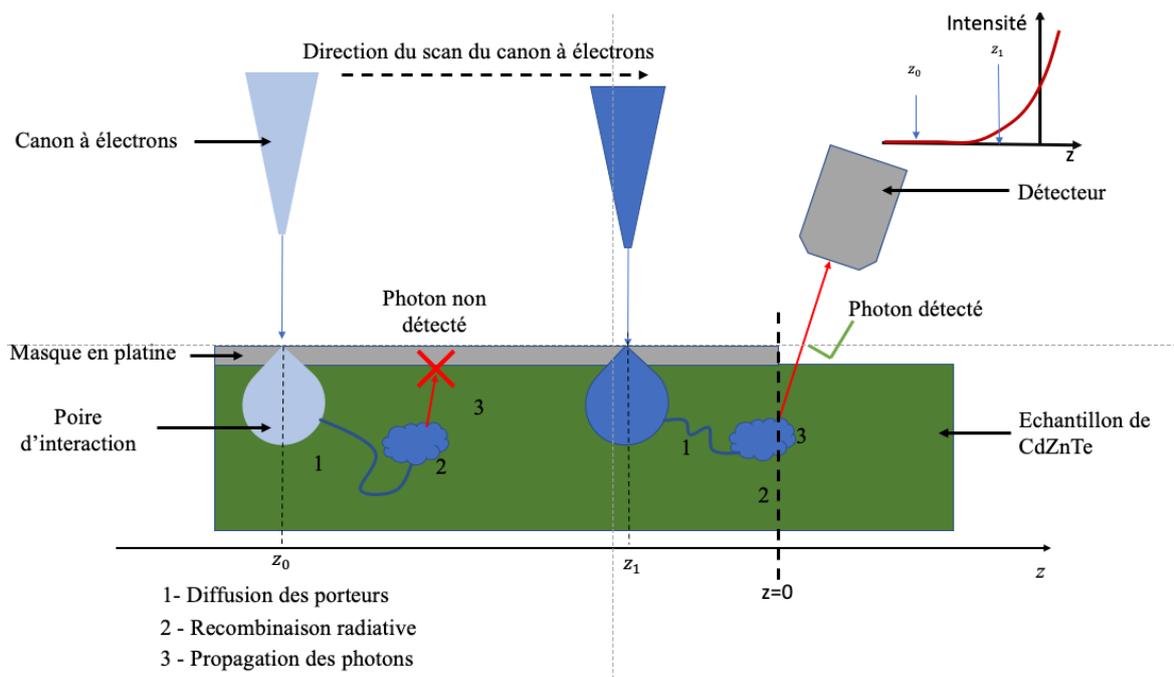


Figure 78 - Schéma illustrant le principe de mesure de la longueur de diffusion des porteurs dans le CdZnTe.

4.2 Résultats préliminaires de la mesure de longueur de diffusion des porteurs dans le CdZnTe

Les résultats des premières mesures effectuées à 40 K sont présentés sur la Figure 79. On observe que l'intensité lumineuse augmente au fur et à mesure que l'on s'approche du bord du masque. Le détecteur possède un système dispersif si bien que l'intensité obtenue pour une position z donnée est déterminée par intégration de la bande principale d'émission du spectre de luminescence mesuré par le détecteur. L'interface entre la zone masquée et la zone non masquée est localisée en $z = 0$. L'ajustement avec une fonction exponentielle permet d'extraire de ces mesures la longueur de diffusion, et estimée ici $1.87 \mu\text{m}$.

Cette approche néglige l'extension de la poire d'interaction générée par les électrons de 10 keV du canon à électrons. Cependant, la taille caractéristique de la poire d'interaction attendue est de l'ordre de plusieurs centaines de nanomètres pour des électrons de 10 keV. L'interprétation des données pourra dans la suite être approfondie pour tenir compte de l'extension radiale de la distribution de porteurs générés par les électrons énergétiques [42].

Ainsi, ces mesures doivent être complétées et approfondies. En effet, aucune préparation de la surface de l'échantillon n'a été effectuée. Il s'agissait lors de ces premières mesures de valider le protocole expérimental (luminescence de l'échantillon, épaisseur du dépôt métallique) avant de poursuivre les mesures. La qualité de surface est d'une importance capitale dans la mesure où les porteurs générés par la poire d'interaction sont excités très proche de l'interface (quelques nanomètres). Lorsque la surface d'un matériau semi-conducteur est de mauvaise qualité cristalline, les recombinaisons de surface non radiative sont favorisées. Par conséquent, d'autres mesures doivent être réalisées sur des échantillons dont la surface a préalablement été préparée.

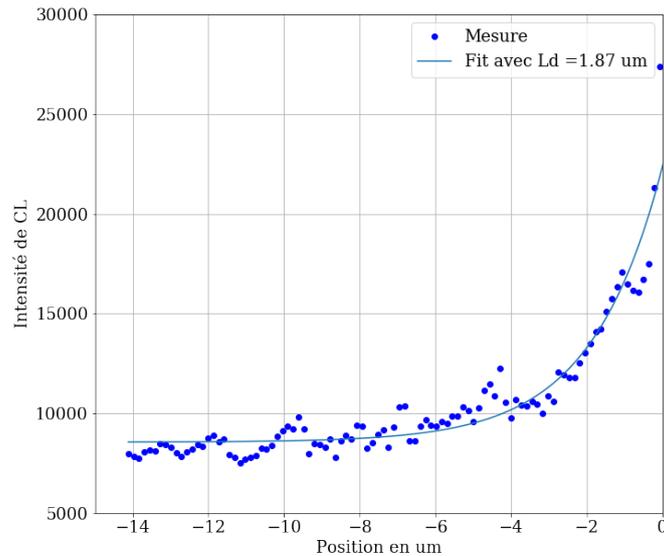


Figure 79 - Mesure de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires sur l'échantillon A de CdZnTe à 40 K.

Ainsi, les mesures que j'ai effectuées sur les échantillons de CdTe et de CdZnTe m'ont permis de déterminer les propriétés optiques de ces matériaux semi-conducteur. Ces données servent de paramètres d'entrée au modèle qui simule la réponse de détecteurs de technologie HgCdTe non amincis sous irradiation. Dans la section suivante, je récapitule la démarche de mon modèle ainsi que les différentes propriétés matériaux utilisées comme paramètres. Enfin, je mets en application ce modèle pour simuler la réponse d'un détecteur de technologie HgCdTe avec 800 μm de substrat résiduel sous irradiation de protons de 63 MeV.

5 Application du modèle à partir des mesures de propriétés matériaux

5.1 Rappels de la démarche générale

Pour rappel, le modèle développé dans le chapitre 2 s'appuie sur le calcul du profil de génération de paires électron-trou dans la structure du détecteur, qui est déterminé à partir des simulations Monte Carlo de GEANT4. Ce résultat sert ensuite d'entrée aux modèles de transport dans les structures semi-conductrices. La luminescence du substrat de CdZnTe et la diffusion des porteurs du CdZnTe vers le HgCdTe sont modélisées analytiquement, tandis que le transport des porteurs dans le HgCdTe est simulé avec des méthodes d'éléments finis. L'objectif du modèle est d'étudier la réponse des détecteurs de type HgCdTe sous irradiation de protons en fonction de l'épaisseur du substrat de CdZnTe. Le modèle a été développé en particulier pour les détecteurs ALFA dont la température de fonctionnement nominale est égale à 100 K. Les propriétés matériaux du CdZnTe et du HgCdTe sont résumées dans le Tableau 20 et le Tableau 21 respectivement. Les propriétés optiques du CdZnTe sont issues des campagnes de mesures expérimentales. J'utilise ces données comme paramètres d'entrée dans ma simulation.

5.1.1 Propriétés matériaux du CdZnTe à 80 K

Dans la mesure où les résultats de mesures de longueur de diffusion ne sont pas suffisamment matures j'ai utilisé les données de la littérature pour calculer cette grandeur électronique à partir de la mobilité. Les mobilités électriques des électrons et des trous dans le CdZnTe sont approximées par celles de l'alliage binaire CdTe. Leur expression, dans le domaine de température allant de 80 à 350 K est donnée par l'équation (5-1) pour les électrons et par l'équation (5-2) pour les trous [43], où T est la température exprimée en kelvin. Ces équations sont tracées en fonction de la température sur la Figure 80. On observe que la mobilité (en particulier celle des électrons) augmente lorsque la température diminue. Ces équations sont issues d'un ajustement de mesures expérimentales effectuées sur des échantillons de CdTe de bonnes qualités cristallines.

$$\mu_e(\text{en cm}^2/\text{V.s}) = 56 \sqrt{T} \left(\exp\left(\frac{261}{T}\right) - 1.33 \right) \quad (5-1)$$

$$\mu_h(\text{en cm}^2/\text{V.s}) = 57 \left(\exp\left(\frac{252}{T}\right) - 1 \right) \quad (5-2)$$

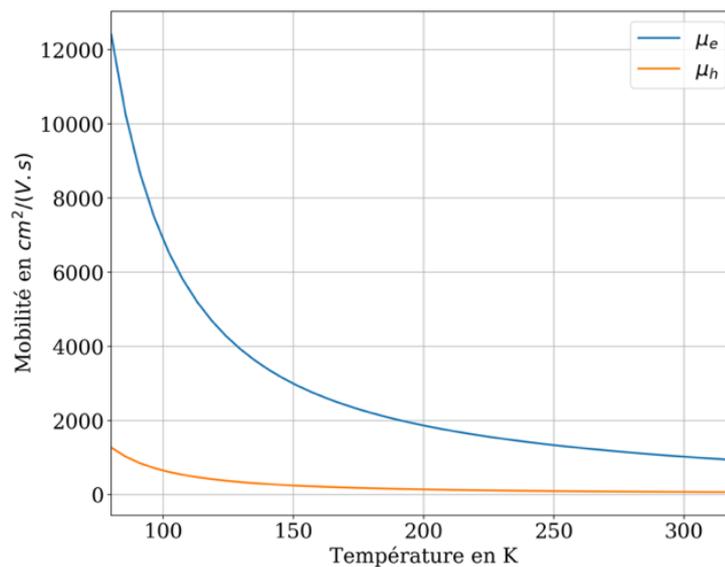


Figure 80 - Évolution de la mobilité des électrons et des trous en fonction de la température dans le CdTe, d'après les expressions extraites de [11].

A partir de l'expression de la mobilité on peut obtenir la valeur du coefficient de diffusion des électrons (noté D_e) et des trous (noté D_h) grâce à la relation d'Einstein [44] retranscrite par l'équation (5-3).

$$D_i = \mu_i \frac{k_B T}{q} \quad (5-3)$$

Où $i \in \{e, h\}$ et désigne soit les électrons (e) ou les trous (h), k_B est la constante de Boltzmann, T la température et q est la charge fondamentale. Le temps de vie des porteurs est égale à 330 ns [45] et

correspond au temps de vie des porteurs minoritaires dans des échantillons de CdTe de bonne qualité cristalline non intentionnellement dopés à 300 K.

La longueur de diffusion ambipolaire, L_d , est définie comme la racine carré du produit du coefficient de diffusion par le temps de vie des porteurs [44]. Cette distance vaut $12.5 \mu\text{m}$ à 80 K dans notre cas et correspond à la distance moyenne parcourue par les porteurs avant de se recombiner. Par ailleurs, je considère le pire cas en supposant que l'efficacité quantique interne est égale à 1. Autrement dit tous les porteurs se recombinent de manière radiative dans le matériau.

Tableau 20 - Résumé des données matériaux du CdZnTe à 80 K utilisés dans l'application du modèle

	Valeur	Ref
Propriétés électriques		
Masse effective des électrons m_e^*	$0.096 m_0$	[5]
Masse effective des trous m_h^*	$0.66 m_0$	[5]
Mobilité des électrons μ_e ($\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$)	1.27×10^4	[43]
Mobilité des trous μ_h ($\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$)	1.10×10^4	[43]
Coefficient de diffusion des électrons D_e ($\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1}$)	8.77	Calculé
Coefficient de diffusion des trous D_h ($\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1}$)	75.99	Calculé
Coefficient de diffusion ambipolaire D^* ($\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1}$)	15.74	Calculé
Temps de vie des porteurs τ (ns)	330	[45]
Longueur de diffusion ambipolaire L^* (μm)	12.5	Calculé
Efficacité quantique interne η	1	
Propriétés optiques		
Spectre de luminescence γ_{spont}		Nos mesures
Coefficient de transmission à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe	1.0 (supposé achromatique et indépendant de l'angle d'incidence)	Calculé
Coefficient de réflexion à l'interface entre le CdZnTe et le vide	0.82 (supposé achromatique et indépendant de l'angle d'incidence)	Calculé

Les propriétés optiques du CdZnTe sont issues des campagnes de mesures effectuée sur les échantillons de CdZnTe représentatifs des substrats utilisés dans la fabrication des détecteurs IR de type HgCdTe. Le spectre de luminescence ainsi obtenu et le coefficient d'absorption moyen sont rappelés dans le Tableau 20. Les calculs du coefficient de transmission à l'interface entre le HgCdTe et le CdZnTe et le coefficient de réflexion à l'interface entre le CdZnTe et le vide sont basés sur les équations de Fresnel (voir chapitre 2).

5.1.2 Propriétés matériaux du HgCdTe à 80 K

Les propriétés électriques du HgCdTe représentatives des détecteurs ALFA sont présentées dans le Tableau 21. La longueur de diffusion correspond approximativement à la taille du pas pixel. Le temps de vie des porteurs est égal à 1 μ s et l'indice de réfraction du HgCdTe est supposé indépendant de la longueur d'onde et est égale à 2.90. Ces données sont utilisées pour simuler le transport des porteurs dans la couche photosensible de HgCdTe. Quant à l'indice de réfraction, il est utilisé pour déterminer le coefficient de transmission de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe.

Tableau 21 - Résumé des propriétés matériaux du HgCdTe à 80 K utilisés dans l'application du modèle.

	80 K
<i>Longueur de diffusion ambipolaire</i>	15 μ m
<i>Temps de vie des porteurs</i>	1 μ s
<i>Indice de réfraction</i>	2.90
<i>Efficacité quantique</i>	0.90

Après avoir présenté les données matériaux utilisés pour le CdZnTe et le HgCdTe dans le modèle, je comparerai dans la sous-section suivante la contribution photonique et la contribution de la diffusion sur la pollution du signal. J'appliquerai ensuite le modèle au cas d'un détecteur ayant 800 μ m de substrat résiduel sous irradiation de protons de 63 MeV. Dans le chapitre 4, je confronterai, les résultats de simulations aux données expérimentales.

5.2 Application du modèle

5.2.1 Comparaison de la contribution photonique et de diffusion

Le modèle développé dans le chapitre 2, considère que deux processus, produits de l'interaction avec le substrat, sont à l'origine de la pollution des images sous irradiation dans les détecteurs IR de technologie HgCdTe, à savoir :

- La diffusion des porteurs du substrat de CdZnTe vers le HgCdTe (exprimée par l'équation (3.16) du chapitre 2)
- **La collection des photons de luminescence émis par recombinaison radiative des porteurs dans le substrat de CdZnTe** (exprimé par l'équation (3.31) du chapitre 2) détectés ensuite par le HgCdTe. Ici je distingue deux contributions : les photons dont l'énergie est inférieure au gap qui seront peu absorbés (3 % des photons) et les photons dont l'énergie est supérieure au gap qui représente 97 % du signal de CL.

A partir, des paramètres matériaux présentés dans la sous-section précédente, je vais maintenant comparer ces deux contributions en considérant un proton incident d'énergie 63 MeV. Leurs évolutions en fonction de la distance radiale au point d'impact (supposé en $r = 0$) pour deux épaisseurs de substrats (800 μm et 50 μm) sont tracées sur la Figure 81 (a) et (b). D'après le modèle, on observe que c'est le phénomène de diffusion qui domine proche de la trajectoire du proton. Celui-ci est plusieurs ordres de grandeurs supérieur aux deux contributions photoniques. Cette observation est valable pour les résultats des simulations effectuées pour les deux épaisseurs de substrat. En revanche, la contribution photonique associée à l'émission de photons dont l'énergie est inférieure à l'énergie de gap du CdZnTe, (qui représentent 3 % des photons de luminescence) devient le principal processus de pollution lorsque l'on s'éloigne de l'impact du proton. Cette contribution est d'autant plus importante que le substrat est épais. En revanche, la contribution des photons qui constituent la majeure partie du spectre de photoluminescence (97 %), restent minoritaire. Ce résultat est attendu dans la mesure où l'absorption est forte, ces photons ne se propageront pas sur de grandes distances dans le substrat de CdZnTe.

Ainsi, d'après le modèle et à partir des paramètres matériaux présentés, la diffusion des porteurs du CdZnTe vers le HgCdTe constitue la principale source de pollution du signal mesuré par les pixels situés proche de l'impact du proton. En revanche, le signal collecté par les pixels loin du point d'impact est majoritairement pollué par la contribution des photons de luminescence émis en dessous de l'énergie gap.

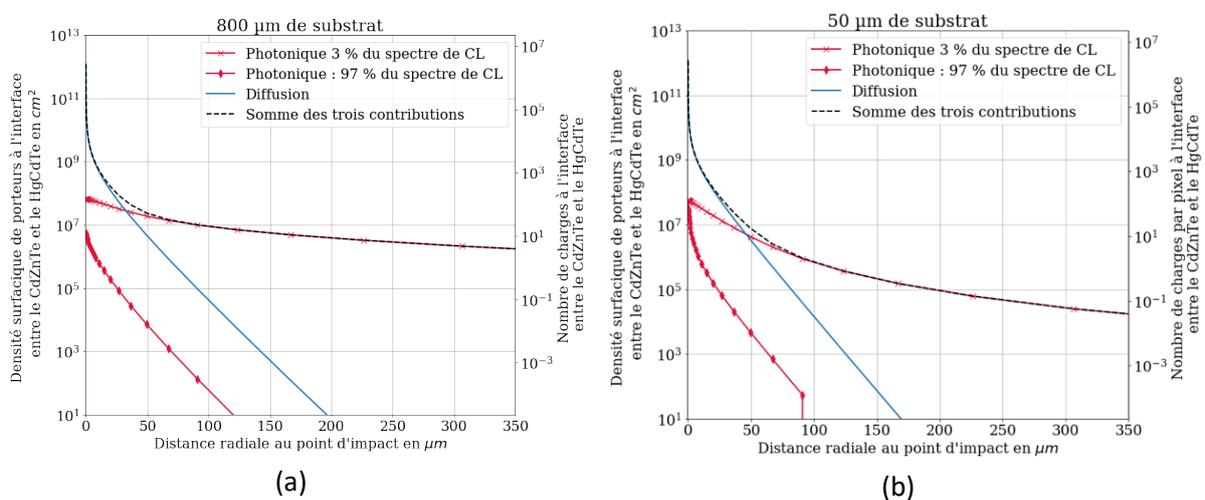


Figure 81 - Évolution en fonction de la distance radiale au point d'impact du proton de la contribution photonique (trait tiré) et de diffusion (trait plein) pour deux épaisseurs de substrat : 800 μm (en rouge) et 30 μm (en bleu). Ce calcul considère un proton d'énergie de 63 MeV.

5.2.2 Image simulée : en considérant un proton de 63 MeV incident sur un détecteur ayant 800 μm d'épaisseur de substrat.

A partir des densités surfaciques de charges présentées dans la section précédente, en ajoutant la contribution du dépôt d'énergie dans le HgCdTe, je peux simuler des images à partir d'une distribution

d'impact. J'ai simulé une image en considérant des protons de 63 MeV, incidents sur un détecteur dont le substrat de CdZnTe fait 800 μm . De plus, j'ai considéré un flux de 5 protons/s/cm² avec un temps d'intégration de 400 s. Ces conditions correspondent aux conditions d'irradiation des détecteurs lors de la campagne d'irradiation que j'ai menée, dont les résultats sont présentés dans le chapitre suivant. Une moitié du détecteur est par ailleurs masquée, de sorte que les protons sont incidents que sur une région du détecteur. L'image obtenue à la fin de l'acquisition est présentée sur la Figure 82. On observe sur cette image les différents impacts et un signal de fond plus élevé dans la région irradiée.

Un cluster simulé est présenté sur la Figure 83 (a). J'appelle cluster l'ensemble des pixels affectés par un proton. On observe que le signal est principalement collecté par le pixel central sur lequel le proton est incident et qu'un signal faible est observé dans les pixels voisins. En effet, on observe sur le profil radial du cluster simulé la présence d'un signal faible dans les pixels autour du point d'impact. Ce profil radial est calculé en calculant la moyenne des pixels à équidistance du pixel central. Les observations effectuées sur les images simulées sont comparées dans le chapitre suivant aux observations effectuées sur des images acquises sous irradiation lors de la campagne d'irradiation.

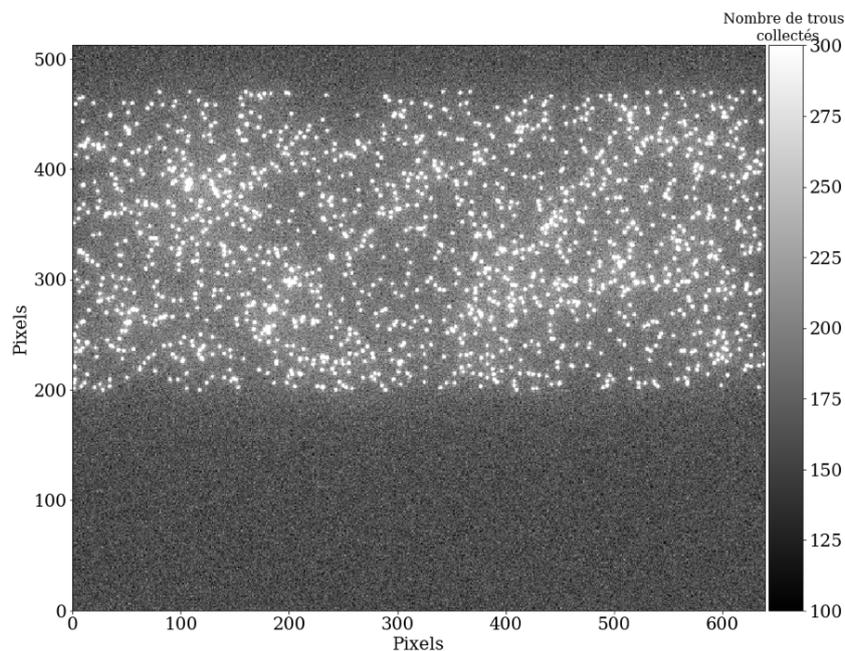


Figure 82 - Image *simulée* d'un détecteur avec 800 μm de substrat après un temps d'intégration de 400 s sous un flux de 5 protons/s/cm² dont l'énergie est de 63 MeV.

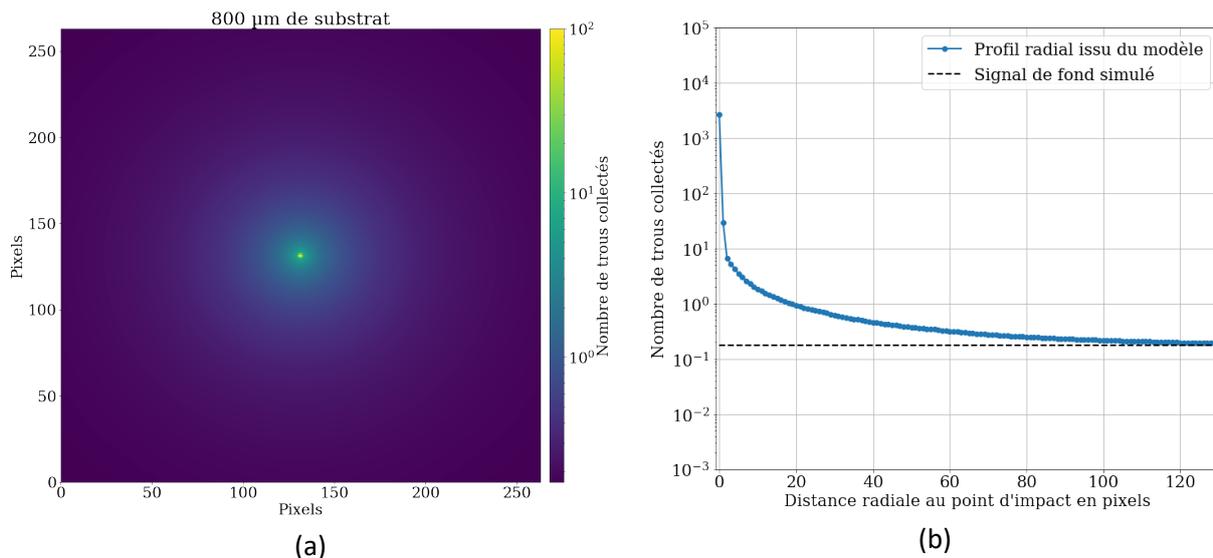


Figure 83 - (a) Cluster simulé en considérant un proton de 63 MeV incident sur un détecteur ayant 800 μm d'épaisseur de substrat de CdZnTe. (b) Profil radial du cluster simulé.

6 Conclusions du chapitre

L'objectif des mesures de propriétés optiques du CdZnTe à 80 K et 100 K était d'alimenter le modèle développé dans cette thèse, présenté dans le chapitre précédent. Ainsi, les propriétés de luminescence d'échantillons de CdZnTe, représentatifs des substrats utilisés dans la fabrication des détecteurs IR, ont été mesurées. Afin d'utiliser ces mesures de luminescence dans le modèle, je fais l'hypothèse que le spectre de luminescence induit par des protons est identique au spectre de cathodoluminescence (induit par des électrons)^a.

Dans les échantillons de bonne qualité cristalline, les photons de luminescence émis par désexcitation radiative de porteurs thermalisés sont émis proche de l'énergie de gap du matériau. Néanmoins, j'ai observé une bande d'émission supplémentaire dans les échantillons de moins bonne qualité. Celle-ci serait associée à la présence de lacunes de cadmium dans l'échantillon. Bien que de très faible intensité, cette bande d'émission correspond à un domaine spectral où l'absorption est faible. Par conséquent, les photons dans cette gamme d'énergie seront potentiellement une source non négligeable de pollution.

Par ailleurs, la distance parcourue par ces photons de luminescence dans le substrat est un élément clef de la modélisation. Ainsi, les coefficients d'absorption d'échantillons de CdTe et de CdZnTe ont été mesurés avec un ellipsomètre. Les mesures effectuées sur l'échantillon de CdZnTe à 80 K et 100 K ne sont pas fructueuses, puisque la qualité de la mesure effectuée n'était pas suffisamment bonne. Ainsi dans la suite, j'utiliserai les valeurs du coefficient d'absorption du CdTe en tenant compte du décalage spectral induit par la différence d'énergie de gap entre les différents matériaux.

^a Dans la mesure où l'on suppose que les photons émis par transition radiative dans le substrat sont émis par recombinaison de porteurs thermalisés, cette hypothèse est acceptable.

Nous avons alors constaté qu'à partir des mesures de luminescence et d'absorption, la distance parcourue par les photons de luminescence émis proche du gap était très courte, environ 500 nm. Si bien que des photons émis par transitions radiatives dans le CdZnTe, loin de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe, n'auront que très peu de chance de se propager jusqu'à la couche photosensible de HgCdTe. En revanche, une fraction des photons de luminescence (jusqu'à 10 % dans le cas du CdTe) sera émise dans un domaine spectral où l'absorption est supposée nulle. Ces photons se propageront alors sur d'importantes distances dans le substrat avant d'être potentiellement détectés par la couche de HgCdTe.

Par ailleurs, dans le cadre d'une caractérisation plus complète des échantillons, des spectres de PL ont été acquis sur les différents échantillons de 4 K jusqu'à 50 K. Nous avons observé que les recombinaisons de type excitoniques dominaient les spectres de PL.

De plus, des résultats préliminaires de mesures de longueur de diffusion dans le CdZnTe ont été présentés. Cependant, l'expérience et les résultats obtenus ne sont pas suffisamment matures pour pouvoir être intégré dans l'application du modèle. C'est pourquoi, dans la suite, seules les données de matériaux de propriétés optiques du CdZnTe sont utilisées dans différents cas d'étude.

Enfin, la dernière section de ce chapitre se consacre à l'application du modèle en s'appuyant sur les propriétés optiques du CdZnTe mesurées. Les propriétés électriques s'appuient quant à elles sur les données de la littérature. J'ai comparé la contribution des différentes sources de pollution : diffusion et luminescence. J'ai observé au travers de cette comparaison que la diffusion était le principal processus de pollution des pixels proches de l'impact du proton et que l'émission de photons de faibles énergies était la source d'une importante extension du profil radial d'un cluster. Dans le chapitre suivant, je vais comparer les résultats de simulation aux données expérimentales après avoir présenté la campagne d'irradiation.

Références

- [1] P. Y. Yu et M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [2] Z.-F. Li, W. Lu, G. S. Huang, J. R. Yang, L. He, et S. C. Shen, « Microphotoluminescence mapping on CdZnTe: Zn distribution », *Journal of Applied Physics*, vol. 90, n° 1, p. 260-264, juill. 2001, doi: 10.1063/1.1378062.
- [3] R. Pässler *et al.*, « Temperature dependence of exciton peak energies in ZnS, ZnSe, and ZnTe epitaxial films », *Journal of Applied Physics*, vol. 86, p. 4403-4411, oct. 1999, doi: 10.1063/1.371378.
- [4] H. Leiderer *et al.*, « Investigation of strain in metalorganic vapor-phase epitaxy grown ZnTe layers by optical methods », *Journal of Applied Physics*, vol. 70, n° 1, p. 398-404, juill. 1991, doi: 10.1063/1.350288.
- [5] P. Capper, *Properties of Narrow Gap Cadmium-based Compounds*. IET, 1994.
- [6] P. Horodyský et P. Hlídek, « Free-exciton absorption in bulk CdTe: temperature dependence: Free-exciton absorption in bulk CdTe: temperature dependence », *Phys. Status Solidi B*, vol. 243, n° 2, p. 494-501, févr. 2006, doi: 10.1002/pssb.200541402.
- [7] G. Fonthal, L. Tirado-Mejía, J. I. Marín-Hurtado, H. Ariza-Calderón, et J. G. Mendoza-Alvarez, « Temperature dependence of the band gap energy of crystalline CdTe », *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 61, n° 4, p. 579-583, avr. 2000, doi: 10.1016/S0022-3697(99)00254-1.
- [8] F. Gemain, « Etudes spectroscopiques du dopage dans les matériaux II-VI pour les détecteurs infrarouge et les cellules photovoltaïques », phdthesis, Université de Grenoble, 2012.
- [9] *CdTe and Related Compounds; Physics, Defects, Hetero- and Nano-structures, Crystal Growth, Surfaces and Applications*. Elsevier, 2010.
- [10] S. Jain, « Photoluminescence study of cadmium zinc telluride », MS, West Virginia University Libraries, 2001.
- [11] J. Lee, N. C. Giles, D. Rajavel, et C. J. Summers, « Room-temperature band-edge photoluminescence from cadmium telluride », *Phys. Rev. B*, vol. 49, n° 3, p. 1668-1676, janv. 1994, doi: 10.1103/PhysRevB.49.1668.
- [12] F. Molva, J. P. Chamonal, et J. L. Pautrat, « Shallow Acceptors in Cadmium Telluride », *physica status solidi (b)*, vol. 109, n° 2, p. 635-644, févr. 1982, doi: 10.1002/pssb.2221090222.
- [13] D. Brellier *et al.*, « Bulk Growth of CdZnTe: Quality Improvement and Size Increase », *Journal of Elec Materi*, vol. 43, n° 8, p. 2901-2907, août 2014, doi: 10.1007/s11664-014-3146-x.
- [14] D. J. Olego, J. P. Faurie, S. Sivananthan, et P. M. Raccah, « Optoelectronic properties of Cd_{1-x}Zn_xTe films grown by molecular beam epitaxy on GaAs substrates », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 47, n° 11, p. 1172-1174, déc. 1985, doi: 10.1063/1.96316.
- [15] S. Jain, « Photoluminescence study of cadmium zinc telluride », *Ph.D dissertation, West Virginia University*, 2001.
- [16] J. M. Francou, K. Saminadayar, et J. L. Pautrat, « Shallow donors in CdTe », *Physical Review B*, 1990, doi: 10.1103/PhysRevB.41.12035.
- [17] J. Lee et N. C. Giles, « Low-temperature photoluminescence from bulk CdTe and Cd_{0.967}Zn_{0.033}Te », *Journal of Applied Physics*, 1995, doi: 10.1063/1.360356.
- [18] H. Y. Shin et C. Y. Sun, « The exciton and edge emissions in CdTe crystals », *Materials Science and Engineering B*, vol. 52, n° 1, p. 78-83, 1998, doi: 10.1016/S0921-5107(97)00145-1.
- [19] J. P. Chamonal, E. Molva, et J. L. Pautrat, « Identification of Cu and Ag acceptors in CdTe », *Solid State Communications*, 1982, doi: 10.1016/0038-1098(82)90843-2.

- [20] K. Hjelt, M. Juvonen, T. Tuomi, S. Nenonen, E. E. Eissler, et M. Bavdaz, « Photoluminescence of Cd_{1-x}Zn_xTe crystals grown by high-pressure bridgman technique », *Physica Status Solidi (A) Applied Research*, vol. 162, n° 2, p. 747-763, 1997, doi: 10.1002/1521-396X(199708)162:2<747::AID-PSSA747>3.0.CO;2-2.
- [21] J. Hamann *et al.*, « Identification of Ag-acceptor related photoluminescence in 111Ag doped CdTe », *Applied Physics Letters*, 1998, doi: 10.1063/1.121530.
- [22] E. Molva, J. L. Pautrat, K. Saminadayar, G. Milchberg, et N. Magnea, « Acceptor states in CdTe and comparison with ZnTe. General trends », *Physical Review B*, 1984, doi: 10.1103/PhysRevB.30.3344.
- [23] S. Seto, A. Tanaka, Y. Masa, S. Dairaku, et M. Kawashima, « Annealing behavior of bound exciton lines in high quality CdTe », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 53, n° 16, p. 1524-1526, oct. 1988, doi: 10.1063/1.99945.
- [24] H.-Y. Shin et C.-Y. Sun, « The exciton and edge emissions in CdTe crystals », *Materials Science and Engineering: B*, vol. 52, n° 1, p. 78-83, mars 1998, doi: 10.1016/S0921-5107(97)00145-1.
- [25] F. Gemain, « Etudes spectroscopiques du dopage dans les matériaux II-VI pour les détecteurs infrarouge et les cellules photovoltaïques », Université Joseph Fourier - Grenoble I, 2012.
- [26] C. B. Norris et C. E. Barnes, « Cathodoluminescence studies of the 1.4 eV bands in CdTe », *Rev. Phys. Appl. (Paris)*, vol. 12, n° 2, p. 219-227, 1977, doi: 10.1051/rphysap:01977001202021900.
- [27] M. Fiederle, A. Fauler, J. Konrath, V. Babentsov, J. Franc, et R. B. James, « Comparison of undoped and doped high resistivity CdTe and (Cd,Zn)Te detector crystals », in *2003 IEEE Nuclear Science Symposium. Conference Record (IEEE Cat. No.03CH37515)*, oct. 2003, vol. 5, p. 3478-3482 Vol.5, doi: 10.1109/NSSMIC.2003.1352661.
- [28] J. Krustok, V. Valdna, K. Hjelt, et H. Collan, « Deep center luminescence in p -type CdTe », *Journal of Applied Physics*, vol. 80, n° 3, p. 1757-1762, août 1996, doi: 10.1063/1.362981.
- [29] K. Lischka, G. Brunthaler, et W. Jantsch, « Deep donor levels due to isolated Fe in CdTe », *Journal of Crystal Growth*, vol. 72, n° 1-2, p. 355-359, juill. 1985, doi: 10.1016/0022-0248(85)90172-1.
- [30] S. Hildebrandt, H. Uniewski, J. Schreiber, et H. S. Leipner, « Localization of Y Luminescence at Glide Dislocations in Cadmium Telluride », *J. Phys. III France*, vol. 7, n° 7, p. 1505-1514, juill. 1997, doi: 10.1051/jp3:1997203.
- [31] R. Triboulet, Y. Marfaing, A. Cornet, et P. Siffert, « Undoped high-resistivity cadmium telluride for nuclear radiation detectors », *Journal of Applied Physics*, vol. 45, n° 6, p. 2759-2765, juin 1974, doi: 10.1063/1.1663661.
- [32] K. Lischka, G. Brunthaler, et W. Jantsch, « Deep donor levels due to isolated Fe in CdTe », *Journal of Crystal Growth*, vol. 72, p. 355-259, 1985.
- [33] A. Castaldini, A. Cavallini, B. Fraboni, et L. Polenta, « Cathodoluminescence and photoinduced current spectroscopy studies of defects in Cd_{0.8}Zn_{0.2}Te », vol. 54, n° 11, p. 7622-7625, 1996.
- [34] F. G. Sánchez-Almazan *et al.*, « Temperature dependence of the band gap of Cd_{1-x}Zn_xTe alloys of low zinc concentrations », *Journal of Applied Physics*, vol. 79, n° 10, p. 7713-7717, mai 1996, doi: 10.1063/1.362374.
- [35] M. Prokesch et C. Szeles, « Accurate measurement of electrical bulk resistivity and surface leakage of CdZnTe radiation detector crystals », *Journal of Applied Physics*, vol. 100, n° 1, p. 014503, juill. 2006, doi: 10.1063/1.2209192.
- [36] J. P. Laurenti, J. Camassel, A. Bouhemadou, B. Toulouse, R. Legros, et A. Lusson, « Temperature dependence of the fundamental absorption edge of mercury cadmium telluride », *Journal of Applied Physics*, vol. 67, n° 10, p. 6454-6460, mai 1990, doi: 10.1063/1.345119.

- [37] T. S. Jeong et P. Y. Yu, « Temperature dependence of the photocurrent in p-type CdTe », *Journal of the Korean Physical Society*, vol. 43, n° 6, p. 1101-1104, 2003.
- [38] R. Pässler, « Temperature dependence of fundamental band gaps in group IV, III–V, and II–VI materials via a two-oscillator model », *Journal of Applied Physics*, vol. 89, n° 11, p. 6235-6240, juin 2001, doi: 10.1063/1.1369407.
- [39] M. A. Quijada et R. Henry, « Temperature Evolution of Excitonic Absorptions in Cd-, Zn, Te Materials », p. 8.
- [40] D. T. F. Marple, « Optical Absorption Edge in CdTe: Experimental », *Phys. Rev.*, vol. 150, n° 2, p. 728-734, oct. 1966, doi: 10.1103/PhysRev.150.728.
- [41] S. Adachi et T. Kimura, « Optical Constants of Zn_{1-x}Cd_xTe Ternary Alloys: Experiment and Modeling », *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 32, n° Part 1, No. 8, p. 3496-3501, août 1993, doi: 10.1143/JJAP.32.3496.
- [42] S. Dadgostar, C. Belloso Casuso, O. Martínez, M. Hinojosa, I. García, et J. Jiménez, « A Cathodoluminescence Study on the Diffusion Length in AlGaInP/InGaP/AlInP Solar Cell Heterostructures », *Journal of Elec Materi*, vol. 49, n° 9, p. 5184-5189, sept. 2020, doi: 10.1007/s11664-020-08176-w.
- [43] R. Grill *et al.*, « Theory of Deep Level Spectroscopy in Semi-Insulating CdTe », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 59, n° 5, p. 2383-2391, oct. 2012, doi: 10.1109/TNS.2012.2210245.
- [44] H. Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et des composants optoélectroniques*. Paris: Dunod, 2004.
- [45] D. Kuciauskas, A. Kanevce, P. Dippo, S. Seyedmohammadi, et R. Malik, « Minority-Carrier Lifetime and Surface Recombination Velocity in Single-Crystal CdTe », *IEEE J. Photovoltaics*, vol. 5, n° 1, p. 366-371, janv. 2015, doi: 10.1109/JPHOTOV.2014.2359738.

Chapitre 4

Résultats des campagnes d'irradiation des détecteurs NIR de type ALFA et du détecteur H1RG de la mission spatiale ARIEL

Table des matières

1	RESULTATS EXPERIMENTAUX DE LA CAMPAGNE D'IRRADIATION EFFECTUEE SUR LES DETECTEURS NIR A	
2.1	μM	179
1.1	PRESENTATION DE LA CAMPAGNE D'IRRADIATION	179
1.1.1	<i>Présentation de l'installation Arronax</i>	180
1.1.2	<i>Présentation générale du dispositif expérimental</i>	181
1.1.3	<i>Description du cryostat d'irradiation Irradix</i>	182
1.1.3.1	Présentation générale	182
1.1.3.2	Présentation du plan focal du détecteur	183
1.1.4	<i>Présentation des détecteurs irradiés et du plan de test</i>	185
1.1.5	<i>Caractéristique du faisceau de protons</i>	188
1.1.6	<i>Caractérisation des détecteurs au laboratoire IR du Département d'Astrophysique du CEA</i>	191
1.1.6.1	Principe des caractérisations effectuées	191
1.1.6.2	Mesure du gain de conversion GV/ADU au laboratoire IR	192
1.1.6.3	Détermination de la capacité d'intégration C_{int} mesuré au laboratoire IR	193
1.1.6.4	Courant d'obscurité mesuré au laboratoire IR	195
1.1.6.5	Mesure de QE relative effectué au laboratoire IR	198
1.1.7	<i>Caractérisation des détecteurs pré-irradiation et post-irradiation</i>	201
1.2	RESULTATS DE LA CAMPAGNE D'IRRADIATION	205
1.2.1	<i>Analyse des données sous irradiation</i>	205
1.2.1.1	Présentation de l'outil SEXtractor	206
1.2.1.2	Détection des impacts de protons sur les mesures FUR avec SEXtractor	206
1.2.2	<i>Caractérisation du signal de fond dans les pixels non affectés par un proton pendant l'irradiation</i>	208
1.2.3	<i>Caractéristique de l'impact d'un proton unique</i>	211
1.2.4	<i>Image CDS sous irradiation</i>	213
1.3	RESUME DES RESULTATS DE MESURES DE LA CAMPAGNE D'IRRADIATION SUR LES DETECTEURS NIR	215
1.4	COMPARAISON DES IMAGES SIMULEES AUX IMAGES EXTRAITES DES MESURES EFFECTUEES SOUS IRRADIATION	215

1.5	DISCUSSION	218
2	RESULTATS EXPERIMENTAUX DE LA CAMPAGNE D'IRRADIATION D'ARIEL ET COMPARAISON AU MODELE	219
2.1	CAMPAGNE D'IRRADIATION : OBJECTIF ET RESULTATS	220
2.1.1	<i>Présentation des détecteurs et objectif de la campagne d'irradiation</i>	220
2.1.2	<i>Moyens de tests et plan d'irradiation</i>	221
2.1.3	<i>Résultat de la campagne d'irradiation d'ARIEL</i>	224
2.1.3.1	Étude des clusters de pixels affectés par un impact de proton	225
2.1.3.2	Détermination du signal de fond sous irradiation	227
2.2	APPLICATION DU MODELE AUX DETECTEURS H1RG D'ARIEL ET COMPARAISON AUX RESULTATS EXPERIMENTAUX	230
2.2.1	<i>Discussion sur l'application du modèle au détecteur CH1 d'ARIEL</i>	230
2.2.2	<i>Application du modèle aux détecteurs H1RG d'ARIEL et comparaison aux résultats expérimentaux</i> 231	
3	CONCLUSIONS DU CHAPITRE	233
	RÉFÉRENCES	235

Dans ce dernier chapitre, je vais mettre en application le modèle développé dans le chapitre 2 en utilisant les propriétés optiques déterminées dans le chapitre 3. Puis je vais comparer les images simulées aux images acquises sous irradiation.

Dans la première section je présente la campagne d'irradiation que j'ai préparée et effectuée durant mes travaux de thèse. Les détecteurs irradiés sont représentatifs de la technologie des détecteurs ALFA. Durant cette campagne deux détecteurs ont été irradiés. Afin d'observer l'influence de l'épaisseur du substrat, ces détecteurs ont une épaisseur de substrat différente : $800\ \mu\text{m}$ et $50\ \mu\text{m}$.

Dans la deuxième section, je simule des images à partir de mon modèle puis je les compare aux images acquises sous irradiation. Nous verrons que les conclusions du modèle sont en bon accord avec les conclusions tirées de l'expérience.

Enfin, dans la dernière section, je présente les résultats de la campagne d'irradiation du détecteur H1RG de la mission spatiale ARIEL dont l'épaisseur de substrat résiduelle est de $45\ \mu\text{m} \pm 15\ \mu\text{m}$. En effet, outre l'étude des effets de dose ionisantes et de déplacement, l'un des objectifs de cette campagne était de s'assurer qu'aucune élévation du signal de fond n'était observée sous irradiation. J'ai eu l'opportunité de travailler sur ces données d'irradiation. J'appliquerai ensuite le modèle au cas du détecteur ARIEL. Néanmoins, je discuterai des limites de cette comparaison. En effet, les inconnues liées à l'architecture du détecteur et aux propriétés matériaux sont nombreuses.

1 Résultats expérimentaux de la campagne d'irradiation effectuée sur les détecteurs NIR à $2.1\ \mu\text{m}$

Afin de valider le modèle que j'ai développé durant ma thèse et que j'ai présenté dans le chapitre 2, des détecteurs ont été irradiés avec des protons, dans le but de comparer les images acquises sous irradiation aux images simulées à partir du modèle. Cette campagne d'irradiation s'est tenue les 2,3 et 4 septembre 2020. Dans cette section, je vais présenter l'expérience, son déroulement ainsi que les résultats obtenus. La comparaison au modèle est effectuée dans la section 2.

1.1 Présentation de la campagne d'irradiation

Dans cette première section, je vais décrire le dispositif expérimental d'irradiation allant du cryostat, appelé Irradix et réhabilité durant cette thèse, à l'accélérateur utilisé pour réaliser la campagne d'irradiation. Le choix de l'irradiateur est dicté par différentes contraintes :

1. Les particules utilisées pour effectuer la campagne d'irradiation doivent être des protons, qui constituent la majeure partie des particules rencontrées en orbite.
2. Le flux de particules doit être suffisamment faible afin de pouvoir distinguer les événements transitoires sur le détecteur.
3. L'énergie des particules doit être suffisante pour traverser les fenêtres du cryostat dans lequel se trouve le détecteur à irradier.

Étant donné que le cyclotron Arronax de Nantes satisfait à toutes ces exigences, je l'ai choisi pour réaliser mon expérience. L'installation Arronax est brièvement présentée ci-dessous.

