

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université de KHEMIS MILIANA



Faculté des Sciences et de la Technologie
Département des Sciences de la Matière

Mémoire du Projet de Fin d'Etudes
Pour l'obtention de diplôme

Master

En

Physique

Spécialité :

Physique Théorique

Titre :

Application de la méthode de Monte Carlo à l'étude de
l'interaction rayonnement-matière codes TRIM et Casino

Réalisé par : Bettou Nadia

Encadré par : Dr Ouerdane Abdallah

Année Universitaire 2015/2016

Remerciements

Mon premier remerciement va vers Allah scubhancu Wataala

Je tiens à remercier vivement mon encadreur, Mr le Docteur Ouerdane

Abdallah, pour sa gentillesse, sa disponibilité et d'avoir accepté d'encadrer ce mémoire et de m'avoir aidé à réaliser ce travail.

Je souhaiterais également remercier mes professeurs de la Faculté des Sciences et de la Technologie.

Je remercie M^{lle} K. Redaouia, enseignante à l'Université de Khémis Miliana d'avoir accepté de présider le jury de la soutenance de ma thèse.

- *Mes remerciements à Monsieur Salah Eddine Bentriddi, Maître de conférences à l'université de Khémis Miliana d'avoir accepté d'être parmi les membres de mon jury*

Et puis, un remerciement très chasteux à Mon mari et mes parents pour m'avoir aidé dans mes études.

Dédicace

Merci Allah << mon Dieu de m' avoir donné la capacité d' écrire et de réfléchir, la force d' y croire, la patience d' aller jusqu' au bout de mes rêves et trouver le bonheur.

Je Dédie ce mémoire à mon père << que Dieu ait son ame >> qui a été mon support durant toutes les années d' étude, qui a veillé tout au long de ma vie à m' encourager, à me donner de l' aide et à me protéger.

À ma mère qui a éclairé mon chemin et qui m' a encouragée et soutenue tout au long de mes études

Que Dieu me la garde et me la protège.

À mon mari: Sid Ahmad

À ma petit fille: Anfal

À mes frères: Amine, Hicham, Mahdi, AbdArazak.

À ma sœur: Nassima

À mes amies: Loubida, Soumia, Asma.

À tous ceux qui m' aiment

À tous ceux que j' aime.

Table des matières

Introduction générale	1
Chapitre I : Théorie de la méthode de Monte Carlo	3
I.1 Introduction.....	4
I.2 Théorie de la méthode de Monte Carlo.....	5
I.2.1 Notions Fondamentales sur les semi-conducteurs.....	5
I.2.2 Interaction électron-matière.....	6
I.2.3 Volume de Dissipation de l'Energie de l'Electronique par Chocs Inélastique...	10
I.2.4 Parcours Electronique.....	11
I.2.5 Energie de Formation d'une Paire Electron-trou.....	12
I.2.6 Estimation de la Densité des Porteurs en Excès.....	12
I.2.7 Phénomène de Recombinaison.....	12
I.2.8 Les processus de recombinaison.....	13
I.3 Interaction ion-matière.....	14
I.3.1 Les différents mécanismes d'interaction ion-matière.....	14
I.3.2 Perte d'énergie nucléaire.....	15
I.3.3 Perte d'énergie électronique.....	16
I.3.4 Perte d'énergie totale.....	17
I.3.5 Principaux phénomènes se produisant dans la matière.....	18
I.4 La pulvérisation ionique.....	19
I.4.1 Le mécanisme de pulvérisation.....	19
I.5 Le rendement de pulvérisation.....	21
I.5.1 Le modèle de Sigmund.....	21
I.5.2 Influence de l'angle d'incidence.....	24
I.5.3 Influence de la structure du matériau.....	26
I.5.4 Pulvérisation de matériaux biatomiques.....	27
I.6 Conclusion.....	28

Chapitre II Simulation de l'interaction Ions –matière Code TRIM et SRIM.....	29
II.1 Propriétés structurales des composés III.....	30
II.2 Dispositifs à base des composés III-V.....	31
II.2.1 Effet des ions argon Ar^+ sur les surfaces de GaAs.....	32
II.2.2 Simulation du processus par les codes TRIM et SRIM.....	33
II.3 Bombardement ionique de GaAs avec la particule hélium.....	40
II.4 Protection des composante par une couche d'oxyde transparent TCO.....	44
II.5 implantation d'ions H^+ dans le Silicium.....	46
II.5.1 Introduction.....	46
II.5.2Propriétés du silicium.....	46
II.6 Simulation de l'Implantation d'ions Hydrogène.....	48
II.6.1 Perte d'énergie par implantation d'ions Hydrogène.....	48
II.7 Conclusion.....	55
Chapitre III : Simulation de l'interaction électron-matière logiciel CASINO.....	56
III.1 Introduction.....	57
III.2 Principe du mode opératoire.....	58
III.3 Résultats et discussions.....	59
III.3.1 Interaction du faisceau des électrons avec la surface du matériau GaAs.....	61
III.3.2 Production de RX par les électrons sur la surface du $SnO_2/ GaAs$	63
III.3.3 Interaction des rayons X avec la matière.....	66
III.4 Absorption des rayons X par la matière.....	67
III.5 Prédiction de la morphologie de la surface à l'aide du programme casino...	74
III.6 Conclusion.....	78
IV. Conclusion générale.....	79

ملخص

طريقة مونتني كارلو هو أداة فعالة لمحاكاة مسارات عشوائية من الأيونات والإلكترونات في قذف سطح مركبات أشباه النواقل بواسطة حزمة من الأشعة الأيونية أو الإلكترونية. بعد تذكير نظري يصف تقنية مونتني كارلو على قذف الأيونات والإلكترونات، قمنا باستخدام برامج TRIM (نقل وجمع الأيونات والمادة) (مونتني كارلو محاكاة مسار الإلكترون في المواد الصلبة) لمحاكاة التفاعل مع المادة، على التوالي لمحاكاة التفاعل الأيونات مع المادة وتفاعل الإلكترونات مع المادة. والنتائج التي تم الحصول عليها في جداول ومنحنيات كما قمنا بسررد الظواهر المختلفة المتعلقة بالسلطة المطلقة، المسافة بين الأيونات والمادة وآثار الأشعة X بواسطة حزمة من الأشعة الإلكترونية. تتم مقارنة النتائج باستخدام المجاهر MEB و تنشيط المواد أشباه النواقل لصناعة المكونات الإلكترونية والضوئية.

Résumé

La méthode de Monte Carlo est un outil efficace pour la simulation des trajectoires aléatoires des ions et des électrons lors des bombardements de la surface de composés semi-conducteurs par des faisceaux d'ions ou d'électrons. Après un rappel théorique décrivant la technique de Monte Carlo relative au bombardement ionique et électronique, on a utilisé des logiciels TRIM (Transport and range of Ions in Mater) et CASINO (Monte Carlo Simulation of electroN trajectory in sOlid) pour simuler respectivement l'interaction ions avec la matière et l'interaction des électrons avec matière. Les résultats obtenus sont donnés sous formes de tableaux et sous formes de courbes relatant les différents phénomènes liés au pouvoir d'arrêt, la distance parcourue des ions dans la matière et les effets de génération de rayon X par les faisceaux des électrons. Les résultats sont comparés avec ceux de l'utilisation des microscopes MEB et du dopage des matériaux semi-conducteurs pour la fabrication des composants électroniques et optoélectronique

Abstract:

The Monte Carlo method is an effective tool for the simulation of random trajectories of ions and electrons when the surface of semiconductor compounds were submitted to ions and electron beams bombardment. After a theoretical reminder describing the Monte Carlo technique on the ion and electron bombardment, we use TRIM software (Transport of Ions and range in Mater) and Casino program (Monte Carlo Simulation of electroN trajectory in sOlid) to simulate the interaction respectively with ions in matter and with electron in matter. The results are given as tables and as curves relating the different phenomena related to stopping powers, the distance of ions in matter and the generating of RX effects by electrons beam. The results were compared with TEM microscopy and doping of materials for the manufacturing of electronic and optoelectronic devises.

Introduction générale :

Notre travail consiste à étudier la méthode de Monte Carlo en vue de simuler les trajectoires des particules (électrons, ions) dans la matière. Les cibles choisies sont des semi-conducteurs tels que le silicium et GaAs très utilisés en énergie solaire photovoltaïque, en l'électronique et en optoélectronique [1].

Les techniques de Monte Carlo sont couramment utilisées en physique des particules, où des simulations probabilistes permettent d'estimer la forme d'un signal ou la sensibilité d'un détecteur. La comparaison des données mesurées à ces simulations peut permettre de mettre en évidence des caractéristiques semblables à celle des caractéristique réalisées par des systèmes de mesure expérimentaux.

Le véritable développement des méthodes de Monte-Carlo s'est effectué sous l'impulsion de John Von Neumann et Stanislaw Ulam notamment, lors de la seconde guerre mondiale et des recherches sur la fabrication de la bombe atomique. Notamment, ils ont utilisé ces méthodes probabilistes pour résoudre des équations aux dérivées partielles dans le cadre de la Monte-Carlo N-Particule transport (MCNP) [2].

Le bombardement d'un semi-conducteur par un faisceau d'électrons donne naissance à divers phénomènes. D'un point de vue global on peut les diviser en deux volets, des dispersions élastiques et d'autres inélastiques. La diffusion ou la dispersion élastique des électrons par les atomes donne naissance à des électrons rétrodiffusés, où les électrons changent de direction sans que leur énergie change, c'est le phénomène de rétrodiffusion où il est utilisé dans le Microscopes à Balayage Electronique très connu sous abréviation (MEB)[3]. Cette simulation va se faire avec le logiciel Casino élaboré par le savant canadien D. Drouin et al.[4].

Le bombardement d'une surface solide par des ions primaires s'accompagne d'une séquence d'interactions au cours desquelles les ions primaires transfèrent tout ou une partie de leur énergie. L'ion incident peut parcourir dans le solide une certaine distance, dissiper son énergie avant d'être finalement arrêtée ou éjectée du solide. Nous allons discuter dans notre travail les deux types d'interactions qui sont mises en jeu entre les ions énergétiques et les atomes du solide et qui provoquent le ralentissement des ions en utilisant le logiciel TRIM (Transport and Range of Ions in Mater) et SRIM (Stopping and Range of Ions in Mater) élaborés par le savant allemand James Ziegler [5].

Dans un premier chapitre nous donner un rappel sur la théorie sur la méthode de Monte Carlo concernant l'interaction de la matière avec les particules chargée et en particulier avec les électrons et les ions. Les formules fondamentales relatives aux deux interactions électrons-matière et ions-matière seront rappelées.

Dans un deuxième chapitre on utilise le logiciel TRIM et SRIM permettant de simuler les interactions ions-matière. Les différents phénomènes comme les défauts Frenkel les vacances créés par les faisceaux d'ions, les distances parcourues par les ions dans leurs trajectoires, les phonons ; la perte d'énergie des ions seront traités. On s'intéressera à leurs courbes de variation avec l'énergie cinétique des ions incidents sur la surface de différents composants semi-conducteurs de notre choix comme le GaAs et le SnO₂ [6,7].