1.1.1 Présentation de l'installation Arronax

Arronax est un groupement d'acteurs nantais (laboratoires, hôpitaux) engagés dans la recherche et le développement de la médecine nucléaire. Arronax est l'acronyme de « Accélérateur pour la Recherche en Radiochimie et Oncologie à Nantes Atlantique ». C'est un institut de recherche public proposant différentes thématiques de recherche allant de la recherche fondamentale (en physique, chimie et biologie) à la recherche appliquée (ou recherche de transfert) en médecine nucléaire. L'objectif principal de ce groupement est de développer la médecine nucléaire.

L'installation dispose d'un accélérateur de type cyclotron et produit différents types de particules : des protons, des alphas et des deutons. L'énergie des protons peut varier de 30 MeV à 70 MeV. Ces différentes particules sont utilisées pour la production de radio-isotopes ainsi que dans différents domaines tels que la radiolyse, la radiochimie, la radiobiologie et la physique. Au total huit lignes de faisceau sont disponibles, réparties dans six casemates. L'une d'entre elles est ouverte aux expérimentations extérieures. Une photo de la casemate d'irradiation utilisée pour effectuer la campagne d'irradiation est présentée sur la Figure 84. Sur cette figure, on observe la ligne de sortie du faisceau au premier plan.



Figure 84 - Sortie du faisceau de la casemate d'irradiation utilisée pour l'irradiation proton des détecteurs NIR.

En offrant la possibilité d'obtenir des faibles flux de protons suffisamment énergétiques, l'installation Arronax répond aux besoins de notre expérience. Dans les sections suivantes, le dispositif expérimental est détaillé.

1.1.2 Présentation générale du dispositif expérimental

Sur la Figure 85, une photo de la casemate d'irradiation avec l'ensemble du dispositif expérimental est présentée, et un schéma est exposé sur la Figure 86. Rappelons que les détecteurs étudiés dans cette thèse fonctionnent à des températures cryogéniques. En effet, afin de réduire leur courant d'obscurité, ils sont utilisés à 80 K. Durant la campagne d'irradiation, les détecteurs sont installés dans un cryostat, appelé Irradix, réhabilité^a et adapté à l'objectif de la campagne d'irradiation. La réhabilitation du cryostat a été réalisée avec la collaboration de Simone De Camillis et de Patrick Mulet. Pendant l'irradiation, le cryostat est positionné sur une table ajustable en hauteur. L'électronique de lecture du détecteur et l'ensemble de l'instrumentation du cryostat sont placés à proximité du cryostat. L'ordinateur qui pilote l'électronique de lecture est connecté par réseau à un ordinateur dans une salle de contrôle, voisine de la casemate d'irradiation. L'énergie des protons en sortie d'accélérateur est de 68 MeV.

Le cryostat est décrit dans la section suivante tandis que les détecteurs irradiés sont présentés dans la section 1.1.4. Les caractéristiques du faisceau de protons sont décrites dans la section 1.1.5.

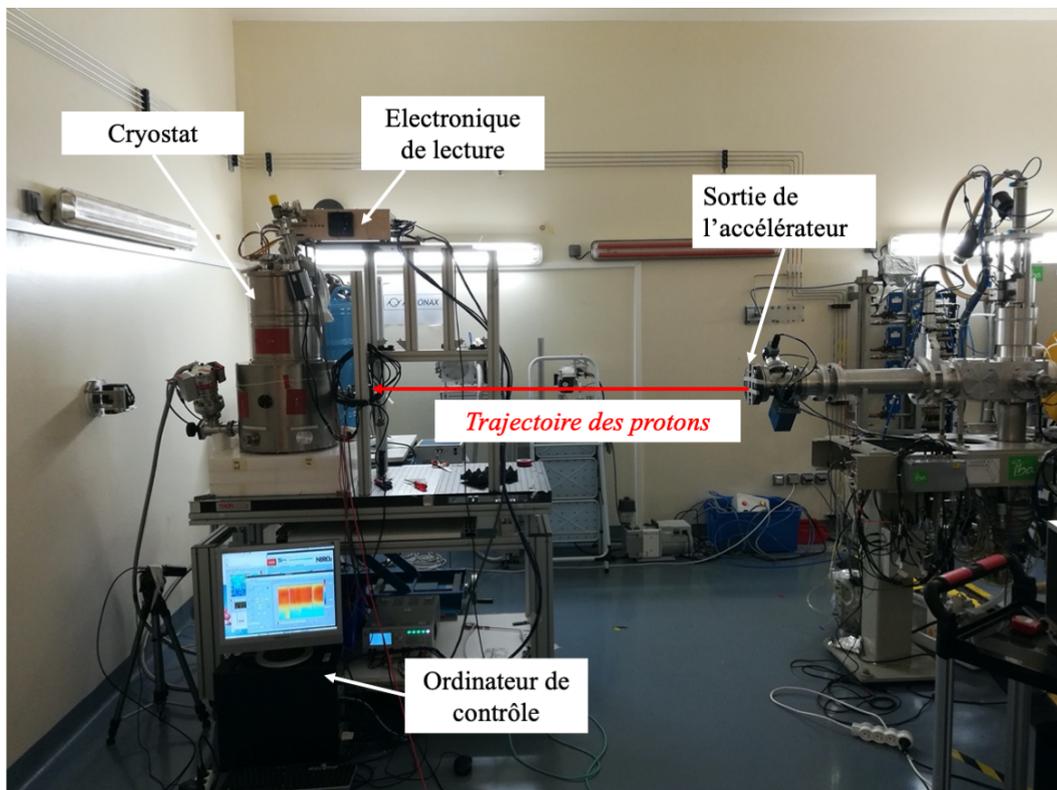


Figure 85 - Photo de l'installation dans la casemate d'irradiation.

^a Aucun plan ni modèle Conception Assisté par Ordinateur (CAO) du cryostat n'existait. Le modèle CAO que nous avons établi s'appuie sur des mesures effectuées sur le cryostat.

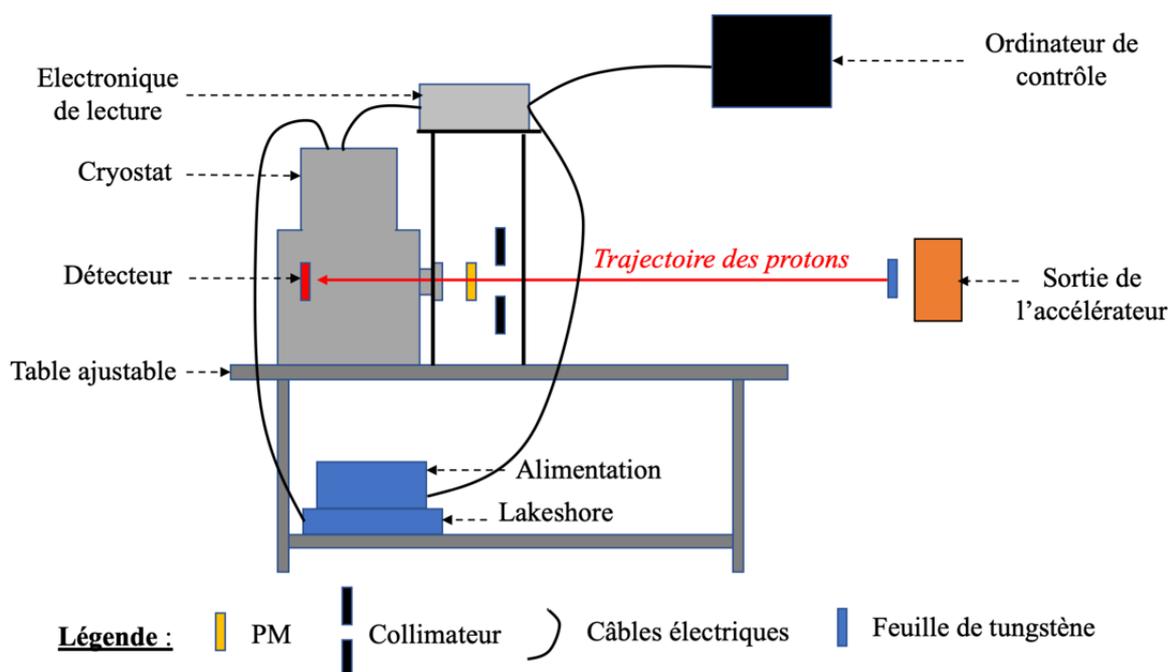


Figure 86 - Schéma du dispositif expérimental dans la casemate d'irradiation.

1.1.3 Description du cryostat d'irradiation Irradix

1.1.3.1 Présentation générale

Une photo d'Irradix, dans le laboratoire IR du Département d'Astrophysique du CEA Saclay, accompagné de l'ensemble de la chaîne d'acquisition est présentée sur la Figure 87. Il s'agit d'un cryostat à azote liquide, constitué de deux réservoirs de liquide cryogénique. On observe sur la Figure 87, l'électronique de lecture qui pilote le circuit de lecture du détecteur. Le Lakeshore, permet de lire les sondes de température présentes dans le cryostat, et l'ordinateur commande l'électronique de lecture. Cette dernière a été développée au département d'astrophysique lors des précédentes phases de développement des détecteurs ALFA.

Deux écrans thermiques sont présents à l'intérieur du cryostat. Les réservoirs de liquide cryogénique sont en contact avec un plateau qui sert de source froide pour refroidir le détecteur. Aucune régulation en température n'est présente ni nécessaire dans le cryostat. Deux sondes de température ont été installées dans le cryostat, l'une sur le plateau la seconde à proximité du détecteur. Ces sondes sont connectées à une bride du cryostat équipée d'un connecteur de type Souriau. Par ailleurs, une résistance chauffante a été fixée sur le plateau du cryostat afin d'accélérer la remontée en température du cryostat. Dans cette configuration, il faut 12 heures pour que la température du détecteur passe de la température ambiante à 80 K. La remontée en température est accélérée en chauffant et en vidant les réservoirs de liquide cryogénique. Le réchauffage du cryostat jusqu'à 300 K nécessite 7 heures.

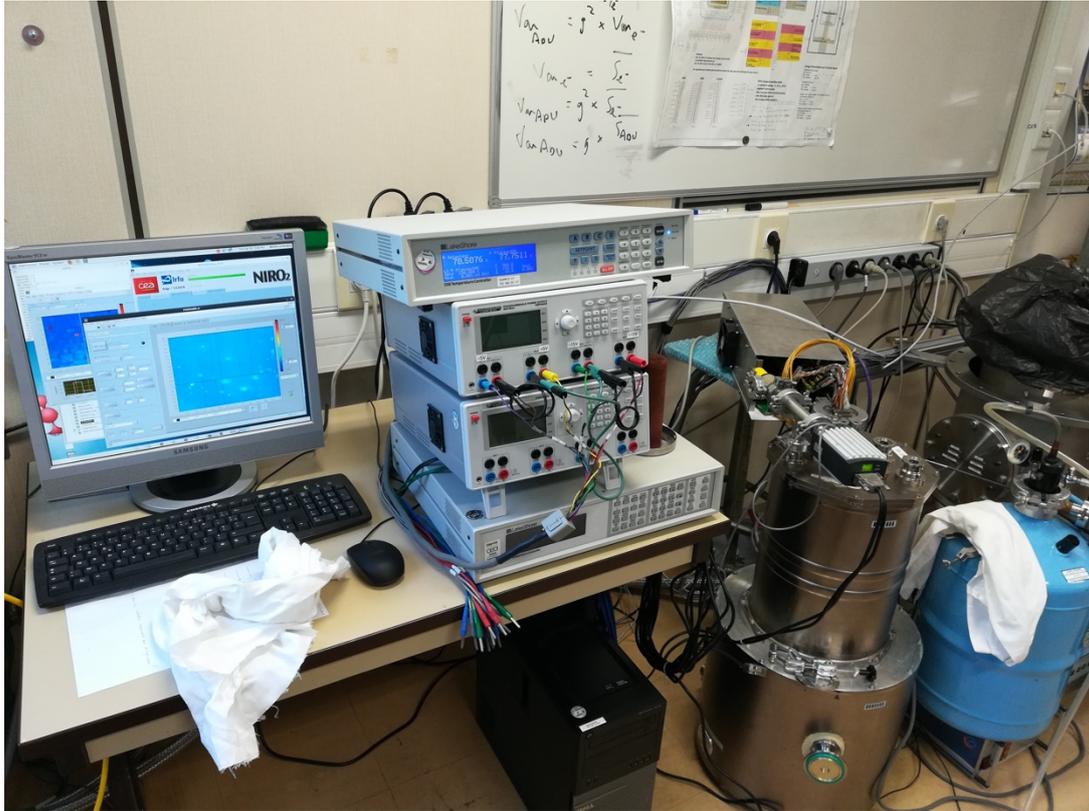


Figure 87 - Photo du cryostat et de l'ensemble du banc d'acquisition d'image des détecteurs.

Le cryostat ainsi réhabilité et adapté aux besoins de notre campagne d'irradiation a finalement été validé en caractérisant un détecteur dans un banc de test de référence puis dans Irradix. C'est lors de cette phase de validation que la présence d'une fuite de lumière dans le cryostat a été révélée. C'est la raison pour laquelle une fenêtre en mylar a été ajoutée sur le second écran thermique, celle-ci permet d'éliminer cette fuite lumineuse.

Ainsi, lors de l'irradiation, les protons seront incidents sur une fenêtre d'entrée en aluminium de 500 μm d'épaisseur. Ils traversent ensuite un premier écran thermique dans lequel se trouve une ouverture puis le second dont l'ouverture est obstruée par une feuille de mylar avant d'atteindre le détecteur. Par conséquent, entre la sortie de l'irradiateur et le détecteur, l'énergie des protons est dégradée, elle passe de 68 MeV à 63 MeV au niveau du détecteur. L'estimation de l'énergie des protons au niveau du détecteur est détaillée dans la section 1.1.5.

1.1.3.2 Présentation du plan focal du détecteur

L'architecture du plan focal dans lequel s'insère les détecteurs est similaire à celle développée lors des précédentes phases de développement des détecteurs ALFA. Un schéma de conception assisté par ordinateur (CAO) du plan focal est présenté sur la Figure 88. Le plan focal contient la carte d'interconnexion qui permet de faire le lien électrique avec l'électronique de lecture. Elle permet d'alimenter le circuit de lecture du détecteur, de séquencer son fonctionnement et de récupérer la valeur de chaque pixel appartenant à la matrice de détection. Une bride de connexion a été réalisée pour permettre d'effectuer le lien entre l'électronique de lecture et la carte d'interconnexion. En outre, le plan focal est équipé d'un doigt froid auquel est fixé un lien thermique relié à la source froide.

Un support a par ailleurs été développé spécifiquement pour ce cryostat avec l'objectif de pouvoir irradier un détecteur. Après avoir été conçu en CAO, il a été fabriqué en impression 3D en Nylon PA12. Le plan focal attaché à son support dans l'enceinte du cryostat est présenté sur la Figure 89 (a) et la Figure 89 (b).

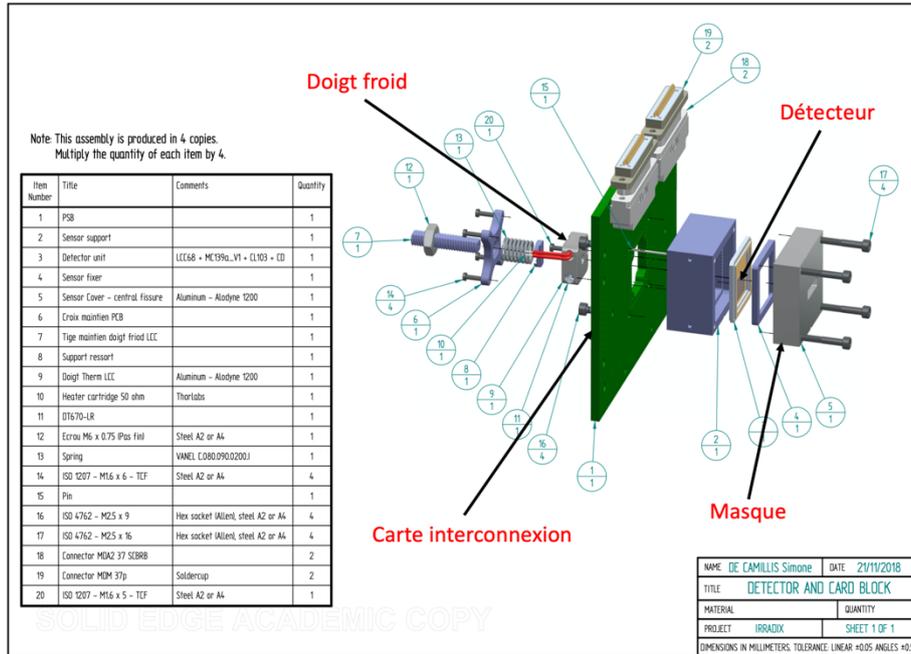


Figure 88 - Vue éclatée du plan focal utilisé dans le cryostat Irradix

Par ailleurs, dans le but d'observer l'élévation du signal de fond observée dans la littérature dans les pixels non affectés par un proton [1]–[3], une partie du détecteur a été masquée. Ainsi, un masque en aluminium a été ajouté au plan focal (en gris sur la Figure 88) afin d'arrêter les protons incidents sur cette région du détecteur. L'épaisseur du masque doit être supérieure à la distance maximale de pénétration des protons de 63 MeVa, qui vaut dans l'aluminium 1.6 mmb. Ainsi, j'ai choisi un masque de 2 cm d'épaisseur.

Afin de s'assurer du bon dimensionnement du masque, j'ai réalisé une simulation GEANT4. La géométrie du cryostat ainsi que le masque du détecteur ont été simulés. Une cartographie de l'impact des protons et une cartographie de l'impact des photons (X et gamma) et électrons ont ainsi été obtenue. Celles-ci sont présentées sur la Figure 90. Ces simulations Monte Carlo ont été réalisées en tirant 10 000 protons.

^a Cette énergie correspond à l'énergie des protons au niveau du détecteur.

^b Cette valeur a été calculée à partir de SRIM.

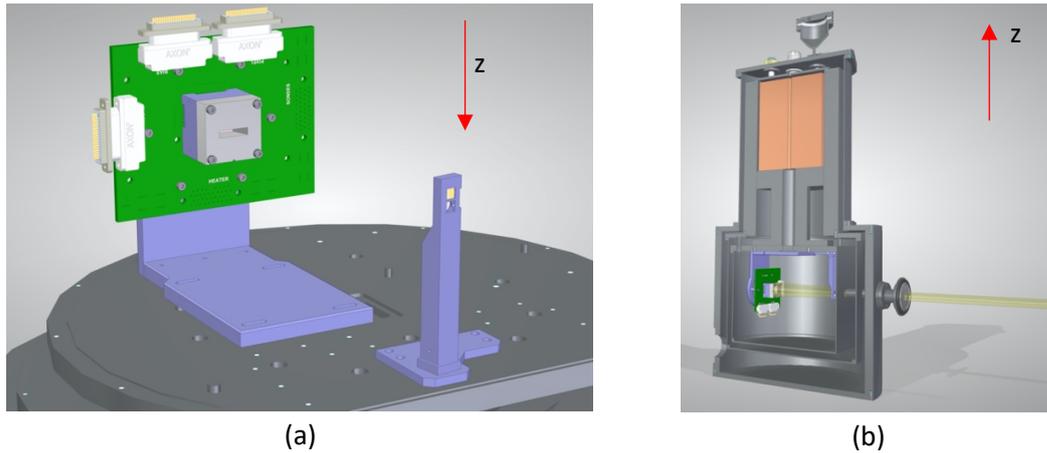


Figure 89 - Schéma CAO du support du plan focal du détecteur réalisé dans cette thèse pour le cryostat Irradix.

On observe sur la Figure 90 (a) que les impacts de protons sont principalement localisés sur la partie non masquée du détecteur. En revanche, les particules secondaires (comme les X, les gamma ou les électrons) affectent la surface du détecteur de manière homogène (voir Figure 90 (b)).

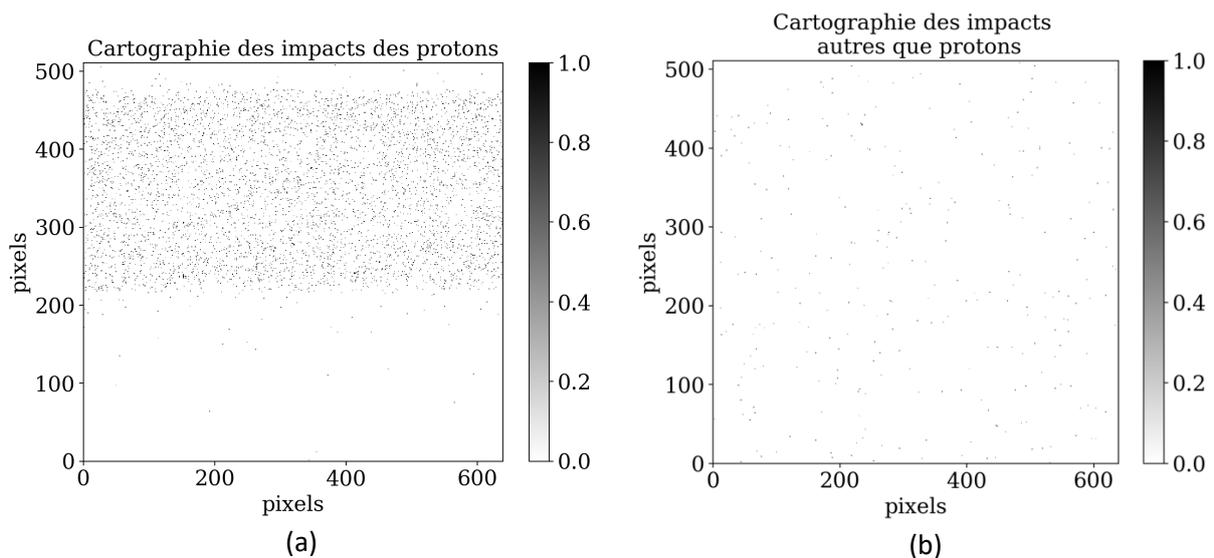


Figure 90 - Cartographies des impacts des protons (a) et de particules autres que des protons (b) obtenues à partir de simulations Monte Carlo effectuées avec GEANT4.

1.1.4 Présentation des détecteurs irradiés et du plan de test

Afin de valider le modèle, trois détecteurs de technologie similaire à ALFA, de plus petit format (640 × 512 pixels) ont été réalisés par le CEA-LETI. Ce sont des détecteurs IR de technologie HgCdTe dont les principales caractéristiques sont résumées dans le Tableau 22. Ces trois détecteurs sont identiques, technologie p/n et circuit de lecture SFD, seule l'épaisseur de substrat de CdZnTe varie. Le détecteur NIR50 a 50 μm de substrat de CdZnTe résiduel. Le détecteur NIR100 a 100 μm de substrat de CdZnTe restant, tandis que le détecteur NIR800 possède un substrat intact de 800 μm. Les détecteurs ont été initialement fabriqués à partir d'un substrat de 800 μm. Puis le substrat des détecteurs NIR50 et

NIR100 a partiellement été retiré. De plus, afin d'assurer une stabilité mécanique à la structure de ces deux détecteurs, une époxy^a a été injectée entre les billes d'indium^b avant amincissement. En amont de la campagne d'irradiation, ces détecteurs ont été caractérisés au laboratoire IR du Département d'Astrophysique du CEA. Les résultats de ces campagnes de caractérisation sont présentés dans la section 1.1.6.

Tableau 22 – Résumé des caractéristiques des détecteurs irradiés. Les colonnes encadrées en rouges mettent en évidence les détecteurs irradiés.

	NIR50	NIR100	NIR800
<i>Nomenclature CEA-LETI</i>	1901	1902	1903
<i>Technologie</i>	HgCdTe	HgCdTe	HgCdTe
<i>Format [pixels × pixels]</i>	640x512	640x512	640x512
<i>Pas pixel</i>	15 μm	15 μm	15 μm
<i>Longueur de coupure</i>	2.1 μm	2.1 μm	2.1 μm
<i>Épaisseur du substrat de CdZnTe</i>	50 μm	100 μm	800 μm
<i>Epoxy ou underfill</i>	Oui	Oui	Non
<i>Technologie</i>	p/n	p/n	p/n
<i>Circuit de lecture</i>	SFD	SFD	SFD
<i>Temps de lecture de l'image entière</i>	400 ms	400 ms	400 ms

Seuls deux détecteurs ont été irradiés, le détecteur NIR50 et le détecteur NIR800 (voir colonnes en rouge dans le Tableau 22), car les contraintes temporelles liées à la mise en froid et au réchauffage du détecteur (voir section 1.1.2), ne permettaient pas d'irradier trois détecteurs durant le temps de faisceau alloué par l'installation Arronax pour l'irradiation. Aussi, la caractérisation du détecteur NIR100 au CEA Saclay, a montré des performances dégradées en comparaison des détecteurs NIR50 et NIR800. Par conséquent, ce détecteur a rapidement été écarté du plan d'expérience l'irradiation. Le plan d'irradiation pour un détecteur est présenté étape par étape dans le Tableau 23. Une fois le détecteur mis en place dans le cryostat. Ce dernier est aligné avec la sortie de l'accélérateur, en utilisant des mires préalablement placées sur le cryostat et deux lasers. Une fois le cryostat positionné, il est mis sous vide puis refroidi. Lors de la descente à froid le détecteur est allumé afin d'obtenir des conditions optimales de fonctionnement à 80 K. Puis le détecteur est éteint lors la phase de calibration du faisceau. Celle-ci est réalisée par les opérateurs d'Arronax. Une fois cette étape terminée, le détecteur est rallumé puis les mesures de calibration pré-irradiation sont effectuées. Survient ensuite les mesures pendant l'irradiation, suivies des mesures de calibration post-irradiation. Enfin, le détecteur est réchauffé puis démonté du plan focal et remplacé par un nouveau détecteur à irradier.

^a Appelé aussi underfill.

^b Pour rappel ces billes d'indium font le lien mécanique (lorsqu'aucune époxy n'est ajoutée), électrique et thermique entre la couche détectrice et le circuit de lecture.

Tableau 23 - Description du protocole expérimental appliqué à l'irradiation d'un détecteur avec la durée correspondant à chaque étape.

Numéro de l'étape	Étape	Durée
1	Installation du détecteur dans le cryostat	1h
2	Alignement du cryostat avec le faisceau de protons	
3	Mise sous vide et descente à froid	12 h
4	Extinction du détecteur	-
5	Calibration du faisceau	1h
6	Allumage du détecteur	-
7	Caractérisation pré irradiation	2h
	1) Mesure des gains	
	2) Mesure de courant d'obscurité	
8	Mesure sous irradiation	2h
	1) Mesure CDS 0.4 s	
	2) Mesure FUR 400s	
9	Caractérisation post-irradiation	2h
	1) Mesure de courant d'obscurité	
	2) Mesure CDS 0.4 s et 10.4 s	
10	Réchauffage	7h
11	Démontage et changement de détecteur	1h30

Avant, pendant et après l'irradiation, le détecteur est utilisé selon deux modes de lectures : CDS (pour *Correlated Double Sampling*) et FUR (pour *Follow Up the Ramp*). En mode FUR, illustré sur la Figure 91 (a), on lit le signal de chaque pixel à intervalles de temps réguliers de manière non destructive. En mode CDS, illustré sur la Figure 91 (b), la tension de chaque pixel est lue deux fois. Une première fois à un temps t_0 et une seconde fois à un temps $t_0 + t_{int}$ où t_{int} est le temps d'intégration. Le signal final résulte de la différence de ces deux mesures.

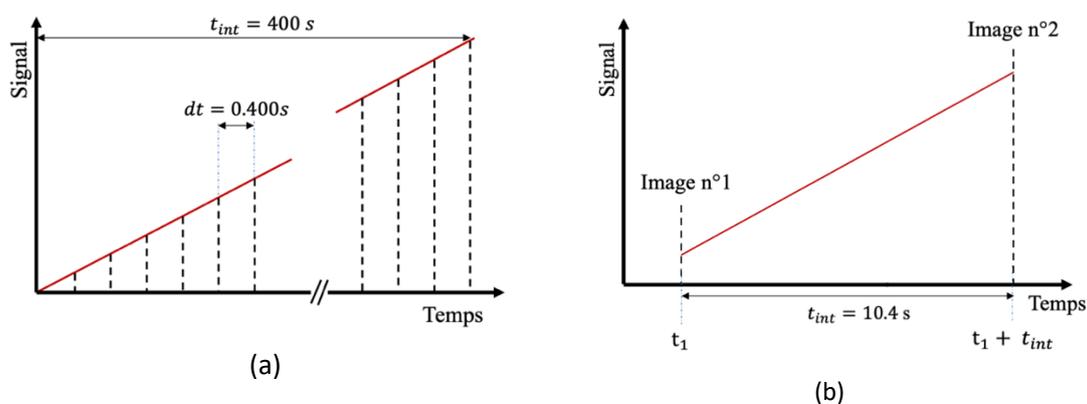


Figure 91 –(a) Illustration du mode de lecture FUR. (b) Illustration du mode de lecture CDS. Chaque trait tiré vertical représente une lecture de la valeur du signal.

Sous irradiation, des images ont été acquises selon ces deux modes de lecture sous différents flux de protons : 50 protons/s/cm², 250 protons/s/cm², 1000 protons/s/cm². Nous avons choisi ces faibles flux afin de distinguer les différents impacts de protons sur une image.

Le résumé des mesures effectuées est présenté dans le Tableau 24. Dans ce manuscrit seule les mesures FUR effectuées avec un flux de 50 protons/s/cm² sont analysées. Les prémisses d'une analyse des images CDS sont succinctement exposées. La campagne d'irradiation a été menée en fin de thèse. Par conséquent les mesures sous irradiation sont toujours en cours d'analyse.

Tableau 24 - Résumé des modes de lecture utilisés avec les temps d'intégration et les flux de protons correspondants

Mode de lecture	Temps d'intégration en s	Flux en protons/s/cm²
CDS	0.4	50
	10.4	1000
FUR	400	50
		250

Afin de distinguer les différents impacts de protons sur les images acquises durant l'irradiation, les détecteurs ont été irradiés avec un faible flux de protons. Le dispositif mis en place par Arronax pour obtenir de faibles flux ainsi que les caractéristiques du faisceau pendant l'irradiation sont décrits dans la section suivante.

1.1.5 Caractéristique du faisceau de protons

Pour atteindre un faible flux de protons, le nombre de charges injectées dans le cyclotron est réduit à son minimum puis un système de pulsation permet de réduire le flux moyen. Une feuille de tungstène en sortie de l'accélérateur permet de diminuer une nouvelle fois le flux, en éclatant le faisceau grâce au phénomène de diffusion de Rutherford. Aussi, les protons incidents sur la feuille de tungstène (de 25 µm d'épaisseur) voient leur trajectoire déviée (phénomène de diffusion), ceci a pour effet d'élargir le profil du faisceau. Puis, un collimateur permet de définir le profil du faisceau. Le diamètre du collimateur utilisé lors de l'irradiation est de 8 mm. Nous avons effectué la mesure du profil du faisceau à la fin de la campagne d'irradiation après avoir irradié les deux détecteurs afin de s'assurer de son homogénéité spatiale. Le profil du faisceau au niveau de la fenêtre d'entrée du cryostat Irradix est donné sur la Figure 92. Il est homogène sur le diamètre du collimateur. Le faisceau de protons a été imagé avec un film fluorescent (voir Figure 93).

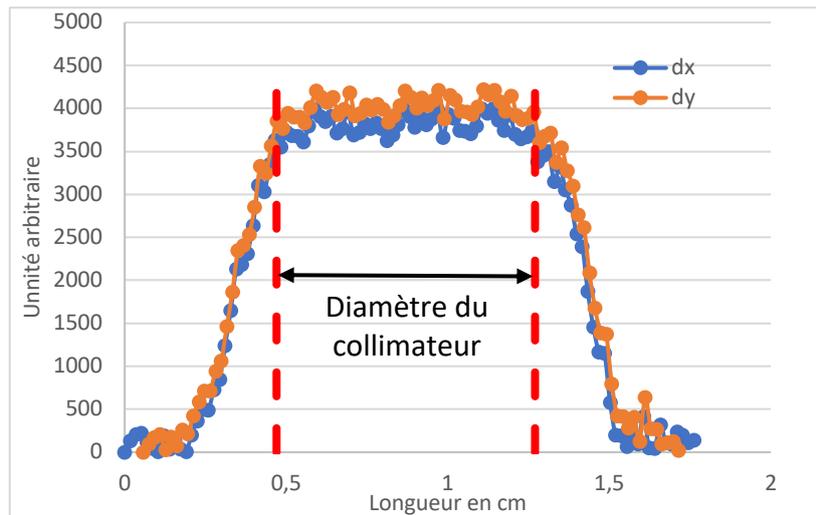


Figure 92 - Profil du faisceau de protons dans les deux directions dx et dy, mesuré au niveau de la fenêtre d'entrée du cryostat Irradix. La courbe orange (dy) correspond à une coupe dans la direction verticale du faisceau et la courbe bleue (dx) correspond à une coupe dans la direction horizontale du faisceau (voir Figure 93).

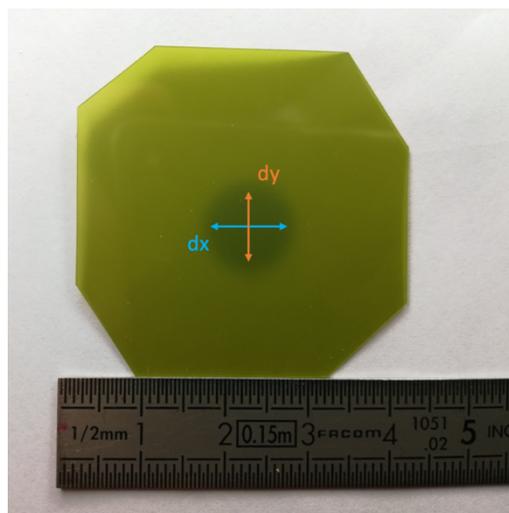


Figure 93 - Image du faisceau de protons sur le film fluorescent.

Afin de mesurer le flux de protons incidents sur le détecteur, un scintillateur a été placé en amont de la fenêtre d'entrée du cryostat, derrière le collimateur (voir Figure 94). Les photons du scintillateur sont détectés par un photomultiplicateur ou PM. Le flux de protons (en nombre de coups/s sur le PM) mesuré lors des deux mesures FUR effectuées est donnée sur la Figure 95. Le nombre de coups moyens mesuré sur le PM lors des mesures FUR est inscrit dans le Tableau 25. Ce nombre de coup est obtenu sur une surface de PM correspondant à la surface du collimateur, soit $\pi 0.4^2 = 0.5 \text{ cm}^2$. Ainsi, en divisant le nombre de coups par cette surface, on obtient le flux attendu en protons/s/cm² au niveau de la fenêtre d'entrée, celui-ci est donné dans le Tableau 25. On déduit de ce flux le nombre d'impact dans la zone irradiée en supposant un temps d'intégration de 400 ms : soit 13 impacts lors des mesures effectuées avec le détecteur NIR50 et 16 avec le détecteur NIR800.

Tableau 25 - Nombre de coups moyen et flux mesurés par le PM lors de mesures FUR effectuées avec les deux détecteurs NIR50 et NIR800.

	Mesure FUR détecteur NIR50	Mesure FUR détecteur NIR800
Nombre de coups/s moyen mesuré sur le PM	47	57
Flux attendu au niveau de la fenêtre d'entrée du cryostat en protons/s/cm ²	23	2
Nombre d'impacts attendus par image sur la région irradiée (en supposant un temps d'intégration de 400 ms)	13	16

Comme illustré sur la Figure 94, en sortant de l'accélérateur, l'énergie des protons est de 68 MeV. Ils traversent ensuite la feuille de tungstène de 25 µm d'épaisseur, puis ils se propagent dans l'air avant de passer à travers le collimateur. Dernière le collimateur ils passent à travers le scintillateur dont l'épaisseur est de 5 mm avec une densité de 1.02 g/cm³. Ils entrent ensuite dans le cryostat en passant par la fenêtre d'entrée en aluminium puis ils traversent la fine feuille de mylar avant d'atteindre le détecteur. Ainsi, lors de leur parcours, les protons perdent une partie de leur énergie. Au niveau du détecteur l'énergie moyenne des protons est de 62.4 MeV. L'estimation de l'énergie des protons au niveau du détecteur a été réalisée à l'aide de GEANT4.

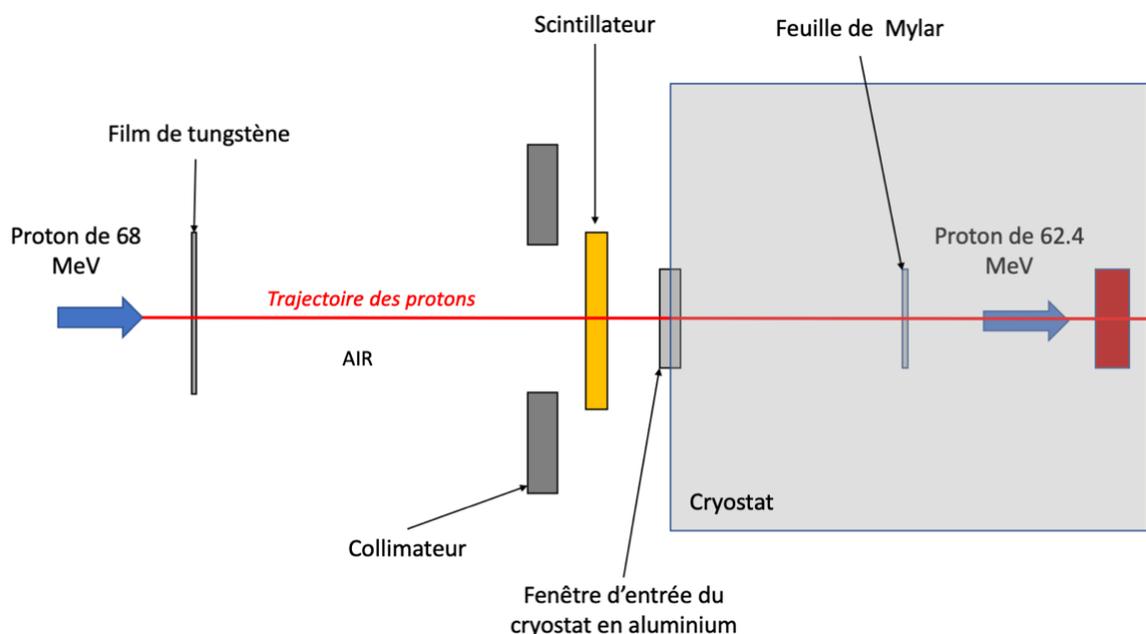


Figure 94 - Illustration de la trajectoire des protons depuis la sortie de l'accélérateur Arronax jusqu'au détecteur à l'intérieur du cryostat Irradix.

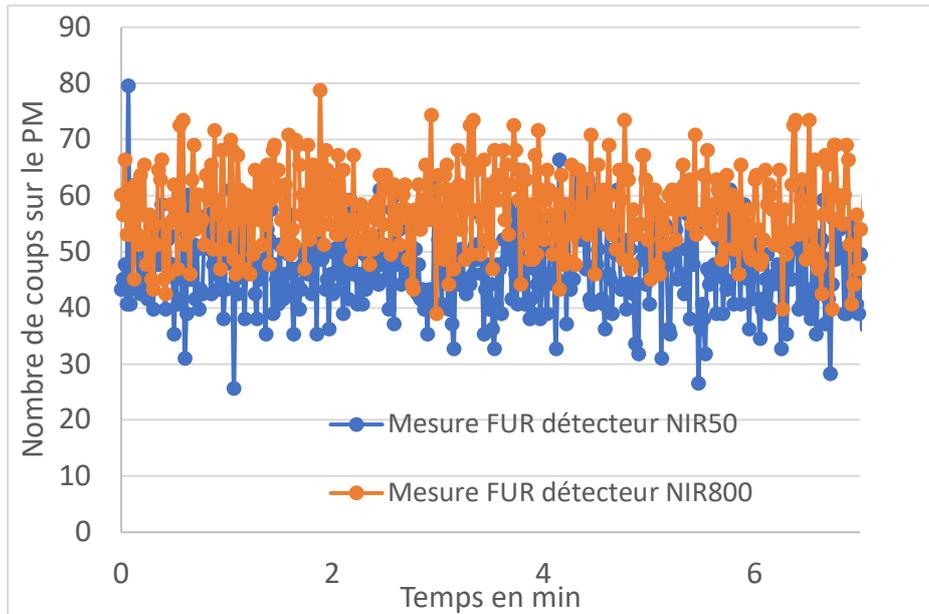


Figure 95 - Évolution du flux de proton mesuré par le photomultiplicateur pendant les mesures FUR effectuées avec les détecteurs NIR50 et NIR800.

Dans cette section, j'ai décrit les caractéristiques du faisceau, en termes d'énergie, de flux et de profil. Dans la suite, je vais présenter les résultats des caractérisations effectuées sur les trois détecteurs en amont de la campagne d'irradiation, au laboratoire IR du Département d'Astrophysique du CEA Saclay.

1.1.6 Caractérisation des détecteurs au laboratoire IR du Département d'Astrophysique du CEA

L'objectif des caractérisations effectuées au CEA était de déterminer les caractéristiques des trois détecteurs. Ces phases de caractérisation m'ont par ailleurs permis d'optimiser le conditionnement des détecteurs lors de la mise à froid dans le but de réduire le courant d'obscurité. Dans cette section, je vais décrire dans un premier temps le principe de ces étapes de caractérisation, puis je présenterai les résultats de ces mesures.

1.1.6.1 Principe des caractérisations effectuées

L'électronique de lecture fournit des données numériques qui s'expriment en ADU (pour *Analog Digital Unit*). La valeur du signal mesuré, exprimée en ADU, noté S_{ADU} , est proportionnelle au signal exprimé en électrons, noté $S_{électron}$. Ainsi, on écrira l'équation (1-3), où $G_{e-/ADU}$ est le facteur de conversion qui permet de passer des ADU aux électrons.

$$S_{électron} = G_{e-/ADU} S_{ADU} \quad (1-1)$$

La connaissance de $G_{e-/ADU}$ permet de faire le lien entre le signal fourni par l'électronique et les grandeurs physiques d'intérêts. En pratique le courant circulant dans une diode est d'abord converti en tension grâce à la capacité d'intégration, puis cette tension est convertie en ADU via un

convertisseur analogique numérique (ou ADC pour *Analog Digital Converter*) auquel est associé un gain et un offset. Ceci est illustré schématiquement au travers de la Figure 96.

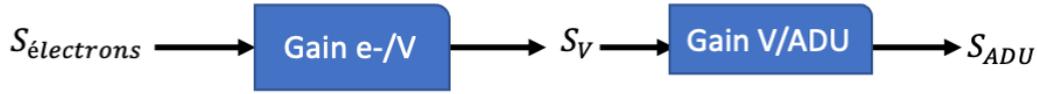


Figure 96 - Schéma illustrant la conversion d'électrons vers ADU.

De manière plus explicite, on écrira que le signal en V, S_V , s'exprime selon le signal en ADU, S_{ADU} , selon l'équation (1-2), où $G_{V/ADU}$ est le gain de conversion des ADU vers les volts. Celui-ci dépend de l'ADC et des différents gains électroniques du circuit de lecture.

$$S_V = G_{V/ADU} S_{ADU} \quad (1-2)$$

Par ailleurs, la tension lue sur un pixel varie linéairement avec le nombre d'électrons, $S_{électrons}$, selon l'expression de l'équation (1-3).

$$S_V = \frac{q S_{électrons}}{C_{int}} \quad (1-3)$$

Où q est la charge fondamentale et C_{int} est la capacité d'intégration. Ainsi, à partir des équations (1-2) et (1-3), on peut obtenir l'expression de $S_{électron}$ donnée par l'équation (1-4).

$$S_{électron} = \frac{C_{int}}{q} G_{V/ADU} S_{ADU} \quad (1-4)$$

Où $G_{e-/ADU} = G_{V/ADU} C_{int} / q$ est le gain de conversion d'ADU vers électrons. La méthode classique de détermination de ce gain s'appuie sur la méthode de transfert de photon (ou *photon transfert curve*) qui repose sur les propriétés statistiques des électrons générés par un éclairage uniforme du détecteur [4]. En revanche, dans le cryostat Irradix aucun moyen d'illumination n'a été mis en place. Par conséquent, j'ai utilisé une méthode alternative, en déterminant successivement les deux grandeurs : $G_{V/ADU}$ et C_{int} .

1.1.6.2 Mesure du gain de conversion $G_{V/ADU}$ au laboratoire IR

Un schéma de principe de la chaîne analogique est présenté sur la Figure 97. L'étage d'entrée du circuit de lecture est composé d'un MOS (*Metal Oxide Semiconductor*) en mode suiveur. La tension V_{ij} d'un pixel est ensuite multiplexée avant d'être convertie en ADU.

Pour obtenir la valeur de $G_{V/ADU}$, l'évolution du signal en ADU en fonction de la valeur de la tension de remise à zéro (ou *reset*) du détecteur a été déterminée pour chaque pixel. En effet, compte tenu de l'architecture du circuit de lecture (voir Figure 97), faire une acquisition pendant la mise à zéro permet d'obtenir la valeur en ADU de la tension de *reset* appliquée. La valeur du signal en ADU varie linéairement avec la tension de remise à zéro appliquée. L'inverse de la pente de cette droite

correspond au facteur de conversion de V vers ADU. La valeur du gain de conversion moyen pour les trois détecteurs est présentée dans le Tableau 26. Ces valeurs sont très proches dans les trois détecteurs.

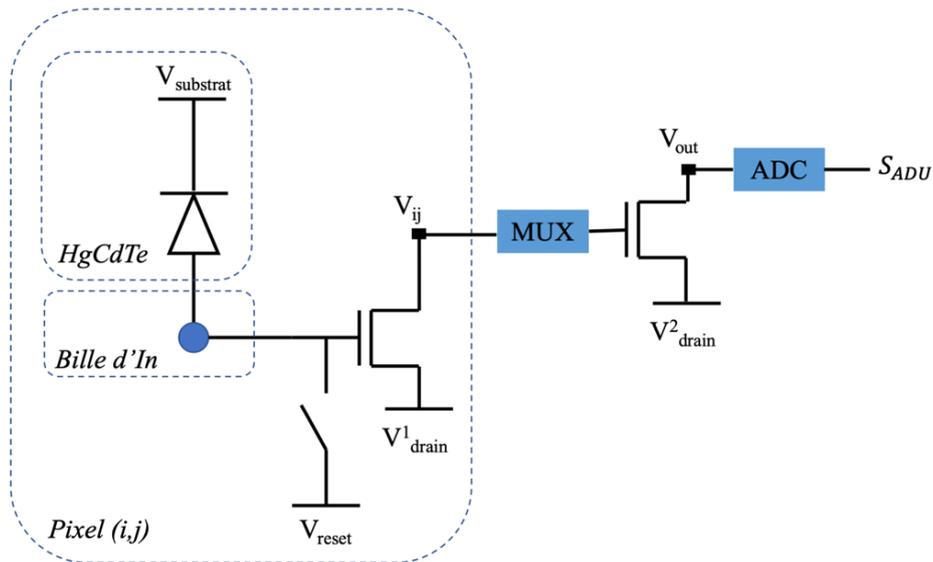


Figure 97 - Schéma de principe de la chaîne analogique.