Le troisième chapitre sera consacré au logiciel casino qui en plus de la description de son emploi, nous enregistrons les différentes courbes de rayon X émises par la matière lors de son interaction avec le faisceau des électrons incidents. On s'intéresse aux variations des intensités des rayons X avec l'énergie du faisceau des électrons incidents sur la surface des matériaux étudiés tels que SnO₂ et GaAs.

CHAPITRE I

Théorie de la méthode de Monte Carlo

I.1 Introduction

On désigne de manière générale, sous le nom de "méthode de Monté Carlo", les modes de résolution des problèmes faisant appel aux variables aléatoires trop complexes pour être résolus analytiquement. La méthode est applicable lorsque le processus global peut être décomposé en séquences de processus élémentaires, corrélés ou non, et décrits chacun par une ou plusieurs variables aléatoires de fonction de densité de probabilité connue. Elle consiste à simuler le processus par la génération successive de valeurs typiquement arbitraires pour les variables distribuées aléatoirement suivant leurs fonctions de densité de probabilité respectives [8].

Le premier problème qu'on envisage de résoudre est lié à l'interaction ions –matière (dopage, implantation des ions, nettoyage de la surface des semi-conducteurs). La matière est en générale un semi-conducteur tel que le silicium ou le GaAs qui sont les matériaux les plus utilisés dans la fabrication des composants électroniques et optoélectroniques [9,10].

La connaissance du profil de dopage du dopant constitue une étape clé dans l'amélioration des propriétés électriques du composant, le moyen expérimental le plus utilisé et connu dans le domaine de la microélectronique est la technique d'analyse SIMS (Spectroscopie de masse d'ions secondaire), une méthode très précise et fiable, mais cette méthode a l'inconvénient d'être destructive, le matériau est détérioré, et par conséquent sera inutilisable. Alors pour contourner ce problème, on propose dans ce travail un moyen théorique basé sur des méthodes de simulation numérique appelée méthode de Monté Carlo et utilisant un code appelé « Code TRIM », capable de reproduire le plus fidèlement possible les profils de concentration de dopant dans des films de semi-conducteurs [11]. On donnera les principales théories de l'arrêt des ions dans un matériau.

Deux types d'interactions physiques peuvent se produire, chacun d'eux étant prédominant dans un domaine qui dépend des valeurs de l'énergie incident de l'ion et de sa masse atomique. Ces deux processus de pertes énergétiques sont : la collision nucléaire et la collision électronique. La première est élastique et met à contribution les électrons de la cible, de fait, les modélisations du ralentissement de l'ion dans le matériau vont être étudiés séparément et les additionner ensuite pour déterminer le pouvoir d'arrêt total [5].

Le deuxième problème à résoudre est lié à l'interaction des électrons avec la matière. On considère toujours la matière comme étant des semi-conducteurs dont les surfaces apparentes sont sujettes à des bombardements par des faisceaux d'électrons en vue de la caractériser ou de reproduire ces surfaces sous forme d'images donnant la morphologie et la porosité [3,4].

Durant ces dernières années, la plus part des méthodes modernes d'analyse et de caractérisation des matériaux semi-conducteurs prennent la voie de la microscopie électronique à balayage (MEB) sous ces différents modes de sortie. Cependant dans la caractérisation, la connaissance des propriétés électroniques et optiques est d'une importance majeure pour résoudre les problèmes posés par les matériaux micro-optoélectroniques, et semi-conducteurs qui sont requis à l'industrie électronique et la nanotechnologie [12,13].

En effet, l'interaction électron-matière offre la possibilité de déterminer avec succès des informations quantitatives et qualitatives à propos des paramètres électriques et optiques des matériaux. L'étude de l'arséniure de Gallium (GaAs) par la Cathodoluminescence (CL) exige une bonne simulation fiable et exacte du signal CL en fonction de ces paramètres, c'est pour ça que nous avons choisi la méthode Monte Carlo(MC) comme méthode de simulation grâce aux avantages qu'elle nous donne dans ce genre de phénomène [9,10].

Les équations gérant le mouvement des électrons à l'intérieur du semi-conducteur et la distribution des porteurs doivent être aussi reliées aux processus de la recombinaison des porteurs en excès [14].

Dans ce travail nous avons calculé la profondeur de pénétration ainsi que le parcours électronique (la trajectoire des électrons) dans le GaAs et leurs variations en fonction de l'énergie d'accélération en utilisant un logiciel dénommé CASINO.

I.2 Notions Fondamentales sur les semi-conducteurs

I.2.1 Théorie de la méthode de Monte Carlo

Un semi-conducteur est un matériau à l'état solide ou liquide, qui conduit l'électricité à température ambiante, mais moins aisément qu'un métal conducteur. La conductivité électrique désigne la capacité d'un corps à conduire un courant électrique lorsqu'une tension lui est appliquée. C'est l'une des propriétés physiques qui varie le plus d'un corps à l'autre. Des métaux, tels que le cuivre, l'argent et l'aluminium, sont d'excellents conducteurs. Au contraire, des isolants tels que le diamant et le verre sont de mauvais conducteurs. Aux basses températures, les semi-conducteurs purs se comportent comme des isolants. A des températures élevées ou en présence d'impuretés ou de lumière, la conductivité des semi-conducteurs s'accroît fortement, pouvant même devenir comparable à celle des métaux. Les propriétés physiques des semi-conducteurs à étudier à l'état physique solide. Les principaux semi-conducteurs sont l'arséniure de gallium (GaAs), le silicium (Si), le germanium(Ge), le sélénium(Se), et le séléniure de zinc(ZnSe), l'oxyde de zinc(ZnO), le tellure de

cadmium(CdTe). L'accroissement de la conductivité en fonction de la température, de la lumière ou des impuretés s'explique par une augmentation du nombre d'électrons de conduction, qui transportent le courant électrique [15].

Dans un semi-conducteur pur tel que le silicium, les électrons périphériques d'un atome sont mis en commun avec les atomes voisins pour établir des liaisons covalentes qui assurent la cohésion du cristal. Ces électrons périphériques, dits électrons de valence, ne sont pas libres de transporter le courant électrique. Pour produire des électrons de conduction, on expose à la température ou à la lumière les électrons périphériques, afin de rompre les liaisons covalentes: les électrons sont alors mobiles. Défauts ainsi créés, appelés « trous » ou « lacunes », participent au flux électrique. On dit que ces trous sont porteurs d'électricité positive. Ces lacunes expliquent l'augmentation de la conductivité électrique des semi-conducteurs avec la température [16].

L'ajout d'impuretés au semi-conducteur ou dopage, est un autre moyen d'augmenter la conductivité électrique du corps. Les atomes du matériau de dopage ou dopant (donneurs ou accepteurs d'électrons), et ceux de l'hôte ont un nombre différent d'électrons périphériques. Le dopage produit ainsi des particules électriques chargées positivement (type P) ou négativement (type N) [17].

I.2.2 Interaction électron-matière

L'électron est une particule élémentaire constitutive, avec les protons et les neutrons, des atomes. L'électron est l'un des constituants fondamentaux de la matière, au même titre que les quarks. Il fait partie de la famille des leptons, qui comprend également le muon, le tauon, et les neutrinos. De plus, les électrons sont des fermions car leur spin est de $1/2$. Le concept de spin est lié à la théorie quantique, que nous devons au physicien allemand Max Planck, qui a découvert la discontinuité de l'énergie en introduisant la notion de quanta, ainsi qu'au physicien français Louis de Broglie, prix Nobel en 1929 pour avoir découvert, en 1924, la nature ondulatoire des électrons [18].

Les électrons ont une masse d'environ $9,1083 \times 10^{-28}$ g et une charge électrique élémentaire de $1,602 \times 10^{-19}$ C (coulombs). La charge de l'électron est l'unité de base en électricité. Les électrons possèdent un moment magnétique qui est égal à $0,92827 \times 10^{-23}$ A.m², et un spin demi-entier caractéristique des fermions. Aussi, l'électron satisfait au principe d'exclusion de Pauli, qui permet la construction d'édifices atomiques stables et qui est à l'origine de la

classification périodique des éléments. L'antiparticule de l'électron est le positron (ou positon), qui se manifeste dans la radioactivité bêta, ou dans l'annihilation des rayons gamma par création de paires électron-positron.

Le bombardement d'un semi-conducteur par un faisceau d'électrons donne naissance à divers phénomènes. D'un point de vue global on peut les diviser en deux volets, des dispersions élastiques et d'autres inélastiques [19]. La diffusion ou la dispersion élastique des électrons par les atomes donne naissance à des électrons rétrodiffusés, où les électrons changent de direction sans que leur énergie change, c'est le phénomène de rétrodiffusion où il est utilisé dans le MEB pour le contraste du nombre atomique et les effets de diffraction. Figure I.1

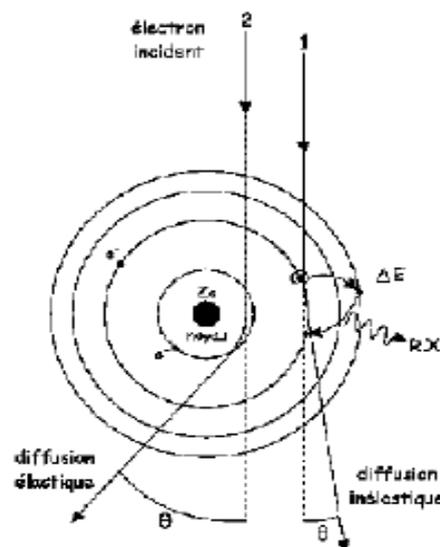


Figure I.1 : schéma représentant la diffusion élastique et inélastique.

Les collisions inélastiques des électrons d'atomes cibles, qui sont éjectés de leurs orbites, avec une perte d'énergie et un faible transfert de vitesse et qui provoquent une dispersion inélastique donnant naissance à une grande variété de signaux et de processus utiles tel que : schématisés sur figure I-1.

-Electrons secondaires

Les électrons secondaires(SE) sont ceux générés par l'atome cible après leurs collisions avec le faisceau incident. Ces électrons ont une énergie de l'ordre de 500 eV et avant de pouvoir quitter l'échantillon, ils subissent encore à une perte aléatoire d'énergie. Ce phénomène a lieu

pour des distances plus proches à la surface (de 5 à 10 nm de la surface). Donc, ces électrons donnent des informations spécifiques dans la zone d'interaction avec la matière.

-Electron rétrodiffusés

Le faisceau électronique incident subit aux collisions élastiques et inélastiques avec la matière. Quelques électrons peuvent rebrousser son chemin en sortant du matériau. Ce sont les électrons rétrodiffusés. L'émission de ces derniers, avec une fraction de perte d'énergie généralement de 50% à 80% par rapport à l'incident, dépend de la nature du matériau bombardé et de l'énergie des électrons incidents.

-Rayons X

Les électrons incidents peuvent exciter les atomes de la cible, qui deviennent instables ; sa durée de vie est de l'ordre de 10^{-10} s. L'atome tend à l'état fondamental par suite des transitions électroniques, c'est-à-dire l'électron saute d'un niveau externe au niveau plus profond ; une énergie est ainsi libérée sous forme des rayons X caractéristiques.

En outre, les électrons subissent à une décélération dans le matériau et rayonnent un champ électromagnétique sous forme des rayons X fluorescents (continu). On peut obtenir des informations très importantes, concernant la composition intérieure du matériau et la contamination de la surface, à l'aide du traitement de ces rayonnements.

-Electrons absorbés

Les électrons sont fortement absorbés par la matière ou les mécanismes d'absorption prépondérants étant les diffusions élastiques et inélastiques. La section efficace de diffusion étant élevée ; les électrons sous l'effet des diffusions perdent successivement leur énergie de façon aléatoire jusqu'à l'arrêt éventuel. Ceci peut produire un courant dans la cible, que l'on peut mesurer expérimentalement.

-Electrons Auger

Au lieu d'être émise directement sous forme du rayonnement X, l'énergie libérée durant les transitions entre les divers états électroniques, peut être utilisée pour éjecter un deuxième électron d'un autre niveau. Ce phénomène a lieu près de la surface (autour de 5nm) et nous permet donc l'étude la surface et la composition chimique de la cible.

-Electrons transmis

Les électrons primaires peuvent traverser l'échantillon, si celui-ci est suffisamment mince. Les électrons transmis perdent, à cause des collisions inélastiques avec les atomes du matériau, une fraction significative de leur énergie initiale.

-Etats de surface

L'électron, comme particule chargée, subit une interaction image attractive du matériau semi-infini. Cette interaction peut être suffisamment forte pour que les électrons soient localisés sur la surface du matériau.

-Cathodoluminescence (CL)

Le bombardement électronique, dans certains matériaux (minéraux naturels, oxydes, semi-conducteurs), provoque l'émission des photons lumineux (la gamme s'étend de l'U.V à l'I.R). L'émission revient aux centres luminescents liés à la présence des défauts dans la matière ou bien à des transitions bande à bande. La CL étant donc liée au gap du semi-conducteur et à la présence d'éléments étrangers, que l'on peut identifier et connaître leur répartition au sein du matériau, où chaque processus est déterminé par sa probabilité de production qui est décrite par une section efficace [10].

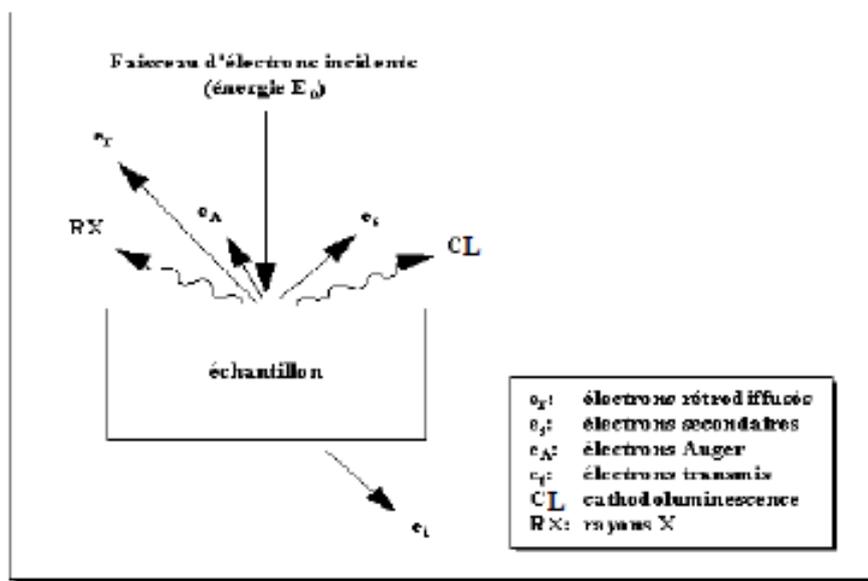


Figure I.2 Les effets produits situés au bombardement d'un échantillon par un électron.

I.2.3 Volume de Dissipation de l'Énergie de l'Electronique par Chocs Inélastique

Les électrons incidents subissent des chocs inélastiques ou élastiques avec les atomes qui composent le matériau, c'est à dire avec ou sans perte d'énergie. La diffusion élastique peut être analysée en employant le modèle de Rutherford [9]. La section efficace totale de diffusion relativiste de Rutherford est donnée par [20].

$$\sigma = (5.21 \times 10^{-21}) \left(\frac{Z}{E}\right) \frac{4\pi}{\delta(\delta+1)} \left(\frac{E+m_0 c^2}{E+2m_0 c^2}\right) \quad \text{I.1}$$

Où Z est le nombre atomique de l'atome diffusé, E est l'énergie des électrons en keV, m_0 et c sont respectivement la masse élémentaire de l'électron et la vitesse de la lumière dans le vide (3.10^8 m/s), et δ est un paramètre donné par la relation [9].

$$\delta = (3.4 \times 10^{-3}) \frac{Z^{0.67}}{E} \quad \text{I.2}$$

Pouvoir d'arrêt

Ce processus statistique, peut être décrit de façon continue par la formule de Bethe (1933) [19]. Cette formule traduit la perte d'énergie moyenne par unité de longueur dS.

$$\frac{dE}{dS} = -2\pi e^4 N_A \frac{\rho Z}{EA} \ln \left(\frac{1.166E}{j}\right) \quad \text{I.3}$$

Où e est la charge électronique, N_A est le nombre d'Avogadro, ρ est la densité, A est le poids atomique, E est l'énergie moyenne d'électron, et J est le potentiel moyen d'ionisation. Ce dernier est la dissipation d'énergie moyenne par interaction (pour indisposer les processus possibles de dissipation d'énergie) est donné par : [19].

$$j = (9.76Z + 58.5Z^{0.19})10^{-3} (KeV) \quad \text{I.4}$$

D'autre part l'interaction électrons-matière est caractérisée par d'autres paramètres tel que le parcours électronique, l'énergie de formation d'un pair électron trou qui vont être analysés un par un dans ce qui suit.

I.2.4 Parcours Electronique

Les électrons incidents subissent des séries successives de dispersion élastique et inélastique dans le semi-conducteur, et ont des trajectoires quelconques. Leur profondeur de pénétration R (range) est donnée par plusieurs expressions proposées par différents auteurs :

La relation générale du parcours électronique (qui décrit la profondeur de pénétration de l'électron dans l'échantillon) est donnée en fonction de l'énergie d'accélération c'est à dire l'énergie du faisceau incident E_0 sous la forme suivante : [19].

$$R_e = \left(\frac{K}{\rho}\right) E_0^\alpha \quad \text{I.5}$$

Où ρ est la densité du matériau, K dépend du nombre atomique du matériau et également formules ont été également proposées par d'autres auteurs.

En 1957, les travaux de Gruen ont conduit à un parcours électronique donné par [20-25]:

$$R_G = 4.57 \quad \text{I.6}$$

Là où R_G est en $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ et E_0 est en KeV.

Selon Everhart et Hoff :

$$R_e = (0.0398/\rho) E_0^{1.75} \quad \text{I.7}$$

où ρ est en g/cm^3 et E_0 est en KeV.

Ces deux résultats ((I.7) et (I.8)) ont été dérivés pour des électrons de gamme d'énergie de 5 à 25 KeV et de nombres atomiques $10 < Z < 15$.

Une relation dérivée pour le GaAs par Wittry et Kyser [20] est utilisée plus tard :

$$R(\text{g}/\text{cm}^2) = 2.56 \cdot 10^{-3} \left(\frac{E_0}{30}\right)^{1.7} \quad \text{I.8}$$

L'exposant 1.7 dans cette dernière équation n'est pas précise à basse énergie [9].

Une expression plus générale dérivée par Kanaya et Okayama s'est avérée pour être conforme bien aux résultats expérimentaux. D'après Kanaya et Okayama [26,27] est :

$$R_e = (0.0276A/\rho Z^{0.889})E_0^{1.67} (\mu m) \quad I.9$$

Où E_0 est en keV, A est le poids atomique en g/mol, ρ est en g/cm³, et Z est le nombre atomique.

I.2.5 Energie de Formation d'une Paire Electron-trou

Cette énergie est définie comme une énergie moyenne dissipée pour créer une paire électron-trou. Dans la plus part des cas elle est considérée comme l'énergie d'ionisation qui est donnée par la relation suivante :

$$E_i = 2.8E_g + M \quad I.10$$

I.2.6 Estimation de la Densité des Porteurs en Excès

L'interaction inélastique entre un électron incident et un électron de l'atome du Semi-conducteur génère une paire électron-trou (l'électron quitte son état lié dans la bande de valence vers un état libre dans la bande de conduction) cette même paire peut à son tour générer un autre pair électron-trou...etc. ce processus de cascade continue jusqu'à ce que le dernier électron secondaire ait une énergie cinétique inférieure à l'énergie d'ionisation.

Le facteur de génération G (c'est à dire, le nombre de paires de électron-trou généré par le rayon d'électrons incident) est donné par :

$$G = \frac{E_0(1-\gamma)}{E_i} \quad I.11$$

Où E_0 est l'énergie de faisceau d'électrons, E_i est l'énergie d'ionisation (c.-à-d., l'énergie requise pour la formation d'une paire électron-trou), et γ représente la perted'énergie fractionnaire du faisceau d'électrons dû aux électrons rétrodiffusés. L'énergie E_i d'ionisation, est reliée au gap du matériau [28-31].

I.2.7 Phénomène de Recombinaison

Après la génération des paires électrons-trous et en absence de toute influence extérieure

Dans l'étude des phénomènes de luminescence dans les semi-conducteurs, on considère que l'effet de la variation des porteurs minoritaires est prépondérant.

La distance entre le point de création du porteur et le point de leur recombinaison (retour à l'état initial) s'appelle longueur de diffusion L , et le temps qui s'est écoulé pour effectuer ce parcours s'appelle la durée de vie τ .

La recombinaison au sein d'un semi-conducteur d'électrons et des trous libres s'effectue par l'un des deux mécanismes :

1. Par la transition d'un électron de la bande de conduction E_C vers la bande de valence E_V c'est à dire recombinaison directe.

2. Par l'intermédiaire d'un centre recombinant, l'acte élémentaire de recombinaison comporte deux étapes successives, tout d'abord l'électron (ou le trou) est capté par un centre localisé (dans la bande interdite), puis ce même centre capte le trou (ou l'électron) qui se recombine avec le porteur initialement capté (recombinaison indirecte).

La contribution relative des deux mécanismes aux processus de recombinaison dépend :

- du rapport des probabilités de ces deux mécanismes.
- de la position en énergie des centres de recombinaison à l'intérieur de la bande interdite et de la concentration de ces centres.
- de la concentration des porteurs à l'équilibre.
- de la température.

I.2.8 Les processus de recombinaison

Selon le mécanisme de recombinaison et selon la forme sous laquelle est libérée l'énergie du porteur capté par le centre d'impureté on distingue plusieurs processus où ils sont représentés sur la figure I.3.