Tableau 26 - Valeur moyenne du gain de conversion des trois détecteurs dans les trois détecteurs au laboratoire IR du département d'astrophysique à 80 K.

	NIR50	NIR100	NIR800
$G_{V/ADU}$	15.82 $\mu\text{V}/\text{ADU}$	15.83 $\mu\text{V}/\text{ADU}$	15.83 $\mu\text{V}/\text{ADU}$

De plus, afin de déterminer la valeur du gain de conversion $G_{e-/ADU}$, il faut connaître la valeur de la capacité d'intégration (appelée aussi capacité de nœud), celle-ci résulte de la somme de deux capacités : la capacité de la diode et une capacité parasite induite par les différents composants du circuit de lecture. La mesure des capacités d'intégration est présentée dans la section suivante.

1.1.6.3 Détermination de la capacité d'intégration C_{int} mesuré au laboratoire IR

Mesure de la capacité parasite

La mesure de la capacité parasite se base sur l'utilisation de pixels de test, dont la valeur de capacité est connue. Sur les détecteurs NIR50, NIR100 et NIR800, ces pixels sont situés en périphérie des matrices de détecteur. Parmi, ces pixels on trouve trois valeurs de capacité 10 fF, 15 fF et 20 fF.

La capacité de ces pixels de test et la capacité parasite du ROIC forme un pont diviseur de tension. On peut alors écrire l'équation (1-5). La capacité parasite, $C_{parasite}$, s'exprime alors selon la pente de l'évolution du signal de sortie, ΔV_{out} , en fonction de la tension de polarisation appliquée, ΔV_{SUB} . Dans la mesure où C_{test} est connue, on peut alors obtenir la valeur de $C_{parasite}$.

$$\Delta V_{out} = \Delta V_{SUB} \frac{C_{test}}{C_{test} + C_{parasite}} \quad (1-5)$$

Les valeurs des capacités parasites mesurées sur les trois détecteurs sont données dans le Tableau 27, elles sont très proches dans les détecteurs NIR50 et NIR800 et correspondent aux valeurs attendues. En revanche, la valeur de la capacité parasite mesurée sur le détecteur NIR100 est très élevée. Cette différence par rapport aux deux autres détecteurs suggère que le comportement du détecteur NIR100 est défectueux.

Tableau 27 - Valeurs des capacités d'intégration parasites mesurées dans les trois détecteurs au laboratoire IR du département d'astrophysique à 80 K.

	NIR50	NIR100	NIR800
$C_{parasite}$	6.3 fF	24.8 fF	6.7 fF

Mesure de la capacité des diodes

La mesure de la capacité des diodes s'appuie sur une mesure de bruit de KTC. Il s'agit du bruit thermique associé à l'injection de charge lors de la mise sous reset. Ceci induit une incertitude sur la tension mesurée aux bornes de la capacité des diodes après remise à zéro. En supposant que ce bruit est un bruit blanc, on peut écrire l'équation (1-6) qui relie la variance du signal mesuré après remise à zéro (*reset*) à la capacité d'intégration de la diode. Cette mesure suppose que le bruit dominant est le bruit de KTC, Cette hypothèse a été vérifiée en effectuant des mesures à différentes température lors des précédentes phases de développement des détecteurs ALFA [5].

$$\sigma_V^2 = \frac{k_B T}{C_{diode}} \quad (1-6)$$

De nouveau, on s'intéresse aux capacités de tests dont la valeur est connue afin d'estimer la valeur des capacités des diodes. On calcule la variance associée à la remise à zéro des pixels de tests. On obtient une droite. Ainsi, pour chaque pixel de la matrice on peut estimer la valeur de σ_V^2 , puis déterminer la valeur de la capacité de la diode à partir de la droite obtenue grâce aux pixels de tests. La valeur moyenne de la capacité des pixels de chacune des matrices étudiées ici est présentée dans le Tableau 28. De nouveau, les détecteurs NIR50 et NIR800 présentent des valeurs de capacités attendues et le détecteur NIR100 présente une valeur de capacité de diode plus élevée.

Tableau 28 - Valeurs des capacités des diodes mesurées dans les trois détecteurs au laboratoire IR du département d'astrophysique à 80 K.

	NIR50	NIR100	NIR800
C_{diode}	16.2 fF	22.0 fF	16.7 fF

Finalement, la valeur de la capacité d'intégration résulte de la somme de la capacité des diodes et de la capacité parasite du ROIC, comme exprimé par l'équation (1-6).

$$C_{int} = C_{diode} + C_{parasite} \quad (1-7)$$

Par conséquent, à partir de la mesure du gain de conversion $G_{V/ADU}$ et de la capacité d'intégration il est possible d'obtenir la valeur du gain de conversion d'ADU vers électrons d'après l'équation (1-4). La moyenne de ce gain mesuré au laboratoire IR pour chacun des détecteurs est donnée dans le Tableau 29. La valeur du gain est environ deux fois plus élevée dans le détecteur NIR100 que dans les détecteurs NIR50 et NIR800, ce qui s'explique la capacité d'intégration plus importante mesurée sur ce détecteur.

Tableau 29 - Valeurs du gain de conversion mesuré dans les trois détecteurs au laboratoire IR du département d'astrophysique à 80 K.

	NIR50	NIR100	NIR800
$G_{e-/ADU}$	2.22 e ⁻ /ADU	4.62 e ⁻ /ADU	2.32 e ⁻ /ADU

Ainsi, le gain de conversion a été mesuré sur les trois détecteurs. Dorénavant, il est possible de relier les mesures effectuées par le détecteur à des grandeurs physiques. Dans la section suivante, je m'intéresse au courant d'obscurité mesuré dans ces détecteurs.

1.1.6.4 Courant d'obscurité mesuré au laboratoire IR

Afin de déterminer la valeur du courant d'obscurité circulant dans les diodes de chaque pixel, une mesure FUR a été réalisée à 80 K. Le principe de mesure a été présenté dans la section 1.1.4, il repose sur la possibilité offerte par l'architecture du détecteur d'effectuer des mesures non destructives du signal des pixels. Le signal de chaque pixel est échantillonné à intervalles de temps régulier. Les mesures de courant d'obscurité ont été effectuées en prenant un temps d'intégration de 10 640 s en réalisant une acquisition toutes les 30 s.

Lors de la descente à froid, des porteurs restent piégés sur des défauts présents dans le gap du matériau. Une fois à basse température, ces porteurs peuvent être libérés par agitation thermique et participer au courant d'obscurité mesuré par le détecteur. **Il s'agit du phénomène de persistance [6].** Les temps caractéristiques de libération des porteurs peuvent être très longs, et atteindre plusieurs heures. Afin de réduire la contribution des porteurs piégés dans le matériau au courant d'obscurité mesuré, le détecteur est conditionné pendant la descente à froid du détecteur. Par ailleurs, afin de réduire l'émission de lumière induite par le fonctionnement des MOS du ROIC, une attention particulière a été portée aux choix des tensions appliquées sur le circuit de lecture [7].

Un exemple de signal FUR d'un pixel pendant la mesure effectuée sur le détecteur NIR800 est présenté sur la Figure 98. On observe sur cette figure que le signal adopte un comportement exponentiel en début d'intégration, puis il suit une loi linéaire. La pente de la partie linéaire détermine la valeur du courant d'obscurité. La pente du signal de chacun des pixels de la matrice est calculée^a. Le

^a Ici les pixels de référence ne sont pas utilisés pour corriger le signal des pixels.

comportement exponentiel en début d'intégration (région bleue sur la Figure 98) est attribué au phénomène de persistance associé au dé-piégeage de porteurs.

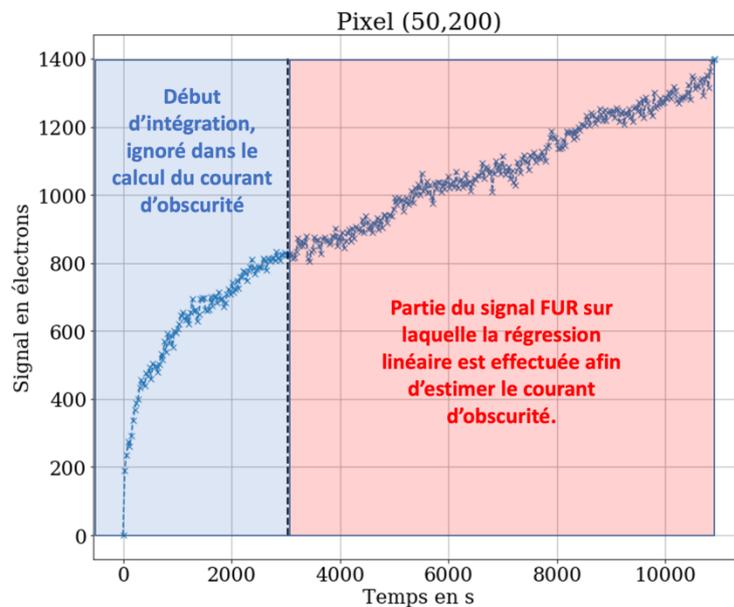


Figure 98 - Exemple de l'évolution du signal du pixel (50,200) de la matrice détecteur NIR800 pendant la mesure de courant d'obscurité au laboratoire IR.

Les cartographies du courant d'obscurité des trois détecteurs sont données sur la Figure 99, la Figure 100, et la Figure 101. Les valeurs de courant d'obscurité extraites de ces mesures sont reportées dans le Tableau 30. Dans ce tableau, on observe que les courants d'obscurité médians des détecteurs NIR50 et NIR800 sont proches. En revanche, le détecteur NIR100 présente un courant d'obscurité médian négatif. Les différences observées entre les cartographies de courant d'obscurité des trois détecteurs peuvent s'expliquer par des différences de contraintes mécaniques. En effet, l'étape d'amincissement du substrat des détecteurs NIR100 et NIR50 a pu modifier les tensions mécaniques au sein de la structure du détecteur. Une étude approfondie du comportement mécanique et thermique des détecteurs amincis doit être menée afin de valider les performances de ces détecteurs^a.

On observe sur les cartographies des détecteurs NIR50 et NIR800 des pixels dont la valeur de courant d'obscurité mesurée est nulle et pour lesquels le courant d'obscurité mesuré dans les pixels voisins est supérieur à la médiane. Ces pixels sont des pixels défectueux, ils saturent très rapidement au début de l'intégration, ils ne peuvent plus collecter de porteurs. Par conséquent, les porteurs générés dans ces pixels défectueux diffusent vers les pixels voisins où ils sont collectés. Ils participent alors au courant mesuré dans ces pixels.

^a En effet, j'ai effectué plusieurs mesures de courant d'obscurité sur le détecteur NIR100 avec à chaque fois un nouveau cycle thermique pour le détecteur (un passage de 300 K à 80 K). J'ai observé que le courant d'obscurité se dégradait d'une mesure à une autre. Un plus grand nombre de pixel présentait un courant d'obscurité négatif. Ce qui suggère que ce détecteur a mal résisté aux changements multiples de température. La mesure présentée dans le manuscrit est la dernière mesure effectuée.

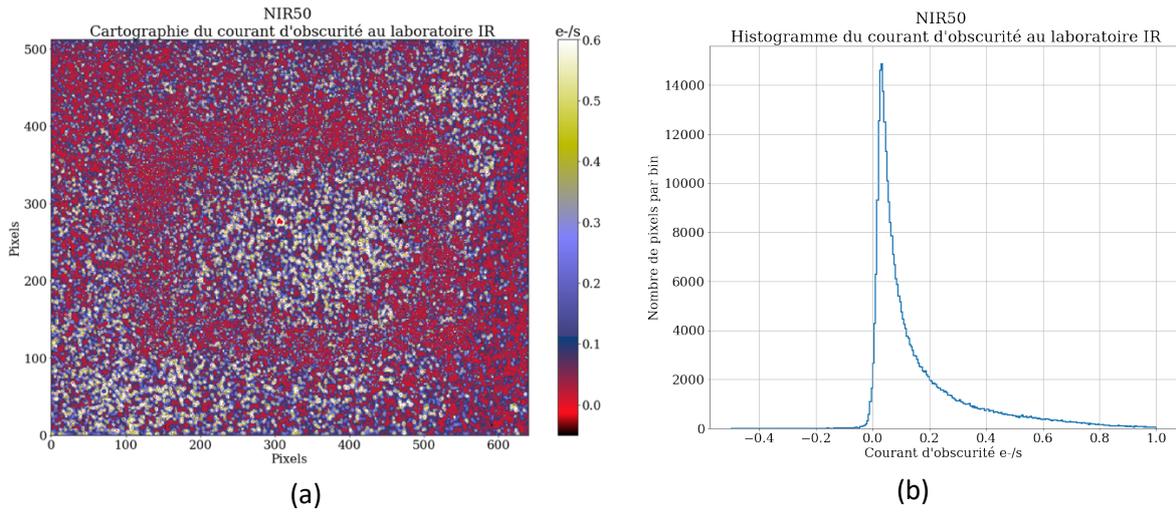


Figure 99 - Cartographie du courant d'obscurité mesurée sur le détecteur NIR50 au laboratoire IR du département d'astrophysique du CEA. (b) Histogramme du courant d'obscurité.

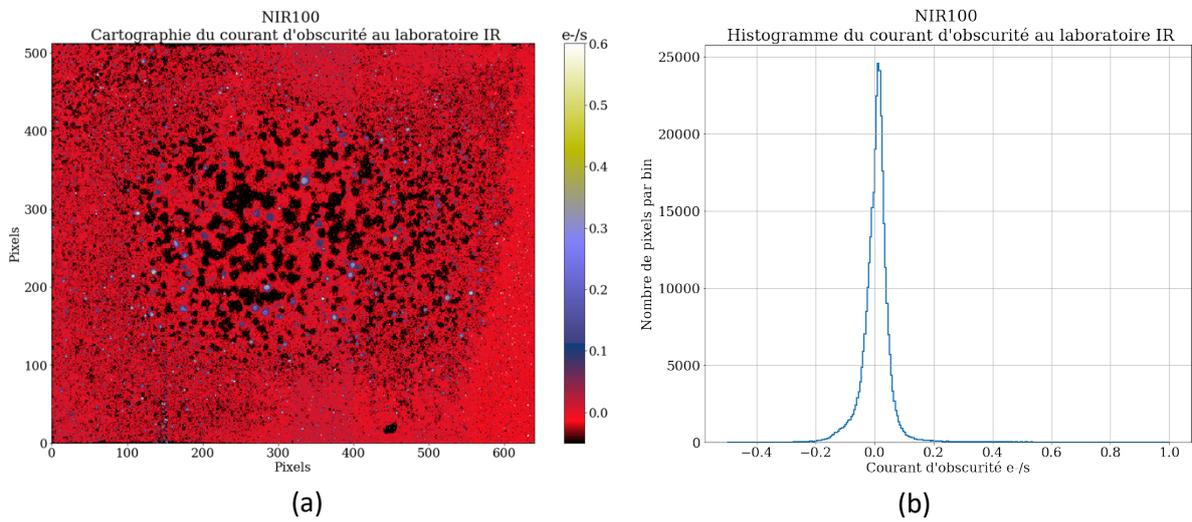


Figure 100 - Cartographie du courant d'obscurité mesurée sur le détecteur NIR100 au laboratoire IR du département d'astrophysique du CEA. (b) Histogramme du courant d'obscurité.

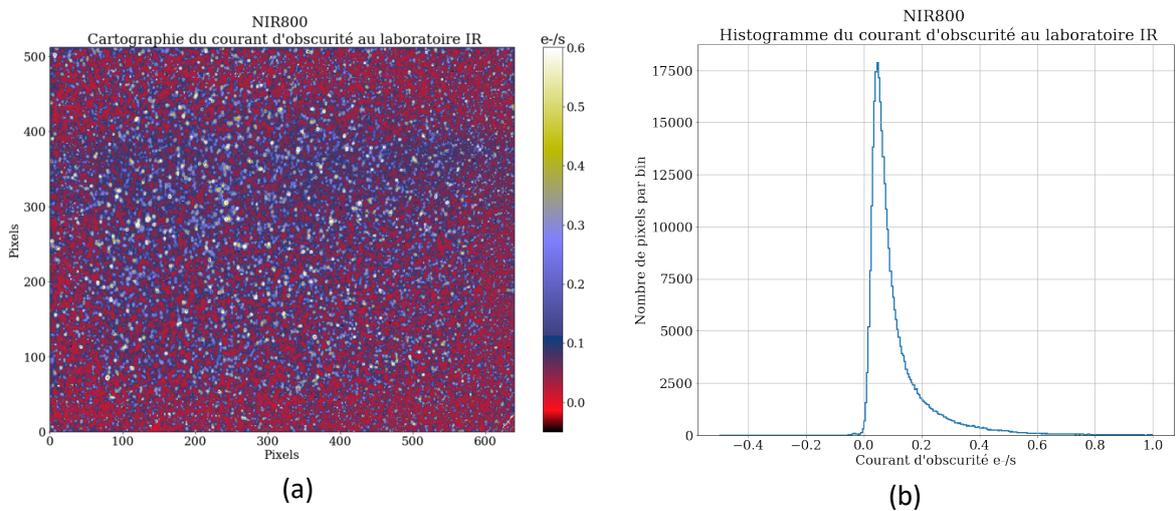


Figure 101 - Cartographie du courant d'obscurité mesurée sur le détecteur NIR800 au laboratoire IR du département d'astrophysique du CEA. (b) Histogramme du courant d'obscurité.

Tableau 30 - Valeurs du courant d'obscurité extrait des mesures au laboratoire IR.

	NIR50	NIR100	NIR800
<i>Courant médian</i>	0.086 e ⁻ /s	-0.009 e ⁻ /s	0.072 e ⁻ /s
<i>Maximum de l'histogramme des pixels</i>	0.025 e ⁻ /s	0.01 e ⁻ /s	0.045 e ⁻ /s

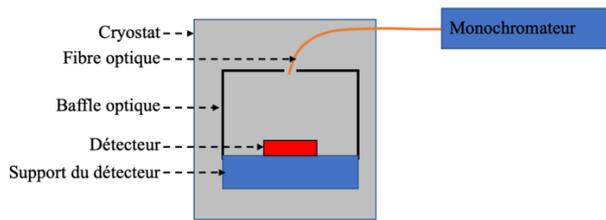
Ainsi, les gains de conversion et les courants d'obscurité des trois détecteurs ont été mesurés au département d'astrophysique du CEA Saclay. Ces résultats de caractérisations seront comparés aux mesures effectuées dans la casemate d'irradiation. En outre, des mesures de réponse des détecteurs sous flux monochromatique ont été réalisées à 80 K, afin d'étudier la transparence du substrat de CdZnTe en fonction de son épaisseur. Les résultats sont présentés dans la section suivante.

1.1.6.5 Mesure de QE relative effectué au laboratoire IR

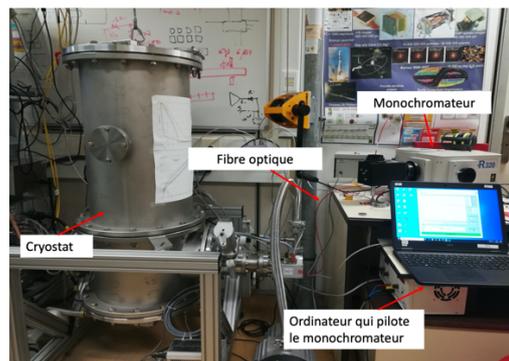
L'objectif était d'observer une éventuelle élévation du signal mesuré par les détecteurs pour des longueurs d'onde inférieures au gap du substrat de Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te. Pour rappel, l'éclairement des détecteurs se fait en face arrière, les photons passent à travers le substrat de CdZnTe avant d'atteindre la couche photosensible de HgCdTe (voir chapitre 1).

L'énergie du gap du CdZnTe a été estimée dans le cadre des mesures de propriétés optiques du CdZnTe dans le chapitre 3. Ainsi, l'énergie de gap de l'échantillon B de CdZnTe (de bonne qualité cristalline) mesuré à 80 K vaut 1.604 eV (ce qui correspond à des photons de longueur d'onde 773 nm). Lorsque l'énergie des photons incidents est grande devant l'énergie de gap du CdZnTe, ceux-ci sont rapidement absorbés et leur distance moyenne de propagation dans le substrat est très courte (< 1 μm). En revanche, lorsque ces photons ont une énergie légèrement inférieure à l'énergie de gap, l'absorption est un peu moins efficace, ces photons ont alors une distance de propagation plus importante. Dans les détecteurs pour lesquels le substrat a été aminci, ces photons peuvent alors atteindre la couche photosensible. Par conséquent j'ai cherché à mesurer la réponse des trois détecteurs sous illumination monochromatique.

Ces mesures ont été réalisées sur un banc de test pourvu d'un système d'illumination. Celui est schématisé sur la Figure 102(a). Une photo est présentée sur la Figure 102 (b). L'enceinte du cryostat dispose d'un connecteur de fibre optique, permettant de conduire la lumière depuis l'extérieur jusque dans l'enceinte cryogénique. La lumière injectée dans la fibre est issue d'un monochromateur. Pour chaque longueur d'onde, 5 images CDS ont été acquises. Puis la valeur moyenne des pixels a été calculée sur l'image moyennée des 5 images CDS. L'évolution de la réponse spectrale des trois détecteurs est donnée sur la Figure 103.



(a)



(b)

Figure 102 – (a) Schéma du banc de mesure sur lequel les mesures de réponse spectrale ont été effectuées. (b) Photo du banc de test utilisé pour faire les mesures de réponses spectrales.

A courte longueur d'onde, loin de la longueur d'onde correspondant au gap du CdZnTe, noté λ_g^{CdZnTe} , le signal mesuré par les trois détecteurs est identique et très proche de zéro, les photons sont absorbés par la couche de CdZnTe et n'atteignent pas la couche de HgCdTe. Lorsque la longueur d'onde augmente et que l'on s'approche de λ_g^{CdZnTe} la réponse des trois détecteurs reste identique. Dans le détecteur NIR50, malgré une plus faible épaisseur de substrat les photons dont la longueur d'onde est proche de λ_g^{CdZnTe} sont absorbés avant d'atteindre la couche photosensible de HgCdTe. Lorsque l'énergie des photons devient inférieure à l'énergie du gap du CdZnTe, les photons atteignent la couche photosensible de HgCdTe où ils génèrent des porteurs qui contribuent au signal mesuré. Au-delà de 770 nm, la différence de réponse entre les trois détecteurs peut s'expliquer par la qualité optique de la surface entre le CdZnTe et le vide. Cette interface n'a pas été préparée optiquement. Aucun dépôt de couche anti-réfléchissante n'a été effectuée sur les trois détecteurs. Par ailleurs, l'interface entre le CdZnTe et le vide a probablement été détériorée lors de la phase d'amincissement des détecteurs NIR50 et NIR100.

Ainsi, pour les longueurs d'onde supérieures à λ_g^{CdZnTe} la réponse des trois détecteurs est identique. Cependant, il s'agit d'un résultat préliminaire, dans la mesure où lors de cette expérience, le flux incident n'a pas été mesuré. De plus, j'ai fait l'hypothèse que celui-ci reste inchangé lors des mesures effectuées sur les trois détecteurs à différentes périodes. Par conséquent, d'autres mesures de rendement quantique doivent être réalisées pour compléter ces premières observations.

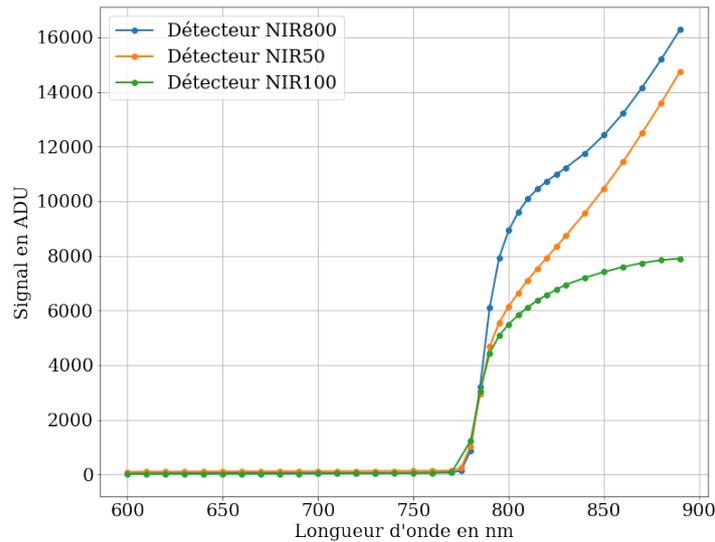


Figure 103 - Évolution de la réponse spectrale des trois détecteurs NIR50, NIR100 et NIR800 à 80 K.

Sur la Figure 104, la réponse spectrale du détecteur NIR800 à 80 K est représentée avec le spectre de CL mesuré sur l'échantillon de CdZnTe B (voir chapitre 3). On constate que le maximum d'émission du spectre de luminescence correspond à un domaine spectral où la réponse du détecteur est nulle. Seule une faible fraction des photons de luminescence, environ 4.4 %, est émise dans une région spectrale où la réponse du détecteur est non nulle. Cette observation suggère que ce sont principalement ces photons de basses énergies qui contribuent à la pollution des images sous irradiation de protons. Ce résultat est tout de même à nuancer dans la mesure où les mesures de CL n'ont pas été effectuées sur le même substrat que celui utilisé dans la fabrication du détecteur NIR800. Ainsi, le taux de zinc est peut-être légèrement différent dans le substrat du détecteur NIR800 et dans l'échantillon B de CdZnTe, ce qui induirait une différence de gap entre les deux matériaux^a.

^a D'après la formule de Tobin introduite dans le chapitre 1 qui relie l'énergie de gap du CdZnTe à sa composition en zinc à 4 K, une variation de 1 % dans la concentration en zinc induit une variation de 21 meV dans l'énergie de gap.

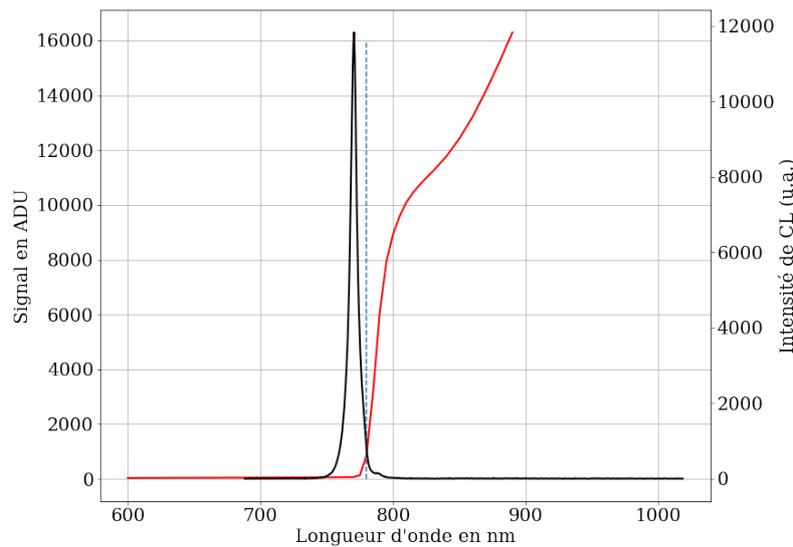


Figure 104 - Comparaison de la réponse spectrale du détecteur NIR800 (en rouge) au spectre de cathodoluminescence (CL) de l'échantillon de CdZnTe B (en noir). La droite verticale en traits tirés symbolise la position de l'énergie du gap.

Dans cette section, j'ai présenté les caractérisations effectuées sur les trois détecteurs au laboratoire IR en amont de la campagne d'irradiation. Seuls deux détecteurs ont finalement été irradiés. Les résultats de caractérisation du détecteur NIR100 ne correspondant pas aux résultats attendus, ce détecteur a été écarté de l'irradiation. Dans la section suivante, je présente les résultats des caractérisations effectuées sur les deux détecteurs irradiés, NIR50 et NIR800, dans la casemate d'irradiation avant et après irradiation.

1.1.7 Caractérisation des détecteurs pré-irradiation et post-irradiation

NIR800

La valeur moyenne du gain de conversion mesurée avant et après irradiation sur le détecteur NIR800 à Arronax est présentée dans le Tableau 31. On observe que la valeur du gain ne varie pas. La capacité d'intégration médiane est donnée dans le Tableau 31. A partir de ces données, on peut obtenir le gain de conversion en électrons par ADU, retranscrit dans le Tableau 31. Celui-ci reste inchangé entre les mesures avant et après irradiation. La valeur du gain de conversion est en bon accord avec la valeur mesurée au laboratoire IR du CEA. En revanche, la valeur médiane des capacités d'intégration est supérieure de 8 % à la valeur mesurée en amont de la campagne d'irradiation. Cette différence peut s'expliquer par le fait que la température du détecteur lors de la mesure dans la casemate était de 81 K. De plus, la mesure des capacités s'appuie sur une mesure de bruit de KTC, et suppose que ce bruit constitue la principale source de bruit. Or des bruits parasites provenant de l'environnement expérimental peuvent invalider cette hypothèse.

Tableau 31 - Valeurs de la capacité parasite du ROIC, de la capacité d'intégration des diodes et du gain de conversion en e-/ADU avant et après irradiation dans le détecteur NIR800.

	Gain de conversion en $\mu\text{V}/\text{ADU}$	Capacité d'intégration en fF	Gain de conversion en e-/ADU
<i>Pré Irradiation</i>	15.85	25.6	2.53
<i>Post Irradiation</i>	15.85	25.6	2.53

Dans la casemate d'irradiation d'Arronax, une mesure de courant d'obscurité a été effectuée. Une mesure FUR (*Follow Up the Ramp*) avec un échantillonnage de 400 ms, et avec un temps d'intégration total de 400 s a été réalisée^a.

La cartographie du courant d'obscurité (exprimé en électrons/s) est donnée sur la Figure 105 (a). L'histogramme correspondant est donné sur la Figure 105 (b). On observe que la valeur médiane du courant d'obscurité dans la région masquée est de 0.81 e⁻/s, et 0.88 e⁻/s dans la région non masquée. Ces valeurs sont très proches mais supérieures aux valeurs de courant d'obscurité mesurées au laboratoire IR du Département d'Astrophysique (voir section 1.1.6.4). On peut expliquer cette disparité par la différence d'historique du composant lors des deux mesures. Lors des mesures effectuées au laboratoire IR, le composant était conditionné depuis la mise à froid jusqu'à la mesure de courant d'obscurité. En revanche, dans la casemate d'irradiation, bien que le détecteur ait été conditionné pendant la descente à froid, il a été éteint une fois à 80 K lors de la phase de calibration du faisceau de proton. Puis rallumé une fois le réglage terminé. Durant toute la période de temps, pendant laquelle le détecteur était éteint, des porteurs ont été piégés sur des défauts dans le gap. Par conséquent, la contribution de la persistance au courant d'obscurité était plus importante lors des mesures effectuées dans la casemate d'irradiation.

Après irradiation, on observe une différence entre les deux régions du détecteur : la partie non masquée présente un courant d'obscurité plus élevée que la partie masquée (voir Figure 106). La valeur du courant d'obscurité médian vaut 1.18 e⁻/s/pix dans la région non masquée et 0.3 e⁻/s/pix dans la région masquée. Les valeurs médianes de courant d'obscurité mesurées avant et après irradiation sont reportées dans le Tableau 32.

Tableau 32 - Valeur du courant d'obscurité médian dans les deux régions du détecteur NIR800 avant et après irradiation.

	Région non masquée	Région masquée
<i>Pré irradiation</i>	0.88 ± 0.32 e ⁻ /s	0.81 ± 0.33 e ⁻ /s
<i>Post Irradiation</i>	1.18 ± 0.30 e ⁻ /s	0.30 ± 0.23 e ⁻ /s

^a La durée de l'acquisition est très courte au regard des temps caractéristiques de persistance. Ainsi, l'évaluation de la persistance sur ces mesures est difficile.

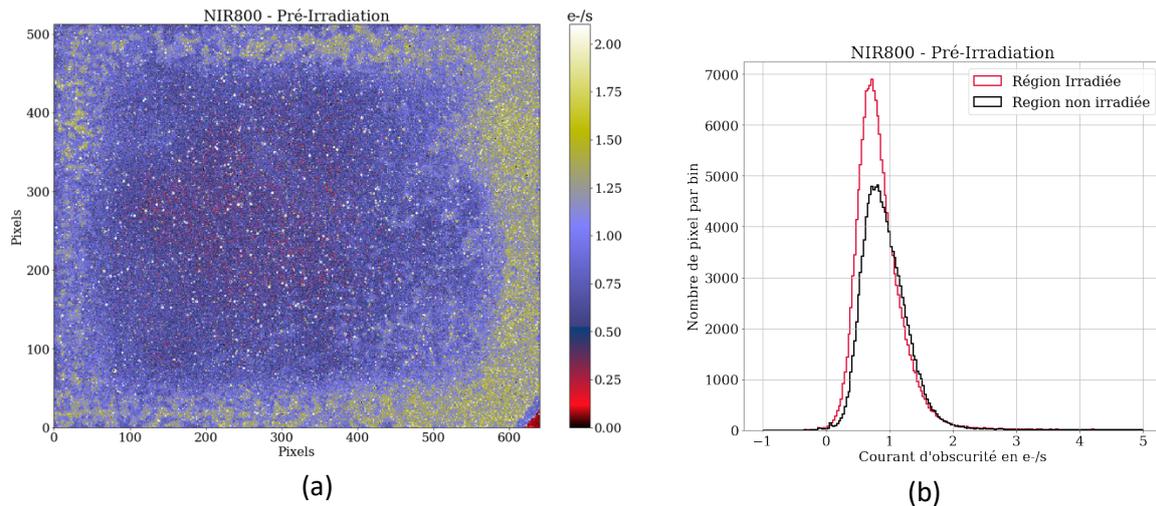


Figure 105 – (a) Cartographie du courant d'obscurité du détecteur NIR800 avant irradiation (b) Histogramme de la distribution de la valeur du courant d'obscurité avant irradiation dans le détecteur NIR800.

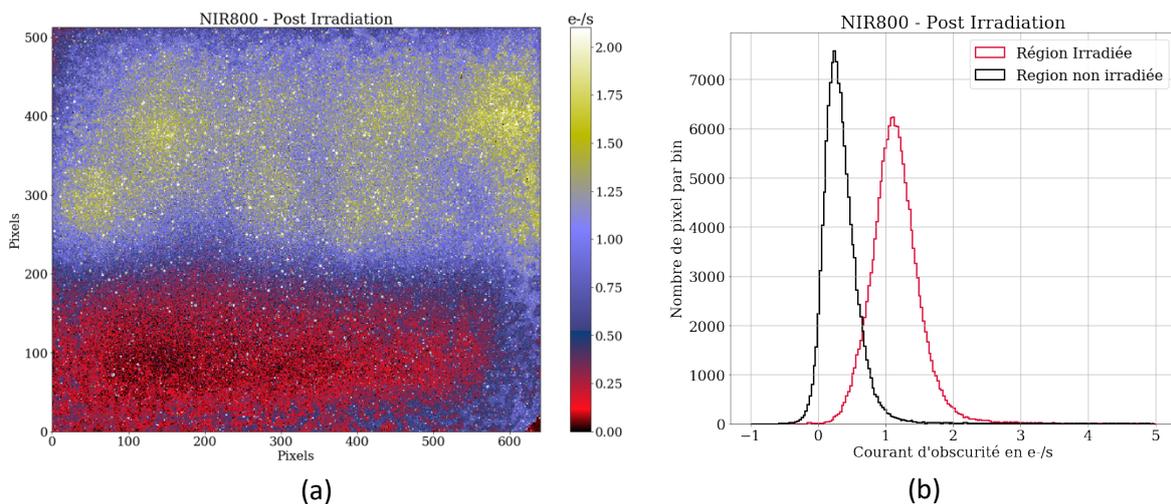


Figure 106 – (a) Cartographie du courant d'obscurité du détecteur NIR800 après irradiation. (b) Histogramme de la distribution de la valeur du courant d'obscurité après irradiation dans le détecteur NIR800.

Dans le détecteur NIR800, On observe une diminution du courant d'obscurité dans la région masquée entre les mesures pré et post irradiation. Cette diminution s'explique par le fait que le courant mesuré est attribué à un courant associé à la libération puis à la collection de porteurs localisés sur des pièges dans le matériau HgCdTe. Il s'agit de la persistance liée au piégeage de porteurs lors de la mise à froid du détecteur. Le nombre de charges piégées décroît exponentiellement avec le temps. Le nombre de charges participant au courant d'obscurité est donc plus important dans la mesure pré-irradiation que dans la mesure post irradiation. La mesure post irradiation a été effectuée quelques heures après la mesure pré irradiation.

En revanche, dans la partie non masquée, on observe après l'irradiation une élévation du courant circulant dans les diodes. Comme on peut le voir sur la Figure 106 (a), celui-ci est fortement inhomogène dans la région irradiée. L'origine de ces variations spatiales reste mal comprise. Il est

difficile de les attribuer au substrat de CdZnTe ou la couche photosensible de HgCdTe, auquel cas le courant mesuré serait un courant de persistance associé au dépôt de charges dans le HgCdTe.

NIR50

Dans le Tableau 33, la valeur moyenne du gain de conversion en $\mu\text{V}/\text{ADU}$ mesurée pour le détecteur NIR50 avant et après irradiation est présentée. On observe une diminution de la valeur du gain après irradiation. Ceci suggère une dégradation du ROIC induit par l'irradiation. Cet effet n'a pas été observé sur le détecteur NIR800. La valeur médiane des capacités des diodes avant et après irradiation, ainsi que le gain de conversion en e^-/ADU sont retranscrits dans le Tableau 33. On remarque que ces grandeurs diminuent légèrement après irradiation. Il semblerait que l'irradiation ait eu un effet néfaste sur le détecteur NIR50.

Tableau 33 - Valeurs mesurées de la capacité parasite du ROIC, de la capacité d'intégration des diodes et du gain de conversion en e^-/ADU avant et après irradiation dans le détecteur NIR50

	Gain de conversion en $\mu\text{V}/\text{ADU}$	Capacité d'intégration en μF	Gain de conversion en e^-/ADU
<i>Pré Irradiation</i>	15.85	23.4	2.31
<i>Post Irradiation</i>	14.73	23.1	2.26

La cartographie et l'histogramme du courant d'obscurité avant et après irradiation sont donnés sur la Figure 107 et la Figure 108, respectivement. Les disparités dans le courant d'obscurité observées sur la cartographie pré irradiation sont attribuées à des effets de persistance. On observe que le courant d'obscurité après irradiation est négatif dans une importante partie du détecteur (à la fois dans les régions irradiée et non irradiée). La raison de ce phénomène est inconnue et reste à investiguer. Les valeurs médianes du courant d'obscurité dans les deux régions du détecteur avant et après irradiation sont reproduites dans le Tableau 34. Le courant d'obscurité mesuré avant irradiation est supérieur au courant mesuré au laboratoire IR. De manière analogue à ce qui a été avancé dans le cas du détecteur NIR800, ce phénomène est attribué à la différence d'historique du composant lors des deux mesures.

Tableau 34 - Courant d'obscurité médian mesuré dans les deux régions du détecteur NIR50 avant et après irradiation

	Région irradiée	Région non Irradiée
<i>Pré irradiation</i>	$2.20 \pm 0.53 e^-/s$	$1.89 \pm 0.62 e^-/s$
<i>Post Irradiation</i>	$0.054 \pm 0.19 e^-/s$	$-0.0057 \pm 0.18 e^-/s$

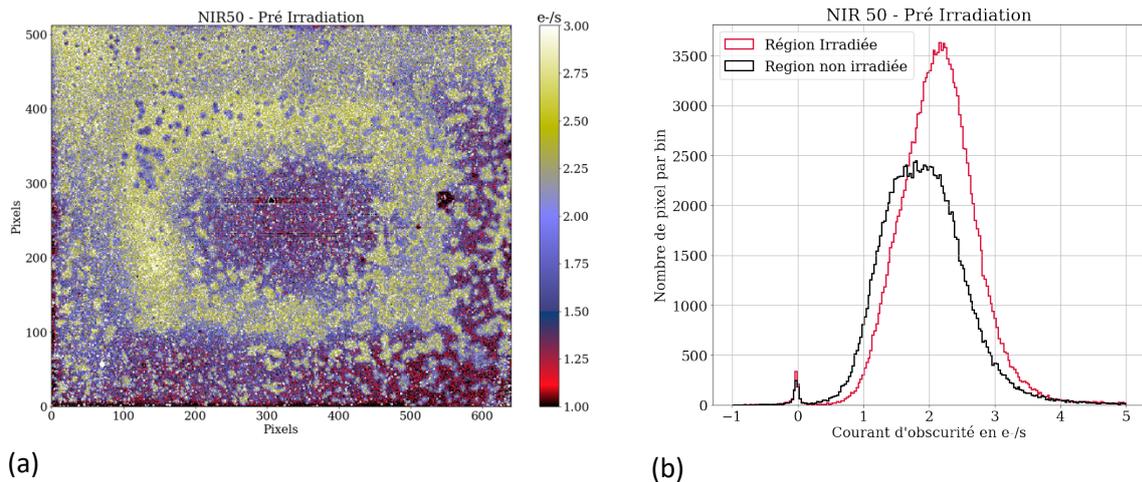


Figure 107 –(a) Cartographie du courant d'obscurité du détecteur avant irradiation NIR50. (b) Histogramme de la distribution de la valeur du courant d'obscurité avant irradiation.

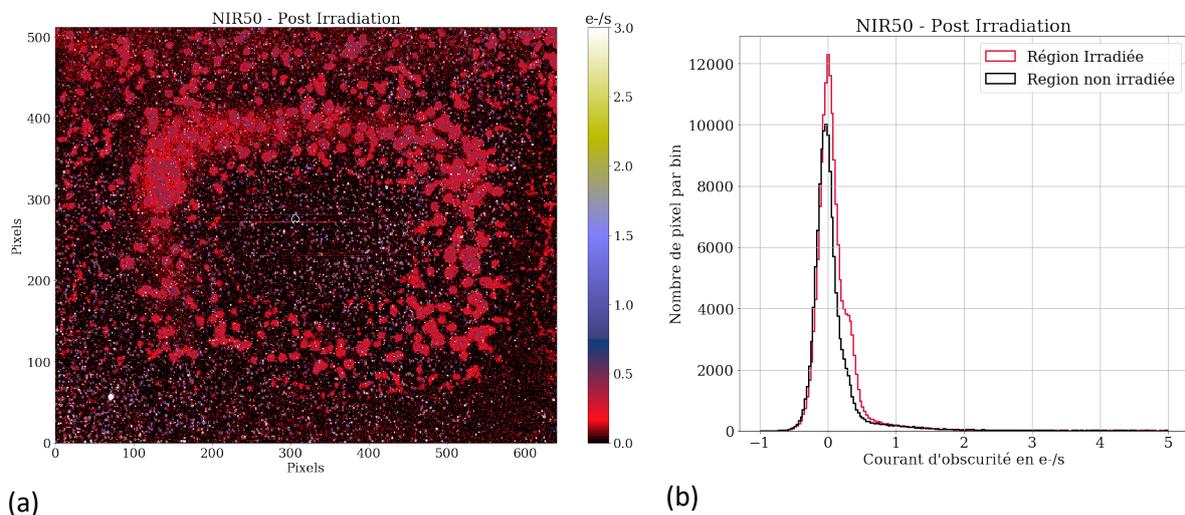


Figure 108 –(a) Cartographie du courant d'obscurité du détecteur après irradiation NIR50. (b) Histogramme de la distribution de la valeur du courant d'obscurité après irradiation.

Dans cette section, j'ai présenté le dispositif expérimental ainsi que le plan d'irradiation et les caractérisations effectuées sur le détecteur avant et après irradiation. Dans la section suivante, je détaille les résultats des mesures effectuées sous irradiation de protons.

1.2 Résultats de la campagne d'irradiation

1.2.1 Analyse des données sous irradiation

L'objectif est d'extraire deux informations à partir des mesures sous irradiation de protons :

1. Les caractéristiques du cluster moyen.
2. L'élévation du signal de fond dans les pixels non affectés par un impact.

Afin de répondre à ces objectifs, il est nécessaire de détecter les impacts de protons sur les images sous irradiation. Pour cela le code de calcul SEXtractor a été utilisé. Il est présenté dans la section suivante.

1.2.1.1 Présentation de l'outil SEXtractor

SEXtractor, pour *Source Extractor* (noté SE dans la suite) est un programme développé pour identifier des objets dans une image astronomique [8]. Dans cette sous-section, je détaillerai la démarche utilisée par SE pour obtenir des informations sur les objets présents dans une image.

Dans SE, un objet est défini de la manière suivante : un groupe de pixels dont la valeur excède un seuil au-dessus du signal de fond de l'image. La première étape dans la détection des objets consiste alors à construire une cartographie du signal de fond. L'estimation de ce signal est réalisée en utilisant la méthode du *sigma-clipping*. La médiane et l'écart type, noté σ , sont calculés. Puis les pixels s'écartant de la distribution sont supprimés. Ces étapes sont répétées jusqu'à ce que l'ensemble des pixels restants soit compris dans l'intervalle $\pm 3\sigma$ autour de la médiane. Par ailleurs, il est possible d'appliquer un filtre sur l'image de fond pour atténuer les artefacts dans la valeur du signal de fond induit par la présence d'objets étendus ou particulièrement brillants. L'image du signal de fond ainsi obtenue est soustraite de l'image que l'on souhaite analyser.

Un seuil est ensuite appliqué afin de détecter les objets. Ce dernier est défini de manière absolue ou de manière relative par rapport au signal de fond. Après ces étapes de détermination du signal de fond et de détection des objets, SE localise les objets et détermine leurs caractéristiques en termes de géométrie et d'intensité.