La recombinaison radiative donne naissance à des photons, elle a été étudiée en détail depuis 1953. Le retour à l'état d'équilibre du matériau, par la recombinaison de l'électron avec le trou peut se faire d'une façon intrinsèque ou extrinsèque

[32-34].

a / la luminescence intrinsèque (ou bande à bande) où on distingue deux transitions :

i) transition directe : Dans ce cas, le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouvent au même vecteur d'onde k l'énergie du photon émis ($h\nu$) dans ce cas est égale (presque) à l'énergie du gap E_g et la luminescence est dite intrinsèque.

ii) transition indirecte : Dans ce cas, la transition n'est plus verticale, et par conséquent la différence de quantité de mouvement entre les deux niveaux n'est pas négligeable. Pour satisfaire le principe de conservation de quantités de mouvement, il est nécessaire de faire intervenir une pseudo-particule, qui est le phonon de vecteur d'onde k_1 . Il s'agit donc ici d'une interaction de trois particules, dont la probabilité est plus faible. C'est ainsi que l'émission de luminescence dans les semi-conducteurs à gap indirect est difficile à observer.

b / la luminescence extrinsèque (bande-niveau) : la luminescence extrinsèque est relative aux impuretés et aux défauts.

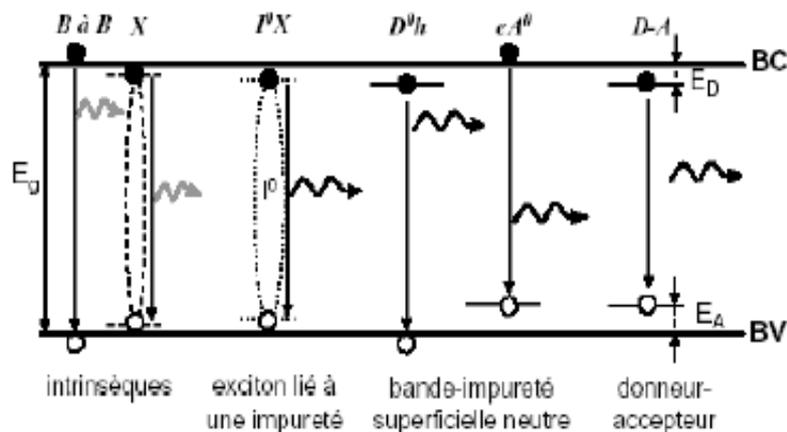


Figure I-3 : illustration des processus de recombinaisons radiatives semi-conducteur à bande interdite directe

I.3 Interaction ion-matière

I.3.1 Les différents mécanismes d'interaction ion-matière :

Le bombardement d'une surface solide par des ions primaires s'accompagne, si l'ion n'est pas réfléchi, d'une séquence d'interactions au cours desquelles les ions primaires transfèrent tout ou une partie de leur énergie. Une particule primaire (l'ion incident) peut parcourir dans le solide une certaine distance, dissiper son énergie avant d'être finalement arrêtée ou éjectée du solide. Nous allons discuter brièvement les deux types d'interactions qui sont mises en jeu entre les ions énergétiques et les atomes du solide et qui provoquent le ralentissement des ions: les pertes d'énergie nucléaire et électronique. Signalons aussi que deux autres mécanismes peuvent exister (génération de photons et réaction nucléaire) à des énergies plus élevés [35].

I.3.2 Perte d'énergie nucléaire

La première interaction est la perte d'énergie nucléaire. Les ions et les atomes rentrent en collision et diffusent élastiquement. Il s'agit d'un transfert de la quantité de mouvement des ions incidents aux atomes contenus dans le matériau-cible. Les ions incidents sont donc ralentis au fil des collisions. Le freinage nucléaire est quantifié par le pouvoir d'arrêt nucléaire [20,21].

$$\left(\frac{dE}{ds}\right)_n = -NS_n(E) \quad \text{I.12}$$

Où N est la densité atomique et, $S_n(E)$ la section efficace d'arrêt nucléaire pour l'énergie E .

C'est le principal mécanisme de perte d'énergie pour les ions à faible énergie. Pour évaluer $S_n(E)$, on part du potentiel d'interaction entre deux atomes Z_1 et Z_2 (séparés par la distance r qui peut être pris comme étant un potentiel de Coulomb écranté :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \varphi\left(\frac{r}{a}\right) \quad \text{I.13}$$

Où φ est la fonction d'écrantage et a le rayon d'écrantage de Thomas-Fermi ($\sim 0.1-0.2\text{\AA}$).

Dans l'approximation d'un potentiel en $1/r^2$, on peut montrer que :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right) = N \frac{\pi^2}{2} Z_1 Z_2 e^2 a \frac{M_1}{M_1 + M_2} \quad \text{I.14}$$

Donc que la perte d'énergie est indépendante de l'énergie. Lindhard, Scharff et Schiott (théorie LSS) ont exprimé le freinage nucléaire dans un système de coordonnées dites «réduites» où l'énergie réduite ε et la longueur réduite ρ valent [20].

$$\varepsilon = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{4\pi\varepsilon_0 a}{Z_1 Z_2 e^2} \quad E\rho = NM_2 4\pi a^2 \frac{M_1}{(M_1 + M_2)^2} \quad \text{I.15}$$

Où M la masse, Z le nombre atomique et e la charge de l'électron. Les indices 1 et 2 se rapportent à l'ion incident et l'atome cible respectivement. Dans ce formalisme, le « pouvoir d'arrêt nucléaire » s'écrit comme :

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right) = S_n(\varepsilon)$$

Ou

I.16

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = a NZ_1 Z_2 e^2 \frac{M_1}{M_1 + M_2} S_n(\varepsilon)$$

Dans ce système de coordonnées, le pouvoir d'arrêt nucléaire est représenté par une relation unique $S_n(E)$, indépendante de la particule incidente et de la cible. $S_n(E)$ dépend de la forme du potentiel $V(r)$. Un potentiel en $1/r$ (Thomas-Fermi) conduit à une perte d'énergie nucléaire qui diminue à haute énergie, et donc qui est plus proche de la réalité que celui en $1/r^2$ (indépendant de l'énergie). Une forme approximative est donnée par Kalbitzer et al. [20-25].

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = \frac{1.7\varepsilon^{0.5} \log(\varepsilon + e)}{1 + 6.8\varepsilon + 3.4\varepsilon^{1.5}} \quad \text{I.17}$$

I.3.3 Perte d'énergie électron :

La deuxième interaction est la perte d'énergie électronique. La plupart des projectiles ne frappent pas de plein fouet les atomes du matériau, mais passent plutôt au voisinage de ceux-ci. Etant donné que les ions restent chargés tant qu'ils possèdent une certaine vitesse, il se produira une interaction électrostatique entre ceux-ci et les électrons et charges nucléaires des atomes du matériau (collisions inélastiques). Les atomes de la cible sont excités ou ionisés Ceci va également provoquer le ralentissement des ions incidents. Il est quantifié par le « pouvoir d'arrêt électronique » [20-25].

$$\left(\frac{dE}{dx}\right) = -N S_e(E) \quad \text{I.18}$$

Où N est la densité atomique et S la section efficace d'arrêt électronique pour l'énergie E. C'est ce mécanisme ion-électron qui est le plus important à plus haute énergie. Dans le cas des collisions à faible énergie (pour $v < 2.2 \cdot 10^6 \text{m/s}$, ce qui correspond à des énergies inférieures au MeV), la théorie LSS dit que le pouvoir d'arrêt électronique est proportionnel à la racine carrée de l'énergie :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = K \quad \text{I.19}$$

Dans le cas des collisions à forte énergie (pour $v > 2.2 \cdot 10^6 \text{m/s}$, ce qui correspond à des énergies supérieures au MeV, on peut montrer que le pouvoir d'arrêt électronique est inversement proportionnel à l'énergie :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = -KE^{-1} \quad \text{I.20}$$

K dépendent du couple ion- atome cible (Z_1, Z_2, M_1, M_2).

I.3.4 Perte d'énergie totale

On considère les processus de perte d'énergie électronique et nucléaire comme indépendants et additifs. La perte d'énergie totale subie par l'ion est donc égale à l'addition des deux [5].

$$\left(\frac{dE}{dx}\right) = \left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e \quad \text{I.21}$$

Les deux mécanismes varient différemment avec l'énergie. La section efficace sera maximale pour des énergies de l'ordre du keV pour l'interaction nucléaire et pour des énergies de l'ordre du MeV pour l'interaction électronique. Souvent une des deux contributions peut être considérée comme négligeable.

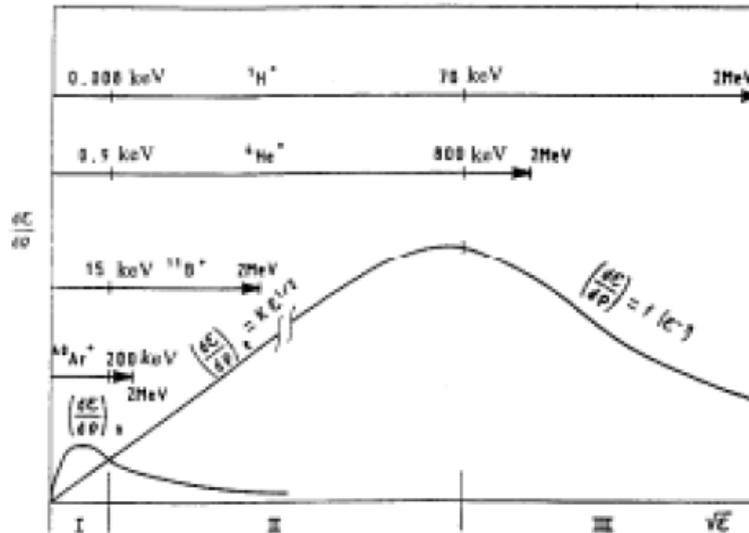


Figure I.4. Domaine d'applications des différentes théories en fonction de l'ion incident (I: interaction nucléaire, II : interaction électronique à faible énergie, III: interaction électronique à haute énergie)

I.3.5 Principaux phénomènes se produisant sur la matière

Dans une certaine gamme d'énergie (de la centaine d'e V à quelques keV, l'impact des ions provoque l'émission de particules de différente nature. Principalement des atomes neutres (pulvérisation ionique), mais aussi des ions (émission d'ions secondaire), des photons (ion luminescence), des électrons secondaires. L'éjection de particules de la cible requiert une séquence de collisions pour changer la quantité de mouvement incidente, dirigée vers l'intérieur du matériau, vers la surface. Ici le parcours des ions dans la matière est faible et ce sont les premières couches atomiques qui participent à la pulvérisation. A titre d'exemple, à la limite supérieure de la gamme d'énergie que nous traitons ici, la profondeur de pénétration pour des ions d'Argon d'1keV bombardant de la silice fondue sous incidence normale est de l'ordre de 4nm. Pour des énergies plus élevées (de quelques keV à quelques MeV) à, l'ion incident pénètre beaucoup plus profondément dans le solide (quelques dixièmes de microns à 100 keV, il s'agit du phénomène d'implantation ionique qui est mis à profit pour implanter des dopants dans un matériau.