1.2.1.2 Détection des impacts de protons sur les mesures FUR avec SEXtractor

Afin de détecter les impacts de protons sur les images acquises pendant l'irradiation, les pixels présentant un saut soudain dans leur signal et dont l'amplitude est supérieure à 3σ par rapport au signal de fond sont marqués comme affectés par un proton. Cette détection est effectuée avec l'aide de SE.

SE est appliqué à la différence de deux images consécutives de la rampe d'intégration comme illustré sur la Figure 109 (a). Un exemple de rampe d'intégration d'un pixel affecté par un proton est donné sur la Figure 109 (b). L'impact du proton sur le pixel induit une discontinuité dans la rampe d'intégration du pixel. Juste après l'impact le signal mesuré par le pixel décroît avant d'augmenter de nouveau. Ce phénomène a déjà été observé par d'autres équipes de recherche [9], mais reste mal compris.

Dans notre cas, je propose une interprétation basée sur le phénomène de persistance. Dans la mesure où c'est un circuit de lecture de type SFD qui est utilisé comme ROIC dans ces détecteurs, la valeur du signal lu donne une indication sur la taille de la zone de charge d'espace dans la jonction. Ainsi, il semblerait que l'interaction du proton avec la jonction induise une modification de la zone déplétion par effet de *funneling* (voir chapitre 1). La présence de ces pentes négatives peut s'expliquer alors par

une augmentation de la zone de déplétion induite par l'interaction du proton avec la jonction de la diode. Ainsi, des pièges aux interfaces ou dans le matériau HgCdTe, se trouvent dépourvus des charges précédemment piégées. Après le passage du proton ces pièges se trouvent vacants et captent les trous qui ne participent alors plus au signal collecté par la jonction. Une analyse plus complète du signal des pixels affectés par un proton doit être menée en ajustant la décroissance du signal après l'impact avec une fonction exponentielle afin de déterminer des temps de décroissance caractéristiques. De plus, l'effet du reset sur les pixels affectés par un proton pourra être étudié.

Dans la suite, les pixels sont marqués comme affectés par un proton, si leur valeur est 3σ au-dessus du signal de fond de l'image. Le nombre d'impacts détectés par image, sous flux de 50 protons/s/cm², est donné sur la Figure 110. La valeur moyenne est de 3.6 impacts par images, est inférieure à la valeur attendue déterminée à partir des mesures de flux réalisé avec le scintillateur et le photomultiplicateur (voir Tableau 25). Cette différence peut s'expliquer par la diffusion des protons lors de leur passage à travers la fenêtre en aluminium du cryostat et du film de mylar de l'écran thermique (voir Figure 94). Cet effet a pour conséquence de diminuer le flux de protons incident sur le détecteur.

La cartographie des impacts ainsi obtenus à la fin de la rampe d'intégration est donnée sur la Figure 111 (a). Cette cartographie correspond aux mesures sous irradiation effectuée avec un flux de protons de 50 protons/s/cm². Elle est comparée qualitativement à la cartographie des impacts simulés avec GEANT4 (voir section 1.1.3.2). On observe une bonne concordance entre la cartographie d'impact simulée et mesurée.

Dans la suite afin de déterminer les caractéristiques des impacts et observer une élévation du signal de fond, je m'appuierai sur ce catalogue d'objet réalisé par SE.

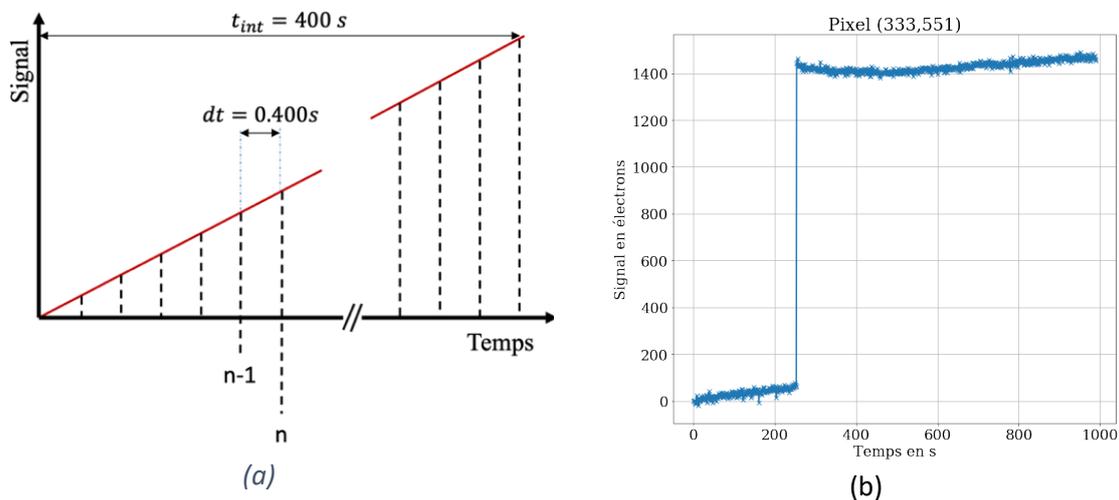


Figure 109 –(a) Illustration schématique d'une rampe d'intégration. (b) Exemple de signal FUR d'un pixel du détecteur NIR800 affecté par un proton. On observe une discontinuité dans le signal du pixel induite par l'interaction du proton avec le détecteur.

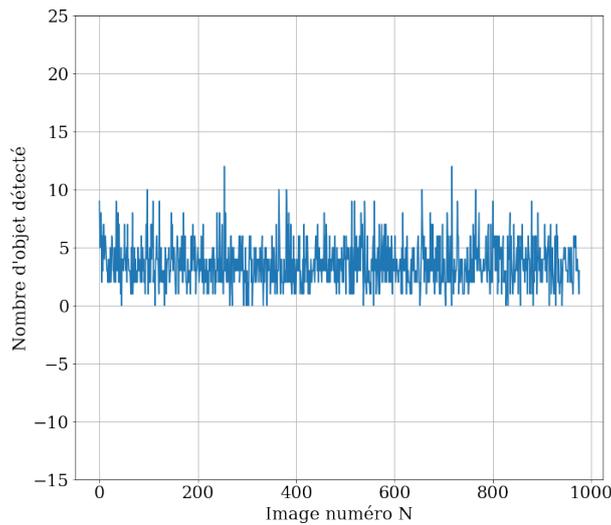


Figure 110 - Nombre d'impacts détectés par images lors des mesures FUR sous flux de 50 protons/cm².

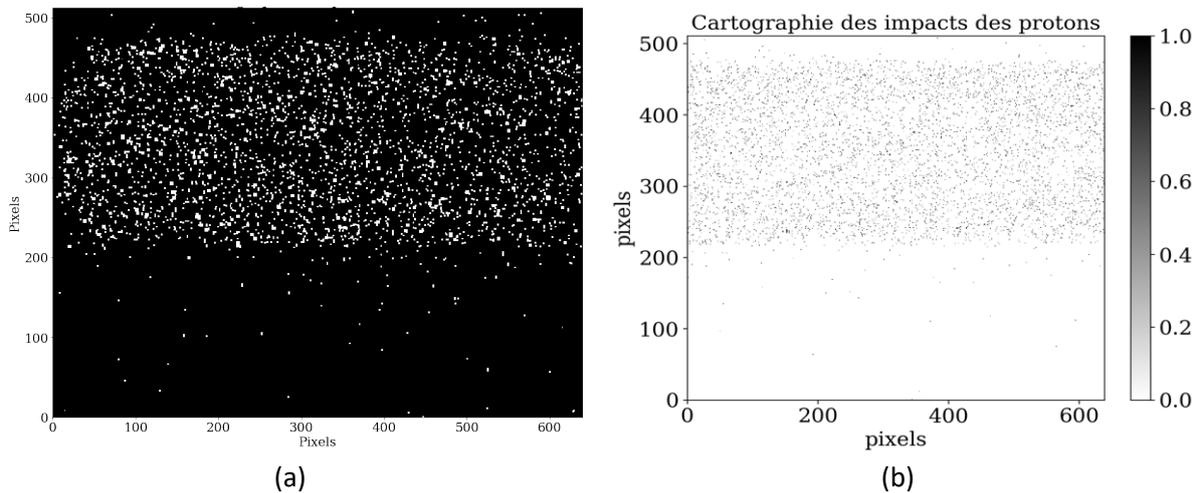


Figure 111 – (a) Cartographie des impacts *mesurés* sur le détecteur NIR800 par SEExtractor à la fin de la rampe d'intégration, obtenu sous flux de 50 protons/s/cm². (b) Cartographie des impacts *simulés* avec GEANT4, voir section Figure 111.

1.2.2 Caractérisation du signal de fond dans les pixels non affectés par un proton pendant l'irradiation

Les pixels affectés par un proton sont détectés avec SE sur chaque image acquise sous irradiation lors de la mesure FUR. Ces pixels sont exclus de l'analyse. Les pixels restants sont marqués comme non affectés par un proton. Une régression linéaire est réalisée sur le signal de ces pixels afin d'obtenir la valeur de leur courant d'obscurité. Les cartographies obtenues pour les deux détecteurs NIR800 et NIR50 sont présentées sur la Figure 112 (a) et Figure 114 (a) respectivement. Les pixels en blancs sur ces cartographies correspondent aux pixels marqués comme affectés par un proton. Les histogrammes associés sont représentés sur la Figure 112 (b) et la Figure 114 (b).

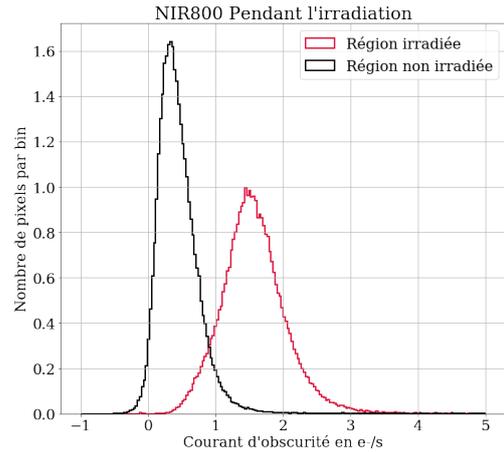
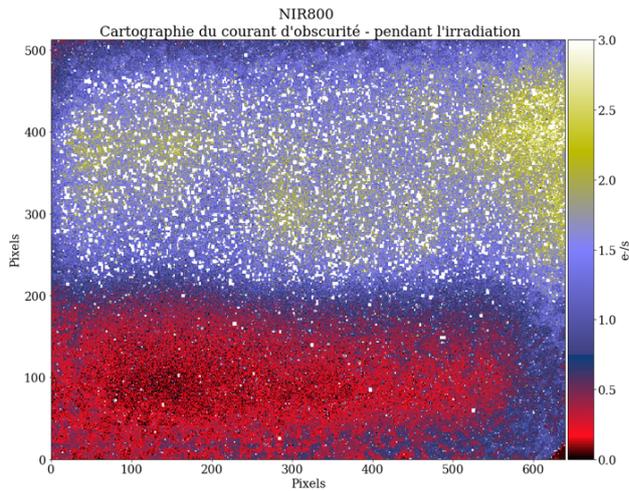
Dans le détecteur NIR800, on observe une élévation du signal de fond dans la région non masquée du détecteur qui a été irradiée (voir Figure 112 (a)). Cette élévation du signal de fond est inhomogène bien que l'irradiation soit homogène sur la surface du détecteur (voir Figure 92). En effet, certaines régions de la partie irradiée du détecteur présentent une élévation du signal de fond plus importante (en jaune sur la figure).

En revanche dans la partie non irradiée, on n'observe pas d'élévation du signal de fond. Ces observations sont appuyées par les histogrammes de la Figure 112 (b). Dans la région irradiée, la valeur médiane du courant d'obscurité est de 1.57 ± 0.46 e⁻/s/pixel tandis qu'elle est de 0.43 ± 0.27 e⁻/s/pixel dans la région non irradiée. Les inhomogénéités observées dans la cartographie du courant d'obscurité sont similaires à celles observées sur les mesures post-irradiation (voir Figure 106).

Cette élévation du courant d'obscurité dans les pixels non affectés par un proton sous irradiation a été observée par d'autres groupes de recherche sur les détecteurs H1RG de l'instrument WCF3 [1]–[3], [10]. Elle a été associée à la luminescence du substrat de CdZnTe, en corrélant la cartographie de l'efficacité quantique à 800 nm avec la cartographie de l'élévation du signal de fond du détecteur sous irradiation.

Des images acquises sous illumination homogène à 805 nm, 840 nm et 880 nm ont été acquises avec le détecteur NIR800, lors des mesures de réponse spectrale (voir section 1.1.6.5). Lors de ces mesures, l'intégralité de la surface du détecteur était illuminée, aucune région n'était masquée. Celles-ci sont comparées qualitativement à la cartographie du courant d'obscurité sous irradiation sur la Figure 114. L'objectif est d'observer une éventuelle corrélation entre la réponse spectrale du détecteur et la cartographie du courant d'obscurité. D'après les images de la Figure 104, il ne semble pas exister de correspondance entre la réponse du détecteur sous flux monochromatique et les inhomogénéités observées sur la cartographie du courant d'obscurité.

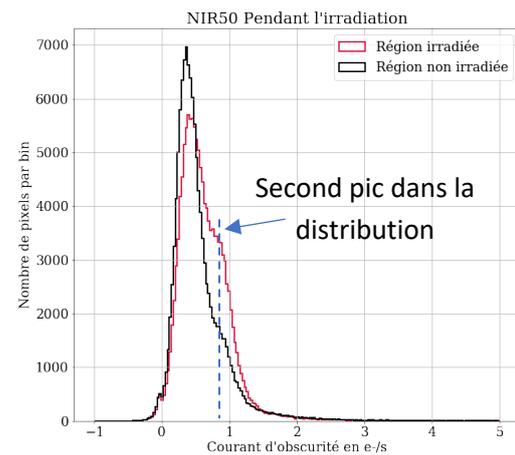
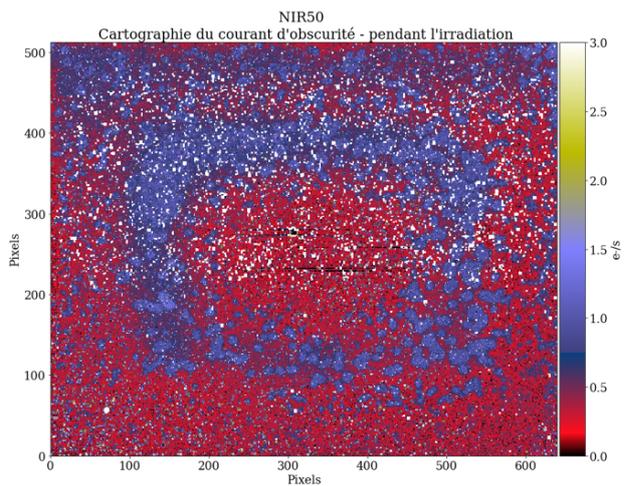
Dans le détecteur NIR50 en revanche, aucune élévation du courant d'obscurité dans les pixels non irradiés n'est observée. Les inhomogénéités de la cartographie du courant d'obscurité (voir Figure 113) étaient visibles avant l'irradiation (voir Figure 107 (a)) et ne sont donc pas attribuées à l'effet de l'irradiation. La valeur médiane du courant dans la région irradiée est de 0.57 ± 0.31 e⁻/s et de 0.45 ± 0.30 e⁻/s dans la région non irradiée. On observe néanmoins un second pic dans l'histogramme correspondant à la région irradiée dans la Figure 113 (b), en dessous de 1e⁻/s, celui-ci est dû aux pixels appartenant au rectangle au centre de la matrice (en bleu sur la Figure 113 (a)). On retrouve par ailleurs ce pic dans l'histogramme des pixels de la région non irradiée, à la même position mais de plus faible amplitude.



(a)

(b)

Figure 112 - Cartographie du courant d'obscurité dans le détecteur NIR800 (sans les pixels affectés par l'impact d'un proton). (b) Histogramme du courant d'obscurité dans les pixels non affectés par un proton sous irradiation dans les deux régions du détecteur NIR800.



(a)

(b)

Figure 113 - Cartographie du courant d'obscurité dans le détecteur NIR50 (sans les pixels affectés par l'impact d'un proton). (b) Histogramme du courant d'obscurité dans les pixels non affectés par un proton sous irradiation dans les deux régions du détecteur NIR50.

Ainsi, les mesures FUR ont montré que le détecteur NIR800, ayant une épaisseur de substrat de 800 μm , présentait une élévation du signal de fond dans les pixels non affectés par un proton à la différence du détecteur NIR50, dont l'épaisseur de substrat est de 50 μm . Je vais montrer dans la section suivante, que cette élévation du signal de fond est associée à la présence d'un signal faible induit par l'interaction d'un proton avec le substrat.

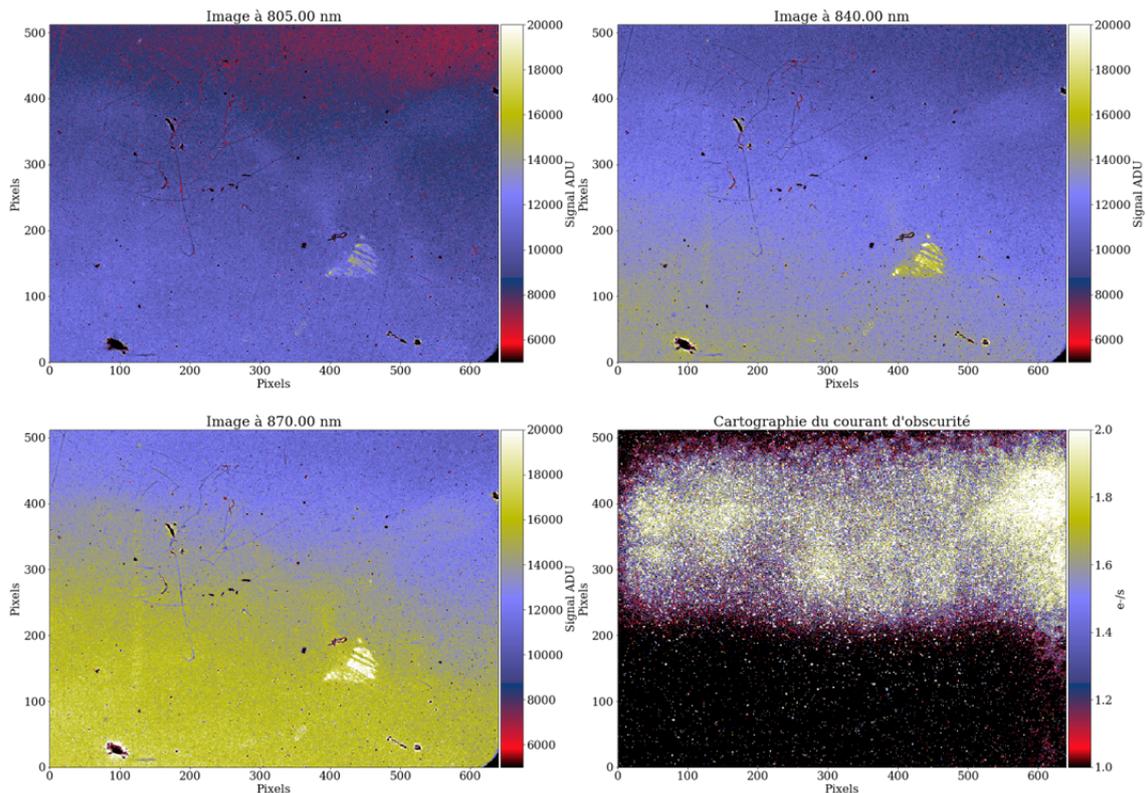


Figure 114 - Comparaison de la cartographie du courant d'obscurité sous irradiation aux images acquises sous flux lumineux monochromatique pour le détecteur NIR800, aux longueurs d'onde 805 nm, 840 nm et 870 nm.

1.2.3 Caractéristique de l'impact d'un proton unique

A partir des mesures FUR réalisées avec le détecteur NIR50 et NIR800, j'ai extrait les caractéristiques des pixels affectés par l'impact d'un proton. Pour rappel, on appelle cluster l'ensemble des pixels affectés par un proton. Des exemples de clusters sont présentés en annexe (voir Annexe G). L'identification des pixels affectés par un proton est réalisée avec SE. L'amplitude maximale de chaque objet identifié dans les images FUR est présentée sur la Figure 115 (a) pour les deux détecteurs. La valeur médiane est de 2830 électrons et 1840 pour le détecteur NIR800 et NIR 50, respectivement. La différence de distribution d'amplitude des évènements entre le détecteur NIR800 et NIR50 peut s'expliquer par la présence du substrat de CdZnTe de 800 μm . Dans le détecteur NIR800, l'épais substrat conduit à une dégradation de l'énergie des protons. Par conséquent, les protons arrivent sur la couche de HgCdTe avec moins d'énergie dans le cas du détecteur NIR800 que dans le cas du détecteur NIR50. Par conséquent, ces protons déposent plus de charges dans la couche de HgCdTe. De plus, l'interaction du proton avec le substrat augmente la dispersion en énergie du spectre de proton incident. C'est la raison pour laquelle l'histogramme est plus large dans le cas du détecteur NIR800 : les protons interagissent plus avec le substrat ce qui mène à un élargissement du spectre énergétique.

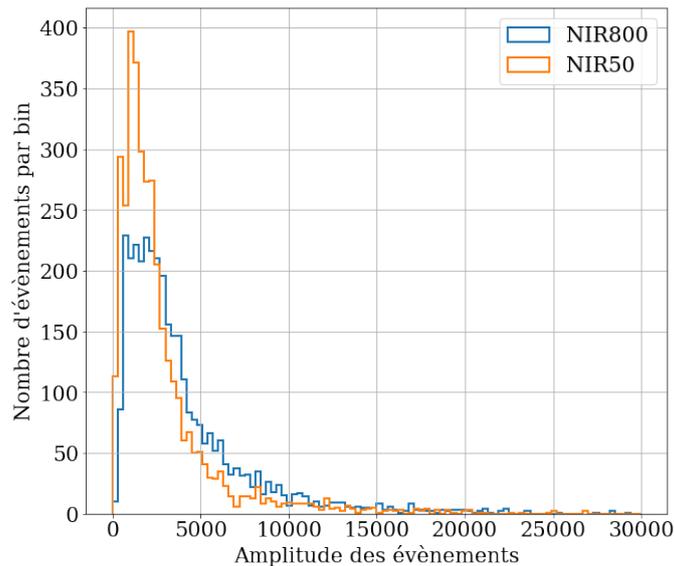


Figure 115 – Valeur du pixel central de l'objet affecté par un proton extrait des mesures effectuées avec le détecteur NIR800 et NIR50.

Afin de déterminer les caractéristiques d'un cluster, la moyenne des clusters identifiés par SE a été déterminée. Le cluster moyen ainsi obtenu à partir des mesures sous irradiation réalisées avec le détecteur NIR800 est présenté sur la Figure 116 (a). On observe la présence d'un signal de fond très faible, inférieur à 10 électrons, autour du point d'impact sur le pixel (101,101). Le cluster moyen extrait des données acquises sous irradiation avec le détecteur NIR50 est présenté sur la Figure 116 (b). Dans ce cas, on n'observe pas de signal de fond diffus autour du point d'impact. Dans le cas d'un détecteur dont le substrat est aminci à 50 μm , un proton affecte seulement le pixel sur lequel il est incident ainsi que ces plus proches voisins.

A partir des clusters moyens, deux profils radiaux, un pour chaque détecteur, ont été calculés en prenant la valeur moyenne des pixels à égale distance du pixel central. Ces profils sont présentés sur la Figure 117. La détermination d'un cluster moyen permet d'extraire du bruit le faible signal induit par l'interaction du proton avec le détecteur présent dans les pixels au voisinage du point d'impact. **On observe que le profil radial s'étend, sur 110 pixels dans le détecteur NIR800 alors qu'il est restreint à 6 pixels dans le détecteur NIR50.** Comme nous l'avons déjà observé sur la Figure 116 (a), dans le détecteur NIR800 l'amplitude du signal mesuré dans les pixels au voisinage du point d'impact est très faible. Néanmoins, cette importante extension radiale d'un cluster est suspectée d'être à l'origine de l'élévation du signal de fond mesurée dans la section précédente (voir section 1.2.2). Dans le paragraphe suivant, je présente des images CDS acquises avec les deux détecteurs sous flux de protons.

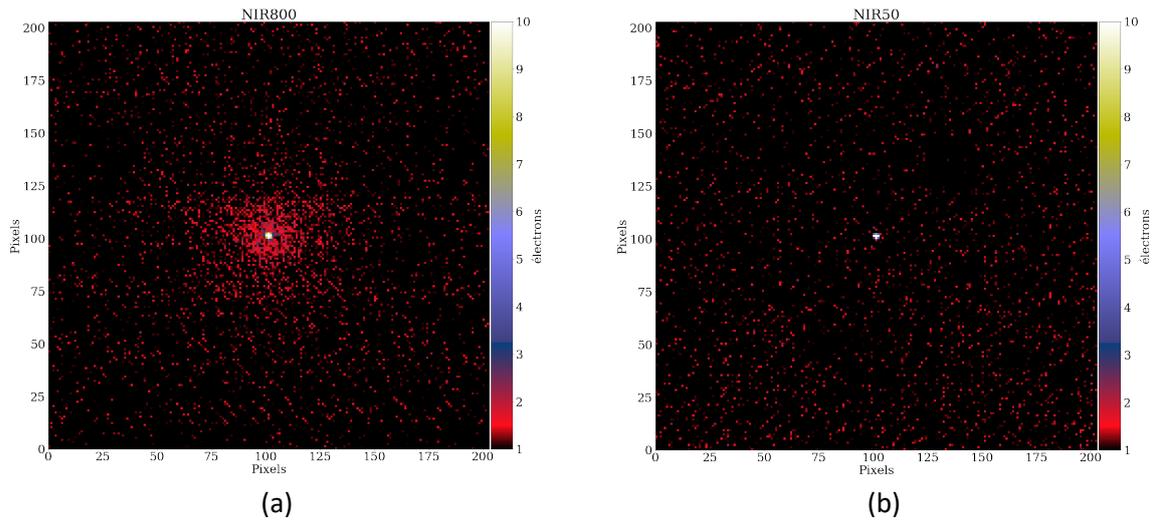


Figure 116 – (a) Cluster moyen obtenu à partir des mesures FUR effectuée avec le détecteur NIR800 (b) Cluster moyen obtenu à partir des mesures FUR effectuée avec le détecteur NIR50. Les échelles sont en nombre de trous.

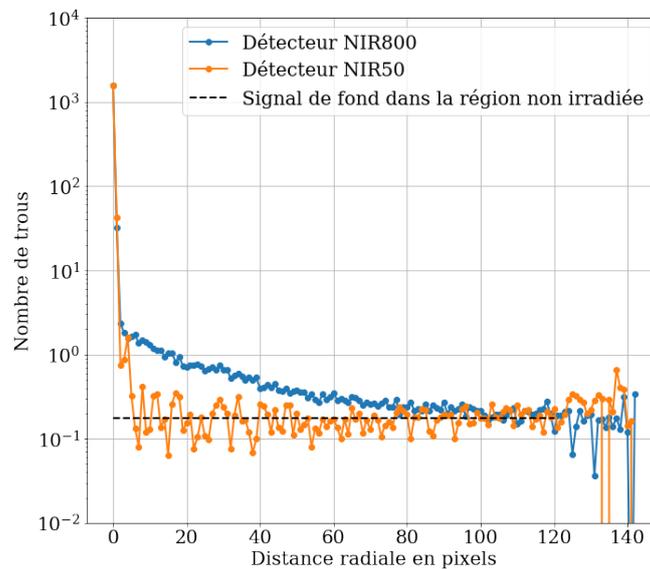


Figure 117 - Profils radiaux obtenus à partir des mesures FUR sur les deux détecteurs NIR50 et NIR800. La courbe en traits tirés correspond au signal de fond mesuré dans les régions non irradiées.

1.2.4 Image CDS sous irradiation

Outre les mesures FUR, des images ont été acquises en mode CDS, comme le montre le protocole expérimental du Tableau 24. Dans ce mode de lecture, une première image est effectuée juste après le reset. Puis une seconde image est acquise au bout d'un temps t_{int} correspondant au temps d'intégration (voir Figure 91 (b)). Une image CDS est la différence de ces deux images. Le temps d'intégration des détecteurs pendant l'irradiation était de 10.4 s.

Pour chaque détecteur, NIR50 et NIR800, cent images CDS ont été acquises sous un flux de 250 protons/s/cm². Sur la Figure 118, la différence de deux images CDS obtenues sous irradiation avec le détecteur NIR800 (800 μ m de substrat) est présentée. D'une image CDS à une autre, les pixels affectés par l'irradiation sont différents. Ainsi, la différence de deux images conduit à des pixels dont

la valeur est positive ou négative. C'est la raison pour laquelle on observe des pixels noirs et des pixels blancs. Par ailleurs sur cette figure, on observe un fond diffus autour des impacts.

La différence d'image CDS obtenue dans des conditions de mesures identiques avec le détecteur NIR50 est présentée sur la Figure 119. De manière similaire, on observe des pixels noirs et blancs suite à la différence de distribution des impacts d'une image à une autre. Cependant, sur cette figure, je n'observe pas de fond diffus autour des impacts. Seul des impacts ponctuels sont visibles.

Ces résultats restent qualitatifs. Des analyses plus avancées des images CDS sous irradiation sont en cours.

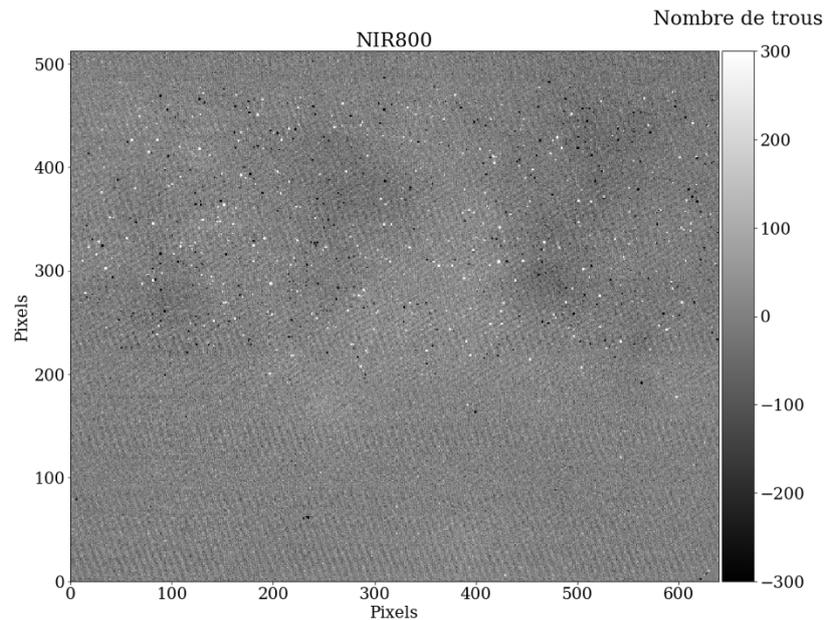


Figure 118 - Différence d'images CDS acquises sous irradiation de protons avec un flux de 250 protons/s/cm² avec le détecteur NIR800

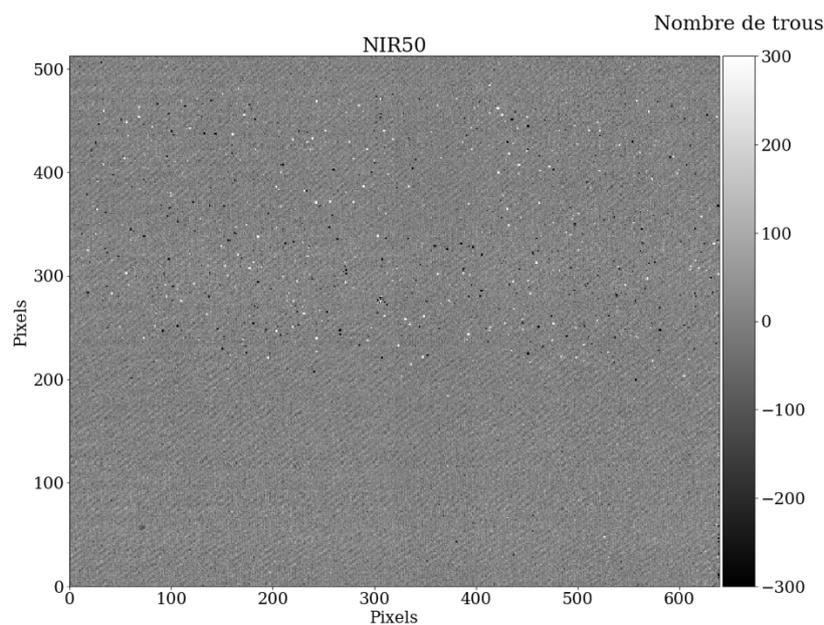


Figure 119 - Différence d'images CDS acquises sous irradiation de protons avec un flux de 250 protons/s/cm² avec le détecteur NIR50.

1.3 Résumé des résultats de mesures de la campagne d'irradiation sur les détecteurs NIR

J'ai présenté dans les sections précédentes les résultats de la campagne d'irradiation. Ceux-ci sont récapitulés dans cette section. Les valeurs de courant d'obscurité mesurées avant, pendant et après irradiation dans les deux détecteurs sont résumées dans le Tableau 35. Seul le détecteur avec 800 μm de substrat a montré une élévation du signal de fond dans les pixels non affectés par un proton. Cette élévation s'explique par la très large extension du profil radial autour de chaque cluster induit par un impact de proton. En effet nous avons vu que le profil radial d'un cluster s'étend sur plusieurs dizaines de pixel lorsque le substrat est épais (ici 800 μm). En revanche, lorsque le substrat est aminci, ici 50 μm de substrat résiduel, les clusters s'étendent sur six pixels. C'est pourquoi, aucune élévation du signal de fond n'a été observée dans le détecteur NIR50.

Dans la section suivante, j'applique mon modèle afin de comparer les caractéristiques d'un cluster simulées aux caractéristiques des clusters extraits des mesures sous irradiation.

Tableau 35 - Courant d'obscurité médian dans les pixels non marqués par SE comme non affectés par un proton deux régions du détecteur sous irradiation de protons de 63 MeV, flux de 50 protons/s/cm².

	Région	Avant Irradiation	Pendant l'irradiation	Après l'irradiation
NIR50	Irradiée	$2.200 \pm 0.53 \text{ e}^-/\text{s}$	$0.57 \pm 0.31 \text{ e}^-/\text{s}$	$0.05 \pm 0.19 \text{ e}^-/\text{s}$
	Non Irradiée	$1.89 \pm 0.62 \text{ e}^-/\text{s}$	$0.45 \pm 0.30 \text{ e}^-/\text{s}$	$-0.01 \pm 0.18 \text{ e}^-/\text{s}$
NIR800	Irradiée	$0.88 \pm 0.32 \text{ e}^-/\text{s}$	$1.57 \pm 0.46 \text{ e}^-/\text{s}$	$1.18 \pm 0.30 \text{ e}^-/\text{s}$
	Non Irradiée	$0.81 \pm 0.33 \text{ e}^-/\text{s}$	$0.43 \pm 0.27 \text{ e}^-/\text{s}$	$0.30 \pm 0.23 \text{ e}^-/\text{s}$

1.4 Comparaison des images simulées aux images extraites des mesures effectuées sous irradiation

Le modèle est appliqué en utilisant les paramètres matériaux mesurés et extraits de la littérature explicités dans le chapitre 3. Des images sont simulées en considérant une distribution aléatoire d'impacts de protons, en considérant deux détecteurs dont l'épaisseur de substrat est différente^a.

La différence de deux images simulées est présentée sur la Figure 120 (a) en supposant un détecteur avec 800 μm de substrat de CdZnTe et sur la Figure 120 (b) en considérant un détecteur au substrat de CdZnTe aminci à 50 μm . La différence des deux images révèle des pixels blancs (dont la valeur est positive) et des pixels noirs (dont la valeur est négative) suite à la différence de distribution des impacts d'une image à une autre. Ces images sont à comparer aux images des Figure 118 et Figure 119 qui correspondent à la différence de deux images CDS acquises sous irradiation. Ainsi, les images simulées considèrent un flux de protons de 250 protons/s/cm² et un temps d'intégration de 10.4 s.

Sur la Figure 120 (a), on observe un signal de fond diffus autour des impacts proton. Ce signal présent dans le voisinage du pixel sur lequel le proton est incident n'est pas visible sur l'image simulée

^a Les images simulées ne prennent pas en compte l'effet de l'IPC (ou *Inter-Pixel Capacitance*) qui caractérise l'influence des charges cumulées dans un pixel sur la tension lue par les pixels voisins [15].

présentée sur la Figure 120 (b). Ces observations sont similaires à ce que nous avons constaté sur la différence d'images CDS construite à partir d'images acquises sous irradiation. Lorsque le substrat est aminci (ici 50 μm de substrat résiduel), un impact de proton affecte seulement un petit nombre de pixels.

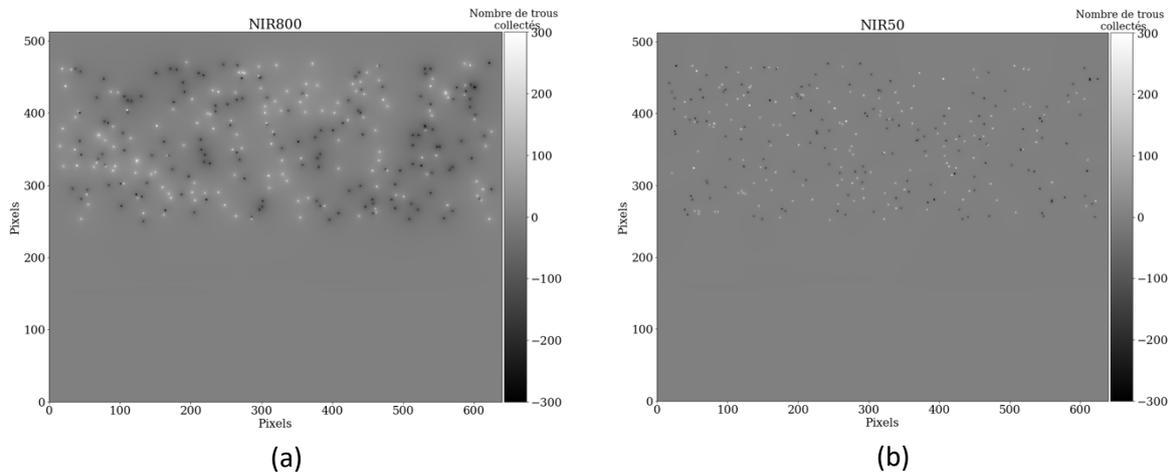


Figure 120 - Différence de deux images simulées en supposant un détecteur de 800 μm de substrat de CdZnTe (a) et en supposant en détecteur de 50 μm de substrat de CdZnTe (b).

Un cluster de pixels affectés par l'impact d'un proton a été extrait des images simulées pour chacun des détecteurs. Ceux-ci sont exposés sur la Figure 121 (a) et la Figure 121 (b) en supposant un détecteur dont le substrat est de 800 μm et un détecteur dont le substrat est de 50 μm , respectivement. Les clusters sont représentés en échelle log. On observe que lorsque le substrat de CdZnTe est intact (soit 800 μm d'épaisseur), le cluster de pixels s'étend sur une importante distance. Un signal de fond diffus est visible autour des pixels sur lequel le proton est incident. L'extension radiale du profil est moins importante lorsque le substrat est aminci. Ces observations sont en bon accord avec les observations effectuées sur les clusters moyens extraits des mesures sous irradiation (voir Figure 116). **Ainsi on observe une augmentation de la taille du cluster avec l'augmentation de l'épaisseur du substrat de CdZnTe.**

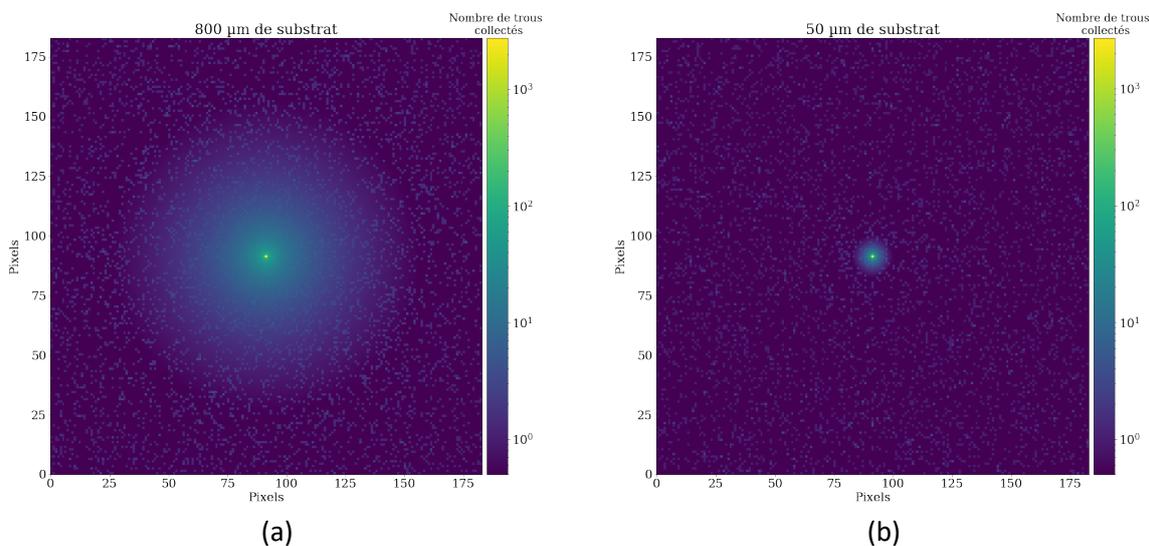


Figure 121 - Cluster simulé à partir du modèle développé dans le chapitre 2 en utilisant les propriétés matériaux mesurées et présentées dans le chapitre 3.

A partir des clusters présentés sur la Figure 121, j'ai calculé le profil radial d'un impact simulé pour les deux épaisseurs de substrat étudiées ici, 800 μm et 50 μm . Ces profils sont présentés sur la Figure 122 (courbes bleues), où ils sont comparés aux profils radiaux extraits des mesures sous irradiation (courbes vertes). On observe un très bon accord entre les données expérimentales et les données simulées. Seule une légère surestimation du nombre de charges est constatée proche de l'impact du proton dans le cas d'un détecteur avec 800 μm de substrat. Celle-ci est discutée ci-après.

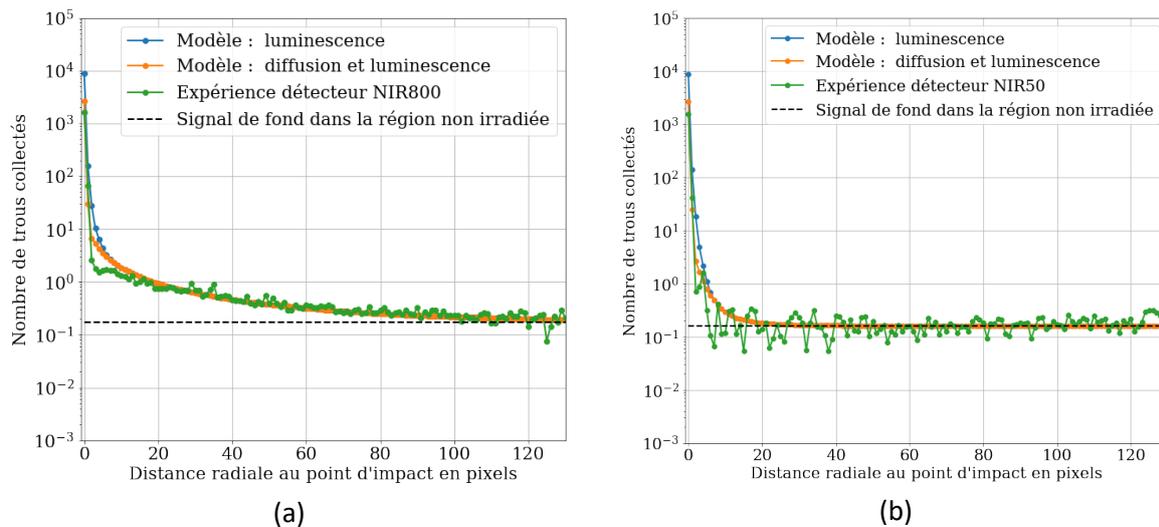


Figure 122 - Profils radiaux calculés à partir des images simulées.

Sur les Figure 122 (a) et Figure 122 (b), on observe que les courbes bleues surestiment le nombre de trous collectés par le pixel sur lequel le proton est incident (en $x = 0$). Ces courbes résultent de la somme de contribution du dépôt dans le HgCdTe, de la contribution de la diffusion des porteurs du CdZnTe vers le HgCdTe et de la contribution des photons de luminescence. D'après le modèle et avec les propriétés matériaux décrites dans le chapitre 3, le nombre de porteurs collectés par le pixel central est de 8681 pour le détecteur avec 50 μm de substrat et 8798 pour le détecteur avec 800 μm . Ces valeurs sont supérieures aux valeurs extraites des mesures expérimentales (voir section 1.2.3). Deux hypothèses peuvent expliquer cette différence.

1. Ces simulations ont été effectuées en supposant une longueur de diffusion de 12.5 μm . Autrement dit, les porteurs générés dans le substrat à une distance inférieure à 12.5 μm de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe peuvent rejoindre par diffusion la couche photosensible puis être collectés. Si la longueur de diffusion est plus courte, une moins grande quantité de porteurs sera susceptibles de diffuser vers la couche de HgCdTe réduisant alors la contribution de la diffusion au signal mesuré par le HgCdTe.
2. Une autre hypothèse concerne la nature électrique de l'interface entre le HgCdTe et le CdZnTe. Nous avons supposé dans le chapitre 2, que l'interface entre le HgCdTe et le CdZnTe était parfaitement absorbante pour les trous. Par conséquent, nous avons considéré jusqu'à

présent que les trous proches de cette interface diffusaient jusqu'à la couche photosensible de HgCdTe où ils étaient collectés. Cette hypothèse suppose que le CdZnTe n'est pas dopé. Or, si le CdZnTe est de type p, une barrière de potentiel se forme à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe ce qui empêche la diffusion des trous du CdZnTe vers le HgCdTe. La détermination du dopage du CdZnTe pourra constituer une perspective expérimentale dans la continuité de ces travaux.

De plus, on observe sur la Figure 122 (a), en concordance avec les mesures expérimentales, que le profil radial simulé s'étend sur plusieurs dizaines de pixels. Or, nous avons vu dans le chapitre 3, que la diffusion des porteurs du CdZnTe était le processus de pollution principal proche de la trajectoire des protons et que la contribution photonique devenait le processus principal de pollution loin du point d'impact. Ainsi, ceci suggère que c'est l'émission de photons de basse énergie qui contribue à l'importante extension radiale d'un cluster.

La comparaison avec le profil radial expérimental, extrait des mesures effectuées avec le détecteur NIR800, montre que le modèle surestime légèrement le nombre de porteurs collectés par les pixels proches du point. La surestimation du nombre de porteurs collectés par le HgCdTe dans les pixels proches du point d'impact du proton, peut s'expliquer par différents facteurs :

1. J'ai supposé que les photons de luminescence dont l'énergie est inférieure à l'énergie de gap du CdZnTe n'étaient pas absorbés. Or l'absorption n'est pas nulle en dessous du gap dans un semi-conducteur, la présence d'état de pièges dans le gap ainsi que des fluctuations dans la composition de l'alliage conduisent à l'absorption des photons dont l'énergie est inférieure au gap. Il s'agit de la queue d'Urbach. Ainsi, en augmentant le coefficient d'absorption optique la contribution photonique sera réduite.
2. Par ailleurs, cette simulation considère une longueur de diffusion de 12.5 μm dans le CdZnTe. Or la réduction de cette longueur de diffusion conduit à une diminution de l'intensité du profil radial proche de la trajectoire du proton incident. Par conséquent, une mesure de la longueur de diffusion permettrait de simuler plus finement le profil radial proche de la trajectoire du proton.

Sur la Figure 122 (b), le profil radial simulé pour un détecteur avec 50 μm de substrat est comparé au profil radial extrait des mesures expérimentales acquises avec le détecteur NIR50. De nouveau, il y a un bon accord avec les données simulées et les données expérimentales. De plus, en concordance avec les résultats de la campagne d'irradiation, on observe que l'étendue du profil radial simulé est moins importante dans le cas d'un détecteur avec 50 μm de substrat résiduel.

1.5 Discussion

Dans cette section, j'ai appliqué le modèle développé dans le chapitre 2, en utilisant les propriétés optiques du CdZnTe mesurées dans cette thèse et présentées dans le chapitre 3. Les conclusions du modèle sont identiques aux observations effectuées sur les données expérimentales :

- La taille des clusters augmente avec l'épaisseur de substrat
- Le signal de fond des pixels au voisinage du pixel sur lequel le proton est incident est faible

- L'élévation du signal de fond observée dans le détecteur NIR800 dans la région irradiée est attribuée à l'importante densité d'impacts et à l'importante étendue radiale d'un cluster induit par un proton.

La comparaison quantitative des profils radiaux simulés aux profils extraits des mesures expérimentales a montré un très bon accord. Bien que le modèle surestime légèrement le signal collecté par les pixels proches du point d'impact du proton. Nous avons vu que cette surestimation peut s'expliquer notamment par une surévaluation de la longueur de diffusion des porteurs dans le CdZnTe.

La problématique du comportement des détecteurs IR de technologie HgCdTe non amincis sous irradiation préoccupe particulièrement les agences spatiales dans le cadre du développement des instruments. Ainsi, le Centre Nationale d'Étude Spatiale (CNES) va réaliser une campagne sur des détecteurs IR de type HgCdTe dont le substrat est partiellement retiré dans le cadre de la mission MicroCarb^a.

Par ailleurs, le détecteur de technologie HgCdTe d'une des voies IR de l'instrument AIRS (*ARIEL infrared spectrometer*) de la mission spatiale ARIEL (*Atmospheric Remote-sensing Infrared Exoplanet Large survey*) ne sera pas complètement aminci. Afin de quantifier l'effet du substrat résiduel sur le comportement du détecteur sous irradiation, une campagne d'irradiation a été réalisée sur ce détecteur^b. J'ai eu l'occasion de participer à cette expérience et j'ai travaillé sur une partie des données d'irradiation. Les résultats obtenus lors de cette campagne d'irradiation sont présentés dans la section suivante.

2 Résultats expérimentaux de la campagne d'irradiation d'ARIEL et comparaison au modèle

ARIEL est la mission spatiale M4 de l'ESA dont l'acronyme signifie Atmospheric Remote Sensing Infrared Exoplanet Survey [16]. L'objectif de la mission spatiale est d'étudier la chimie des exoplanètes. Pour cela un télescope fournira de la lumière à deux instruments : un spectromètre NIR-visible et un spectromètre sensible aux longueurs d'onde comprises entre 1.93 μm et 8 μm , l'instrument AIRS. Cet instrument est composé de deux voies, CH0 et CH1, lesquelles possèdent chacune un détecteur IR. Dans la suite je m'intéresse seulement au détecteur de la voie CH1.

J'introduirai dans un premier temps le détecteur ainsi que l'objectif de la campagne d'irradiation. Ensuite, je présenterai le dispositif expérimental développé par l'ESTEC (*European Space Research and Technology Centre*) ainsi que le plan d'expérience mis en place pour étudier les effets transitoires dans le détecteur. Puis, l'analyse des images acquises sous irradiation est présentée. Nous verrons

^a Mission observation de la Terre pour faire du monitoring de CO₂

^b La quantification de l'impact du substrat résiduel constituait seulement une partie des objectifs de cette campagne d'irradiation. En effet, il s'agissait avant de tout de vérifier la tenue à la dose (ionisante et de déplacement) de ces détecteurs.

qu'aucune élévation du signal de fond n'est observée dans les pixels non affectés par un proton. Finalement, les images acquises sous irradiation sont comparées aux images simulées à partir du modèle. Dans la dernière sous-section je discuterai de la validité de la comparaison des images simulées et images obtenues sous irradiation.

2.1 Campagne d'irradiation : objectif et résultats

2.1.1 Présentation des détecteurs et objectif de la campagne d'irradiation

Le détecteur de la voie CH1 est un détecteur de TIS dont le développement est adapté des détecteurs de NEOCam^a (*Near Earth Orbit Camera*) [16][17]. C'est un détecteur H1RG^b (Hawaï 1RG) de technologie HgCdTe ayant une longueur d'onde de coupure de 7.8 μm à 42 K de format 1024×1024 au pas pixel de 18 μm . Par ailleurs, le substrat de ce détecteur n'est pas complètement retiré. L'épaisseur de substrat résiduelle est de 45 $\mu\text{m} \pm 15 \mu\text{m}$. Les caractéristiques de ce détecteur sont présentées dans le Tableau 36 et comparées à celle du détecteur ALFA (pour lequel le modèle a été développé).

Les différences entre le détecteur H1RG d'ARIEL et le détecteur ALFA (pour lequel le modèle a été développé) sont nombreuses. Le pas pixel est plus grand dans le cas des détecteurs H1RG, 18 μm au lieu de 15 μm pour ALFA. Outre ces disparités physiques, les longueurs d'onde de coupure sont différentes, et par conséquent les températures nominales de fonctionnement ne sont pas identiques (100 K pour ALFA et 42 K pour les détecteurs des deux voies de AIRS). Enfin, les différences majeures ne sont pas mentionnées dans le tableau mais résident dans les choix technologiques effectués par les deux fabricants de la couche de détection (le CEA-Leti pour ALFA et Teledyne pour les H1RG). Ainsi, les architectures de diode, les passivations, l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe sont probablement très différents dans les deux détecteurs. Ces caractéristiques constituent des savoir-faire technologiques dont les spécificités ne seront pas accessibles. Nous verrons que ceci est une limitation à la validation du modèle à partir des données d'irradiation d'ARIEL.

Lors de la campagne d'irradiation, il s'agissait alors, de s'assurer que les performances du détecteur ne se trouvaient pas dégradées sous irradiation. En particulier, l'influence du substrat résiduel (45 $\mu\text{m} \pm 15 \mu\text{m}$) sur la réponse du détecteur sous irradiation doit être quantifiée. En effet, il s'agissait de s'assurer qu'aucune élévation du signal de fond n'était observée sous irradiation.

La campagne d'irradiation a été préparée et effectuée par l'ESA. L'objectif principal était de vérifier que les performances du détecteur, après avoir reçu une dose ionisante et de déplacement correspondant à la durée totale de la mission^c, répondaient toujours aux spécifications de l'instrument requises par la science. Le second objectif, correspondant à la thématique de la thèse, était de quantifier l'impact du substrat résiduel sur la réponse du détecteur sous irradiation. J'ai eu

^a C'est une mission de la NASA (*National Aeronautics and Space Administration*) dont l'objectif est de découvrir et de caractériser les astéroïdes potentiellement dangereux pour la Terre.

^b En toute rigueur H1RG désigne le circuit de lecture du détecteur. Par abus, on parle de détecteur H1RG.

^c On parle aussi de 1 fois EOL, soit 1 fois la durée totale de la mission. Une dose de 1 EOL correspond à la dose totale reçue par le satellite et des instruments au cours de la durée de la mission (ici 4 ans pour la mission ARIEL).

l'opportunité de participer à cette campagne d'irradiation. J'ai ensuite contribué l'exploitation des résultats afin de répondre au second objectif, dont la thématique correspond aux travaux développés dans cette thèse.

Dans la section suivante, les objectifs de la campagne d'irradiation, le dispositif expérimental ainsi que les résultats de cette campagne d'irradiation sont présentés.

Tableau 36 – Spécifications des détecteurs des voies CH0 et CH1 de l'instrument AIRS et comparaison aux détecteurs ALFA

	CH1	ALFA
Type de détecteur	HgCdTe	HgCdTe
Nomenclature	H1RG	-
Format [pixels×pixels]	1024 × 1024	2048 × 2048
Longueur d'onde de coupure	7.8 μm (soit 0.16 eV)	2.1 μm (soit 0.59 eV)
Pas pixel	18 μm	15 μm
Courant d'obscurité (médian) (spéc)	1 e ⁻ /s/pix	0.1 e ⁻ /s/pix
Bruit de lecture CDS	30 e ⁻	15 e ⁻
Température de fonctionnement	42 K	100 K
Épaisseur de substrat résiduelle	45 μm ± 15 μm	10 μm
Type de diode	p/n	p/n

2.1.2 Moyens de tests et plan d'irradiation

Cette campagne d'irradiation a été effectuée du 24 au 26 Février 2020 à l'Université Catholique de Louvain La Neuve (ou UCL). L'université Belge possède un cyclotron qui fait partie des installations d'irradiation privilégiées par l'ESA. L'énergie maximale des protons en sortie d'accélérateur est égale à 62 MeV, elle peut être abaissée jusqu'à 10 MeV en utilisant des dégradeurs placés sur la trajectoire du faisceau. Le flux de protons varie de 3×10^3 protons/s/cm² à 2×10^8 protons/s/cm². La campagne d'irradiation a été divisée en sept étapes au cours desquelles les détecteurs ont été irradiés pendant 20 min (avec un flux donné) suivies de quelques heures de caractérisation. La première étape d'irradiation a été réalisée avec le plus faible flux de protons atteignable afin d'observer les évènements transitoires et ainsi caractériser la réponse du détecteur sous irradiation. Les flux et les fluences des sept étapes d'irradiation sont présentés dans le Tableau 37. Dans ce tableau, la ligne cerclée de rouge correspond à l'étape d'irradiation dédiée à l'étude des évènements transitoires. Durant l'irradiation le détecteur fonctionne et acquiert des images en mode FUR. Par ailleurs, le détecteur est utilisé avec 16 sorties et le temps d'acquisition entre deux images est de 0.738 s. Une seule rampe est réalisée pendant toute la durée d'une étape d'irradiation. Ce mode de fonctionnement du détecteur est illustré sur la Figure 123 (a). Un exemple de rampe est présenté sur la Figure 123 (b). Sur cette figure, seules les 135 premières secondes d'irradiation sont présentées, au-delà le pixel est affecté par un nouveau proton. La discontinuité observée est induite par l'interaction du proton avec le pixel.

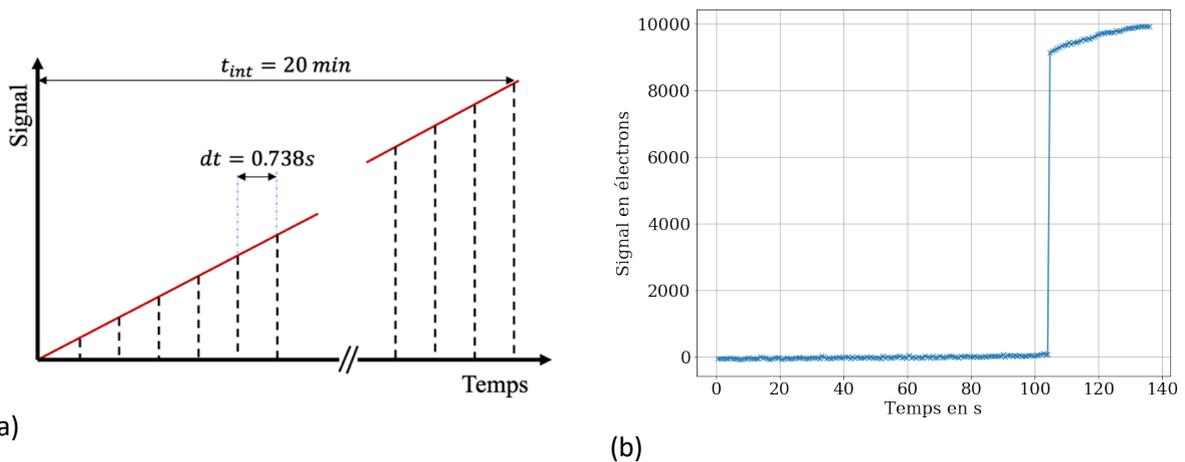


Figure 123 – (a) Illustration du mode d'acquisition FUR du détecteur H1RG de la voie CH1 de l'instrument AIRS pendant l'irradiation. (b) Exemple de signal FUR acquis pendant l'irradiation du détecteur H1RG d'ARIEL.

Dans le paragraphe suivant je présente le dispositif expérimental développé par l'ESA avant de décrire les résultats obtenus concernant l'étude de l'impact du substrat sur la réponse des détecteurs sous irradiation.

Tableau 37 - Flux et fluences de chacune des 7 étapes d'irradiation, avec la dose correspondante et le nombre de EOL associée. L'étape 1 encadrée en rouge est dimensionnée pour l'étude des effets transitoires dans le détecteur.

Étape	End of Life	Fluence (protons/cm ²)	Flux (protons/s/cm ²)	Dose (rad)
1	2.88×10^{-4}	3.60×10^6	3.00×10^3	8.52×10^{-1}
2	1.69×10^{-1}	2.11×10^9	1.76×10^6	500
3	0.5	6.25×10^9	3.45×10^6	1.48×10^3
4	0.75	9.38×10^9	2.61×10^6	2.22×10^3
5	1	1.25×10^{10}	2.61×10^6	2.96×10^3
6	1.5	1.88×10^{10}	5.21×10^6	4.44×10^3
7	2	2.50×10^{10}	5.21×10^6	5.92×10^3

Un dispositif expérimental dédié a été développé par l'ESA pour réaliser cette campagne d'irradiation, le schéma de CAO (Conception Assistée par Ordinateur) est présenté sur la Figure 124. Le détecteur est installé dans un cryostat et fonctionne à sa température nominale de 42 K. Un tube pulsé est utilisé comme système de refroidissement. Des chaufferettes et un thermomètre permettent de réguler la température du détecteur. La moitié du détecteur est masquée avec un motif d'échiquier. Ainsi, il sera possible de comparer la valeur du courant d'obscurité circulant dans les pixels dans des zones irradiées et dans les zones non-irradiées. L'électronique qui pilote le circuit de lecture (appelée aussi Sidecar) est située à l'arrière du cryostat. Elle est contrôlée par un ordinateur placé à l'extérieur de la chambre d'irradiation. Des repères placés sur le cryostat et un système de lasers ont permis d'aligner la sortie du faisceau de protons avec le détecteur.

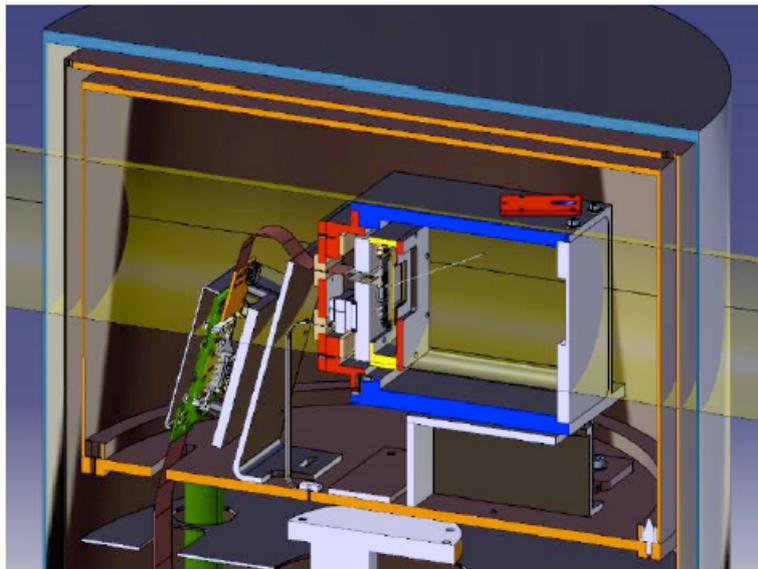


Figure 124 - Dispositif expérimental utilisé pour l'irradiation des détecteurs H1RG d'ARIEL (crédit ESA).

En sortie de faisceau l'énergie des protons est de 62 MeV, en traversant l'enceinte du cryostat et les différents écrans, l'énergie des protons est dégradée. J'ai réalisé une simulation GEANT4 afin d'estimer la valeur de l'énergie des protons au niveau du détecteur. La géométrie construite dans GEANT4 est présentée sur la Figure 125, celle-ci est représentative de la véritable configuration. Sur la Figure 125, on observe en bleu la trajectoire des protons, en vert la trajectoire des photons (X ou gamma) et en rouge la trajectoire des électrons. Les épaisseurs et les matériaux que j'ai utilisés pour simuler le cryostat sont retranscrits dans le Tableau 38. Dans la simulation GEANT4, 10 000 protons sont tirés. L'énergie de chacun des protons incidents est choisie aléatoirement dans une distribution normale centrée autour de 62 MeV avec un écart type de 100 keV^a. Puis l'énergie des protons au niveau du substrat du détecteur est enregistrée. Le résultat de la simulation est présenté sur la Figure 126. On constate que l'énergie des protons au niveau du détecteur suit une loi normale centrée autour de 29.3 MeV avec un écart type de 0.78 MeV.

Tableau 38 - Épaisseurs et matériaux des couche traversées par le faisceau de protons constituant le cryostat

Couche	Épaisseur (en mm)	Matériau
Enceinte du cryostat	1.5	Inox
Écran 60 K	1	Cuivre
Écran 4 K	1	Cuivre
Écran thermique	2	Aluminium

^a Il s'agit d'une donnée fournie par l'installation de Louvain La Neuve. Cette grandeur n'a pas été mesurée pendant la campagne d'irradiation.

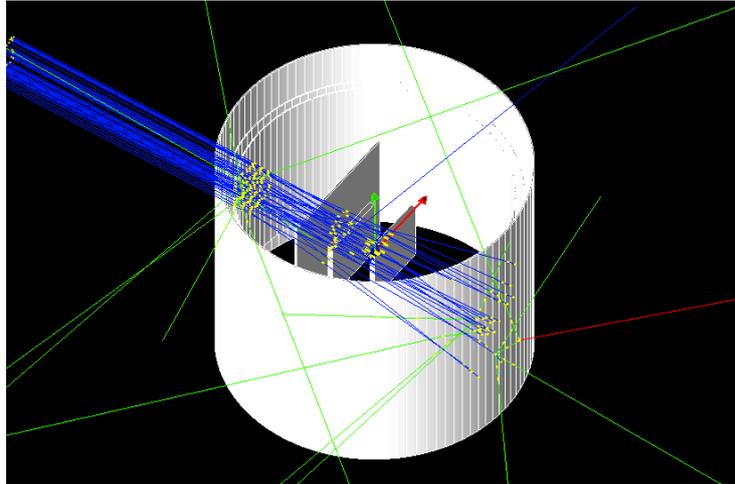


Figure 125 - Géométrie que j'ai construite dans GEANT4 du dispositif expérimental de la campagne d'irradiation d'ARIEL pour déterminer l'énergie des protons au niveau du détecteur. En bleu : trajectoire des protons. En rouge : trajectoire des électrons. En vert : trajectoire des photons. Les points jaunes correspondent à l'interaction des particules avec l'environnement.

Dans cette sous-section j'ai présenté l'objectif ainsi que l'ensemble du dispositif expérimental. Désormais, je vais m'intéresser à l'analyse des données d'irradiation, j'étudierai en particulier les clusters des pixels affectés par un impact de proton et je montrerai qu'aucune élévation du signal de fond n'est observée dans ces détecteurs sous irradiation de protons.

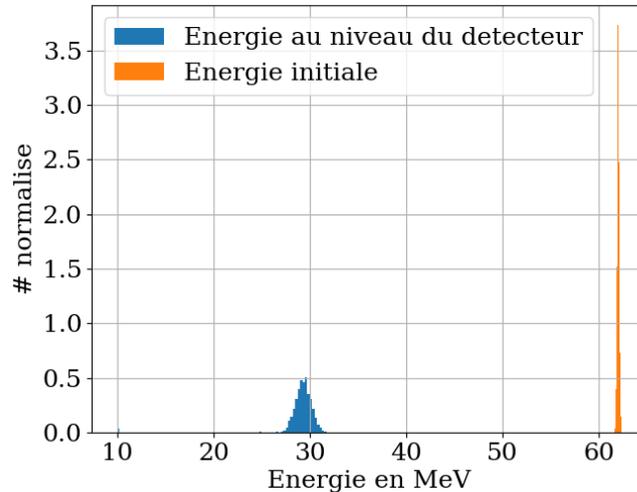


Figure 126 - Énergie des protons en sortie de faisceau (en orange) et au niveau du détecteur après avoir traversés les différents écrans (en bleu) déterminée à partir d'une simulation Monte Carlo effectuée sur GEANT4 avec la géométrie de la Figure 125.

2.1.3 Résultat de la campagne d'irradiation d'ARIEL

Des images acquises sous irradiation sont présentées sur la Figure 127. Il s'agit d'images obtenues lors de la première étape d'irradiation 17 secondes après le début de l'irradiation. Les points blancs

correspondent aux pixels chauds et morts^a et aux pixels affectés par un proton qui ont alors vu leur signal augmenter subitement. On observe par ailleurs le découpage du détecteur : avec deux régions irradiées (en bas à gauche et en haut à gauche) et deux régions irradiées (en haut à gauche et en bas à droite). Sur la Figure 127, on observe un carré au centre de la matrice. Celui-ci correspond à la région du détecteur sur laquelle des mesures de persistances (avec stress électrique) ont été effectuées.

Dans la sous-section suivante, je présente successivement les clusters de pixels affectés par un impact de proton et la valeur du signal de fond mesuré dans les pixels non affectés.

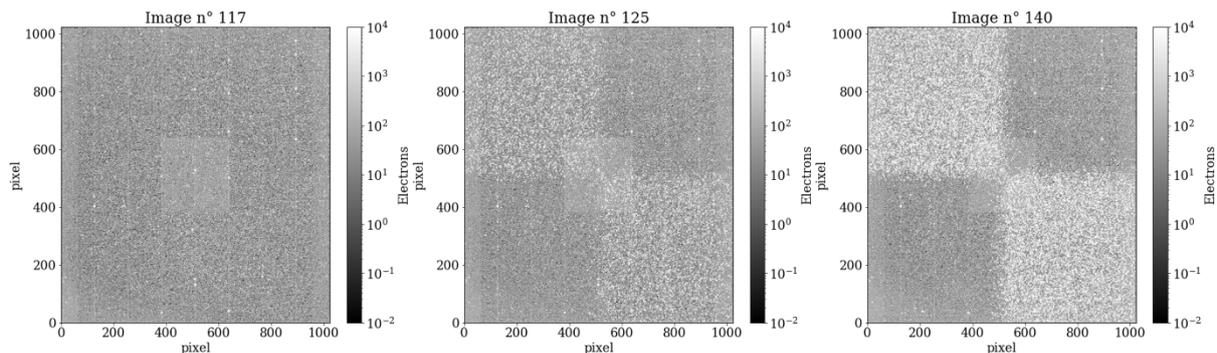


Figure 127 - Exemple d'image acquises sous irradiation de protons de 29 MeV sur le détecteur CH1 d'ARIEL.

2.1.3.1 Étude des clusters de pixels affectés par un impact de proton

La première étape de notre analyse consiste à étudier les clusters de pixels affectés par un impact de proton. Pour ce faire, les images acquises sous irradiation pendant la rampe FUR sont analysées avec SE. SE est appliqué à la différence de deux images consécutives afin de localiser les pixels dont le signal est supérieure à 3 fois l'écart type du signal de fond médian de l'image obtenue par soustraction des deux images. Ces pixels sont marqués comme potentiellement affectés par l'impact d'un proton. Ils sont analysés en détail dans la suite afin de déterminer les caractéristiques des clusters induit par des protons d'énergie 29.3 MeV sur ce détecteur IR. Cette approche est analogue à celle effectuée par Dorn et al. [3]. Elle est identique à celle adoptée pour analyser les images FUR obtenues sur les détecteurs NIR du CEA Leti (voir section 1.2.1.2). Des exemples de clusters sont présentés en annexe (voir Annexe G).

Afin de mesurer une élévation du signal de fond sous irradiation dans ces détecteurs, il est essentiel de connaître précisément le profil des clusters. En particulier, il s'agit d'extraire la valeur du signal collecté par les pixels au voisinage des clusters extraits par SE. Une région de 41×41 pixels est extraite, centrée sur le pixel central (sur lequel le proton est incident). On obtient alors un cube de données : une matrice de 41×41 pixels est extraite pour les n clusters. Ceci est illustré sur la Figure 128.

^a Ces pixels sont défectueux, ils sont présents sur l'image même sans irradiation. Ce sont généralement des défauts ponctuels.

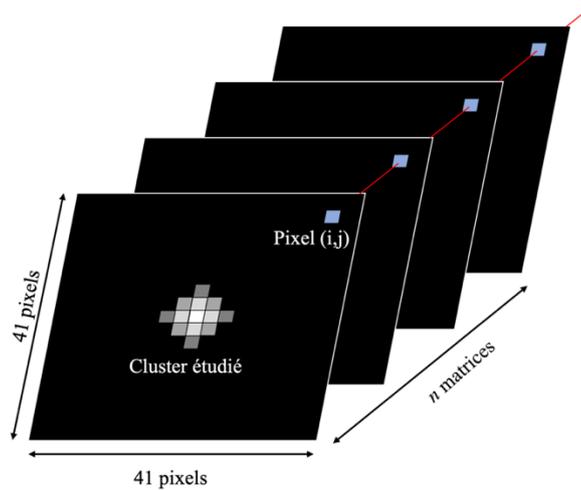


Figure 128 - Représentation schématique d'un cube de données utilisé pour déterminer le cluster moyen induit par des protons de 29.3 MeV dans le détecteur CH1 d'ARIEL.

L'objectif est d'obtenir le cluster moyen induit par des protons de 29.3 MeV. Ainsi l'ensemble de ces matrices sont moyennées afin d'obtenir un meilleur rapport signal sur bruit. Cependant, le flux de proton est élevé si bien que dans cette région étendue, plusieurs impacts de pixels peuvent être observés. C'est la raison pour laquelle, la valeur moyenne du pixel (i,j) est calculée en ignorant les pixels dont la valeur est déviante. Autrement dit, les pixels à plus de 3σ de la valeur médiane, calculée à partir de la valeur des pixels (i,j) des n matrices, ne sont pas pris en considération. Le cluster moyen ainsi obtenu est présenté sur la Figure 129 (a)

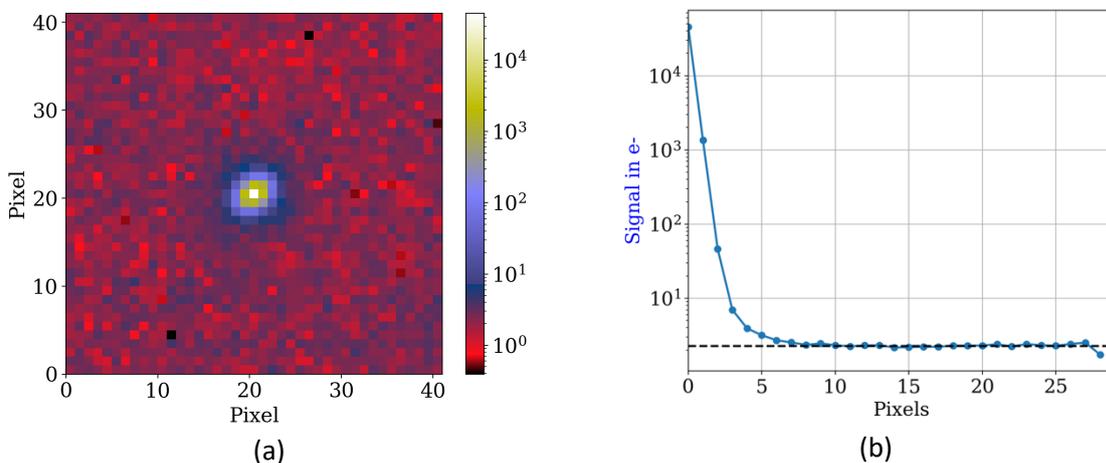


Figure 129 – (a) Cluster moyen induit par des protons de 29.3 MeV sur les détecteurs d'ARIEL (échelle log). (b) Évolution du profil radial d'intensité induit par un proton de 29.3 MeV.

Le profil radial obtenu à partir du cluster moyen est présenté sur la Figure 129 (b), celui-ci s'étend sur 7 pixels. De plus, on observe sur la Figure 129 (b) que la majorité du signal est collectée par le pixel central. Lorsque l'on s'éloigne du pixel central, le nombre d'électrons collectés décroît. L'extension du cluster est induite par deux phénomènes. Le premier est la diffusion des charges générées par le proton directement dans le HgCdTe. Le second est associé au couplage capacitif inter-pixel (ou IPC pour *Inter-Pixel Capacitance*) [15]. Ce dernier est intrinsèque aux détecteurs ayant un circuit de lecture

de type SFD dans lesquelles la polarisation de chaque pixel est différente. Autrement dit, les charges accumulées dans un pixel peuvent influencer la valeur du signal mesuré sur les pixels voisins. Outre ces deux contributions liées au dépôt d'énergie dans le HgCdTe, l'extension radiale du cluster peut aussi être en partie associée à l'interaction du proton avec le substrat de CdZnTe. A partir des résultats de simulations, je comparerai dans la section 3.3 le cluster moyen déterminé expérimentalement au cluster simulé, en tenant compte du dépôt d'énergie dans le substrat de CdZnTe.

Outre la taille des clusters, il est pertinent de chercher à estimer le nombre de charges collectées par cluster. La distribution correspondant à cette grandeur est présentée sur la Figure 130. La valeur médiane de la distribution est de 100 000 électrons dont la majorité est collectée par le pixel central.

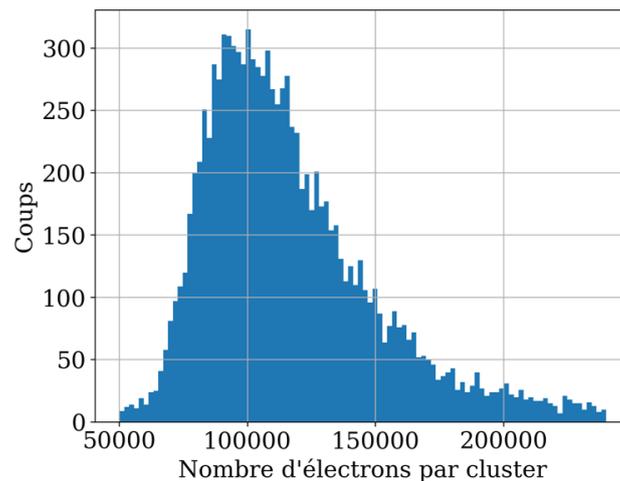


Figure 130 - Nombre de charges totales collectées par cluster mesuré lors de la campagne d'irradiation.

Dorénavant, nous connaissons le nombre de pixels moyen affectés par impact de proton sur le détecteur. Ainsi, il est maintenant possible de déterminer la valeur du signal de fond mesuré dans les pixels qui ne sont pas affectés par l'impact d'un proton. Cette étude fait l'objet de la section suivante.

2.1.3.2 Détermination du signal de fond sous irradiation

L'un des objectifs de cette campagne expérimentale effectuée sur un détecteur IR de la voie CH1 de l'instrument AIRS d'ARIEL est de s'assurer qu'aucune élévation du signal de fond n'est observée sous irradiation de protons. Ainsi, après avoir identifié et exclu les pixels affectés par l'impact d'un proton, il s'agit de déterminer la valeur du signal de fond dans les pixels restant. Dans la section précédente, nous avons vu que le profil radial s'étendait sur 7 pixels. Par conséquent, les pixels présents dans un rayon de 7 pixels autour d'un impact seront masqués afin d'examiner la valeur du signal de fond dans les pixels non impactés. La cartographie des pixels affectés par un impact de protons, 14.76 s après le début de l'irradiation, est donnée sur la Figure 131. Les points blancs correspondent aux pixels marqués comme affectés par un proton.

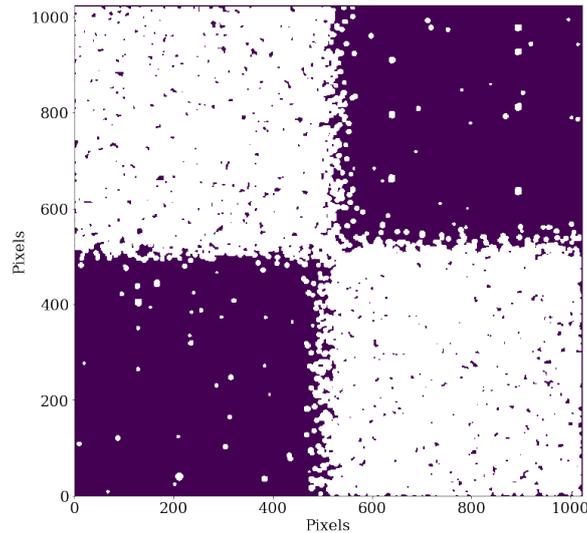


Figure 131- Cartographie des impacts 14.76 s après le début de l'irradiation (en tenant compte de l'extension radiale des clusters) du détecteur CH1 d'ARIEL.

Bien que le flux avec lequel l'étude de l'élévation du signal de fond a été menée correspond au flux minimum délivré par le cyclotron de l'université catholique de Louvain la Neuve, celui-ci reste élevé (3×10^3 protons/s/cm², voir Tableau 37). Par conséquent, les pixels dans les parties du détecteur non masquées sont rapidement tous affectés par l'irradiation. Ainsi, seul 14.76 secondes (soit 20 images) d'irradiation sont utilisables pour déterminer la valeur du signal de fond sous irradiation (voir Figure 132). Au-delà, la statistique diminue et la probabilité pour qu'un pixel ait été affecté par un proton devient très importante.

Pour déterminer la valeur du signal de fond sous irradiation, la pente du signal des pixels non affectés par un impact de proton est calculée avant l'irradiation et pendant l'irradiation (voir Figure 132). Les histogrammes du courant d'obscurité mesuré dans les pixels des quatre régions du détecteurs (deux régions masquées et deux régions non masquées) avant l'irradiation (entre $t = 70.848s$ et $t = 86.608 s$) sont données sur la Figure 133.

Les valeurs des courants d'obscurité^a sous irradiation de protons dans les quatre régions sont présentées. On observe de nouveau que le courant mesuré est très proche dans les régions irradiées et non irradiées. **Aucune élévation du signal de fond n'est observée dans les pixels non affectés par un proton dans ce détecteur sous irradiation de protons.** La régression linéaire effectuée sur ces pixels est réalisée sur une rampe constituée de 20 points. C'est la raison pour laquelle l'incertitude est grande sur la valeur du courant mesurée. Les valeurs médianes du courant d'obscurité avant et pendant l'irradiation sont données dans le Tableau 39.

^a Dans le sens où il n'y a pas de lumière qui arrive sur le détecteur.

Tableau 39 - Valeur médiane du courant d'obscurité dans les pixels non affectés par un proton avant et après irradiation.

	Bas gauche	Haut gauche	Bas droit	Haute droit
Avant irradiation	$1.2 \pm 1.3 \text{ e}^-/\text{s}$	$0.7 \pm 1.3 \text{ e}^-/\text{s}$	$0.8 \pm 1.5 \text{ e}^-/\text{s}$	$0.9 \pm 1.5 \text{ e}^-/\text{s}$
Pendant irradiation	$1.2 \pm 1.8 \text{ e}^-/\text{s}$	$1.7 \pm 2.1 \text{ e}^-/\text{s}$	$1.6 \pm 2.4 \text{ e}^-/\text{s}$	$1.4 \pm 2.2 \text{ e}^-/\text{s}$

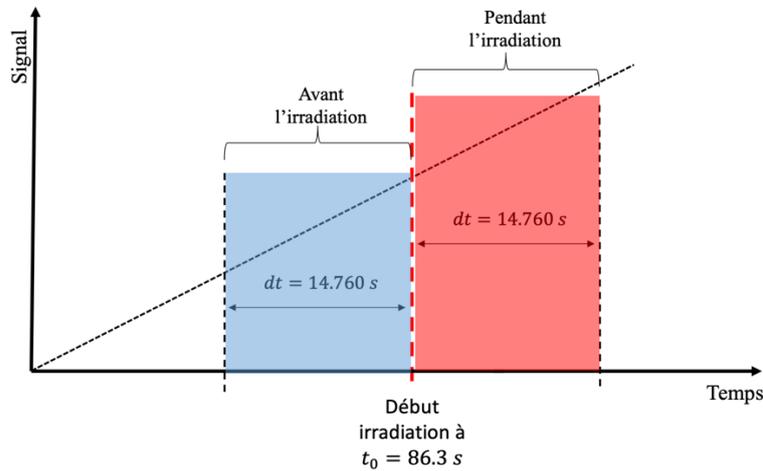


Figure 132 – Illustration schématique du signal FUR des pixels non affectés par un proton. Le courant d'obscurité avant (en bleu) et pendant l'irradiation (en rouge) est estimé sur un intervalle de temps de 14.76 s.

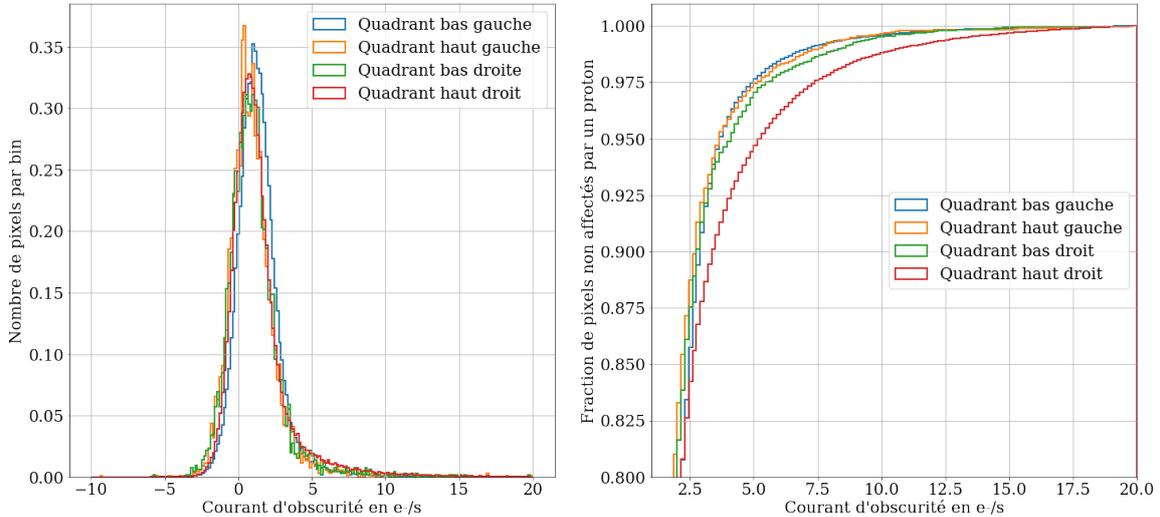


Figure 133 – Histogramme des pentes des pixels non affectés par proton calculées dans les 4 zones du détecteur avant l'irradiation.

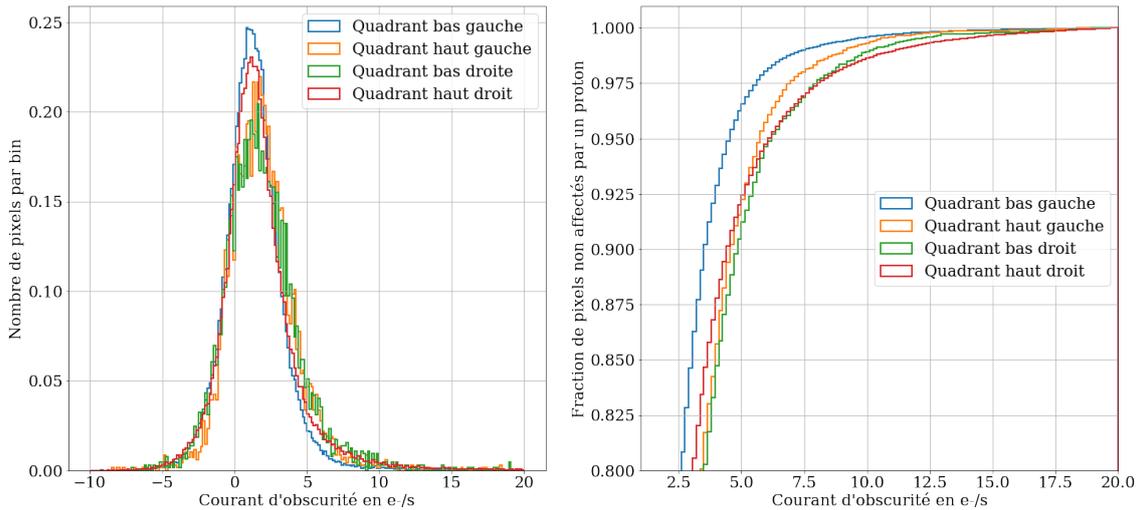


Figure 134 –(a) Histogramme normalisé du courant d'obscurité des pixels non affectés par un proton calculées dans les 4 zones du détecteur **pendant l'irradiation**. (b) Histogramme cumulé.

Dans cette section, j'ai présenté dans un premier temps le cluster moyen induit pas des protons de 30 MeV. Puis nous avons constaté qu'aucune élévation du signal de fond n'était observée dans ces détecteurs sous irradiation. Dans la section suivante, je vais appliquer le modèle développé dans cette thèse au détecteur de la voie CH1 de l'instrument AIR, objet de la campagne d'irradiation présentée, dont l'épaisseur de substrat résiduelle est de $45 \mu\text{m} \pm 15 \mu\text{m}$. Ensuite, je comparerai les caractéristiques du cluster moyen déterminé expérimentalement à celles du cluster simulé. Enfin, je discuterai de la validé de cette comparaison.

2.2 Application du modèle aux détecteurs H1RG d'ARIEL et comparaison aux résultats expérimentaux

L'effet de l'irradiation en tenant compte à la fois de l'interaction du proton avec la couche photosensible de HgCdTe et le substrat de CdZnTe est simulé à partir du code développé dans cette thèse et présenté dans le chapitre 2. Dans un premier temps, je discuterai de la validité de l'application du modèle au détecteur CH1 d'ARIEL avant de présenter les résultats de simulations.

2.2.1 Discussion sur l'application du modèle au détecteur CH1 d'ARIEL

Il existe plusieurs limites à la comparaison des résultats de simulation aux données expérimentales. En effet, le modèle a été développé pour les détecteurs IR dont la technologie est similaire aux détecteurs ALFA. Les différences de technologie entre le détecteur AFLA et le détecteur H1RG de la voie 1 de l'instrument AIRS peuvent être importante. Par ailleurs, alors que les caractéristiques d'ALFA me sont connues, les particularités du détecteur de Teledyne me resteront secrètes. Enfin, l'intensité du dopage dans la couche de HgCdTe, l'architecture de la diode (diamètre, profondeur), l'épaisseur de la couche de HgCdTe constituent entre autres des savoirs technologiques protégés par les fabricants de détecteurs. C'est le cas par exemple de la gestion de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe.

Outre ces inconnues géométriques, les propriétés optiques et électriques du CdZnTe à 42 K (la température nominale de fonctionnement des détecteurs IR de la voie grande longueur d'onde

d'ARIEL) sont absentes de la littérature. Par conséquent, afin de réaliser une comparaison pertinente des résultats de simulation le modèle devra être alimenté de nouvelles mesures expérimentales effectuées sur des substrats de CdZnTe dont la valeur de zinc dans l'alliage est adaptée aux détecteurs IR de grande longueur d'onde.

Malgré les différentes limites à l'application du modèle au détecteur CH1 d'ARIEL, la comparaison des données simulées au données mesurées est effectuée dans la section suivante.

2.2.2 Application du modèle aux détecteurs H1RG d'ARIEL et comparaison aux résultats expérimentaux

L'épaisseur du substrat du détecteurs IR de la voie CH1 de l'instrument AIRS d'ARIEL est de $45 \mu\text{m} \pm 15 \mu\text{m}$. Ainsi, je vais appliquer le modèle pour trois épaisseurs de substrat différentes : $30 \mu\text{m}$, $45 \mu\text{m}$ et $60 \mu\text{m}$. A défaut de connaître les paramètres matériaux du CdZnTe à 42 (la température nominale du détecteur), le modèle sera appliqué à 80 K^a . Ceci constitue une première limitation qui sera discutée dans la sous-section suivante. Par ailleurs, les paramètres tels que la taille de l'implantation ou l'épaisseur de la couche photosensible sont autant de paramètres inconnus qui créent une seconde limitation à l'application du modèle.

De manière analogue à ce qui a été présenté dans le Chapitre 2, le dépôt d'énergie dans la structure du détecteur est simulé à l'aide de GEANT4, la diffusion et luminescence des porteurs dans le substrat de CdZnTe sont simulées analytiquement. Le transport et la collection des porteurs dans le HgCdTe sont simulés avec des méthodes d'éléments finis. Par ailleurs, GEANT4 est utilisé pour générer une cartographie des impacts sur le détecteur. Puis, à chacun de ces impacts est associé un cluster précédemment simulé. Le nombre d'impact dépend du flux ($3 \times 10^3 \text{ protons/s/cm}^2$) et du temps d'intégration ici 20 s. Par ailleurs, les besoins de la mission ARIEL requièrent les spécifications données dans le Tableau 40 pour le détecteur H1RG. Une image simulée du détecteur H1RG avec $45 \mu\text{m}$ de substrat sous irradiation de protons de 30 MeV est présentée sur la Figure 135 en supposant un temps d'intégration de 0.738 s.