En résumé, on distingue généralement 4 phénomènes concernant les modifications de la cible bombardée: figure I.5

- La pulvérisation de particules de la surface

- L'implantation d'ions primaires
- Des modifications dans la structure de la matière
- Des effets chimiques tels que la rupture et la formation de liaison

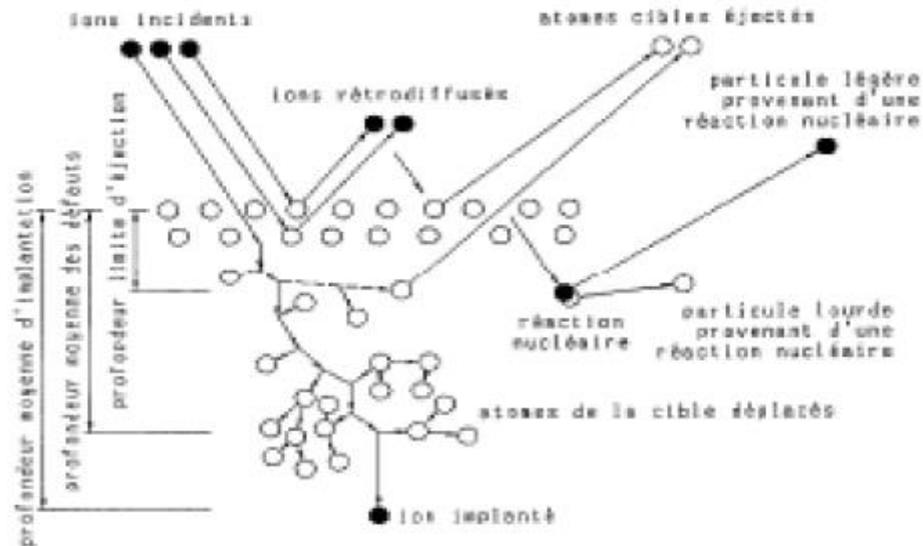


Figure I. 5 Principaux phénomènes lors du bombardement ionique d'un matériau

I.4 La pulvérisation ionique

I.4.1 Le mécanisme de pulvérisation

Un des effets principaux de l'interaction ion-surface est la pulvérisation (sputtering). La figure I.6 illustre un processus physique typique produisant la pulvérisation dans la gamme de 1keV. La particule incidente, énergétique, pénètre dans le matériau et perd de l'énergie dans une série de collisions avec les atomes de la cible. Si l'énergie transmise à l'atome cible est supérieure à une énergie de déplacement, il peut quitter sa position et engendrer une série de chocs avec d'autres atomes du matériau (cascades de collisions). Un atome éjecté de sa position initiale peut s'échapper du matériau s'il a suffisamment d'énergie pour compenser les pertes énergétiques qu'il subit lorsqu'il traverse la matière et s'il acquiert suite aux collisions une composante de vitesse dirigée vers l'extérieur du matériau[38].

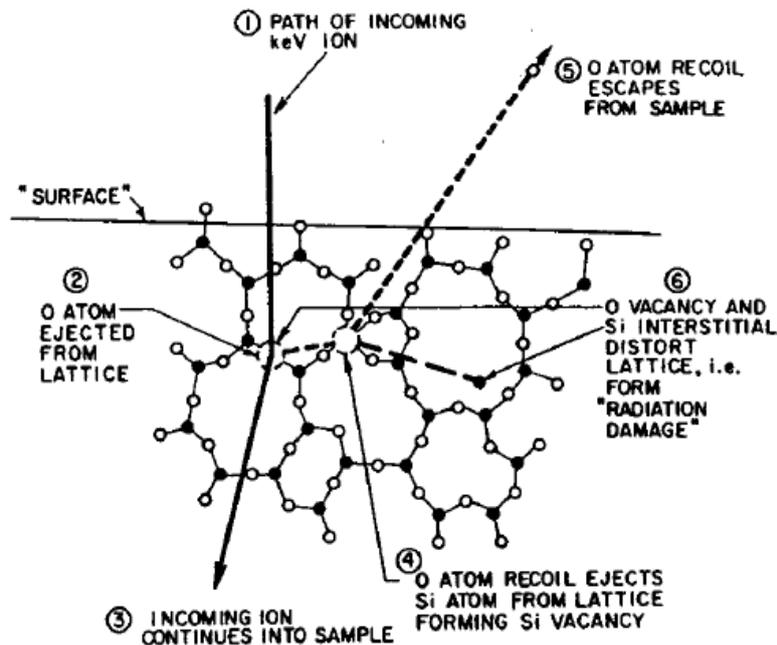


Figure I.6 Illustration d'un processus de pulvérisation typique se produisant lors du bombardement de la surface du verre par des ions. Les cercles pleins représentent les atomes d'oxygène, les cercles creux les atomes de silicium.

De plus, il doit lui rester suffisamment d'énergie pour vaincre les forces de liaisons de surface (de 1 à quelques dizaines d'électron Volts) et être finalement éjecté de la surface, produisant l'effet de pulvérisation. On dit que l'énergie du projectile a atteint le seuil de pulvérisation si elle conduit à l'éjection des atomes de la surface. Au-delà de cette description générale de mécanisme de pulvérisation, on distingue généralement trois types de régime de collisions :

- Le régime des collisions uniques?:

L'ion incident transfère de l'énergie aux atomes de la cible, lesquelles, après avoir subi un petit nombre de collisions ultérieures sont éjectés de la surface. Dans ce mode, peu de collisions se produisent et seuls les atomes heurtés en premier contribuent à la pulvérisation de manière significative. Ce régime s'applique pour les bombardements de faible énergie (1keV).

- Le régime de cascades linéaires :

Dans ce régime, les atomes de la cible reçoivent suffisamment d'énergie pour engendrer le recul d'autres atomes et donc un régime dit en cascades, mais de densité assez faible si bien que les collisions entre atomes en mouvement sont très improbables. Ce régime s'applique

pour des bombardements d'ions de nombre atomique moyen ou élevé et dans une gamme d'énergie de quelques keV [5].

- Le régime des pointes thermiques³:

Les collisions sont telles qu'elles mettent en mouvement une densité importante des particules à l'intérieur d'un certain volume de la cible (appelé le « spike » volume) et les collisions entre atomes en mouvement peuvent se produire. Ce régime est atteint pour des bombardements de cibles d'atomes lourds par des ions lourds et des énergies élevées (20-80keV) [35].

I.5. Le rendement de pulvérisation

Le phénomène de pulvérisation ionique est quantifié en terme de rendement de pulvérisation $Y(E)$, qui est égal au nombre d'atomes éjectés par ion incident. C'est une des valeurs les plus importantes dans le domaine de la pulvérisation ionique.

I.5.1 Le modèle de Sigmund

Le modèle le plus connu pour le calcul du rendement de pulvérisation est celui de Sigmund [39]. C'est un modèle basé sur l'équation de transport de Boltzmann, valable pour des cibles monoatomiques (amorphes et poly cristallines).

Le rendement de pulvérisation peut s'exprimer comme :

$$Y(E) = \Lambda F d(E) \quad \text{I.22}$$

Λ contient les propriétés du matériau et l'état de la surface :

$$\Lambda \cong 0.042/(N U_0) \quad \text{I.23}$$

Avec U_0 l'énergie de liaisons des atomes de surface et N sa densité atomique. U_0 peut être estimé à partir de l'énergie de sublimation du matériau cible et est compris en général entre 2 et 4 eV.

$F d(E)$ est la densité d'énergie déposée en surface :

$$F d(E) = a N S_n(E) \quad \text{I.24}$$

Où $N S_n(E)$ est le pouvoir d'arrêt nucléaire et α un facteur de correction dépendant de l'angle de pulvérisation et de contributions dues à des grands angles de diffusion. En incidence normale, le facteur α dépend de l'énergie et surtout du rapport de masse de l'ion incident (M_1) et de l'atome cible (M_2). La valeur de α est comprise entre 0.15 et 1.5. figure I.7

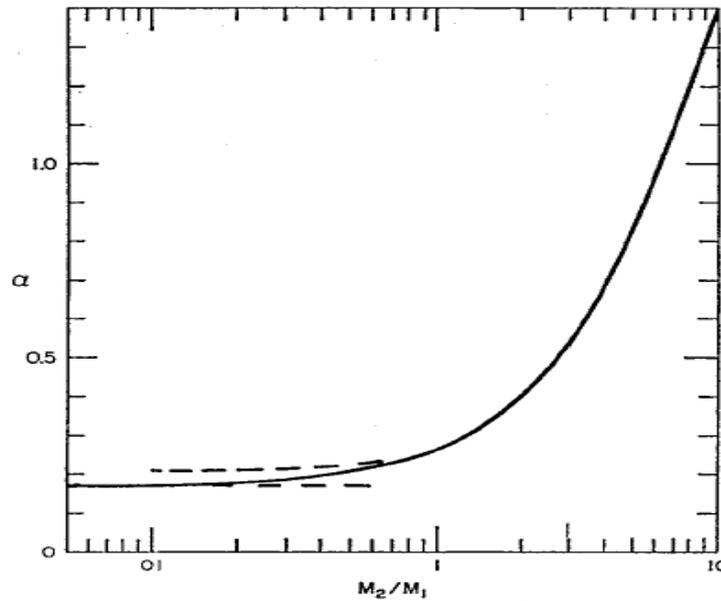


Figure I.7. Facteur α en fonction du rapport de masse M_2/M_1 dans le domaine des collisions élastiques (incidence normale).

Pour le calcul du pouvoir d'arrêt nucléaire dans son modèle, il distingue plusieurs cas en énergie entre les deux cas décrits ci-dessous dépend du couple ion incident-atome cible. Pour le cas des faibles énergies ($<1\text{keV}$), il privilégie la pulvérisation causée directement par le recul de l'atome cible plutôt que par le processus de collisions en cascades.

Le rendement de pulvérisation en incidence normale Y_0 s'écrit dans ce cas:

$$Y_0(E) \propto \frac{3}{4\pi} \alpha \frac{\gamma E_0}{U_0} \quad \text{I.25}$$

Avec :

α : le facteur dépendant du rapport M

E_0 : L'énergie de l'ion incident

U_0 : L'énergie de liaisons des atomes de surface

γ : Le coefficient de transfert d'énergie

$$\gamma = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2} \quad \text{I.26}$$

La quantité γE_0 correspond en fait à l'énergie maximale transmise à un atome cible lors d'une collision. Elle est maximale (et donc le rendement de pulvérisation aussi) quand les masses de l'ion incident et de l'atome cible sont identiques.

Pour des énergies plus élevées (<10keV) et des ions de masses intermédiaires, où la pulvérisation est toujours gouvernée par les pertes nucléaires (région des collisions élastiques), Sigmund utilise pour le pouvoir d'arrêt nucléaire est exprimée en énergie réduite.

Le rendement de pulvérisation s'exprime alors :

$$Y_0 = 0.042 \alpha Z_1 Z_2 e^2 a \frac{M_1}{U_0(M_1+M_2)} S_n(\varepsilon) \quad \text{I.27}$$

Où α est le facteur décrit à la figure 2.4, a est le rayon d'écrantage de Thomas-Fermi, Z_1 et Z_2 sont les nombres atomiques de l'ion incident et l'atome cible respectivement. Comme vu précédemment, $S_n(E)$ est une fonction unique (pour tous les couples ions - atomes cibles), tabulée par les auteurs du modèle LSS et dont les valeurs sont reprises dans l'article de Sigmund [39].

La figure I.8 compare le rendement de pulvérisation du cuivre obtenus à l'aide du modèle de Sigmund (Equations (I.25) et (I.27)) et celles mesurées expérimentalement.

Aux faibles énergies, le rendement de pulvérisation augmente linéairement avec l'énergie, comme décrit par l'équation (2.15). Pour des ions de plus grandes énergies, les ions pénètrent plus profondément dans le matériau, l'énergie déposée en surface diminue, ainsi que le rendement de pulvérisation. L'énergie à laquelle le rendement est maximum diminue pour des ions incidents plus légers.

Comme illustré à la figure I.8, on constate en général une bonne adéquation entre le modèle de Sigmund et les mesures expérimentales pour les matériaux poly cristallins et amorphes, sauf pour les hautes énergies (>10keV) dans le cas d'ions lourds (comme pour le Xe⁺) [39].

Dans le domaine des faibles énergies ($<1\text{keV}$), certaines incertitudes sur le calcul des sections efficaces de collisions nucléaires peuvent également limiter la précision sur la valeur du rendement calculé par ce modèle.

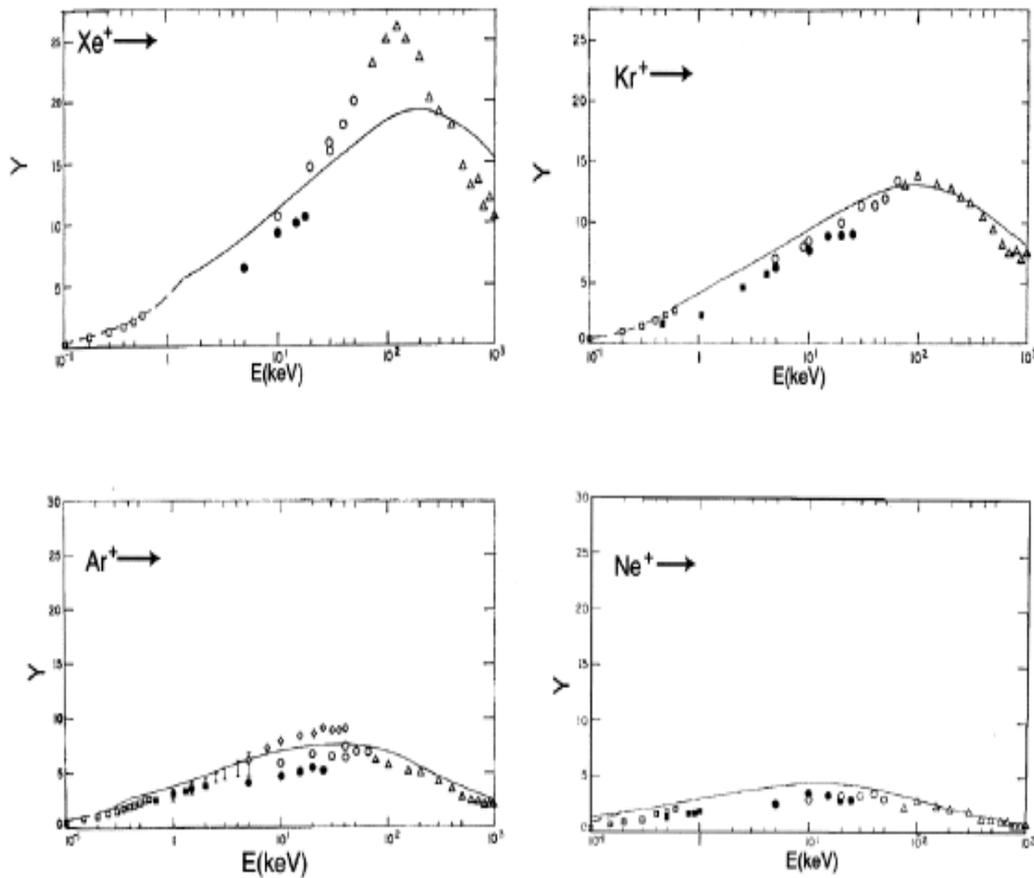


Figure I.8 Rendements de pulvérisation du Cu mesurés expérimentalement (points) et calculés selon le modèle de Sigmund (lignes) en fonction de l'énergie pour des ions primaires Xe, Kr, Ar et Ne [39].

I.5.2 Influence de l'angle d'incidence

Sous incidence oblique, la pulvérisation ionique est favorisée par le fait qu'une composante de la quantité de mouvement de l'ion incident est parallèle à la surface et donc qu'une part plus importante de son énergie peut être transférée aux atomes de surface. Le rendement croît donc avec l'angle d'incidence des ions de la surface. Le rendement de pulvérisation s'exprime dans le modèle de Sigmund comme [39] :

$$Y(\theta) = \frac{Y_0}{\cos^f(\theta)} \quad \text{I.28}$$

Ou

Y_0 est le rendement de pulvérisation

θ est l'angle d'incidence par rapport à la normale à la surface

f est un paramètre dépendant des conditions de pulvérisation.

Pour des angles d'incidence raisonnables, f dépend principalement du rapport M_2 / M_1 . Il est également lié au coefficient m ($0 < m < 1$) qui dépend de la gamme d'énergie, et donc de la section efficace des collisions élastiques (Thomas-Fermi), et qui est approximé de la manière suivante :

$m = 1 \rightarrow$ Rutherford (hautes énergies)

$m = 1/2 \rightarrow$ gamme autour du keV et moyennes énergies

$m = 1/3 \rightarrow < \text{keV}$

$m \rightarrow 0 \rightarrow$ dans la gamme de quelques eV.

La courbe de f pour $m=1/2$ et $1/3$ (gamme qui nous intéresse ici) se trouve à la figure 2.6. On peut constater que les 2 courbes sont très semblables, ce qui signifie que l'influence de l'angle d'incidence sur le rendement de pulvérisation est très peu sensible à l'énergie de l'ion incident dans la gamme de la centaine d'eV à quelques keV. De plus, pour $M_2 / M_1 \leq 3$, f est quasiment constant ($\sim 5/3$) et donc le rendement de pulvérisation est également indépendant du rapport de masse.

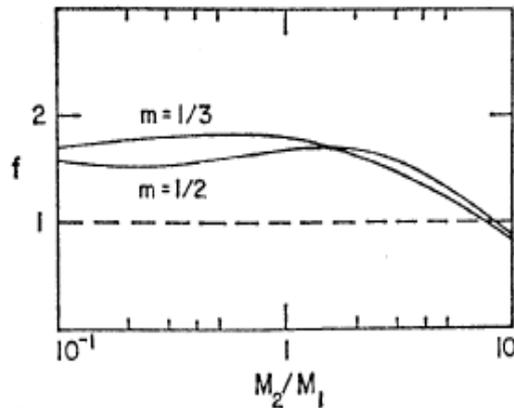


Figure I.9 Facteur f en fonction du rapport de masse M_2/M_1 et de l'énergie ionique (quelques keV pour $m=1/2$ et <1 keV pour $m=1/3$) [39].

Pour des angles d'incidence élevés (au-delà de l'angle critique $\sim 70^\circ$), le rendement de pulvérisation diminue alors très rapidement en raison de la réflexion des ions incidents sur la surface (l'action répulsive de la surface est assez grande pour empêcher les ions de pénétrer dans le matériau) et tend vers 0 pour $\theta=90^\circ$.

Notons que des valeurs expérimentales pour f dans la gamme entre 0.7 et 2.5 peuvent être trouvées dans la littérature. Ainsi, la grande dépendance du rendement de pulvérisation du diamant avec l'angle d'incidence pour des ions argon est illustrée à la fig. I.10

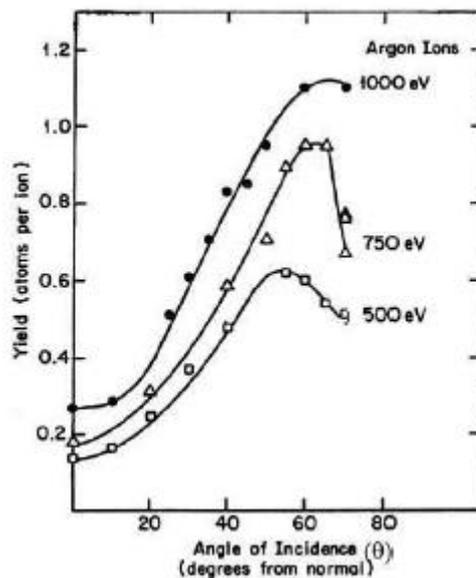


Figure I.10 Mesure du rendement de pulvérisation du diamant en fonction de l'angle d'incidence pour des ions Argon de 500, 750 et 1000 eV [39]

I.5.3 Influence de la structure du matériau

Bien que le processus physique de pulvérisation soit le même pour les matériaux amorphes, cristallins et poly cristallins, l'arrangement régulier des atomes dans une structure cristallin induit des effets qui n'ont pas lieu dans les structures désordonnées. Pour les cristaux, le rendement de pulvérisation dépend également du plan cristallin qui subit le bombardement ionique.

Lorsque le bombardement s'effectue selon certaines directions cristallographiques privilégiées, la profondeur de pénétration dans le cristal est beaucoup plus importante que dans le cas amorphe. L'alignement des atomes dans les cristaux procurent en effet de véritables « boulevards » pour les ions incidents ayant la même direction. Ne rencontrant que peu d'obstacles, la perte d'énergie de l'ion est beaucoup plus faible. Il en résulte un rendement de pulvérisation Y plus faible car les collisions se produisant plus en profondeur, les atomes ont une probabilité plus faible d'être éjectées. Ce phénomène est connu sous le nom de l'effet de canalisation (*channeling effect*).

Au contraire, lorsque le bombardement s'effectue perpendiculairement aux plans de hautes densités atomiques, le rendement de pulvérisation est supérieur à celui observé sur les matériaux amorphes ou poly cristallins.

I.5.4 Pulvérisation de matériaux biatomiques

Les différences de rendement de pulvérisation des différents constituants du matériau vont engendrer la formation d'une couche de surface (dite « couche altérée ») de typiquement quelques nm d'épaisseur enrichie du constituant ayant le rendement de pulvérisation le plus faible (« pulvérisation différentielle ») [42].

Pour un alliage A-B, les rendements de pulvérisation Y_A et Y_B des constituants A et B dans l'alliage A-B s'écrivent

$$Y_A = \frac{N_{A-B}}{N_A} S_A \qquad Y_B = \frac{N_{A-B}}{N_B} S_B \qquad \text{I.29}$$

Avec

S_A = coefficient de pulvérisation de A dans A pur

S_B = densité atomique de A pur

S_{A-S} = densité atomique de A-B

Idem pour le constituant B

Au fur et à mesure que la pulvérisation se poursuit, la concentration de surface du composant avec le rendement le plus élevé va diminuer. Après un certain temps, un état d'équilibre va

être atteint pour lequel la concentration des constituants peut être très différente que celle initiale.