Tableau 40 - Spécification du détecteur H1RG de la voie CH1 de l'instrument AIRS d'ARIEL.

Grandeurs	Valeurs
<i>Courant d'obscurité</i>	1 e-/s/pix
<i>Bruit de lecture (en mode CDS)</i>	30 e- rms

^a La possibilité de participer à la campagne d'irradiation et de pouvoir récupérer les données expérimentales est venue après avoir réalisé les mesures de propriétés optiques du CdZnTe.

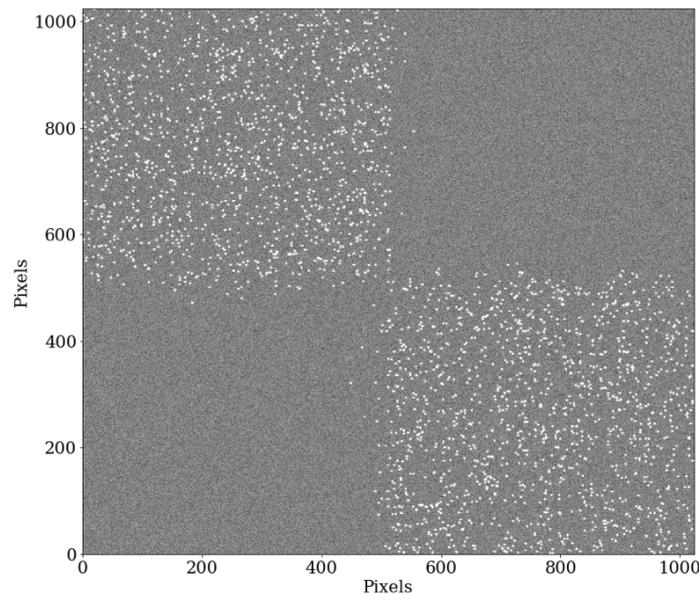


Figure 135 - Image simulée d'un détecteur H1RG avec 45 μm de substrat résiduel sous irradiation de protons de 30 MeV. En supposant un temps d'intégration de 0.738 s.

L'objectif est de comparer le cluster moyen induit par des protons de 30 MeV déterminé expérimentalement et le cluster moyen simulé. Dans cette optique, les images simulées sont analysées avec le même algorithme que les images acquises sous irradiation. La démarche a été présentée dans la section précédente. Le cluster moyen ainsi déterminé pour un détecteur dont le substrat est de 45 μm est présenté sur la Figure 136 (a). On observe en accord avec les données expérimentales que la majorité du signal est collecté par le pixel central. A mesure que l'on s'éloigne du pixel central, la quantité de charges collectés par les pixels diminue. Ces observations sont en accord avec les résultats de la Figure 136 (b). Sur cette figure, des profils radiaux simulés sont comparés au profil radial expérimental. Les trois profils radiaux simulés ont été obtenu à partir du modèle présenté dans le chapitre 2 en considérant 3 épaisseurs de substrat différentes : 30 μm , 45 μm et 60 μm . La comparaison des profils radiaux aux données expérimentales montre que le modèle sous-estime le nombre de charges collectées par le pixel central. Ceci peut s'expliquer par une sous-estimation de l'épaisseur de la couche de HgCdTe. De plus, on observe sur la Figure 136 (b) que le profil simulé en considérant une épaisseur de substrat de 30 μm est en meilleur accord avec les données expérimentales. Cependant, la comparaison du modèle aux mesures effectuées sous irradiation avec le détecteur ARIEL souffre de limites, discutées dans la section précédente.

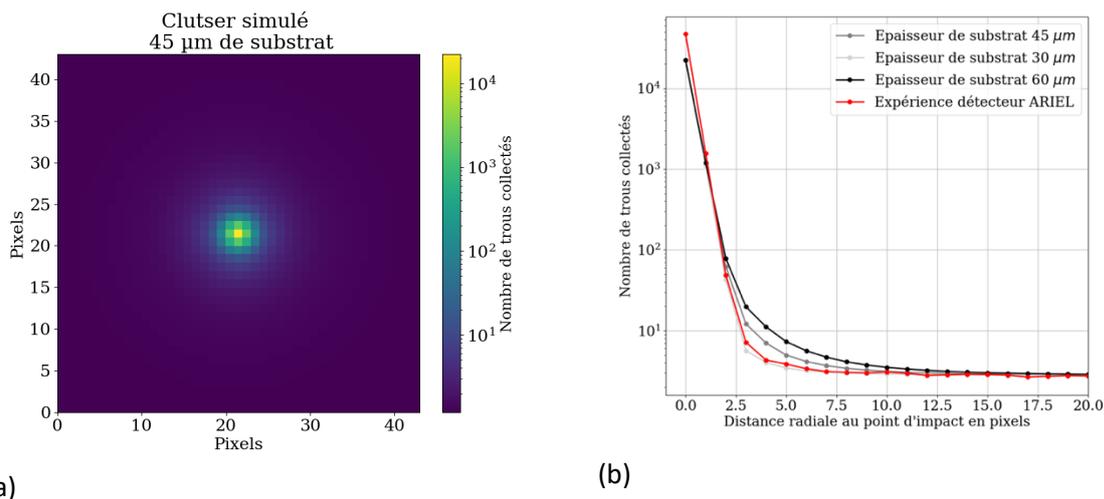


Figure 136 – (a) Cluster simulé à partir du modèle présenté dans le chapitre 2. (b) Comparaison des profils radiaux simulés et extrait des mesures effectuées sur le détecteur ARIEL.

3 Conclusions du chapitre

En conclusion, dans ce chapitre j’ai présenté la campagne d’irradiation que j’ai préparée ainsi que les résultats que j’ai obtenus à l’issu de cette campagne expérimentale.

Durant cette campagne d’irradiation deux détecteurs, l’un ayant 800 μm et l’autre 50 μm de substrat de CdZnTe, ont été irradiés avec des protons d’environ 63 MeV. Ces détecteurs sont des détecteurs de technologie p/n, de format 512× 640 pixels, avec un pas pixel de 15 μm, et une longueur d’onde de coupure de 2.1 μm. Ceux-ci ont largement été caractérisés en amont de la campagne d’irradiation, ainsi qu’avant et après irradiation dans la chambre d’expérience à Arronax. Afin de distinguer les impacts de protons sur le détecteur, l’irradiation a été menée avec des faibles flux de protons 50 protons/s/cm², 250 protons/s/cm², 1000 protons/s/cm² en utilisant différents modes d’acquisition. Seules les mesures réalisées avec un flux de 50 protons/s/cm² ont été présentés dans ce manuscrit. J’ai effectué les observations suivantes :

- La taille des clusters augmente avec l’épaisseur du substrat
- Le signal de fond mesuré dans le détecteur avec 800 μm de substrat est attribué à l’importante extension du profil radial d’un cluster généré par un impact de proton.
- Aucune élévation du signal de fond n’est observée dans les pixels non affectés par un proton dans le détecteur avec 50 μm de substrat.

Ces observations sont en bon accord avec les conclusions de mon modèle tirées de son application avec les paramètres matériaux détaillés dans le chapitre 3. J’ai comparé les profils radiaux simulés à partir du modèle en considérant un détecteur avec un substrat de 800 μm et un détecteur avec un substrat résiduel de 50 μm aux profils radiaux extraits des mesures sur les deux détecteurs sous irradiation. J’ai observé que proche de la trajectoire du proton, mon modèle surestimait légèrement l’intensité du profil radial. Cette surestimation constatée est attribuée à une surévaluation de la longueur de diffusion des porteurs dans le CdZnTe. En revanche, celui-ci concorde avec les données expérimentales lorsque l’on s’éloigne du pixel sur lequel le proton est incident. Ainsi, le modèle décrit correctement l’extension du profil radial avec l’augmentation de l’épaisseur du substrat. Et finalement,

l'étendue de la taille d'un cluster est attribuée aux photons de luminescence émis dans le CdZnTe dont l'énergie est inférieure à l'énergie du gap.

De plus, j'ai présenté les résultats de la campagne d'irradiation effectuée sur le détecteur de la voie grande longueur d'onde de l'instrument AIRS de la mission spatiale ARIEL. Cette campagne d'irradiation a été préparée et effectuée par l'ESA. J'ai travaillé sur une partie des données d'irradiation concernant l'étude des événements transitoires. Le détecteur a été irradié avec des protons d'énergie 30 MeV. Le substrat de ce détecteur n'est pas complètement retiré, et fait $45 \mu\text{m} \pm 15 \mu\text{m}$. J'ai extrait des mesures sous irradiation le cluster moyen à partir duquel j'ai extrait un profil radial. Nous avons alors observé que la taille d'un cluster était de 7 pixels (en distance radiale). Finalement, aucune élévation du signal de fond n'a été observée dans les pixels non affectés par l'impact d'un proton. Enfin, mon modèle a été appliqué au détecteur d'ARIEL. J'ai montré que la comparaison des profils radiaux du cluster simulé et du cluster extrait des mesures expérimentales suggère que le substrat des détecteurs est plus proche de $30 \mu\text{m}$ que de $45 \mu\text{m}$. La validité de l'application du modèle dans le cas d'ARIEL reste discutable dans la mesure où les données matériaux et l'architecture du détecteur me sont inconnus et différents de la technologie des détecteurs ALFA. Néanmoins, le modèle pourrait être adapté à ce type de détecteur notamment en effectuant de nouvelles mesures de propriétés matériaux sur des substrats de CdZnTe représentatifs de ceux utilisés dans la fabrication du détecteur d'ARIEL.

Références

- [1] A. Waczynski *et al.*, « Radiation induced luminescence of the CdZnTe substrate in HgCdTe detectors for WFC3 », in *Focal Plane Arrays for Space Telescopes II*, San Diego, California, USA, août 2005, p. 59020P, doi: 10.1117/12.617716.
- [2] R. Smith *et al.*, « Noise and zero point drift in 1.7 μ m cutoff detectors for SNAP », in *High Energy, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy II*, juin 2006, vol. 6276, p. 62760R, doi: 10.1117/12.672616.
- [3] M. L. Dorn *et al.*, « Proton irradiation results for long-wave HgCdTe infrared detector arrays for Near-Earth Object Camera », *JATIS*, vol. 2, n° 3, p. 036002, août 2016, doi: 10.1117/1.JATIS.2.3.036002.
- [4] J. Janesick, K. Klaasen, et T. Elliott, « CCD Charge Collection Efficiency And The Photon Transfer Technique », in *Solid-State Imaging Arrays*, déc. 1985, vol. 0570, p. 7-19, doi: 10.1117/12.950297.
- [5] O. Boulade *et al.*, « Development activities on NIR large format MCT detectors for astrophysics and space science at CEA and SOFRADIR », Edinburgh, United Kingdom, août 2016, p. 99150C, doi: 10.1117/12.2231295.
- [6] S. Tulloch, E. George, et E. D. S. Group, « Predictive model of persistence in H2RG detectors », *JATIS*, vol. 5, n° 3, p. 036004, sept. 2019, doi: 10.1117/1.JATIS.5.3.036004.
- [7] T. L. Goff *et al.*, « ROIC glow reduction in very low flux short wave infra-red focal plane arrays for astronomy. », Paris, 2020, p. 6.
- [8] E. Bertin et S. Arnouts, « SExtractor: Software for source extraction », *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, vol. 117, n° 2, Art. n° 2, juin 1996, doi: 10.1051/aas:1996164.
- [9] P. Guiot, M. Vincendon, J. Carter, Y. Langevin, et A. Carapelle, « Characterization of transient signal induced in IR detector array by Jupiter high-energy electrons and implications for JUICE/MAJIS operability », *Planetary and Space Science*, vol. 181, p. 104782, févr. 2020, doi: 10.1016/j.pss.2019.104782.
- [10] S. D. Johnson *et al.*, « Radiation effects in WFC3 IR detectors », in *Focal Plane Arrays for Space Telescopes*, janv. 2004, vol. 5167, p. 243-257, doi: 10.1117/12.508443.
- [11] R. Grill *et al.*, « Theory of Deep Level Spectroscopy in Semi-Insulating CdTe », *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 59, n° 5, p. 2383-2391, oct. 2012, doi: 10.1109/TNS.2012.2210245.
- [12] H. Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et des composants \emptyset lectroniques*. Paris: Dunod, 2004.
- [13] D. Kuciauskas, A. Kanevce, P. Dippo, S. Seyedmohammadi, et R. Malik, « Minority-Carrier Lifetime and Surface Recombination Velocity in Single-Crystal CdTe », *IEEE J. Photovoltaics*, vol. 5, n° 1, p. 366-371, janv. 2015, doi: 10.1109/JPHOTOV.2014.2359738.
- [14] P. Capper, *Properties of Narrow Gap Cadmium-based Compounds*. IET, 1994.
- [15] A. C. Moore, Z. Ninkov, et W. J. Forrest, « Interpixel capacitance in nondestructive focal plane arrays », in *Focal Plane Arrays for Space Telescopes*, janv. 2004, vol. 5167, p. 204-215, doi: 10.1117/12.507330.
- [16] G. Tinetti *et al.*, « ARIEL Assessment Study Report », 2017.
- [17] C. W. McMurtry *et al.*, « Development of Passively Cooled Long Wave Infrared Detector Arrays for NEOCam », vol. 221, p. 350.04, janv. 2013.

Conclusions et perspectives

En astrophysique IR, les détecteurs de technologie HgCdTe sont les plus utilisés. Dans l'espace ces détecteurs sont soumis aux particules ionisantes du rayonnement cosmique. L'interaction des protons avec le substrat de CdZnTe de ces détecteurs est suspectée d'être à l'origine de dégradations de leurs performances observées sous irradiation. Bien que le retrait complet du substrat règle radicalement le problème c'est une étape délicate dans la fabrication des détecteurs. L'objectif de ma thèse est alors d'estimer une épaisseur de substrat de CdZnTe résiduelle qui permette de maintenir les hautes performances, requises par les besoins scientifiques, de ces détecteurs en me basant sur une étude détaillée des phénomènes physiques mis en jeu.

Pour répondre à cette problématique, j'ai développé un modèle de réponse de détecteurs IR de technologie HgCdTe pour lesquels le substrat de CdZnTe n'est pas complètement retiré. J'ai modélisé le dépôt d'énergie des protons dans la structure du détecteur avec GEANT4, un code calcul Monte Carlo. Puis j'ai développé un modèle analytique afin de calculer la diffusion des porteurs du CdZnTe vers le HgCdTe ainsi que la luminescence du substrat induit par l'irradiation. La collection des porteurs dans le HgCdTe est modélisée à l'aide de méthodes d'éléments finis.

Ce modèle dépend fortement des propriétés optiques et électriques du matériaux semi-conducteur CdZnTe. Ces données sont absentes de la littérature aux températures de fonctionnement des détecteurs IR étudiés dans cette thèse, à savoir 80 K et 100 K. Par conséquent j'ai effectué des mesures de propriétés optiques sur des échantillons de CdZnTe représentatifs des substrats utilisés dans la fabrication des détecteurs IR de technologie HgCdTe. J'ai réalisé des mesures de photoluminescence sur ces échantillons de 4 K à 50 K complétées par des mesures de cathodoluminescence à 80 K et 100 K. Ces mesures de luminescence sont d'une importance capitale dans la modélisation de la contribution photonique à la pollution des images. En effet, au travers de ces mesures il s'agissait de déterminer la fraction des photons dont l'énergie est inférieure à l'énergie du gap, ces derniers étant susceptibles de se propager sur d'importantes distances dans le CdZnTe. J'ai alors observé que dans l'échantillon de CdZnTe de bonne qualité cristalline cette fraction était de 3 % à 80 K.

Ces mesures ont été complétées par des mesures d'ellipsométrie à partir desquelles j'ai obtenu le coefficient d'absorption du CdZnTe, afin d'estimer les pertes par propagation des photons dans le substrat de CdZnTe. Ces grandeurs servent de paramètres aux modèles développés. Ces mesures de propriétés ont aussi été effectuées sur un échantillon de CdTe issu de la même chaîne de production, bénéficiant ainsi d'une littérature plus importante pour comparer mes mesures aux données disponibles de la littérature. En particulier, les mesures de cathodoluminescence et de fonctions optiques à 300 K ont été confrontées à la littérature et discutées.

En parallèle du développement du modèle et des mesures de propriétés matériaux, j'ai préparé et effectué une campagne d'irradiation sur deux détecteurs IR de technologie HgCdTe. Ces deux détecteurs ont une épaisseur de substrat différente. Le premier détecteur a un substrat intact de 800 μm , tandis que le second est partiellement aminci et possède 50 μm de substrat résiduel. J'ai caractérisé ces détecteurs en amont de la campagne d'irradiation. Les premiers résultats de la campagne d'irradiation ont été présentés dans cette thèse. Nous avons effectué les observations suivantes :

- La taille des clusters (nombre de pixels affectés par un impact proton) augmente avec l'épaisseur du substrat. Le rayon d'un cluster est de 6 pixels dans le détecteur avec 50 μm de substrat et de 110 pixels dans le cas d'un détecteur avec 800 μm de substrat. Néanmoins, la majorité du signal est collectée dans le pixel central et ses plus proches voisins. L'intensité du signal mesuré en périphérie de l'impact est très faible et est inférieure à 3 électrons. La quantité de charges générées par impact est très faible en comparaison des valeurs mentionnées dans la littérature, qui varient de 59 000 électrons à 400 000 électrons. Ceci peut s'expliquer par la meilleure qualité des substrats utilisés dans les détecteurs que j'ai irradiés.
- Une élévation du signal de fond a été observée sous irradiation dans les pixels non affectés par un proton sous irradiation dans le détecteur avec 800 μm de substrat. Celle-ci est attribuée à l'importante extension radiale d'un cluster et à l'importante densité d'impacts lors d'une acquisition, ce qui conduit à un chevauchement des impacts sur l'image.

Ces deux observations sont en accord avec les conclusions du modèle. D'après le modèle, l'importante extension radiale du profil d'un cluster est causée par l'émission de photons de luminescence de faible énergie susceptibles de se propager sur d'importantes distances dans le substrat de CdZnTe. En revanche, le modèle surestime légèrement cette contribution proche de la trajectoire du proton, de quelques électrons. Aussi d'autres simulations doivent être menées (en tenant compte de la dépendance spectrale des propriétés optiques) complétées par de nouvelles mesures de propriétés matériaux comme la longueur de diffusion qui détermine la distance de parcourue par les porteurs avant de se recombiner et l'efficacité quantique interne qui détermine la fraction de porteurs qui se recombinent de manière radiative dans le matériau.

Les conclusions de cette campagne expérimentale et la comparaison aux conclusions du modèle m'amènent à proposer un critère sur l'épaisseur du substrat pour lequel la pollution des images sous irradiation ne dégradera pas la sensibilité de l'instrument pour une application donnée. J'ai montré au travers du modèle que les photons de luminescence de basse énergie étaient à l'origine de l'importante extension radiale d'un cluster. Dans le modèle de dimensionnement je néglige le processus de diffusion et considère seulement la pollution induite par l'émission et la propagation de ces photons^a.

Le nombre de photons émis au point z dans l'intervalle dz , reçus par le point de l'interface CdZnTe/HgCdTe localisé, à une distance r du point d'impact est donné par la formule (1).

^a Cela revient à dire que la longueur de diffusion est très inférieure à la distance de propagation des photons. Ce qui est vrai ici, dans la mesure où je ne prends en compte que les photons de basse énergie dont l'absorption est supposée nulle, ce qui correspond à une distance de propagation infinie dans le substrat.

$$dN(r, z) = \frac{LET}{E_{e-h}} \eta_{in} \gamma \eta_{QE} T_{mct/czt} \left(\frac{d\Omega_1}{4\pi} + \frac{d\Omega_2}{4\pi} R_{vide/czt} \right) dz \quad (1)$$

Où

- LET est le transfert d'énergie linéique,
- E_{e-h} est l'énergie moyenne de création de paires,
- η_{in} est l'efficacité quantique interne,
- γ est la fraction des photons de luminescence émis par le CdZnTe dont l'absorption est nulle,
- η_{QE} est l'efficacité quantique externe,
- $T_{mct/czt}$ est le coefficient de transmission de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe,
- $d\Omega_1$ est l'angle solide correspondant à l'émission des photons vers le HgCdTe, il est donné par l'équation (2), où ϕ_1 est l'angle d'incidence et dS est un élément de surface de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe.

$$d\Omega_1 = \frac{\cos(\phi_1)}{r^2} dS \quad (2)$$

- $d\Omega_2$ est l'angle solide correspondant à l'émission des photons réfléchis sur l'interface entre le CdZnTe et le vide, où ϕ_2 est l'angle d'incidence et dS est un élément de surface de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe.

$$d\Omega_2 = \frac{\cos(\phi_2)}{r^2} dS \quad (3)$$

Le nombre total de photons de luminescence reçus par le pixel i , situé à une distance r_i de l'impact du proton est noté N_i . Il s'exprime en intégrant (1) sur la trajectoire du proton, et sur la surface du pixel i . Ce qui se traduit par l'équation (4) :

$$N_i = \int_0^H \int_{S_{pixel}} \frac{LET}{E_{e-h}} \eta_{in} \gamma \eta_{QE} T_{mct/czt} \left(\frac{\cos(\phi_1)}{4\pi r^2} + \frac{\cos(\phi_2)}{4\pi r^2} R_{vide/czt} \right) dS dz \quad (4)$$

En approximant la surface d'un pixel carré avec une partie d'anneau, comme illustré sur la Figure 137, on peut obtenir une expression analytique de N_i . Celle-ci est donnée par l'équation (5) en considérant le pire cas où $R_{vide/czt} = 1$ et $T_{mct/czt} = 1$.

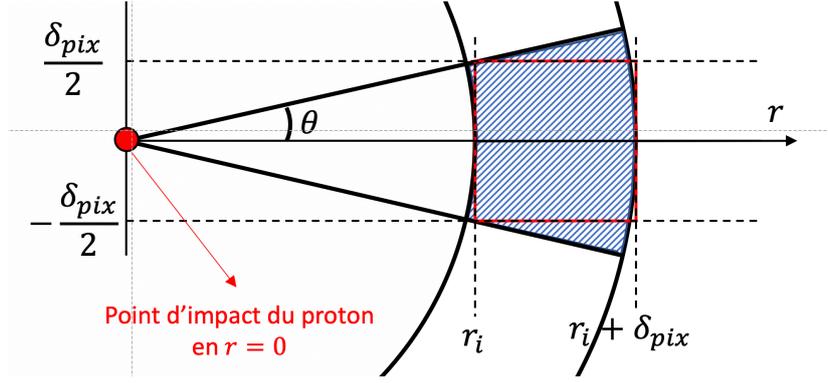


Figure 137 - Illustration d'un pixel dans le plan de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe. Par ailleurs, l'approximation d'un pixel en une partie d'anneau est représentée. r_i est la position du pixel i , et δ_{pix} correspond au pas pixel.

$$N_i = \frac{LET}{\pi E_{e-h}} \eta_{in} \gamma \eta_{QE} \arctan\left(\frac{\delta_{pix}}{2r_i}\right) \left(\delta_{pix} + \sqrt{r_i^2 + 4H^2} - \sqrt{(r_i + \delta_{pix})^2 + 4H^2} \right) \quad (5)$$

Où δ_{pix} est le pas pixel et H est l'épaisseur du substrat. La valeur de N_i doit être comparée au nombre de charges collectées par ce pixel pendant le temps d'intégration T_{int} en considérant un flux photonique utile noté $F(r_i)$ incident sur le pixel i . Je considère un facteur 3 entre la contribution utile et la contribution parasite de luminescence, de sorte que je peux écrire l'équation (6). De cette façon, on s'assure que la contribution parasite de luminescence ne dégrade pas la sensibilité de l'instrument. L'équation (6) définit un critère en considérant un impact de proton isolé. En revanche, pour estimer l'épaisseur de substrat acceptable en environnement spatial, il faut tenir compte du flux de protons incidents.

$$\frac{LET}{\pi E_{e-h}} \eta_{in} \gamma \eta_{QE} \arctan\left(\frac{\delta_{pix}}{2r_i}\right) \left(\delta_{pix} + \sqrt{r_i^2 + 4H^2} - \sqrt{(r_i + \delta_{pix})^2 + 4H^2} \right) = \frac{F(r_i)T_{int}}{3} \quad (6)$$

Afin prendre en considération le flux de protons reçu par le détecteur, il faut sommer la contribution induite par les différentes particules chargées affectant le détecteur. Ainsi, le nombre de charges collectées par le pixel localisé (x_0, y_0) , induites par l'émission de photons de luminescence sous irradiation, est donné par l'équation (7), où R_i est la distance entre le pixel (x_0, y_0) et l'impact du proton m , et $Nb \text{ impact}$ est le nombre d'impacts défini par le produit du flux de protons, de la surface du détecteur et du temps d'intégration.

$$N(x_0, y_0) = \frac{LET \eta_{in} \gamma \eta_{QE}}{\pi E_{e-h}} \sum_m^{Nb \text{ impact}} \arctan\left(\frac{\Delta_{pix}}{2R_i}\right) \left(\Delta_{pix} + \sqrt{R_m^2 + 4H^2} - \sqrt{(R_m + \Delta_{pix})^2 + 4H^2} \right) \quad (7)$$

De manière similaire je peux contraindre la valeur de $N(x_0, y_0)$ en écrivant l'équation (8), où est $F(x_0, y_0)$ est le flux utile reçu par le pixel (x_0, y_0) et T_{int} est le temps d'intégration.

$$\frac{LET\eta_{in}\gamma\eta_{QE}}{\pi E_{e-h}} \sum_n^{Nb\ impact} \arctan\left(\frac{\Delta_{pix}}{2R_m}\right) \left(\Delta_{pix} + \sqrt{R_m^2 + 4H^2} - \sqrt{(R_m + \Delta_{pix})^2 + 4H^2} \right) = \frac{F(x_0, y_0)T_{int}}{3} \quad (8)$$

Ces deux critères définis par l'équation (6) et l'équation (8) sont confrontés au cas d'étude de la mission spatiale Euclid introduit dans le chapitre 0 de cette thèse. Dans ce cas $F(x_0, y_0)T_{int}$ est donné par l'équation (9), dont les paramètres ont été explicités dans le chapitre 0. Ils sont rappelés dans le Tableau 41.

$$F(x_0, y_0)T_{int} = f_{star}\Delta t_{int}S_{pixel}\eta_{qe}T_{tele} T_{NISP} A_{col} \quad (9)$$

Tableau 41 - Résumé des valeurs utilisées pour estimer l'épaisseur de substrat acceptable dans le cas de la mission Euclid à partir des critères sus mentionnés.

Paramètres	Valeurs
f_{star}	$1.6 \times 10^{-4} \text{ photons. s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ à $1.6 \mu\text{m}$
Δt_{int}	560 s
η_{qe}	0.7
T_{tele}	0.779
T_{NISP}	0.5
A_{col}	$1.1 \times 10^4 \text{ cm}^2$
δ_{pix}	$18 \mu\text{m}$
Flux de protons	$5 \text{ protons. s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$
LET	8 MeV/cm (Proton de 1 GeV)
η_{in}	1
γ	3 %
E_{e-h}	4.65 eV
Signal photonique que l'on cherche à observer $f_{star}\Delta t_{int}S_{pixel}\eta_{qe}T_{tele} T_{NISP} A_{col}$	272 charges en moyenne

L'équation (5) est tracée sur la Figure 138 (a). Elle décrit l'évolution du nombre de charges collectées par un pixel à une distance r_i du point d'impact, exprimée en nombre de pixels, pour différentes épaisseurs de substrat, notées H, en considérant un impact de proton unique. On constate que le nombre d'électrons collectés par pixels est faible et inférieur au seuil défini dans l'équation (6), à savoir $272/3 \sim 90$ électrons (voir Tableau 41).

Cependant afin d'estimer l'épaisseur du substrat pour une application donnée, il faut tenir compte du flux de protons incidents. Ainsi, l'équation (7) est tracée sur la Figure 138 (b). Ce graphique considère deux contributions au signal collecté par un pixel :

1. La contribution d'un cluster isolé (dont le proton est incident en $r = 0$)
2. La contribution de l'ensemble des impacts de protons affectant le détecteur sur la durée d'une acquisition.

Ceci donne le nombre d'électrons induit par la luminescence du substrat, collectés par la couche de HgCdTe en fonction de la distance radiale au point d'impact du proton et en fonction de l'épaisseur du substrat H. On observe sur cette figure, que plus l'épaisseur de substrat est importante plus la quantité de charges collectées dans un pixel donné augmente. Sur cette figure, la courbe rouge représente l'iso-contour égal à un tiers du nombre de charges générées dans un pixel par le signal photonique utile que l'on cherche à observer. La courbe bleue représente l'iso-contour égal à un dixième du nombre de charges générées dans un pixel par le signal photonique utile. On observe qu'en fonction du critère choisi, la contrainte sur l'épaisseur de substrat acceptable varie. Ainsi, pour que la contribution parasite de luminescence soit inférieure à un tiers du flux utile, l'épaisseur du substrat doit être inférieure à 300 μm , tandis que pour que la contribution parasite de luminescence soit inférieure à un dixième du flux photonique utile, le détecteur doit avoir un substrat résiduel inférieur à 100 μm . Ainsi, dans le cadre de la mission spatiale Euclid, l'utilisation de détecteurs avec 100 μm d'épaisseur n'aurait pas dégrader la sensibilité de l'instrument sous irradiation en environnement spatial.

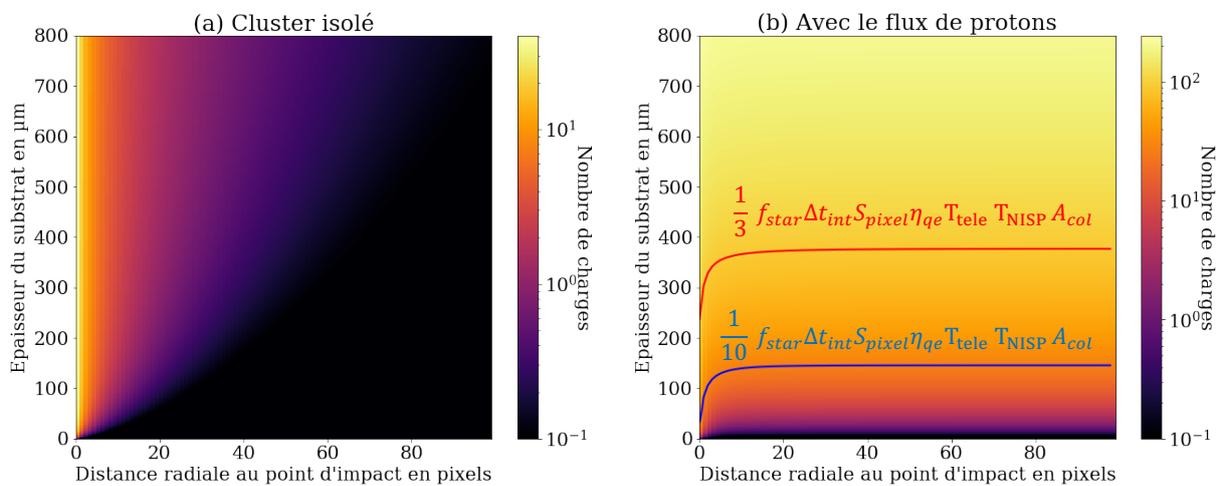


Figure 138 - (a) Application du critère en considérant un cluster isolé (b) Application du critère en tenant compte du flux de protons incidents. La courbe rouge est l'iso-contour qui représente un tiers du nombre de charges générées dans un pixel par le flux photonique d'intérêt.

L'objectif de ce travail de thèse était de déterminer une épaisseur de substrat CdZnTe qui permettent de ne pas dégrader la sensibilité des détecteurs de technologie HgCdTe sous irradiations de protons. Ainsi au regard des travaux effectués, l'amincissement complet du substrat n'est pas nécessaire. J'ai montré qu'un amincissement partiel du substrat ne dégradait pas la sensibilité du détecteur et j'ai proposé un critère afin de déterminer une épaisseur de substrat acceptable en fonction des conditions d'observations.

Par conséquent, dans le cas des détecteurs ALFA, dans le cas d'une mission en L2 avec un faible flux de protons incidents, l'amincissement complet du substrat n'est pas indispensable. Je suggère néanmoins d'amincir le détecteur avec une épaisseur d'environ 50 μm . A cette épaisseur aucune inhomogénéité spatiale du signal de fond n'a été observée. Ces inhomogénéités (constatée dans le détecteur avec 800 μm de substrat) peuvent être dommageables dans la mesure où leur calibration est compliquée.

D'autres contraintes, peuvent nécessiter un retrait complet du substrat. Par exemple, si l'on veut étendre le domaine spectral de détection des détecteurs de technologie HgCdTe dans le domaine visible, le retrait complet du substrat est indispensable. De plus, le choix de l'épaisseur du substrat doit aussi être dicté par des considérations mécaniques. En effet, la tenue mécanique d'une architecture de détecteur dont le substrat est partiellement aminci doit être vérifiée. En particulier, il s'agit de s'assurer que les performances du détecteur ne se dégradent après plusieurs cycles thermiques.

Afin de poursuivre ces travaux, des perspectives de modélisations peuvent être proposées associées à des perspectives expérimentales.

Concernant les perspectives d'amélioration du modèle, je recommande de :

- Compléter le modèle en ajoutant la contribution du recyclage photonique, qui on l'a vu dans le chapitre 2, peut rallonger le temps de vie des porteurs. Ces derniers sont susceptibles de se propager sur d'importantes distances.
- Adapter le modèle aux détecteurs de type n/p. Dans ces détecteurs, on cherche à collecter les électrons. Outre les propriétés matériaux qui changent, la structure du détecteur peut être différente.
- Par ailleurs, le modèle peut être précisé en prenant en considération les effets de hautes densités de porteurs ou en tenant compte du comportement excitonique du CdZnTe aux températures cryogéniques de fonctionnement des détecteurs. Ce comportement a été observé lors des mesures de fonction optiques du CdZnTe à 80 K et 100 K que j'ai effectuées
- A plus long terme, ce modèle pourra être intégré aux outils de simulation de l'effet des radiations sur les détecteurs IR. Pour cela, je propose de simplifier le modèle en réduisant la modélisation du dépôt d'énergie dans le détecteur à un dépôt linéaire le long de la trajectoire ce qui permettrait de réduire le temps de calcul nécessaire à la simulation des impacts. Pour passer de plusieurs jours à quelques heures.

Concernant les perspectives expérimentales, elles sont multiples et je propose de :

- Améliorer la connaissance des propriétés matériaux du CdZnTe aux températures cryogéniques de fonctionnement des détecteurs IR. Il s'agit par exemple de poursuivre les mesures de longueur de diffusion dans le CdZnTe. Afin de déterminer le diagramme de bande au niveau de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe, il est essentiel de faire une mesure du niveau de dopage du CdZnTe. Ces mesures de propriétés matériaux ont été effectuées sur des substrats de CdZnTe massif. Ces mesures doivent être reproduites sur des substrats représentatifs des substrats à la fin du processus de fabrication des détecteurs. Afin d'estimer les effets des étapes technologiques sur les propriétés électriques et optiques du CdZnTe.
- Par ailleurs afin de chercher à différencier expérimentalement la source de pollution sous irradiation, une campagne d'irradiation plus ambitieuse peut être envisagée. Plus de détecteurs doivent être irradiés, avec des épaisseurs de substrat différentes. De plus, en irradiant avec des protons de faibles énergies, dont la distance maximale de pénétration est inférieure à l'épaisseur du substrat, nous pourrions dissocier les effets du dépôt d'énergie dans le HgCdTe de ceux dans le CdZnTe. Cette étude permettrait d'investiguer les variations spatiales du signal de fond observées sous irradiation dans le détecteur avec 800 μm de substrat. Enfin, cette expérience peut être complétée par une mesure de luminescence sous irradiation, en installant un dispositif de collecte de photons de luminescence dans le cryostat.

- De plus, il serait pertinent de réaliser une campagne de caractérisation en mesurant par exemple l'efficacité quantique, sur différents détecteurs avec différentes épaisseurs de substrat pour estimer son influence sur les performances générales du détecteur

Annexe A

Étude de la position du film

Dans cette annexe, nous allons décrire l'influence de la position du film dans le substrat de CdZnTe sur le profil du dépôt d'énergie. Trois positions de film ont été choisies (voir Figure 139 (a)) : proche de l'interface avec le vide, au milieu du substrat et proche de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe. La dose obtenue à partir des trois positions de film est présentée sur la Figure 139 (b).

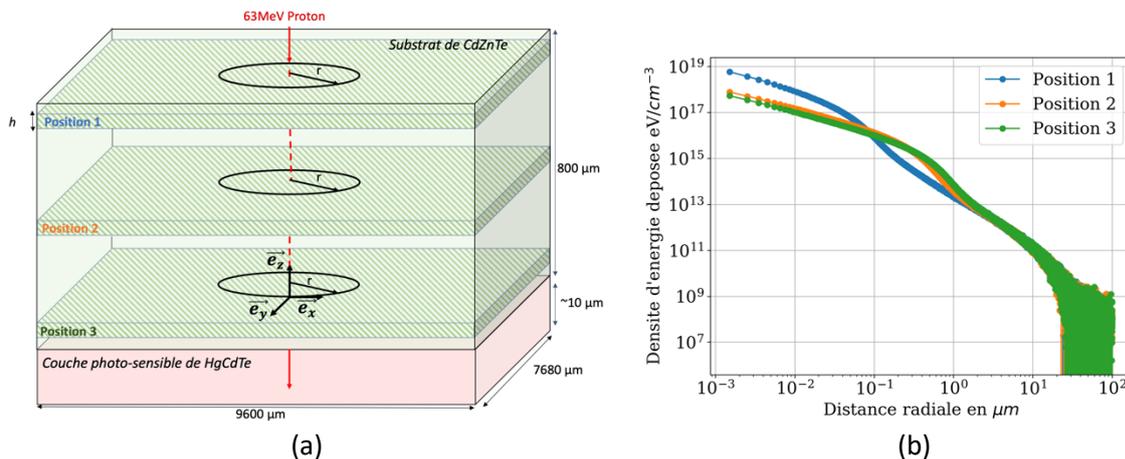


Figure 139 – (a) Schéma de la structure simulée sur GEANT4 (b) Densité volumique d'énergie estimée à partir de la position du film dans le substrat

On observe que la Figure 139 (b) que plus le film est proche de l'interface entre le CdZnTe et le vide (Position 1), plus la densité d'énergie déposée est importante en cœur de trace. Lorsque le film est positionné loin de l'interface entre le CdZnTe et le vide (Position 2 et 3) la densité d'énergie déposée est moins grande en cœur de trace mais s'étale sur une plus grande distance lorsque l'on s'éloigne du point d'impact. Ceci s'explique par le phénomène de diffusion, plus les protons traversent de matière plus ces derniers sont susceptibles d'être diffusés en interagissant avec les noyaux du cristal. L'objectif des simulations GEANT4 est de déterminer la trace induite par le passage d'un proton dans le substrat de CdZnTe. Ainsi, pour réduire l'influence la diffusion des protons, il est pertinent de mettre le film dans lequel le dépôt d'énergie est enregistré à l'interface la plus proche du point d'impact du proton. Soit dans la position du film 1 dans le cas du CdZnTe.

Annexe B

Calcul coefficient diffusion ambipolaire

En une dimension les équations de continuité pour les trous et les électrons peut s'écrire comme suit :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = n\mu_n \frac{\partial E}{\partial x} + \mu_n E \frac{\partial n}{\partial x} + D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + G - \frac{n - n_0}{\tau}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -p\mu_p \frac{\partial E}{\partial x} + \mu_p E \frac{\partial p}{\partial x} + D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + G - \frac{p - p_0}{\tau}$$

Le champ E correspond à la somme de deux contributions, le champ électrique appliqué noté E_a et le champ électrique interne E_i . Ce champ est lié à la différence de vitesse de diffusion des porteurs dans le matériau. Il y a trois inconnus : p, n et E_i . Il faut ajouter l'équation de Poisson afin de pouvoir résoudre ce problème :

$$-\Delta V = \frac{\rho}{\epsilon} = \frac{e}{\epsilon} (p + N_d^+ - n - N_a^-)$$

On définit la constante de temps diélectrique comme suit :

$$\tau_D = \frac{\epsilon}{\sigma}$$

Où σ est la conductivité du matériau, ϵ est la constante diélectrique du matériau.

Cette constante est de l'ordre de la picoseconde, elle traduit la durée à partir de laquelle un matériau retourne à l'équilibre électrique. La durée de vie des porteurs traduit quant à elle la durée nécessaire pour qu'un matériau retrouve son état d'équilibre, elle est supérieure de plusieurs ordres de grandeur à la constante de temps diélectrique. Autrement dit la neutralité électrique est établie en un temps plus bref que le retour à l'équilibre. On peut donc supposer que $\Delta n(x, t) = \Delta p(x, t)$.

Cette égalité suppose alors que les trous et les électrons diffusent de la même manière. Par ailleurs, les porteurs se recombinant par paires : $\tau_n = \tau_p = \tau$. Ici on suppose qu'il n'y a ni de pièges à électrons ni de pièges à trous.

Si l'on note $\Delta\pi = \Delta n = \Delta p$, on obtient les équations de diffusions suivantes :

$$\frac{\partial \Delta\pi}{\partial t} = n\mu_n \frac{\partial E_i}{\partial x} + \mu_n(E_i + E_a) \frac{\partial \Delta\pi}{\partial x} + D_n \frac{\partial^2 \Delta\pi}{\partial x^2} + G - \frac{\Delta\pi}{\tau}$$

$$\frac{\partial \Delta\pi}{\partial t} = -p\mu_p \frac{\partial E_i}{\partial x} - \mu_p(E_i + E_a) \frac{\partial \Delta\pi}{\partial x} + D_p \frac{\partial^2 \Delta\pi}{\partial x^2} + G - \frac{\Delta\pi}{\tau}$$

On peut montrer que le $\mu_p(E_i + E_a) \partial \Delta\pi / \partial x$, est négligeable devant $D_p \partial^2 \Delta\pi / \partial x^2$. En multipliant la première équation par $p\mu_p$ et la seconde par $n\mu_n$ et en effectuant une somme membre à membre des deux équations on obtient :

$$\frac{\partial \Delta\pi}{\partial t} = \mu^* E_a \frac{\partial \Delta n}{\partial x} + D^* \frac{\partial^2 \Delta\pi}{\partial x^2} - \frac{\Delta\pi}{\tau} + G$$

C'est l'équation de diffusion ambipolaire, les coefficients μ^* et D^* sont appelés mobilités et constante de diffusion ambipolaire et valent :

$$\mu^* = \frac{(p - n)\mu_n\mu_p}{p\mu_p + n\mu_n}$$

$$D^* = \frac{(p + n)D_n D_p}{pD_p + nD_n}$$

Remarque : cette équation n'est pas linéaire les paramètres matériaux effectifs dépendent de la concentration des porteurs.

Annexe C

Modélisation du recyclage photonique et chaînes de Markov

Dans cette annexe, un modèle de recyclage photonique est proposé basé sur l'utilisation des chaînes de Markov.

1 Présentation du formalisme basé sur une chaîne de Markov

Après avoir présenté le formalisme mathématique de cette approche nous étudierons différents exemples de l'influence du recyclage photonique sur l'évolution du système. Puis nous discuterons de son application dans le cadre de l'étude de l'effet des radiations sur des détecteurs IR non amincis.

L'étude du recyclage photonique que nous proposons ici s'appuie sur l'utilisation d'une chaîne de Markov à temps discret. On fait alors l'hypothèse que le recyclage photonique est un processus de Markov. Autrement dit, il satisfait la propriété suivante : l'état futur du système ne dépend que de l'instant présent et n'est pas dépendant des états passés du processus. La représentation schématique de la chaîne de Markov est donnée sur la Figure 140. L'étude des chaînes de Markov à temps discret suppose qu'à chaque étape le processus évolue dans un état avec une certaine probabilité. L'objectif est de déterminer dans quel état se trouve le système après un grand nombre d'itérations. Sur la Figure 140, p_0 décrit la probabilité pour que la paire électron-trou diffuse vers l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe à partir de l'état A, η_{in} est la probabilité de recombinaison radiative et p_1 la probabilité pour que le photon émis s'échappe du matériau semi-conducteur. Ces grandeurs dépendent directement des propriétés du matériau semi-conducteur dans lequel le phénomène de recyclage photonique est étudié.

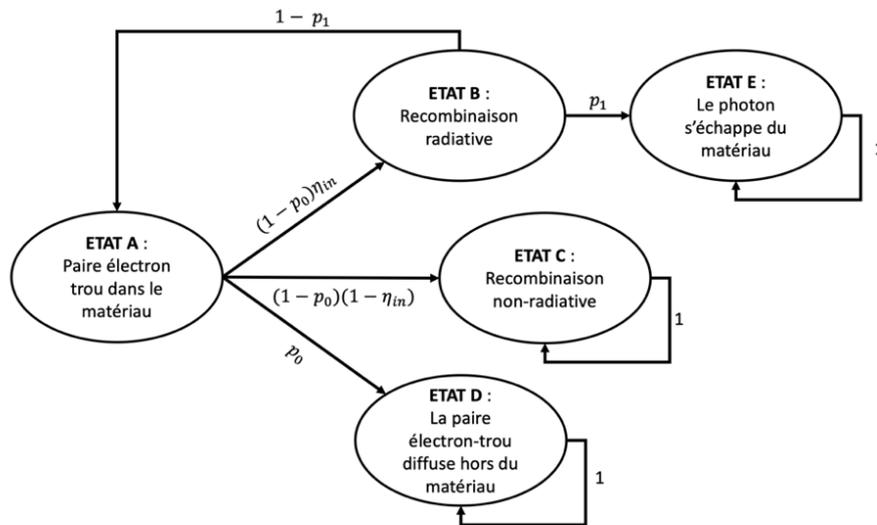


Figure 140 - Schéma de la chaîne de Markov avec recyclage photonique.

On observe sur la Figure 140, les différents états de la chaîne de Markov. Ceux-ci sont listés ci-dessous :

1. État A : le processus est dans le stade paire électron-trou
2. État B : la paire électron-trou s'est recombinaisonnée de manière radiative
3. État C : la paire électron-trou s'est recombinaisonnée de manière non radiative
4. État D : la paire électron-trou a diffusé vers l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe.
5. État E : le photon émis par recombinaison radiative sort du semi-conducteur.