A l'équilibre [38.42] :

$$\frac{\theta_A Y_A}{C_A} = \frac{\theta_B Y_B}{C_B} \quad \text{I.30}$$

C_A = fraction initiale de A dans l'alliage

θ_A = fraction en surface de A dans l'alliage à l'équilibre

C_B = fraction initiale de B dans l'alliage

θ_B = fraction en surface de B dans l'alliage à l'équilibre

Le concept peut être généralisé à un matériau à plusieurs constituants.

I.6 Conclusion :

Dans ce chapitre il a été question de donner les formules en relation avec les deux phénomènes d'interaction électrons-matière et ions-matière. Toutes ces formules sont en relation avec la théorie de Monte Carlo. La trajectoire des électrons dans les différents cristaux cristallins ou amorphes suivant des directions normales ou inclinées a été vue en détail, le calcul du pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire a été aussi formulé. On a aussi traité le modèle de Sigmund connu pour le calcul du rendement de pulvérisation [39].

Ce chapitre on a permis de me familiariser avec tous ces différents phénomènes et toutes ces intéressantes formules.

Chapitre II

Simulation de l'interaction Ions-matière

Code TRIM et SRIM

II.1 Propriétés structurales des composés semi-conducteurs

Les atomes III-V ne possèdent que III électrons de valence sur leurs dernières orbitales s et p (ex : Ga de structure électronique $[Ar]3d^{10}4s^2P^1$) contre V sur les orbitales s et p (ex : As de structure électronique $[Ar]3d^{10}4s^2P^3$). La liaison III-V résulte donc de l'hybridation Sp^3 des orbitales atomiques (liaison covalente) avec , en plus , pour les atomes II-VI une partie ionique (liaison covalente) avec , en plus pour les atomes II-VI une partie ionique non négligeable qui provient de la différence de natures entre l' élément VI , très électronégatif (anion) , et l' élément II (cation) . La liaison II-VI est donc ion-covalente au contraire des IV-IV (Si, Ge) qui elle est purement covalente. C'est cette ionicité qui va conférer aux II-VI leurs propriétés remarquable. Le caractère covalent, donc directionnel, de la liaison III-V impose, lui, à chaque anion d'être au centre d'un tétraèdre formé par les cations et réciproquement. La structure cristalline de compacité maximale qui résulte (34%) est soit cubique (on parlera de la maille blende dite aussi sphalérite) cf. Figure I-1. Ces deux mailles ne diffèrent l'une de l'autre, malgré les apparences, que par une rotation de 60° d'un tétraèdre sur deux autour de la liaison III-V [9,10] On voit, figure I-1, que la maille zinc blende revient à une cubique face centré dans laquelle les sites tétraédriques non contigus sont tous occupés, soit une multiplicité de 8 atomes par maille (dont autant de cations que d'anions).

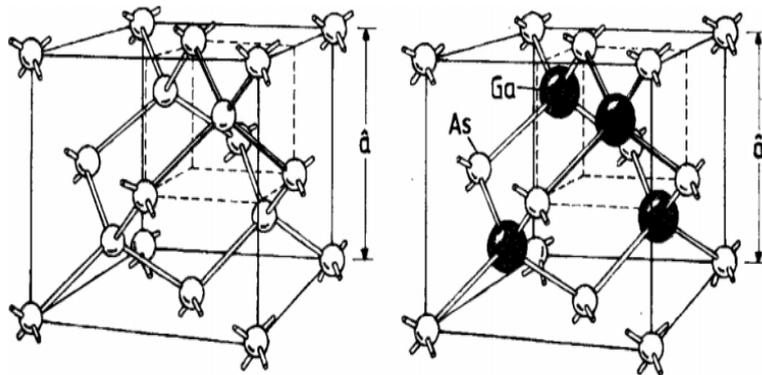


Figure I.1 maille cristalline des composés semi-conducteurs III-V

Le rôle des deux ions étant symétrique , la maille zinc blende se décompose donc en deux sous-réseaux cubiques faces centrées imbriqués , décalés d'un quart de la grande diagonale du cube, l'un étant occupé par l'anion (P , As ou Sb) , l' autre par le cation (Al , Ga ou In) , l'arête du cube , notée a , est le paramètre de maille du matériau. Le tableau II-2 récapitule les valeurs de a pour différents binaires de la catégorie des semi-conducteurs III-V.

Composés	GaAs	AlAs	InP	GaP	InAs	GaSb	InSb	AlSb
a (Å)	5.65 33	5.6611	5.8687	5.4505	6.0583	6.0960	6.4790	6.1355

Tableau II-1 : paramètre de maille cubique à 300°K.

II.2 Dispositifs à base des composés III-V

Les dispositifs à base de semi-conducteurs III-V et nanostructures devraient être d'un intérêt vital pour les composants des futurs microsystemes. Par exemple, l'intégration des composants à base de III-V pourrait élargir l'utilité de microsystemes dans les champs croissants de communications à haute fréquence le long d'un grand ensemble de technologies optoélectroniques. Le caractère unique de ces matériaux est leur taille dépend des propriétés électroniques, magnétiques et optiques; en outre, ils peuvent être fonctionnellement intégrés dans les appareils existants.

La nature multifonctionnelle des microsystemes peut être mieux exploitée par les employeurs dans des environnements de rayonnement rigoureux, tels que l'espace, où une faible consommation d'énergie, faible volume, et des fonctionnalités supérieures sont requises.

Cependant, le rayonnement qu'un dispositif supporte peut modifier ou endommager le fonctionnement normal et entraînant une défaillance du système critique. Les paramètres qui donnent effet à la formation de dégâts d'irradiation sont la masse d'ions, les espèces d'ions, la température cible pendant l'irradiation, la dose totale, des ions d'énergie et la fluence du lion (nombre d'ions par unité de surface)[42,43].

Les études de cette interaction ion-solide peut être fait en introduisant des atomes dans un substrat solide par bombardement de la matière solide avec des ions dans la gamme d'énergie allant jusqu'à des méga électrons volts (MeV),[44]L'évolution des dommages dus aux rayons est simulée dans des couches nanométriques GaAs en utilisant SRIM (Stopping and Range of Ions in Mater). TRIM (Transport and Range of Ions in Mater) calcul est également utilisé pour simuler la quantité d'énergie nucléaire déposé dans les collisions et les événements de recul.[5]

Nous avons également comparé la tolérance de rayonnement entre l'échelle conventionnelle et nanométrique couche de GaAs. D'après les résultats, on constate que la plupart des dommages formés dans la couche de GaAs induite par les radiations est provoquée par la création de défaut ponctuel (défaut de Frenkel) [5].

Ceci est dû à l'énergie transférée par l'ion cible énergétique ou reculant à l'atome dans la matrice ciblée est supérieure à l'énergie de déplacement. Cependant, lorsque la couche de GaAs est réduite (à l'échelle nanométrique), on a constaté que la couche de GaAs peut résister à une énergie de rayonnement plus élevée en termes de dommages de déplacement.

Le nombre total de l'ordre et de la distribution en profondeur dépend fortement de l'espèce d'ions et de leur énergie.

Les propriétés physiques d'un substrat solide particulier sont toujours sensibles à la présence d'une trace d'atomes étrangers. Les propriétés mécaniques, électriques, optiques, magnétiques et supraconducteurs sont tous affectées et parfois peuvent même être dominées par l'existence de ces atomes étrangers[46 – 48].

II.2.1 Effet des ions argon Ar⁺ sur les surfaces de GaAs

L'usage des gaz inertes comme l'ion Ar⁺ est intéressant du point de vue décapage ionique des surfaces. L'interaction ions-matière joue un rôle très important dans le processus de nettoyage des surfaces. Les ions sont accélérés à différentes énergies tout en veillant de ne pas abîmer la surface du matériau. Les ions sont obtenus par le processus d'ionisation à l'aide d'un canon à ions.

Les gaz sont introduits dans la chambre d'ionisation d'une façon contrôlée à l'aide d'une jauge de fuite. L'interaction ions-matière s'effectue suivant un mode non réactif pour nettoyer la surface des impuretés de contamination. Le traitement des surfaces suivant l'interaction ions-matière peut s'effectuer en utilisant des ions qui réagissent avec la surface pour restaurer sa structure.

Généralement, la pression partielle du gaz introduit dans la chambre d'analyse est 10⁻⁵Torr. Les ions sont accélérés à différentes énergies en utilisant un canon à ions avec une densité de l'ordre de 2.5μA /cm²[49].

Le bombardement ionique à l'argon de la cible provoque un décapage ionique au niveau de la surface. Le contrôle de l'énergie de ces ions est important pour éviter la dégradation et la détérioration du matériau. Le canon à ions nous permet l'obtention d'un faisceau d'ions qu'on dirige perpendiculairement à la surface de la cible. Il est à noter que le choix de la densité de courant des ions incidents, doit être aussi contrôlé, toujours dans l'objectif d'éviter la dégradation de matériaux. Le diamètre du faisceau ionique sur la cible est de l'ordre du cm. L'efficacité du bombardement ionique dépend de la section efficace qui constitue un paramètre important dans le processus d'interaction avec la cible.

La dissipation de l'énergie des ions provoque l'éjection d'atomes et molécules adsorbés suivant un processus de pulvérisation (sputtering). Un régime de collisions en cascade peut être engendré, entraînant la perturbation des atomes distribués sur une profondeur déterminée.

Un phénomène complexe s'instaure lors ce processus de pulvérisation. Il est donc intéressant de comprendre le mécanisme d'interaction ions –matière. Des méthodes de simulation numériques ont été développées dans ce sens ; à savoir Transport Range of Ions in Malter (TRIM) développée par Ziegler et al [5].

II.2.2 Simulation du processus par les codes TRIM et SRIM

Toutes ces propriétés peuvent être simulées par la code de calcul TRIM (Transport and Range of Ions in Mater) ou SRIM (Stopping and Range of Ions in Mater) .Ce logiciel utilisé a été développé par Ziegler et al. La figure1 représente le tableau de bord permettant de choisir le mode de calcul désiré. En premier approche notre choix est porté sur la technique de bombardement ionique des ions sur la cible GaAs. Donc on choisit la fonction « TRIM calculassions » se trouvant à droite du tableau de commande du logiciel.