On associe à chacun de ces états une probabilité de transition. Ainsi, depuis l'état A, le système peut évoluer vers l'état B, C ou D. Une paire électron-trou a trois possibilités d'évolution : soit elle se recombine de manière radiative, soit elle se recombine de manière non radiative, soit elle diffuse directement vers l'interface et disparaît. Dans la mesure où il y a recombinaison radiative, soit le photon parvient à s'échapper du matériau, soit celui-ci génère une nouvelle paire électron-trou.

2 Présentation du formalisme matriciel

A la différence des états A et B qui sont dits transitoires, les états C, D et E sont absorbants. Par conséquent, une fois que le système est entré dans ces états, il ne peut en ressortir. Les probabilités de transitions sont contenues dans une matrice appelée **matrice de transition** de la chaîne de Markov. Dans notre cas celle-ci est donnée par l'équation (2-1).

$$P = \begin{pmatrix} 0 & (1-p_0)\eta_{in} & (1-p_0)(1-\eta_{in}) & p_0 & 0 \\ (1-p_1) & 0 & 0 & 0 & p_1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-1)$$

Soit $\pi^{(n)}$ le vecteur décrivant l'état du système au bout de n étapes. Ce vecteur regroupe les probabilités d'occupation des différents états. L'état du système à l'instant $n + 1$ s'exprime selon l'équation (2-2).

$$\pi^{(n+1)} = \pi^{(n)}P \quad (2-2)$$

Par ailleurs, à partir d'un état initial $\pi^{(0)}$ on obtient la probabilité que le système soit dans l'état $\pi^{(n)}$ par l'équation (2-3).

$$\pi^{(n)} = \pi^{(0)}P^n \quad (2-3)$$

En outre, puisque P est diagonalisable (son polynôme caractéristique est scindé), on peut écrire :

$$P^n = MD^nM^{-1} \quad (2-4)$$

De sorte que l'on obtient directement une expression pour le vecteur $\pi^{(n)}$ donnée par l'équation (2-5).

$$\pi^{(n)} = \pi^{(0)}MD^nM^{-1} \quad (2-5)$$

Où D est une matrice diagonale et M est la matrice de passage. On peut montrer que D et M valent :

$$D = \begin{pmatrix} \sqrt{(1-p_0)(1-p_1)\eta_{in}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{(1-p_0)(1-p_1)\eta_{in}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-6)$$

$$M = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{(1-p_0)\eta_{in}}}{\sqrt{1-p_1}} & -\frac{\sqrt{(1-p_0)\eta_{in}}}{\sqrt{1-p_1}} & \frac{(1-p_0)(1-\eta_{in})}{1-\alpha^2} & \frac{p_0}{1-\alpha^2} & \frac{p_1\eta_{in}(1-p_0)}{1-\alpha^2} \\ 1 & 1 & \frac{(1-p_0)(1-\eta_{in})(1-p_1)}{1-\alpha^2} & \frac{p_0(1-p_1)}{1-\alpha^2} & \frac{p_1}{1-\alpha^2} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-7)$$

Dans la matrice M , α est donnée par l'équation (2-8).

$$\alpha = \sqrt{(1-p_0)(1-p_1)\eta_{in}} \quad (2-8)$$

Le phénomène de recyclage photonique est ensuite estimé numériquement en fonction des trois probabilités p_0 , p_1 et η_{in} . La section suivante s'attache à calculer ces différentes probabilités.

3 Calcul des probabilités

La valeur des différentes probabilités est déterminée par des principes physiques. Par exemple, p_0 , calculée dans la section suivante, dépend de la possibilité pour la paire électron-trou de diffuser jusqu'à une interface où elle sera absorbée. Celle-ci dépend des propriétés matériaux mais aussi des propriétés géométriques du matériau considéré.

3.1 Calcul de la probabilité p_0 : probabilité pour que la paire électron-trou diffuse hors du matériau

Afin de calculer cette probabilité, nous allons considérer un substrat homogène de CdZnTe pour lequel on considère des conditions aux limites de Dirichlet à l'interface entre le CdZnTe et le vide ainsi qu'à l'interface entre le HgCdTe et le CdZnTe. Ces conditions sont similaires à celles utilisées dans le cas de la modélisation du transport des porteurs générés par le passage d'un proton dans le substrat de CdZnTe (voir section 3.1). La probabilité p_0 pour qu'un porteur localisé en z_0 diffuse hors du substrat, est donnée par la somme de deux contributions associées à chacune des deux interfaces, comme exprimé par l'équation (3-1).

$$p_0 = p_{czt/mct}(z_0) + p_{czt/vide}(z_0) \quad (3-1)$$

La probabilité pour qu'une paire électron-trou, localisée en z_0 , diffuse vers l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe est calculée à partir de la résolution de l'équation différentielle de diffusion en considérant une source ponctuelle. Le nombre de charge, exprimé par unité de surface, reçu à l'interface au point r entre le CdZnTe et le HgCdTe est donné par l'équation (3-2). Ce calcul est tiré de Rolland [6]

$$Q_{czt/mct}(z_0, r) = \frac{1}{2\pi H^2} \sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} \frac{a_m(1 + \eta R_m) \exp(-\eta R_m)}{R_m^3} \quad (3-2)$$

Avec

$$a_m = \frac{z_0}{H} + 2m \quad (3-3)$$

$$R_m = \sqrt{\frac{r^2}{H^2} + a_m^2} \quad (3-4)$$

$$\eta = \frac{H}{L_d} \quad (3-5)$$

Donc finalement la probabilité totale pour qu'un porteur localisé en z_0 diffuse jusqu'à l'interface entre le HgCdTe et le CdZnTe est donnée par intégration de (3-2) sur l'ensemble de la surface associée à cette interface, comme exprimée par l'équation (3-6).

$$p_{czt/mct}(z_0) = 2\pi \int_0^{+\infty} r Q_{czt/mct}(z_0, r) dr \quad (3-6)$$

L'équation (3-6) est tracée sur la Figure 141, en supposant une épaisseur de substrat de 800 μm et deux longueurs de diffusion 5 μm (en bleu) et 20 μm (en orange). On observe que pour un z_0 donné, la probabilité $p_{czt/mct}(z_0)$ est plus importante lorsque la longueur de diffusion est plus élevée. Jusqu'à présent, nous avons seulement considéré une seule interface. La probabilité pour qu'une paire électron-trou diffuse à l'interface entre le CdZnTe et le vide est analogue à celle correspondant à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe.

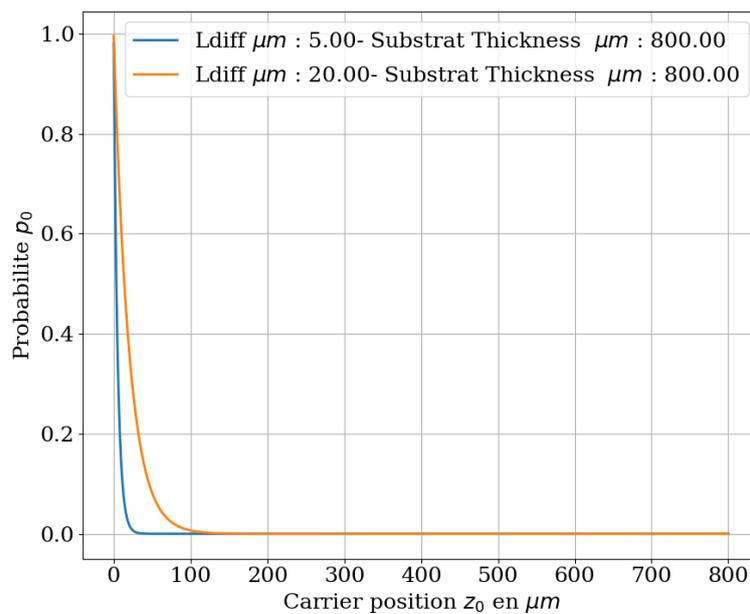


Figure 141 - Tracé de l'évolution pour qu'une paire électron-trou diffuse jusqu'à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe

3.2 Calcul de la probabilité p_1 : probabilité pour qu'un photon s'échappe du matériau

La probabilité p_1 pour qu'un photon émis au point z_0 s'échappe du matériau est la somme de plusieurs contributions, comme illustré sur la Figure 142. Dans la mesure où l'absorption des photons est forte et où l'épaisseur du substrat est grande (devant la longueur moyenne d'absorption), on peut supposer que seuls les termes a_0 et b_0 sont prépondérants dans l'expression de p_1 . Ceci est exprimé par l'équation (3-7).

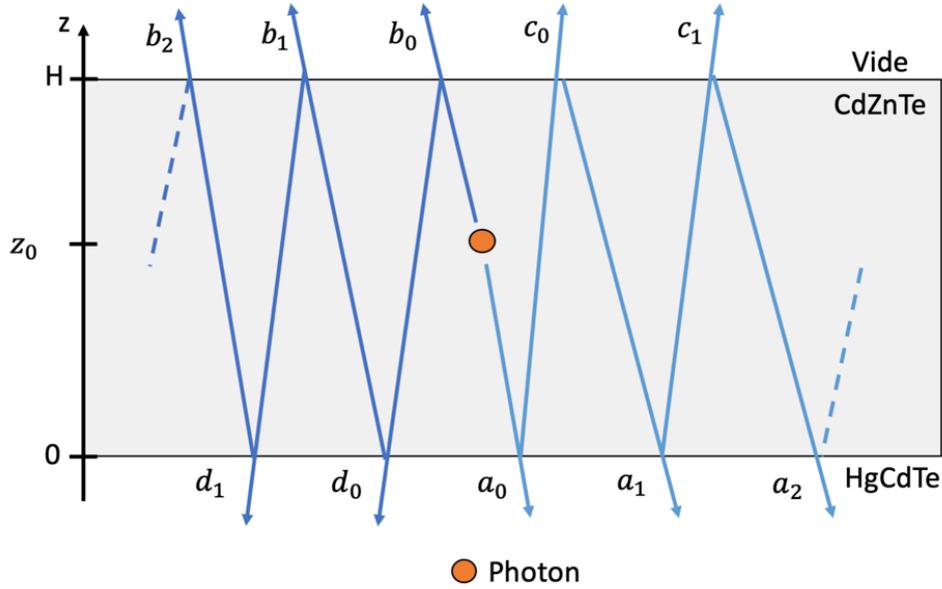


Figure 142 - Schéma illustrant les différentes composantes de la probabilité p_1 , associées aux réflexions multiples et à l'émission de la lumière via deux interfaces.

$$p_1(z_0) = \sum_i a_i(z_0) + b_i(z_0) + c_i(z_0) + d_i(z_0) \approx a_0(z_0) + b_0(z_0) \quad (3-7)$$

La détermination de a_0 s'appuie sur une démarche analogue à celle utilisée pour calculer la fluence (voir section 3.4). Il s'agit en effet de prendre en compte l'émission dans 4π stéradians, de tenir compte des pertes par absorption, du facteur de transmission au niveau des interfaces et l'énergie des photons émis par recombinaison spontanée. Ceci est traduit mathématiquement par l'équation (3-8).

$$da_0 \left(\begin{matrix} r & 0 \\ \theta & 0 \\ 0 & z_0 \end{matrix}, \lambda \right) = \frac{\cos(\phi)}{4\pi R^2} \exp(-\alpha(\lambda)R) T_{czt/mct}(\phi(z, r), \lambda) \gamma_{spon}(\lambda) d\lambda r dr d\theta \quad (3-8)$$

Dans cette équation da_0 correspond à la probabilité pour qu'un photon de longueur d'onde λ , émis en z_0 soit reçu au point de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe, localisé par (r, θ) . Finalement, la probabilité totale pour que le photon émis en z_0 s'échappe à l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe est donnée par intégration de l'équation de (3-8) sur l'ensemble de la surface de l'interface et sur l'ensemble des longueurs d'ondes d'émission, soit :

$$a_0(z_0) = 2\pi \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{\cos(\phi)}{4\pi(r^2 + z^2)} \exp(-\alpha(\lambda)\sqrt{r^2 + z^2}) T_{czt/mct}(\phi(z, r), \lambda) \gamma_{spon}(\lambda) r dr d\lambda \quad (3-9)$$

Une expression analogue existe pour $b_0(z_0)$. L'équation (3-9) est tracée sur la Figure 143. On observe que plus le coefficient d'absorption est élevé plus la probabilité pour que le photon s'échappe du matériau semi-conducteur décroît rapidement. Par ailleurs, on constate que la probabilité maximale pour qu'un photon émis en z_0 s'échappe au niveau de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe est

inférieure à 0.5. Ceci est dû à l'émission isotrope du photon ainsi qu'aux pertes par réflexion au niveau de l'interface.

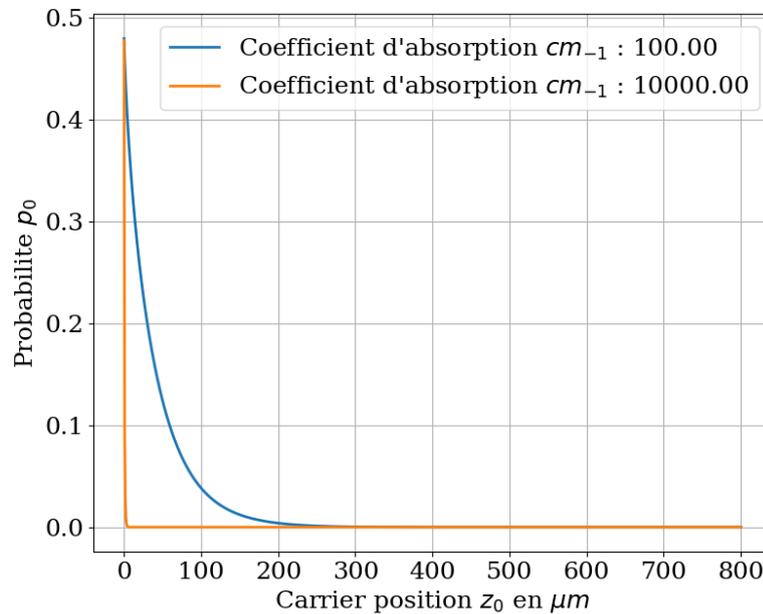


Figure 143 - Tracé de a_0 en fonction du point d'émission z_0 pour deux valeurs de coefficient d'absorption, 100 cm^{-1} (en bleu) et 10000 cm^{-1} (en orange).

3.3 Calcul de η_{in} : probabilité pour que la paire électron-trou se recombine de manière radiative

Il reste maintenant à calculer la probabilité pour que la paire électron-trou se recombine de manière radiative. Cette probabilité est aussi connue sous le nom **d'efficacité quantique interne**^a. Elle correspond au rapport de la section efficace de recombinaison radiative avec la section efficace de recombinaison totale. Elle s'exprime à partir des temps de vie des porteurs selon l'équation

$$\eta_{in} = \frac{\tau}{\tau_R} \quad (3-10)$$

Où τ_R est le temps de vie radiatif et τ est le temps de vie des porteurs, donné par l'équation (3-11).

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_R} + \frac{1}{\tau_{NR}} \quad (3-11)$$

Avec τ_{NR} le temps de vie de non-radiatif. Dans ces sections, nous avons introduit les différentes probabilités. Dans la suite, nous allons nous appuyer sur la détermination de p_0 , p_1 et η_{in} afin d'étudier l'effet du recyclage photonique à partir des chaînes de Markov.

^a L'efficacité quantique interne est à distinguer de l'efficacité quantique (introduite dans le chapitre 0). Cette dernière correspond au rapport entre le nombre de photons incidents et le nombre de photo-électrons collectés.

4 Résultat et discussion

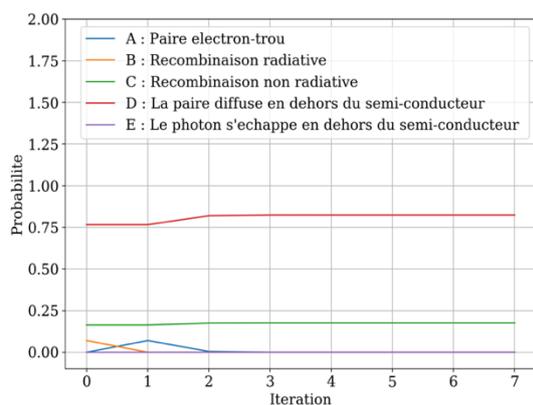
Dans cette section, nous allons appliquer le formalisme des chaînes de Markov à l'étude du phénomène de recyclage photonique afin d'illustrer ce phénomène. Les propriétés matériaux, utilisées pour calculer les probabilités p_0 , p_1 et η_{in} sont données dans le Tableau 42. Pour simplifier l'exemple, nous considérerons ici, une seule longueur d'onde d'émission.

Tableau 42 - Résumé des propriétés matériaux utilisés dans l'application du modèle des chaînes de Markov dans l'étude de l'effet du recyclage photonique

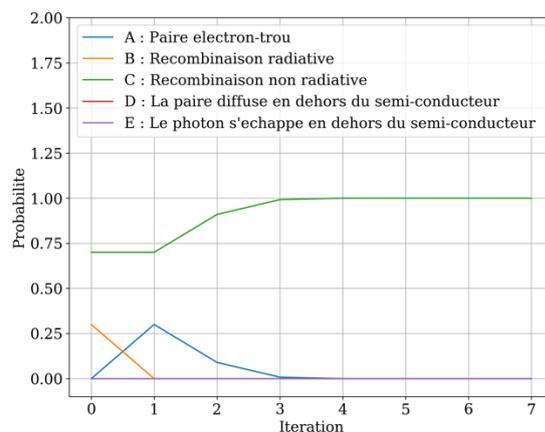
Grandeurs	Valeurs
L_D	15 μm
τ	100 ns
η_{in}	0.3
α	10^4 cm^{-1}

Outre, la dépendance avec les propriétés matériau susmentionnée, p_0 , p_1 et η peuvent aussi varier avec la position de la paire électron-trou dans le semi-conducteur comme illustré sur les Figure 144 (a) et (b). Par exemple, proche de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe la probabilité que la paire électron-trou diffuse hors du CdZnTe est élevée. En revanche loin des interfaces (Figure 144 (b)) le porteur a très peu de chance de diffuser vers une des interfaces si bien qu'il finit inévitablement par se recombiner de manière radiative ou non radiative.

Il faut noter cependant que, dans ce modèle la diffusion des porteurs dans le semi-conducteur ainsi que la propagation des photons n'est pas prise en compte. Le processus de Markov suppose que la particule se trouve dans différents états, sa propagation n'est pas explicitement prise en compte (tout comme celle du photon). En revanche, dans la mesure où les porteurs sont nombreux dans le semi-conducteur, l'application de ce modèle permet d'obtenir le comportement moyen du matériau. En effet, lorsqu'un porteur en z diffuse hors de sa position, il est remplacé par un porteur précédemment en $z+dz$.



(a)



(b)

Figure 144 – (a) Évolution de la probabilité d'occupation des états de la chaîne de Markov en considérant un porteur initialement à $4 \mu\text{m}$ de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe (b) Évolution de la probabilité d'occupation des états de la chaîne de Markov en considérant un porteur initialement à $400 \mu\text{m}$ de l'interface entre le CdZnTe et le HgCdTe. Les deux cas ont été calculés à partir des données matériaux du Tableau 42.

Annexe D

Propriétés optiques du CdZnTe

La probabilité pour qu'un photon sorte du substrat dépend de l'angle d'émission, θ , de la position dans le substrat ainsi que de la longueur d'onde du photon incident. On peut décomposer cette probabilité en deux composantes :

- Le photon s'échappe côté HgCdTe
- Le photon s'échappe côté vide

1 Probabilité que le photon s'échappe côté HgCdTe

$$T_{mct}^F(z, \lambda, \theta) = \frac{T_{mct}(\theta, \lambda) \exp(-\alpha(\lambda)z)}{1 - R_{mct}(\theta, \lambda)R_{air}(\theta, \lambda) \exp(-2\alpha(\lambda)H)}$$
$$T_{mct}^B(z, \lambda, \theta) = \frac{T_{mct}(\theta, \lambda)R_{vide}(\theta, \lambda) \exp(-\alpha(\lambda)(2H - z))}{1 - R_{mct}(\theta, \lambda)R_{air}(\theta, \lambda) \exp(-2\alpha(\lambda)H)}$$

La probabilité pour que le photon s'échappe côté HgCdTe s'écrit alors :

$$P_{HgCdTe}^{escape}(z, \lambda, \theta) = \frac{T_{mct}^F(z, \lambda, \theta) + T_{mct}^B(z, \lambda, \theta)}{2}$$

Les indices « F » et « B » distinguent l'émission directement vers la surface de HgCdTe (Forward) de l'émission de photons vers l'interface CdZnTe/vide (Backward), réfléchis puis transmis vers la couche sensitive de HgCdTe. Le facteur 0.5 vient du fait qu'on fait l'hypothèse d'une émission isotrope.

2 Probabilité que le photon s'échappe côté vide

$$T_{mct}^F(z, \lambda, \theta) = \frac{T_{vide}(\theta, \lambda) \exp(-\alpha(\lambda)(H - z))}{1 - R_{mct}(\theta, \lambda)R_{air}(\theta, \lambda) \exp(-2\alpha(\lambda)H)}$$
$$T_{mct}^B(z, \lambda, \theta) = \frac{T_{vide}(\theta, \lambda)R_{mct}(\theta, \lambda) \exp(-\alpha(\lambda)(H + z))}{1 - R_{mct}(\theta, \lambda)R_{air}(\theta, \lambda) \exp(-2\alpha(\lambda)H)}$$

La probabilité pour que le photon s'échappe côté HgCdTe s'écrit alors :

$$P_{vide}^{escape}(z, \lambda, \theta) = \frac{T_{vide}^F(z, \lambda, \theta) + T_{vide}^B(z, \lambda, \theta)}{2}$$

3 Probabilité que le photon « sorte » du matériau :

$$P_{escape}(z, \lambda, \theta) = P_{vide}^{escape}(z, \lambda, \theta) + P_{HgCdTe}^{escape}(z, \lambda, \theta)$$

Annexe E

Calcul de propagation d'erreur

Dans cette annexe, nous allons effectuer un calcul de propagation d'erreur sur les mesures de fonction optiques réalisées par ellipsométrie.

Si l'on considère une onde plane arrivant sur une surface plane, une partie de l'onde est transmise ou absorbée par le matériau tandis que l'autre partie est réfléchi. Par ailleurs, on peut décomposer le champ électrique en deux composantes :

- E_p^i (p : *parallel* en Allemand) : l'onde parallèle au plan d'incidence.
- E_s^i (s : *senkrecht* en Allemand) : l'onde perpendiculaire au plan d'incidence.

L'indice i fait référence au champ incident. Après réflexion sur la surface le champ électrique est modifié. Cette modification peut être mesuré avec deux coefficients :

- $r_p = \frac{E_p^r}{E_p^i} = |r_p| \exp(j\delta_p)$: pour une polarisation parallèle au plan d'incidence
- $r_s = \frac{E_s^r}{E_s^i} = |r_s| \exp(j\delta_s)$: pour une polarisation perpendiculaire au plan d'incidence

Ces deux coefficients sont complexes, leur module représente la modification apportée à l'amplitude de la composante du champ et leur phase le retard introduit à la réflexion. En pratique c'est le rapport de ces deux grandeurs qui est mesuré soit :

$$\rho = \tan(\psi) e^{i\Delta} = \frac{r_p}{r_s}$$

Ainsi :

$$\tan(\psi) = \frac{r_p}{r_s}$$

Et Δ est la différence de phase entre les deux polarisations introduites par la réflexion. Les coefficients de réflexion et de transmission peuvent être déterminé à partir des équations de continuités du champ électrique et magnétique.

$$r_p = \frac{N_1 \cos(\phi_0) - N_0 \cos(\phi_1)}{N_1 \cos(\phi_0) + N_0 \cos(\phi_1)} = \frac{N_1 \cos(\phi_0) - N_0 \sqrt{1 - \left(\frac{N_0 \sin(\phi_0)}{N_1}\right)^2}}{N_1 \cos(\phi_0) + N_0 \sqrt{1 - \left(\frac{N_0 \sin(\phi_0)}{N_1}\right)^2}}$$

$$r_s = \frac{N_0 \cos(\phi_0) - N_1 \cos(\phi_1)}{N_0 \cos(\phi_0) + N_1 \cos(\phi_1)} = \frac{N_0 \cos(\phi_0) - N_1 \sqrt{1 - \left(\frac{N_0 \sin(\phi_0)}{N_1}\right)^2}}{N_0 \cos(\phi_0) + N_1 \sqrt{1 - \left(\frac{N_0 \sin(\phi_0)}{N_1}\right)^2}}$$

Avec N_0 l'indice optique de l'environnement, $N_1 = n + jk$ l'indice optique du matériau, ϕ_0 l'angle d'incidence et ϕ_1 l'angle de réfraction. Ces expressions s'obtiennent en utilisant la loi de Descartes et les propriétés trigonométriques. En pratique la mesure de ρ conduit à la mesure de deux grandeurs Δ et ψ . A partir de ces grandeurs, il est possible de remonter aux indices optiques n et k .

Ainsi ρ est dépend de l'indice optique de l'environnement n_0 , de l'indice du matériau N_1 et de l'angle d'incidence ϕ_0 , soit $\rho(n_0, n_s, \phi_0)$. En prenant la différentielle on obtient :

$$d\rho = \frac{\partial \rho}{\partial N_0} dN_0 + \frac{\partial \rho}{\partial N_1} dN_1 + \frac{\partial \rho}{\partial \phi} d\phi$$

En négligeant la variation de ρ avec l'indice de l'air, N_0 , on peut écrire :

$$d\rho = \frac{\partial \rho}{\partial N_1} dN_1 + \frac{\partial \rho}{\partial \phi} d\phi$$

Ainsi :

$$dN_1 = \frac{d\rho - \frac{\partial \rho}{\partial \phi} d\phi}{\frac{\partial \rho}{\partial N_1}}$$

Par ailleurs, $\rho = \tan(\psi) e^{i\Delta}$, soit :

$$d\rho = \frac{\partial \rho}{\partial \psi} d\psi + \frac{\partial \rho}{\partial \Delta} d\Delta$$

Soit :

$$d\rho = \frac{e^{i\Delta}}{\cos^2(\psi)} d\psi + i\rho d\Delta$$

Finalement

$$dN_1 = \frac{\frac{e^{i\Delta}}{\cos^2(\psi)} d\psi + i\rho d\Delta - \frac{\partial \rho}{\partial \phi} d\phi}{\frac{\partial \rho}{\partial N_1}}$$

On peut montrer que

$$\frac{\partial \rho}{\partial \phi} = - \frac{\frac{\partial \rho}{\partial N_1} \left(N_1^2 \left(1 + \frac{1}{\cos^2(\phi)} \right) + N_0^2 \left(1 - \frac{1}{\cos^2(\phi)} \right) \right)}{N_1 \tan(\phi)}$$

Et

$$\frac{\partial \rho}{\partial N_1} = - \frac{N_1(1 + \rho)^3 \cos^2(\phi)}{2(1 - \rho)N_0 \sin^4(\phi)}$$

Ainsi :

$$dN_1 = a_1 d\phi + a_2 d\Delta + a_3 d\psi$$

Où

$$a_1 = \frac{N_1^2 \left(1 + \frac{1}{\cos^2(\phi)} \right) + N_0^2 \left(1 - \frac{1}{\cos^2(\phi)} \right)}{N_1 \tan(\phi)}$$

$$a_2 = \frac{2i\rho(\rho - 1)}{N_1(1 + \rho^3)} n_0^2 \sin^2(\phi) \tan^2(\phi)$$

$$a_3 = \frac{2(\rho - 1)}{N_1(1 + \rho)^3} N_0^2 \sin^2(\phi) \tan^2(\phi) \frac{1}{\cos^2(\phi)} e^{i\Delta}$$

Et finalement

$$dn = \text{real}(dN_1)$$

$$dk = \text{imag}(dN_1)$$

Annexe F

Annihilation d'excitons libres dans les échantillons de CdTe et CdZnTe : détermination du gap en fonction de la température

Dans cette annexe, la raie d'émission de l'exciton libre est étudiée dans les échantillons de CdTe, CdZnTe A et CdZnTe B à partir des spectres de PL obtenus à différentes températures. Par ailleurs, des lois d'évolution de l'énergie de gap du CdZnTe en fonction de la température sont proposées.

1 Détermination de la position de l'exciton et de l'énergie de gap

Dans l'échantillon de CdTe, comme on peut le voir sur la Figure 145, la raie d'énergie correspondant à l'annihilation de l'exciton libre, FX, est difficilement distinguable sur le spectre de photoluminescence (PL). Cette région d'émission a par ailleurs été largement discuté dans le corps du manuscrit.

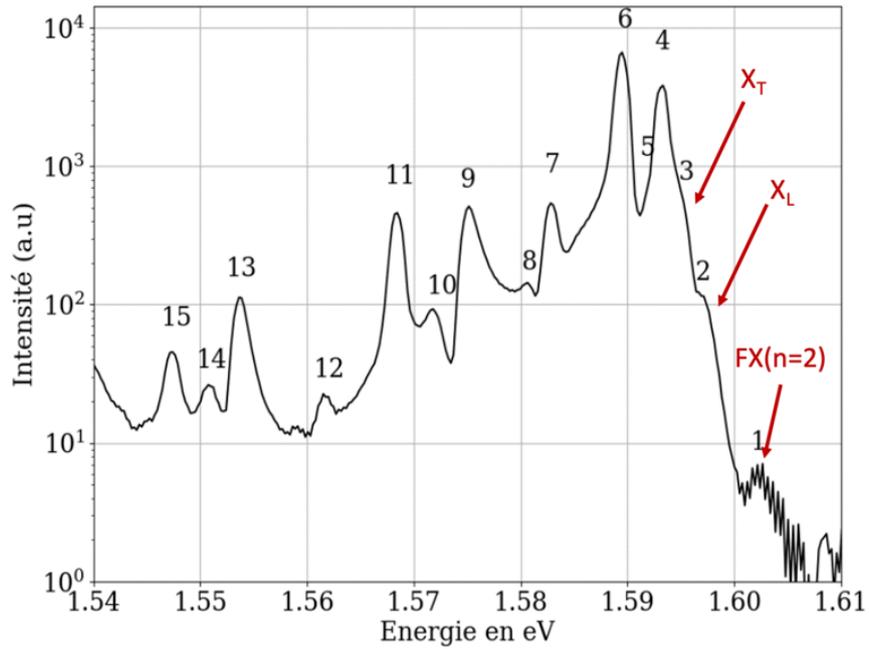


Figure 145 - Région du bord de bande du spectre de PL de l'échantillon de CdTe à 4 K en échelle log. Les différents chiffres correspondent aux différents processus listés dans le manuscrit. Les branches polaritoniques et l'état excité de l'exciton sont mis en évidence avec une flèche rouge.

L'énergie associée à la recombinaison d'un exciton libre a été déterminée à partir de la position de sa première réplique phonon, selon l'expression de l'équation (1). Sachant que l'énergie d'un phonon optique dans le CdTe est de 21.3 meV [1]–[3],[4], en tenant de l'énergie cinétique moyenne de l'exciton (qui vaut 0.57 meV à 4 K), on peut obtenir l'énergie de l'exciton dans le CdTe qui vaut 1.5960 eV. En ajoutant à cette énergie, l'énergie de liaison de l'exciton E_x qui vaut 10.6 meV dans [5]a on obtient l'énergie de bande interdite du CdTe à 4 K qui vaut 1.6061 eV, d'après l'équation (1). Cette valeur est très proche de la valeur de gap du CdTe la plus acceptée à 4 K de 1.606 eV ([7] et les références citées).

$$E_g = E_{FX-1LO} + E_{phonon} + E_x - E_{kinetic} \quad (1)$$

La région d'émission qui s'étend de 1.5969 eV à 1.5960 eV dans le spectre de l'échantillon de CdTe à 4 K est associée aux recombinaisons excitoniques parmi lesquels les branches polaritoniques sont observées. La différence entre les deux branches polaritoniques X_L et X_T est approximativement égale à 2 meV [9]. A plus haute énergie, la raie d'émission à 1.6026 eV peut être attribuée au second état excité de l'exciton. Par conséquent, à partir du modèle hydrogénoïde de l'exciton on peut estimer à partir de l'équation (2), l'énergie de liaison de l'exciton, E_x , qui vaut alors ici 8.8 meV. Cette valeur est inférieure aux énergies précédemment reportées. L'incertitude sur la détermination de l'énergie des pics de luminescence ou la mauvaise attribution de cette ligne au second état excité de l'exciton peuvent expliquer cette différence.

a Les énergies suivantes ont aussi été reportées dans la littérature 10.5 meV [6], 10.1 meV [6] and 10 meV [7], [8]

$$E_{FX(n=2)} - E_{FX(n=1)} = \frac{3}{4} E_x \quad (2)$$

Les spectres de PL des échantillons de CdZnTe A et B à 4 K sont présentés sur la Figure 146. Ces spectres ont été largement analysés dans le corps du manuscrit. La différence d'énergie entre les raies d'émission associées aux branches polaritoniques, X_L et X_T , est égale à 2 meV dans l'échantillon A et 1.7 meV dans l'échantillon B. Ces énergies sont en bon accord avec la valeur mesurée par Gemain sur des échantillons de CdZnTe [3]. Concernant la détermination de l'énergie de l'exciton dans le CdZnTe, les mêmes observations sont faites que pour l'échantillon de CdTe. Par conséquent, la position de FX dans les échantillons de CdZnTe a été déterminée à partir de la position des répliques phonons. Pour cela, nous supposons que l'énergie de liaison de l'exciton ainsi que l'énergie d'un phonon dans l'alliage ternaire de CdZnTe sont identiques à celles de l'alliage binaire de CdTe, soit 10.6 meV et 21.3 meV respectivement. Par conséquent, dans l'échantillon A, l'énergie de l'exciton libre vaut 1.6157 eV, et l'énergie de gap vaut 1.6253 eV. La différence entre l'énergie de gap de l'échantillon de CdTe et l'échantillon de CdZnTe A est de 19.2 meV. De manière similaire, on obtient l'énergie de l'exciton et de l'énergie de gap dans l'échantillon de CdZnTe B, soit 1.6248 eV et 1.6354 eV respectivement. La différence d'énergie de gap avec le CdTe est cette fois de 29.3 meV.

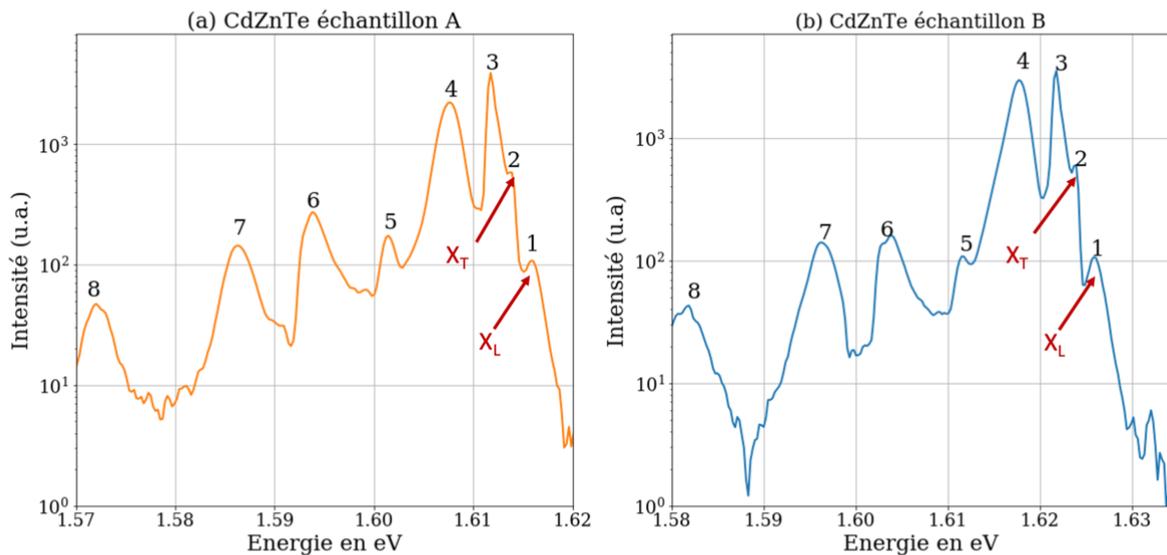


Figure 146 – (a) Région du bord de bande du spectre de PL de l'échantillon A de CdZnTe à 4 K en échelle log. (b) Région du bord de bande du spectre de PL de l'échantillon B de CdZnTe à 4 K en échelle log Les différents chiffres correspondent aux différents processus listés dans le manuscrit. Les branches polaritoniques sont mises en évidence avec une flèche rouge

Différentes formules qui expriment l'énergie de gap du CdZnTe en fonction de la composition en zinc ont été publiées [10]–[13]. L'expression de Tobin et al. [10], exprimée par l'équation (3), est la plus couramment utilisée. Elle est valide à 4 K pour une composition en zinc comprise entre 3 % et 6 %. En appliquant cette formule, il est possible de déterminer la composition en zinc des échantillons de CdZnTe à partir de leur énergie de gap. Ainsi, dans l'échantillon A, on trouve 3.6 % de zinc. Alors que l'échantillon B possède 5.5 % de zinc. Ces valeurs sont en bon accord avec les 4 % attendus.

$$E_g(x) = 1.6058 + 0.546 x \quad (3)$$

2 Évolution de l'énergie gap en fonction de la température

Comme nous l'avons vu avec les spectres de PL à 4 K, il est possible d'extraire de la position de la première réplique phonon l'énergie de gap des échantillons de matériaux semi-conducteur. Cette procédure (décrite dans la section ci-dessus) a été reproduite sur chaque spectre de chaque échantillon mesuré entre 4 K et 50 K. Ainsi, sur chacun des spectres, la raie correspondant à la recombinaison FX-1LO est relevée, puis l'énergie d'un phonon et l'énergie de liaison de l'exciton sont ajoutées^a. Enfin l'énergie cinétique des excitons est ôtée. L'évolution avec la température de l'énergie de gap des échantillons a ainsi été obtenue. Les courbes sont représentées sur les Figure 147 et Figure 148. Les points sur la figure correspondent à l'énergie de gap extraites des spectres de PL à partir de la méthode décrite ci-dessus. Au-delà de 50 K, la position de la première réplique phonon devient irrésolue.

En ce qui concerne le matériau CdTe, les énergies de bande interdite calculées sont en bon accord avec ce qui a été rapporté dans la littérature. Cependant, on peut remarquer que plus la température augmente, plus l'écart entre les valeurs d'énergie du gap augmente^b.

L'évolution de l'énergie de gap des échantillons de CdZnTe A et B est tracée sur la Figure 148 en fonction de la température. Ces résultats sont comparés à la littérature. Gemain [8] a réalisé des mesures de PL sur un échantillon de CdZnTe avec 3.5 % de zinc. Sanchez-Almazan et al. [14] ont réalisé des mesures de photo-reflectance modulées sur des différents échantillons de CdZnTe ayant des compositions différentes. Tandis que Gemain et Sanchez-Almazan et al ont estimé la même fraction de zinc dans leur échantillons (3.5 %), ils ne trouvent pas la même valeur pour l'énergie de gap. Ceci peut s'expliquer par la différence de méthodes utilisé pour estimer la valeur du gap ou bien par une mauvaise estimation de la proportion de zinc dans les échantillons. Sanchez-Almazan et al. ont estimé la quantité de zinc dans l'échantillons à partir de mesures du paramètre de maille tandis que Gemain s'appuie sur l'utilisation de la formule de Tobin à 4 K (de manière analogue à ce qui a été effectuée ici). Bien que la tendance d'évolution de l'énergie de gap en fonction de la température, extraite des mesures de PL, soit correcte, cette méthode semble sous-estimer la valeur la valeur de l'énergie de gap.

^a Les deux énergies sont supposées indépendantes de la température

^b Cet écart est encore plus marqué à 300 K (voir Chapitre 1).

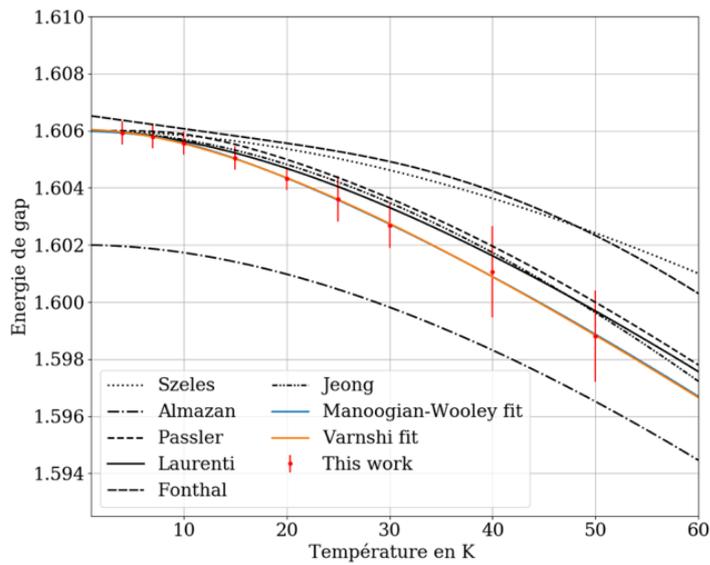


Figure 147 - Évolution de l'énergie du gap du CdTe en fonction de la température. Les résultats sont comparés à la littérature [7], [14]–[18]

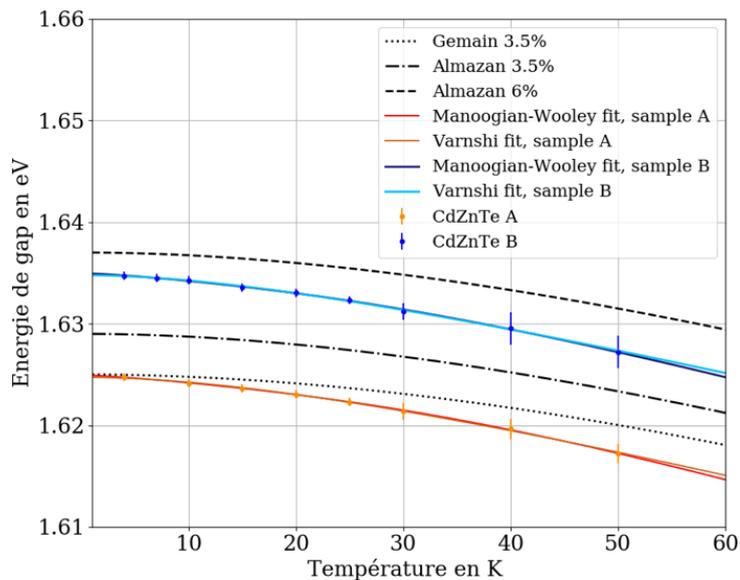


Figure 148 – Évolution de l'énergie du gap du CdZnTe en fonction de la température. Les résultats sont comparés à la littérature [8], [14].

3 Ajustement de l'énergie de gap en fonction de la température

L'énergie de gap estimée à partir des spectres de PL en fonction de la température a été ajustée pour les trois échantillons (CdTe, CdZnTe A et CdZnTe B) avec deux lois d'évolution de l'énergie de gap avec la température. La première est donnée par l'équation (4). Cette expression est tirée des travaux de Varshni [19].

$$E_g(T) = E_0 - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (4)$$

Dans l'équation (4), E_0 est l'énergie de gap à 0 K, et α et β sont constantes. Ces trois variables sont des paramètres du fit. L'ajustement des mesures expérimentales au modèle est réalisé avec la méthode des moindres carrés. Les valeurs de ces paramètres pour les trois échantillons sont reportées dans le Tableau 43 et les courbes de fit sont tracées sur la Figure 147 et la Figure 148

Bien que l'expression de Varshni soit utilisée pour déterminer l'évolution de l'énergie de gap du CdTe [14], [15], [17] et du CdZnTe [8][21], celle-ci est physiquement adaptée au matériau semi-conducteur III-V et IV [7]. Par conséquent, l'équation de Manoogian-Wooley (M-W), donnée par l'équation (5) est préférablement utilisé pour les matériaux II-VI puisqu'elle offre une meilleure interprétation physique. Cependant, cette expression reste basée sur des modèles empiriques. Dans l'équation (5), E_0 est l'énergie de gap à 0 K, le second terme prend en compte les effets de dilatation thermique et le dernier terme décrit l'interaction électron-phonon. Les variables E_0 , U, x, V et θ sont des paramètres de fit indépendant de la température. Ces paramètres sont reportés dans le Tableau 43.

$$E_g(T) = E_0 + UT^x + V\theta \left(\coth\left(\frac{\theta}{2T}\right) - 1 \right) \quad (5)$$

Tableau 43 – Valeurs des paramètres de fit des expressions de Varnshi et de Manoogian-Wooley aux mesures des énergies de gap effectuées sur les mesures de PL dans les échantillons de CdTe et CdZnTe.

Varshni					
	E_0 en eV	α en eV.K ⁻¹	β en K		
CdTe	1.606	2.98×10^{-4}	50.8		
CdZnTe A	1.625	2.90×10^{-4}	48.5		
CdZnT B	1.635	2.68×10^{-4}	40		
Manoogian-Wooley					
	E_0 en eV	U en eV.K ⁻¹	x	V en eV.K ⁻¹	θ en K
CdTe	1.606	-6.85×10^{-6}	1.63	-4.39×10^{-5}	31.1
CdZnTe A	1.625	-3.77×10^{-5}	1.31	-7.13×10^{-5}	138
CdZnTe B	1.635	-3.40×10^{-5}	1.34	-4.31×10^{-5}	115.8

Dans le CdTe, l'énergie de gap extraite des valeurs de l'ajustement des données expérimentales avec les équations (4) et (5) sont en bon accords avec la valeur de l'énergie de gap la plus acceptée à 4 K de 1.606 eV. Dans l'équation de M-W (équation (5)), doit être proche de la température de Debye du cristal. Dans le CdTe celle-ci vaut $\Theta_D = 158$ K. Or la valeur de θ extraite du fit est de 31.1 K. En revanche, la valeur de cette température dans le CdZnTe extraite des données expérimentales est en meilleure accord avec la valeur attendue^a.

^a Dans la mesure où l'on suppose que la température de Debye du CdZnTe est proche de celle du CdTe.

Références

- [1] F. Molva, J. P. Chamonal, et J. L. Pautrat, « Shallow Acceptors in Cadmium Telluride », *physica status solidi (b)*, vol. 109, n° 2, p. 635-644, févr. 1982, doi: 10.1002/pssb.2221090222.
- [2] J. Lee et N. C. Giles, « Low-temperature photoluminescence from bulk CdTe and Cd_{0.967}Zn_{0.033}Te », *Journal of Applied Physics*, 1995, doi: 10.1063/1.360356.
- [3] S. Jain, « Photoluminescence study of cadmium zinc telluride », *Ph.D dissertation, West Virginia University*, 2001.
- [4] J. Lee, N. C. Giles, D. Rajavel, et C. J. Summers, « Room-temperature band-edge photoluminescence from cadmium telluride », *Physical Review B*, vol. 49, n° 3, p. 1668-1676, janv. 1994, doi: 10.1103/PhysRevB.49.1668.
- [5] P. Capper, *Properties of narrow gap cadmium-based compounds*. London, 1995.
- [6] P. Horodyský et P. Hlídek, « Free-exciton absorption in bulk CdTe: Temperature dependence », *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, vol. 243, n° 2, p. 494-501, 2006, doi: 10.1002/pssb.200541402.
- [7] G. Fonthal, L. Tirado-Mejía, J. I. Marín-Hurtado, H. Ariza-Calderón, et J. G. Mendoza-Alvarez, « Temperature dependence of the band gap energy of crystalline CdTe », *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2000, doi: 10.1016/S0022-3697(99)00254-1.
- [8] F. Gemain, « Etudes spectroscopiques du dopage dans les matériaux II-VI pour les détecteurs infrarouge et les cellules photovoltaïques », Université Joseph Fourier - Grenoble I, 2012.
- [9] P. Hiesinger, S. Suga, F. Willmann, et W. Dreybrodt, « Excitation spectra of exciton luminescence in CdTe », *Physica Status Solidi (B)*, vol. 67, n° 2, p. 641-652, 1975, doi: 10.1002/pssb.2220670227.
- [10] S. P. Tobin *et al.*, « A comparison of techniques for nondestructive composition measurements in CdZnTe substrates », *Journal of Electronic Materials*, vol. 24, n° 5, p. 697-705, 1995, doi: 10.1007/BF02657981.
- [11] J. L. Reno et E. D. Jones, « Determination of the dependence of the band-gap energy on composition for Cd_{1-x}Zn_xTe », *Physical Review B*, vol. 45, n° 3, p. 1440-1442, 1992, doi: 10.1103/PhysRevB.45.1440.
- [12] D. J. Olego, J. P. Faurie, S. Sivananthan, et P. M. Raccah, « Optoelectronic properties of Cd_{1-x}Zn_xTe films grown by molecular beam epitaxy on GaAs substrates properties of Cd_{1-x}Zn_xTe films grown by molecular beam epitaxy on GaAs substrates », vol. 1172, p. 1-4, 1985, doi: 10.1063/1.96316.
- [13] K. Oettinger, D. M. Hofmann, Al. L. Efros, B. K. Meyer, M. Salk, et K. W. Benz, « Excitonic line broadening in bulk grown Cd_{1-x}Zn_xTe », *Journal of Applied Physics*, vol. 71, n° 9, p. 4523-4526, 2002, doi: 10.1063/1.350798.
- [14] F. G. Sanchez-Almazan *et al.*, « Temperature dependence of the band gap of Cd_{1-x}Zn_xTe alloys of low zinc concentrations », *Journal of Applied Physics*, vol. 79, p. 7713, 1996.
- [15] M. Prokesch et C. Szeles, « Accurate measurement of electrical bulk resistivity and surface leakage of CdZnTe radiation detector crystals », *Journal of Applied Physics*, 2006, doi: 10.1063/1.2209192.
- [16] J. P. Laurenti, J. Camassel, A. Bouhemadou, B. Toulouse, R. Legros, et A. Lusson, « Temperature dependence of the fundamental absorption edge of mercury cadmium telluride », *Journal of Applied Physics*, 1990, doi: 10.1063/1.345119.
- [17] Jeong, T. S. et Yu, P.Y., « Temperature Dependence of the Photocurrent in p-Type CdTe », *J. Korean, Phys. Soc.*, 2003.

- [18] R. Pässler, « Temperature dependence of fundamental band gaps in group IV, III-V, and II-VI materials via a two-oscillator model », *Journal of Applied Physics*, 2001, doi: 10.1063/1.1369407.
- [19] Y. P. Varshni, « Temperature dependence of the energy gap in semiconductors », *Physica*, vol. 34, n° 1, p. 149-154, 1967, doi: 10.1016/0031-8914(67)90062-6.
- [20] C. Hill, « SciPy », in *Learning Scientific Programming with Python*, Cambridge: Cambridge University Press, 2016, p. 333-401.
- [21] F. G. Sánchez-Almazan *et al.*, « Temperature dependence of the band gap of Cd_{1-x}Zn_xTe alloys of low zinc concentrations », *Journal of Applied Physics*, vol. 79, n° 10, p. 7713-7717, mai 1996, doi: 10.1063/1.362374.
- [22] A. Manoogian et J. C. Woolley, « Temperature dependence of the energy gap in semiconductors », *Canadian Journal of Physics*, vol. 62, n° 3, p. 285-287, mars 1984, doi: 10.1139/p84-043.

Annexe G

Mesures de cathodoluminescence et d'ellipsométrie effectuées à 300 K

Dans cette annexe, nous allons présenter les mesures de cathodoluminescence (CL) et d'ellipsométrie effectuées à 300 K. Puis la valeur de l'énergie de gap du CdTe extraite de nos mesures à 300 K est comparée à la littérature. La disparité observée dans la littérature parmi les valeurs de gap est discutée. Enfin, une loi d'évolution de l'énergie de gap du CdZnTe en fonction de la composition en zinc et de la température est proposée, celle-ci s'exprime à partir du gap du CdTe

1 Interprétation des spectres de cathodoluminescence à 300 K

Les spectres de CL des échantillons de CdTe et de CdZnTe à 300 K sont présentés sur la Figure 149. Les positions du maximum d'émission pour les trois échantillons sont présentées dans le Tableau 44. On observe que l'écart en énergie entre le pic d'émission du CdTe et des échantillons de CdZnTe A et B est très proche des écarts calculés à 80 K et 100 K (présenté dans le corps du manuscrit). On trouve en effet 21 meV et 29 meV. On constate aussi que la bande d'émission centrée autour de 1.4 eV est absente des spectres de CdTe et CdZnTe à 300 K.

Tableau 44 - Énergie correspondant au maximum d'émission pour les trois échantillons CdTe, CdZnTe A et CdZnTe B

	CdTe	CdZnTe A	CdZnTe B
<i>Énergie du maximum d'émission</i>	1.507 eV	1.528 eV	1.536 eV
<i>Gap obtenu à partir du fit du spectre de CL</i>	1.494 eV	1.512 eV	1.522

Le maximum de l'énergie correspondant au maximum d'émission dans le CdTe à 300 K est 6 meV en dessous de la valeur de l'énergie de gap la plus acceptée à 300 K dans la littérature, à savoir 1.513 eV [1]. En ajustant la courbe de CL à partir de l'expression de Li et al. [2], donnée par l'Eq. I-3 du chapitre 3 il est possible d'estimer la valeur de l'énergie de gap des différents échantillons de CdTe et CdZnTe. Les valeurs ainsi obtenues sont reportées dans le Tableau 44. L'utilisation de l'expression de Li et al. suppose que le processus dominant de recombinaison est de type bande à bande. Cependant, la nature du processus de radiatif à 300 K dans le CdTe reste débattue.

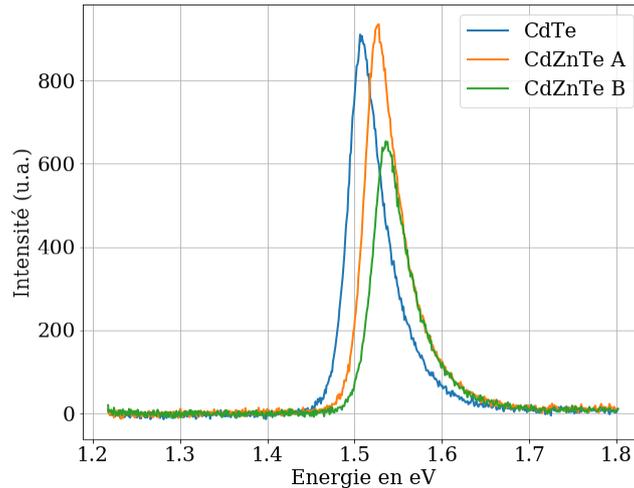


Figure 149 - Spectre de CL des échantillons de CdTe et de CdZnTe à 300 K

2 Mesure d'ellipsométrie à 300 K

L'indice de réfraction du CdTe à 300 K est comparé à la littérature sur la Figure 150. Les données de la littérature sont issues des travaux d'Adachi [3], Hildek et al. [4], Marple [5] et Finkman [6]. La valeur de n déduite de nos mesures est supérieure à celles reportées par la littérature.

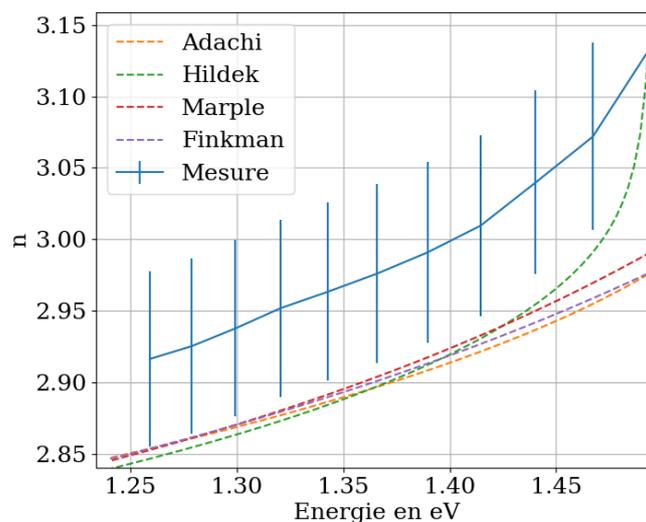


Figure 150 - Comparaison de l'indice de réfraction mesuré avec les données de la littérature

La valeur du coefficient d'extinction, k , à 300 K est comparée aux mesures d'Adachi sur la Figure 151. On observe un décalage énergétique du spectre d'Adachi par rapport à la valeur mesurée sur notre

échantillon de CdTe. L'origine de cette différence reste inexplicée. Par ailleurs, on constate que la valeur de k issue des mesures d'Adachi est bien supérieure à 0, ce qui traduit une forte absorption en dessous du gap du CdTe, où l'on s'attend à avoir une absorption proche de zéro.

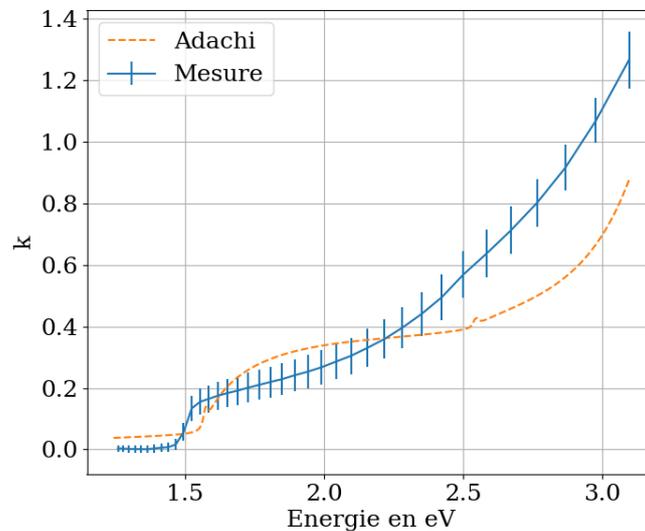


Figure 151 - Évolution du coefficient d'extinction en fonction de l'énergie dans le cas du CdTe à 300 K. Les mesures sont comparées à la littérature

Il est possible à partir des mesures d'ellipsométrie d'estimer le gap du CdTe à 300 K. Deux méthodes ont été appliquées pour déterminer $E_g^{CdTe}(T = 300 K)$. La première s'appuie sur le logiciel Complete EASE qui pilote l'ellipsomètre et détermine les fonctions optiques à partir de la mesure de ρ et de Δ . La seconde calcule le gap à partir du maximum de la dérivée du coefficient d'extinction. La première méthode donne une valeur de gap de 1.500 eV tandis que la seconde donne une valeur de 1.498 eV. Ces deux méthodes sont en bon accord. Ces méthodes supposent que l'absorption est associée aux porteurs libres (et non de nature excitonique).

Concernant l'échantillon de CdZnTe A, la partie réelle, $n(E)$ et la partie imaginaire, $k(E)$ de l'indice de réfraction complexe peuvent être comparées aux mesures d'Adachi [3]. De nouveau, on observe un décalage énergétique entre les deux mesures ainsi qu'une valeur de $n(E)$ mesurée dans cette thèse plus importante que celle d'Adachi. Les valeurs de l'énergie de gap du CdZnTe extraites de ces mesures sont les suivantes :

- 1.518 eV obtenue à partir de CompleteEASE
- 1.521 eV calculée à partir de la dérivée de k

Dans la suite, la valeur du gap du CdTe et du CdZnTe à 300 K sont discutées et comparées à la littérature.

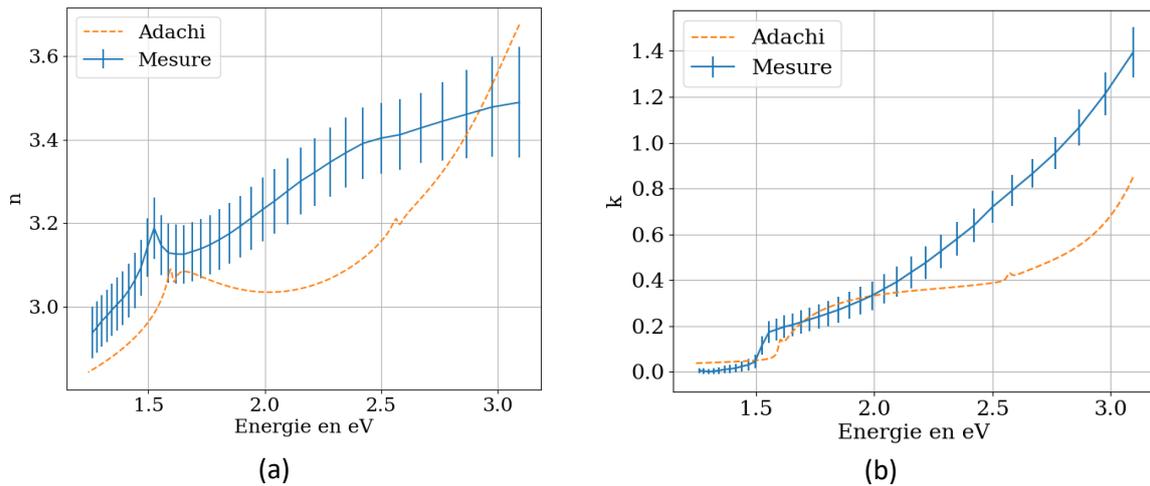


Figure 152 - Évolution de n (a) et k (b) à 300 K mesuré sur l'échantillon de CdZnTe A et comparés aux mesures d'Adachi et al. [3]

3 Discussion sur le gap du CdTe et du CdZnTe

3.1 Discussion sur le gap du CdTe à 300 K

Les valeurs de l'énergie de gap du CdTe à température ambiante reportées dans la littérature sont tracées sur la Figure 153. La valeur de gap la plus acceptée dans la littérature est de 1.513 eV [1]. Néanmoins, on observe une forte disparité parmi les valeurs publiées. Celle-ci peut s'expliquer par différents facteurs. Par exemple, la qualité de l'échantillon peut varier ou les méthodes et les modèles peuvent ne pas être adaptés. Ainsi, l'énergie de gap déterminée dans cette thèse à partir de l'expression de Li et al. [2] suppose une recombinaison de type bande à bande. Cependant, la nature des recombinaisons à 300 K dans le CdTe reste débattue. Ainsi, Lee et al. [1] associent le pic de luminescence à température ambiante à des émissions de nature excitoniques. Les valeurs de l'énergie de gap extraites des mesures de CL et d'ellipsométrie sur notre échantillon de CdTe sont néanmoins en bon accord avec les données reportées dans la littérature. Sur la Figure 153, les énergies de gap calculées à partir de nos mesures de PL sont issues d'une extrapolation des fits réalisés avec les expressions de Manoogian Wooley et Varshni (voir Annexe E).

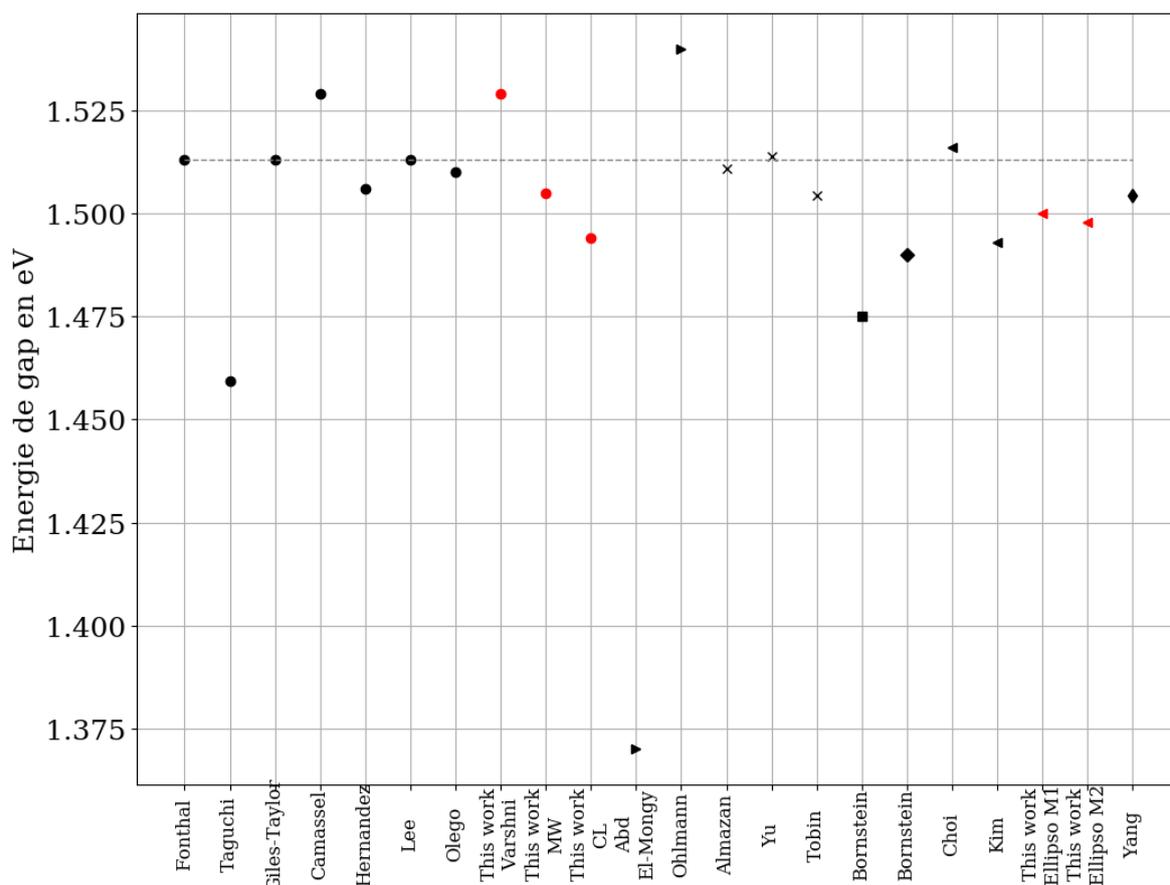


Figure 153 - Valeurs de l'énergie de gap du CdTe à 300 K reportées dans la littérature. En pointillé il s'agit de la valeur de gap la plus acceptée de 1.513 eV

3.2 Discussion sur le gap du CdZnTe

Plusieurs expressions de l'énergie de gap à température ambiante du CdZnTe en fonction de la composition en zinc ont été proposées dans la littérature [7]–[9]. Les valeurs de $E_g^{CdZnTe}(300\text{ K})$ calculées à partir de ces formules (pour une concentration en zinc de 3.6 % pour l'échantillon A et de 5.5 % pour l'échantillon B) sont reportées dans le Tableau 45. L'expression de Johnson et al. semble sous-estimer la valeur de l'énergie de gap comparée aux autres formules. En revanche, les expressions de Tobin et al. et Bouarissa sont en très bon accord.

A 4 K, nous avons calculé la différence d'énergie entre E_g^{CdTe} et E_g^{CdZnTe} . Celle-ci est égale à 19.6 meV et 29.3 meV pour l'échantillon de CdZnTe A et B respectivement. Par ailleurs, la différence d'énergie entre les maximums d'émission des spectres de CL à 300 K des échantillons de CdTe et CdZnTe est égale à 21 meV pour cristal A et 29 meV pour le cristal B. Ce qui est cohérent avec les résultats obtenus à basse température. Ainsi, on peut supposer que cette différence énergétique entre les deux échantillons reste constante sur la gamme de température allant de 4 K à 300 K [10]. Ainsi, il est possible de prédire la valeur de l'énergie de gap à température des échantillons de CdZnTe A et B en ajoutant cette différence énergétique à l'énergie de gap du CdTe $E_g(300\text{ K}) = 1.513\text{ eV}$. Les valeurs ainsi obtenues sont présentées dans le Tableau 45. Ces énergies sont en bon accord avec l'expression d'Olego et al. [8]

Tableau 45 – Valeurs de l'énergie de gap du CdZnTe à température. Calculées à partir de l'expression de Li et al. [2]. Déterminée à partir des équations de la littérature ainsi qu'à partir de la valeur du gap du CdTe à 300 K.

	CdZnTe A	CdZnTe B
<i>Maximum d'émission</i>	1.528 eV	1.536 eV
<i>Gap déterminé à partir du fit du spectre de CL</i>	1.512 eV	1.522 eV
<i>Gap estimé à partir de la formule de Tobin [11]</i>	1.527 eV	1.540 eV
<i>Gap estimé à partir de la formule de Bouarissa [9]</i>	1.527 eV	1.539 eV
<i>Gap estimé à partir de la formule de Olego [12]</i>	1.531 eV	1.544 eV
<i>Gap estimé à partir de la formule de Johnson [11]</i>	1.481 eV	1.492 eV
<i>Valeur de gap déterminée à partir du gap du CdTe à 300 K et de l'écart en énergie associé à chaque échantillon</i>	1.533 eV	1.543eV

Au cours ce chapitre, nous avons fait l'observation de que la différence entre les pics caractéristiques de luminescence restait constante sur l'ensemble de la gamme de température étudiée de 4 K à 300 K. Ainsi, nous proposons une loi d'évolution de l'énergie de gap du CdZnTe pour une faible concentration en zinc (en dessous de 6 %), celle-ci est donnée par l'équation (1).

$$E_g^{CdZnTe}(y, T) = E_g^{CdTe}(T) + 0.545y \quad (1)$$

Où $E_g^{CdTe}(T)$ décrit l'évolution avec la température de l'énergie de gap du CdTe et y est le taux de zinc dans l'alliage ternaire de CdZnTe. Le taux de zinc dans l'alliage a été calculé à partir de la formule de Tobin et al. Par ailleurs, le coefficient linéaire (0.545) est très proche du coefficient linéaire de la formule de Tobin et al égale à 0.546.

Références

- [1] J. Lee, N. C. Giles, D. Rajavel, et C. J. Summers, « Room-temperature band-edge photoluminescence from cadmium telluride », *Phys. Rev. B*, vol. 49, n° 3, p. 1668-1676, janv. 1994, doi: 10.1103/PhysRevB.49.1668.
- [2] Z.-F. Li, W. Lu, G. S. Huang, J. R. Yang, L. He, et S. C. Shen, « Microphotoluminescence mapping on CdZnTe: Zn distribution », *Journal of Applied Physics*, vol. 90, n° 1, p. 260-264, juill. 2001, doi: 10.1063/1.1378062.
- [3] S. Adachi et T. Kimura, « Optical Constants of Zn_{1-x}Cd_xTe Ternary Alloys: Experiment and Modeling », *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 32, n° Part 1, No. 8, p. 3496-3501, août 1993, doi: 10.1143/JJAP.32.3496.
- [4] P. Hlídek, J. Bok, J. Franc, et R. Grill, « Refractive index of CdTe: Spectral and temperature dependence », *Journal of Applied Physics*, 2001, doi: 10.1063/1.1385351.
- [5] D. T. F. Marple, « Optical Absorption Edge in CdTe: Experimental », *Phys. Rev.*, vol. 150, n° 2, p. 728-734, oct. 1966, doi: 10.1103/PhysRev.150.728.
- [6] E. Finkman et S. E. Schacham, « The exponential optical absorption band tail of Hg_{1-x}Cd_xTe », *Journal of Applied Physics*, vol. 56, n° 10, p. 2896-2900, nov. 1984, doi: 10.1063/1.333828.
- [7] S. P. Tobin *et al.*, « A comparison of techniques for nondestructive composition measurements in CdZnTe substrates », *JEM*, vol. 24, n° 5, p. 697-705, mai 1995, doi: 10.1007/BF02657981.
- [8] D. J. Olego, J. P. Faurie, S. Sivananthan, et P. M. Raccah, « Optoelectronic properties of Cd_{1-x}Zn_xTe films grown by molecular beam epitaxy on GaAs substrates », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 47, n° 11, p. 1172-1174, déc. 1985, doi: 10.1063/1.96316.
- [9] N. Bouarissa, « Pseudopotential calculations of Cd_{1-x}Zn_xTe : Energy gaps and dielectric constants », vol. 399, p. 126-131, 2007, doi: 10.1016/j.physb.2007.05.034.
- [10] S. Jain, « Photoluminescence study of cadmium zinc telluride », MS, West Virginia University Libraries, 2001.
- [11] S. P. Tobin *et al.*, « A comparison of techniques for nondestructive composition measurements in CdZnTe substrates », *Journal of Electronic Materials*, vol. 24, n° 5, p. 697-705, 1995, doi: 10.1007/BF02657981.
- [12] D. J. Olego, J. P. Faurie, S. Sivananthan, et P. M. Raccah, « Optoelectronic properties of Cd_{1-x}Zn_xTe films grown by molecular beam epitaxy on GaAs substrates », vol. 1172, p. 1-4, 1985, doi: 10.1063/1.96316.

Annexe H

Exemple de clusters observés lors des mesures FUR sous irradiation

Dans cette annexe, des exemples de clusters de pixels affectés par un proton sont présentés. Ces derniers ont été extraits des mesures sous irradiation effectuées avec le détecteur NIR50, le détecteur NIR800 et le détecteur H1RG de la mission spatiale ARIEL.

1 Détecteur NIR800 et NIR50

Des exemples de signal FUR de pixels affectés par un proton sont présentés sur la Figure 154 (a) et la Figure 155 (a). Sur ces figures, le signal du pixel central et celui de ces plus proches voisins sont exposés. La discontinuité observée dans les signaux FUR correspond à l'arrivée du proton sur le pixel. Les clusters associés extraits des images FUR sont reproduits sur la Figure 154 (b) et la Figure 155 (b). On observe que l'impact d'un proton affecte principalement le pixel sur lequel il est incident. De plus, on peut observer que le signal FUR du pixel sur lequel le proton est incident possède une pente négative après l'impact du proton (courbes bleues sur la Figure 154 (a) et Figure 155 (a)). Une explication basée sur le phénomène de persistance a été proposée dans le corps du manuscrit.

Ce phénomène a été observé lors des mesures effectuées avec le détecteur H1RG de la mission spatiale ARIEL. Il reste mal compris et doit être investigué.

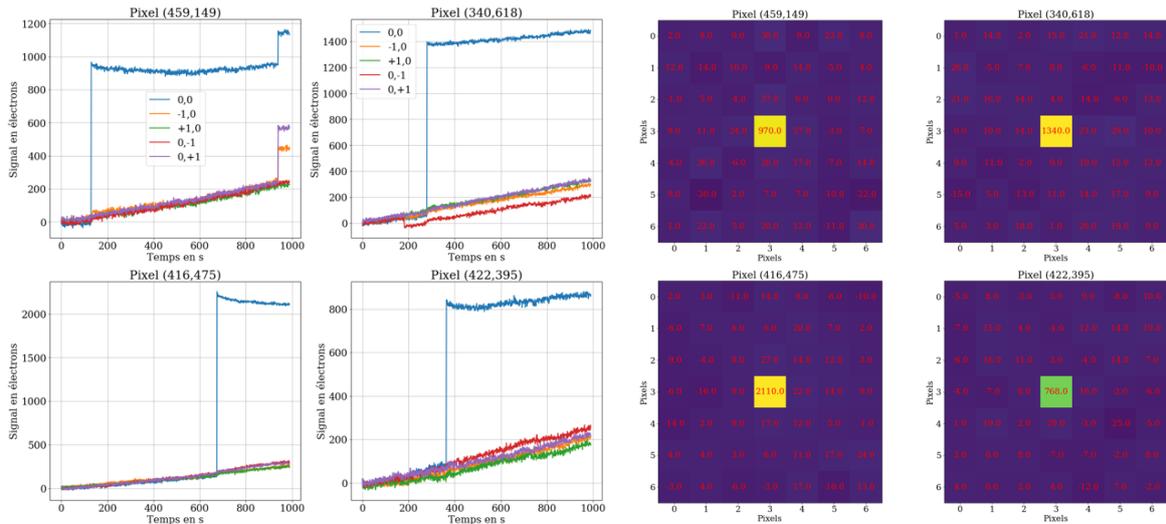


Figure 154 - (a) Exemple de signal FUR sous irradiation d'un pixel frappé par un proton et de ces plus proches voisins. (b) Exemple de clusters extraits des mesures FUR sur le détecteur NIR800. Les chiffres en rouges correspondent au nombre de porteurs collectés par pixels.

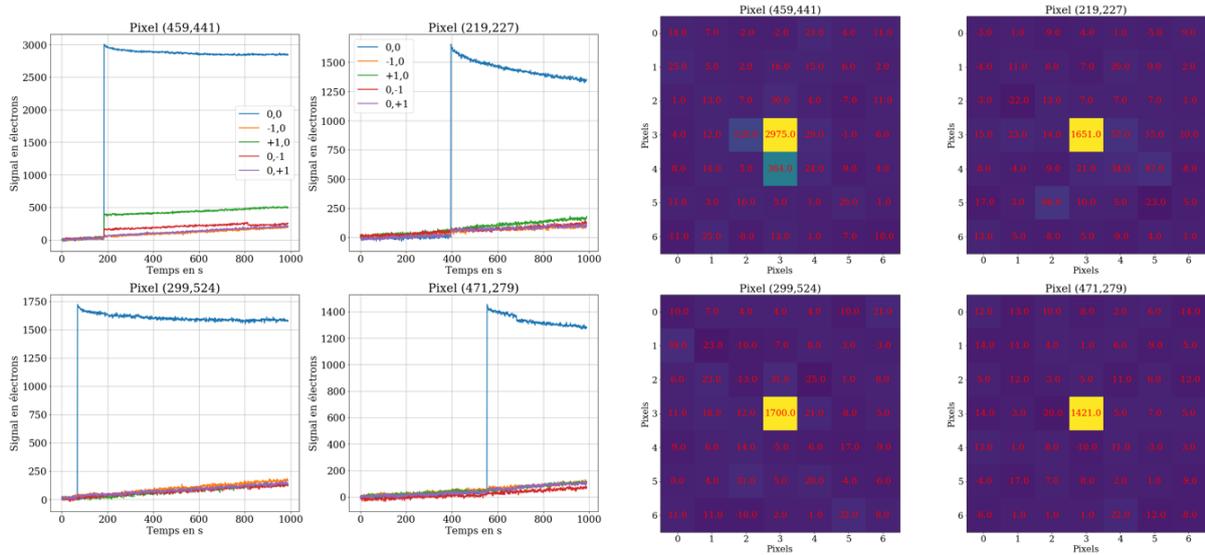


Figure 155 - (a) Exemple de signal FUR sous irradiation d'un pixel frappé par un proton et de ces plus proches voisins. (b) Exemple de clusters extraits des mesures FUR sur le détecteur NIR800. Les chiffres en rouges correspondent au nombre de porteurs

2 Détecteur H1RG de la mission ARIEL

Des exemples de clusters pixels sont présentés sur la Figure 156. On observe que les pixels centraux collectent une importante partie du signal. Le reste des charges générées dans la structure du détecteur est partagé entre les pixels voisins. A mesure que l'on s'éloigne du pixel central, la quantité d'électrons collectée par les pixels diminue. Cette conclusion est appuyée par l'étude du profil radial du cluster moyen présenté dans le corps du manuscrit.

Sur la Figure 157, est tracée l'évolution du signal en électrons en fonction du temps d'un cluster de pixels affectés par l'impact d'un proton. La courbe centrale, intitulée (0,0), correspond au pixel central, directement affecté par le proton. Les courbes autour concordent avec la position des pixels voisins. Ceux-ci sont repérés par leur position relative au pixel central. On observe une discontinuité dans le signal de chacun de ses pixels. Celle-ci est associée à l'impact du proton sur le détecteur. On constate que l'amplitude de la discontinuité est plus importante dans le pixel central.

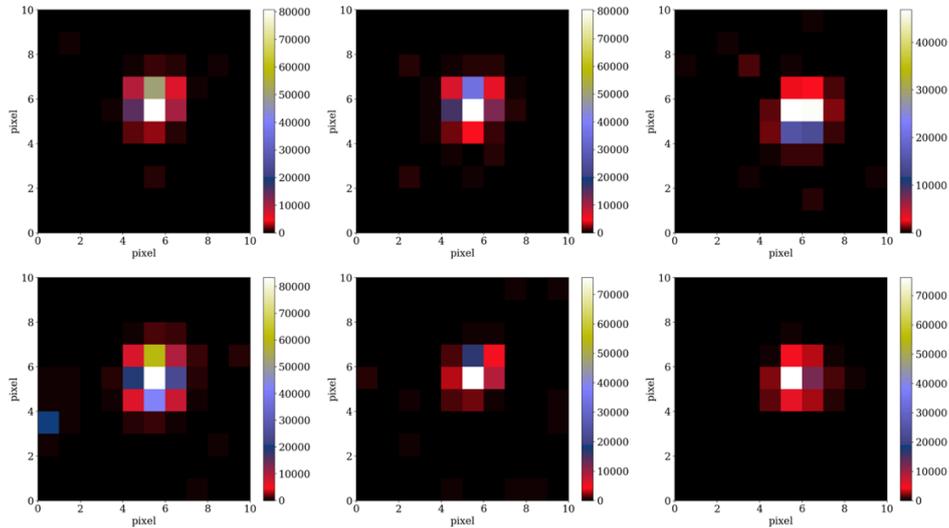


Figure 156 - Exemple de cluster de pixels 5x5 extraits par SEXtractor des images sous irradiation. L'échelle est en électrons

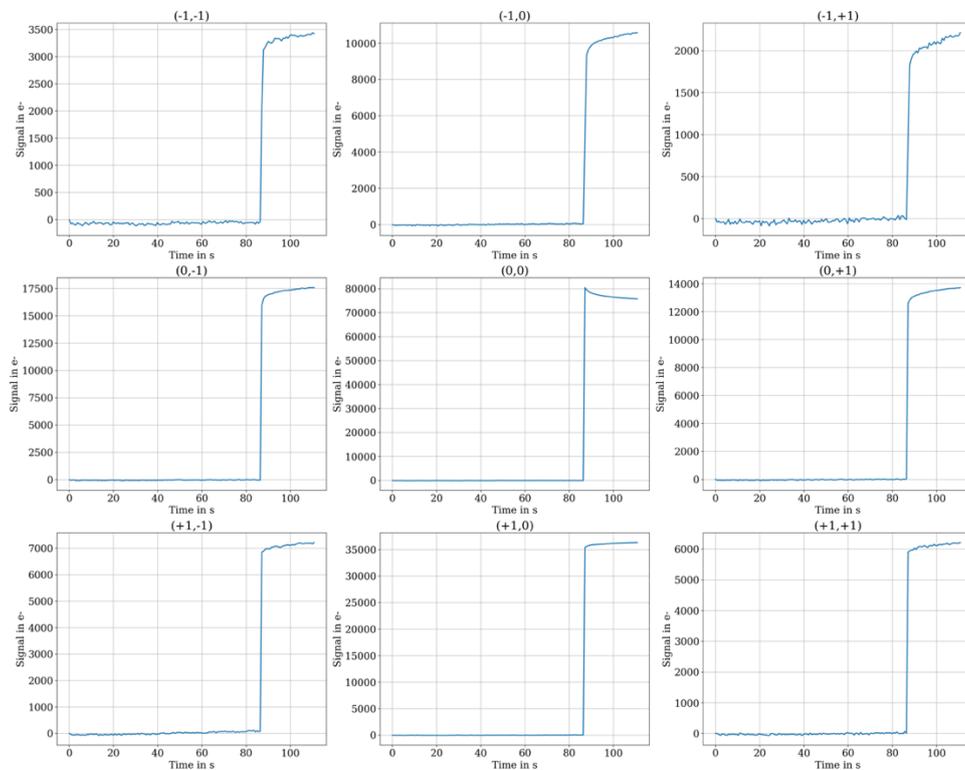


Figure 157 - Évolution du signal des pixels appartenant au cluster n°2 de la Figure 14. Sur la figure centrale est tracée l'évolution du signal du pixel central. Les figures autour correspondent au signal des pixels voisins, dont la position est repérée par (ligne, colonne).

Par ailleurs, après l'impact du proton, le signal du pixel central décroît. En revanche, les pixels dans le voisinage du pixel central ne présentent pas une évolution décroissante de leur signal. En revanche, la courbe d'évolution du signal après l'impact du proton, présente une évolution exponentielle. Ceci peut être associé à un phénomène de persistance : des charges générées par le passage du proton se trouvent piégées (dans le matériau ou au niveau des interfaces), puis se libèrent par agitation thermique avant d'être collectées.

Ainsi, la pente du signal d'un pixel après l'impact d'un proton est décroissante. Ceci est illustré sur la Figure 158 (a). Les pentes de l'évolution du signal avant et après l'impact du proton ont été déterminées à partir d'une régression linéaire. L'historgramme des pentes des pixels avant et après impact est présenté sur la Figure 158 (b). On observe que la pente est positive avant l'impact (ce qui est attendu dans la mesure où le détecteur intègre du signal). En revanche, après l'impact du proton (distribution orange sur la Figure 158 (b)), on s'aperçoit que les pentes deviennent négatives. Ces distributions ont été réalisées en sélectionnant les pixels directement frappés par l'impact d'un proton, pour lesquels le temps entre deux impacts était suffisamment long (supérieur à 7.38 s) pour pouvoir effectuer une régression linéaire.

Par ailleurs, la valeur de la pente en fonction de l'amplitude de la discontinuité mesuré sur le pixel est présentée sur la Figure 159. On observe un lien entre ces deux grandeurs : plus l'amplitude de la discontinuité est grande plus la pente est négative. De plus, on observe une saturation de l'amplitude autour de 70 000 électrons qui correspond à la quantité de charges maximale que la diode peut accumuler avant de saturer (on parle de *full well* ou *charge handling capacity*). Bien que l'origine de la pente décroissante semble être associée à la déformation de la zone de charge d'espace induite par l'irradiation, les mécanismes physiques à l'origine de ce phénomène restent mal compris.

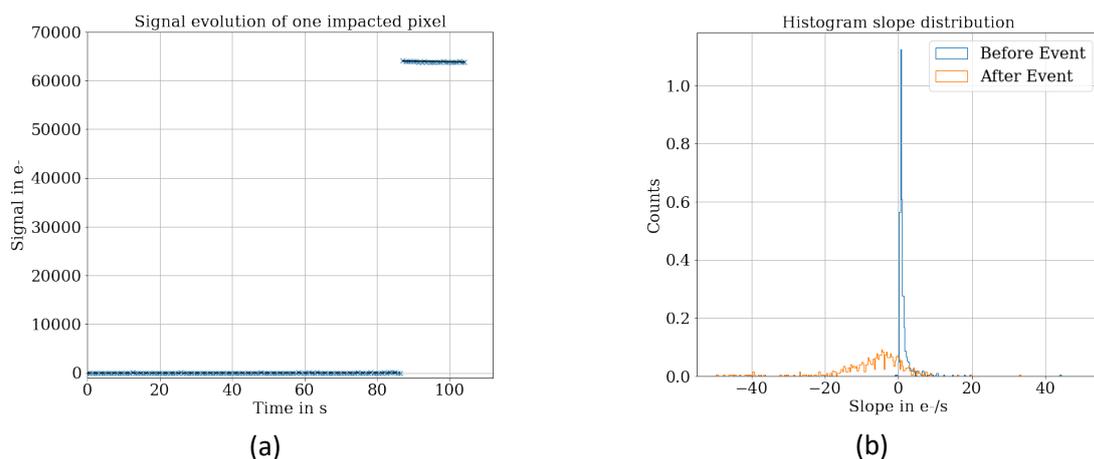


Figure 158 - (a) Évolution du signal d'un pixel sur lequel un proton a été incident (b) Histogramme des pentes du signal de pixels affectés par un proton avant et après l'impact.

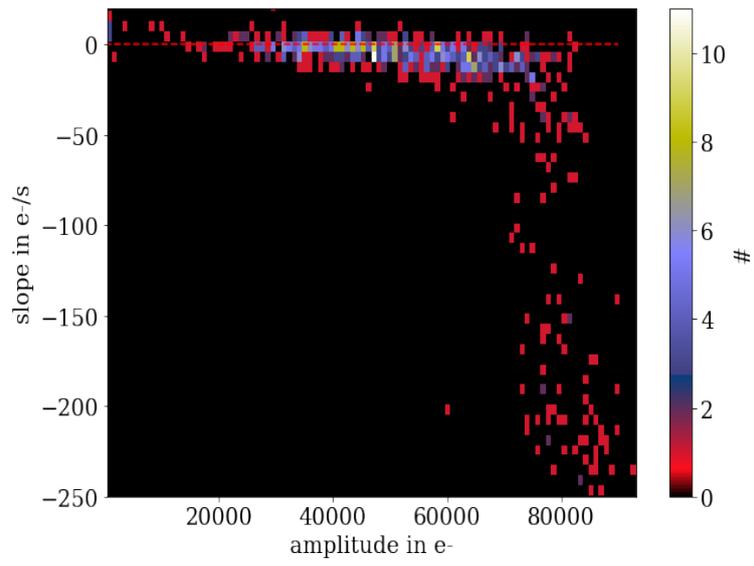


Figure 159 - Évolution de la pente en (e-/s) en fonction de l'amplitude de la discontinuité

Titre : Modélisation et caractérisation expérimentale du phénomène de luminescence induit par l'irradiation de protons dans les détecteurs infrarouges de technologie HgCdTe en environnement spatial.

Mots clés : HgCdTe, Infrarouge, Radiation, Luminescence, CdZnTe

Résumé : Ce manuscrit présente le travail de thèse effectué dans le cadre de la préparation à la spatialisation des détecteurs infrarouges ALFA (*Astronomical Large Format Array*) : des détecteurs matriciels 2048×2048 pixels au pas de $15 \mu\text{m}$ composés d'un matériau absorbant en HgCdTe crû sur un substrat de CdZnTe. L'étude se porte en particulier sur le produit de l'interaction des protons avec le substrat de CdZnTe à l'origine de la pollution des images sous irradiation. Le retrait complet du substrat résout radicalement le problème mais c'est une étape délicate dans la fabrication des détecteurs. L'objectif de cette thèse est d'étudier la réponse sous irradiation de détecteurs HgCdTe dont le substrat n'est pas complètement retiré.

Cette thèse est organisée en trois étapes. La première concerne la description du modèle développé, allant de la modélisation du dépôt d'énergie au transport des porteurs dans la structure du détecteur, mêlant des méthodes Monte Carlo, analytiques et d'éléments finis.

La seconde étape concerne la description des mesures de propriétés matériaux du CdZnTe absentes de

mesures de propriétés matériaux du CdZnTe absentes de la littérature aux températures cryogéniques de fonctionnement des détecteurs infrarouges étudiés dans cette thèse (80 K et 100 K). Ces propriétés matériaux sont ensuite utilisées comme paramètres dans l'application du modèle.

Enfin, la dernière partie de la thèse, décrit la campagne d'irradiation préparée et effectuée dans cette étude. Lors de cette campagne deux détecteurs de technologie similaire à ALFA de plus petit format et ayant des épaisseurs de substrat différentes ($50 \mu\text{m}$ et $800 \mu\text{m}$ de substrat) ont été irradiés. Les résultats expérimentaux sont en bon accord avec les données simulées : on observe une augmentation du nombre de pixels affectés par un proton avec l'augmentation de l'épaisseur du substrat. Les impacts de protons d'énergie 63 MeV présentent une géométrie circulaire dont le rayon peut atteindre 110 pixels dans le cas d'un détecteur avec $800 \mu\text{m}$ de substrat. Cette importante pollution, prédite par le modèle, est attribuée à l'émission de photons dans le substrat dont l'énergie est inférieure à l'énergie de gap du CdZnTe.

Title: Modelling and experimental characterization of luminescence induced by protons irradiation in HgCdTe-based infrared detectors in space environment.

Keywords : HgCdTe, Infrared, Radiation, Luminescence, CdZnTe

Abstract: This manuscript presents the work carried out within the framework of the preparation for the spatialization of ALFA (*Astronomical Large Format Array*) infrared detectors which are 2048×2048 pixels detectors matrices with $15 \mu\text{m}$ pixel pitch composed of an HgCdTe absorbing material grown on a CdZnTe substrate. The study focuses on the product of the interaction of protons with the CdZnTe material at the origin of the pollution of images under irradiation. The complete removal of the substrate radically solves the problem but it is a delicate step in the fabrication process. The objective of this thesis is to study the response under irradiation of HgCdTe detectors whose substrate is not completely removed.

This thesis is organized in three parts. The first one concerns the description of the model developed going from the modeling of the energy deposition to the transport of the carriers in the detector structure, using Monte Carlo, analytical and finite element methods.

The second part concerns the description of measurements of CdZnTe material properties, which could not be found in the literature at the cryogenic operating temperatures of the infrared detectors studied in this work (80 K and 100 K). These material properties are then used as parameters in the application of the model.

Finally, the last part of the manuscript describes the irradiation campaign prepared and carried out in this study. During this campaign, two detectors having different substrate thicknesses ($50 \mu\text{m}$ and $800 \mu\text{m}$ substrate) with ALFA like technology but with smaller format were irradiated. The experimental results are in good agreement with the simulated data: an increase in the number of pixels affected by a proton is observed with increasing substrate thickness. This increase in cluster size is predicted by the model, and is attributed to the emission of photons in the substrate whose energy is lower than the gap energy of the CdZnTe