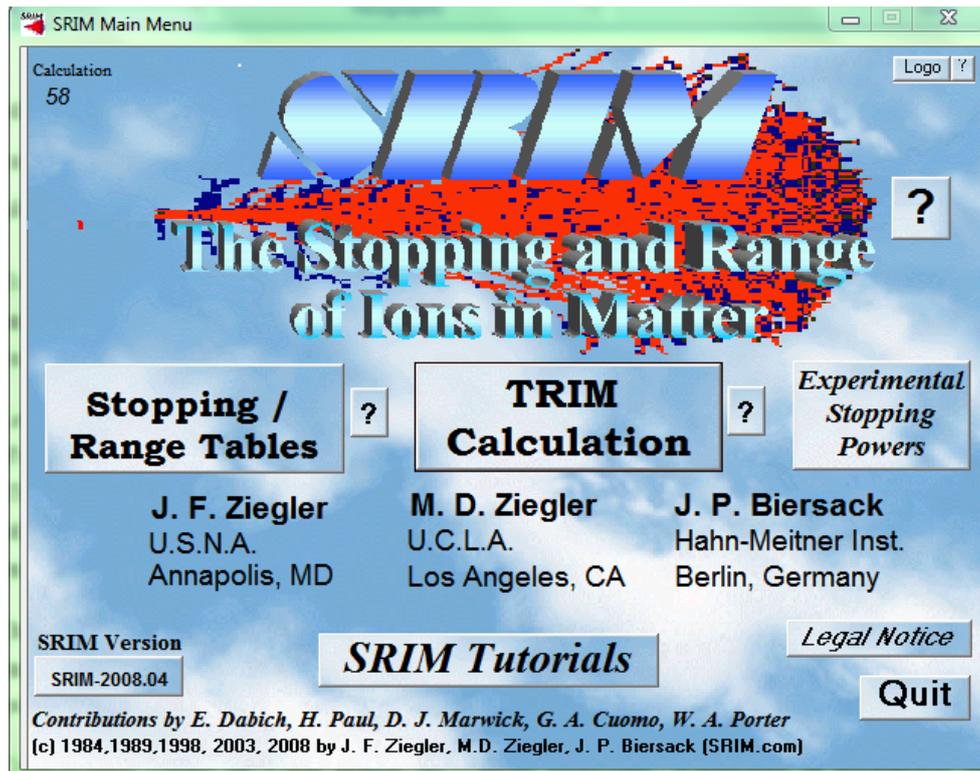


Figure II.2 tableau de bord du code TRIM et SRIM

Une fois ce choix fait, il apparaît un autre tableau représenté sur figure 3 sur lequel on fixe des données comme l'ion (ici Argon) le logiciel donne les propriétés de cette ion. Puis la cible qui est le composé GaAs avec toutes ces caractéristiques physiques telles que la densité, la surface l'énergie de liaison etc.

On fixe dans ce logiciel les paramètres suivants : l'épaisseur de l'échantillon ; le nombre d'ions qui seront utilisés pour le bombardement de la cible GaAs, l'énergie du faisceau ionique qui apparaît à gauche et qui est affichée, dans cet exemple, égale à 6 keV.

Les résultats numériques présentés ci-dessous visent à étudier l'interaction faisceau d'ions avec les surfaces semi-conductrices. C'est une simulation dénommée TRIM (Transport and Range de Ion à Mater) et SRIM (Stopping and range of Ions in Mater) pour caractériser l'interaction des ions avec des cibles échantillons en gaz ou en solide [5].

Dans notre étude le bombardement des ions argon tombe sur la cible GaAs selon une incidence normale au plan de la surface du matériau. Pour cela on fixe l'angle d'incidence sur la valeur zéro.

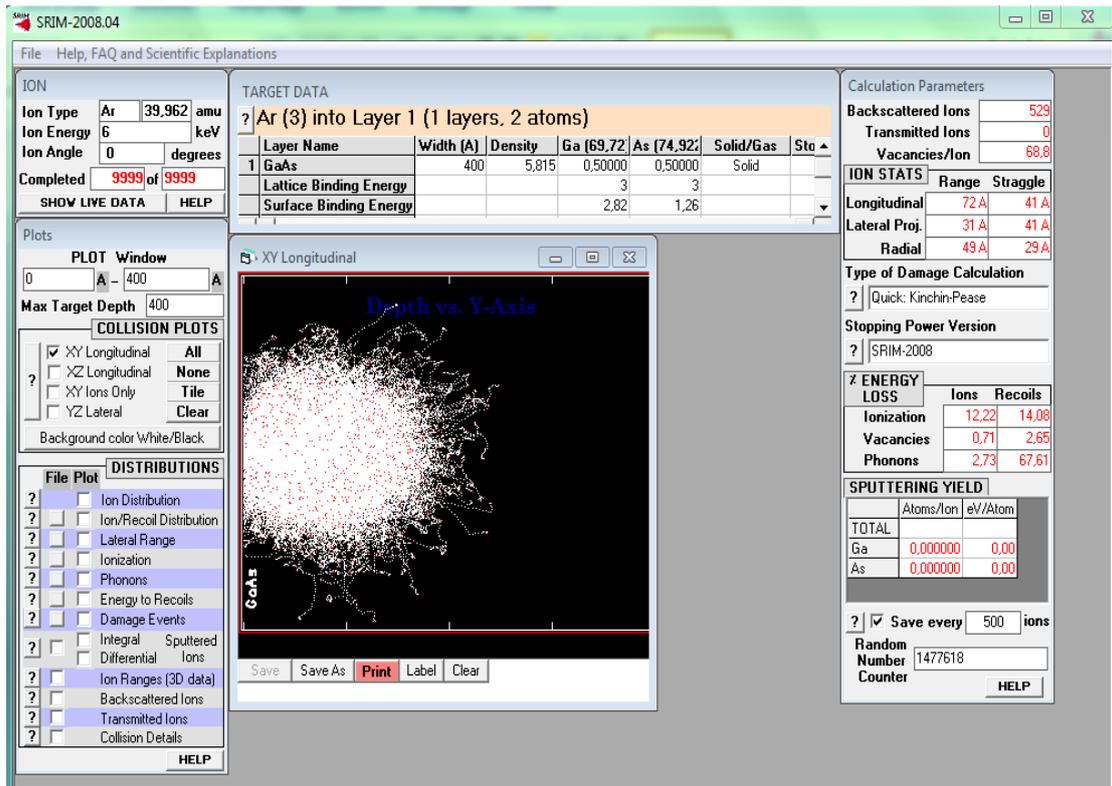


Figure II.3 Tableau des données TRIM pour le bombardement ionique

Le processus de pulvérisation des ions Ar^+ induit un certain arrangement de ces ions étranger dans la matrice du matériau GaAs est enregistré sur la figure 4. Les dimensions de la poire formée telles que la profondeur de pénétration, la largeur et le rayon sont toutes notées sur cette figure. L'arrangement comprend les ions arrêtés par les forces d'interaction coulombienne ainsi que les ions dus au phénomène de recul d'autres ions dans le matériau créant une nouvelle structure électronique.

On pourra lire sur cette courbe, à l'énergie qui a été fixée à 6 keV, les informations suivantes : la profondeur de pénétration des ions Ar^+ atteint 72Å sur les 400Å de la cible GaAs. Nous allons étudier ultérieurement la variation de la profondeur de pénétration en fonction de l'énergie du faisceau d'ions Ar^+ . Cette courbe nous informe aussi sur le nombre d'atomes par cm^2 introduit dans la matrice GaAs. Ce nombre est noté sur l'axe des ordonnées.

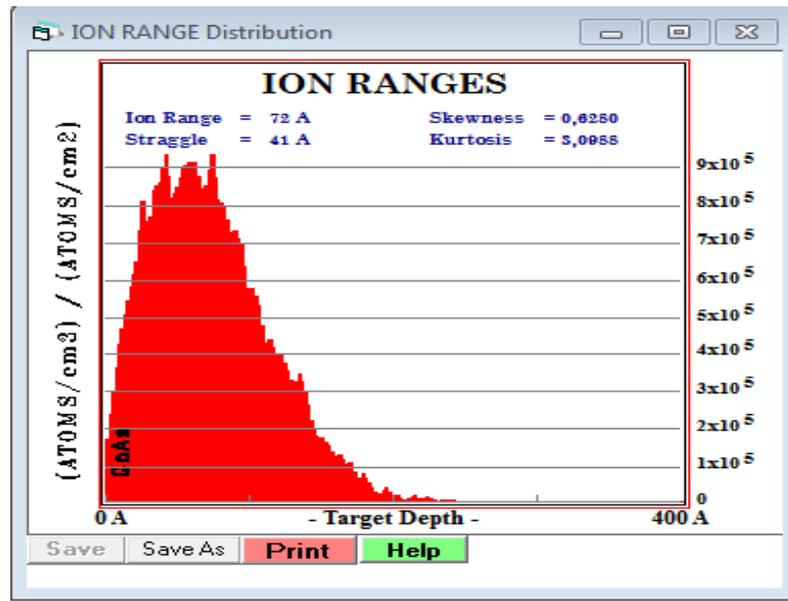


Figure II.4 Arrangement des ions Ar^+ sur la surface altérée de GaAs

D'autre part des défauts ponctuels peuvent être créés par diffusion ou par implantation d'ions incidents dans le cristal. Une neutralisation électronique pourrait être utile quand les défauts ponctuels deviennent actifs. Le bombardement ionique pourra altérer les propriétés électroniques du matériau et provoque des dérives dans des applications technologiques. Il est à noter que le phénomène interaction ions-matière dépend de plusieurs paramètres, à savoir : l'énergie, la masse, l'angle d'incidence du faisceau d'ions, la nature des ions, la structure et la composition chimique du cristal

Pour un certain régime d'énergie utilisée dans le nettoyage, une couche amorphe pourra s'instaurer. Elle concerne la dernière couche de la surface Généralement le processus de pulvérisation cause une destruction de la surface.

La dégradation du cristal diminue lorsque l'énergie des ions décroît comme on le verra sur les courbes de variation des paramètres en fonction de l'énergie cinétique des ions Ar^+ .

La figure 6 nous renseigne sur le nombre d'événements ou de postes vacants appelés communément défauts ponctuels ou défaut de Frenkel. Le nombre de ces défauts portés sur la figure 6 par l'axe des ordonnées dépend beaucoup de l'énergie cinétique des ions Ar^+ atteignant la surface de GaAs.

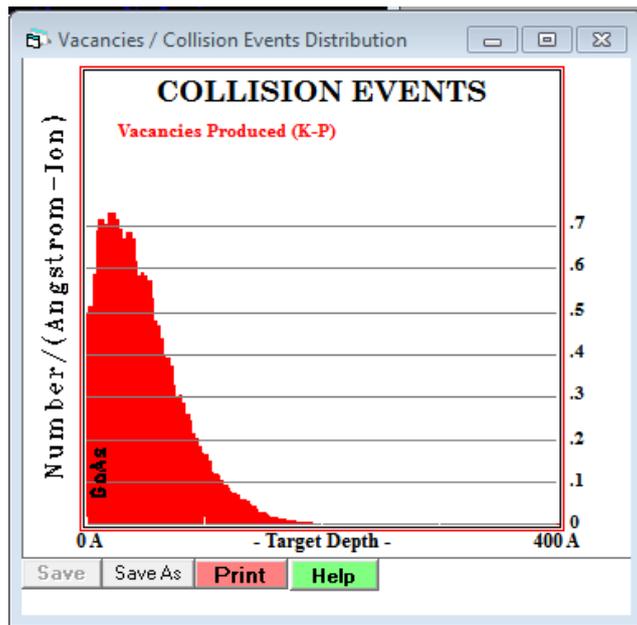


Figure II.5 Nombre de défauts créés en fonction de la profondeur de pénétration

La figure 6 représente le phénomène d'ionisation créé par les ions argon sur la surface du matériau GaAs. L'énergie perdue ou absorbée par la matrice du matériau GaAs varie avec la profondeur de pénétration des ions Ar^+ . Il est à noter que deux formes de perte d'énergie sont visibles sur la courbe/ en rouge se sont les ions directs et en bleu celle des ions de recul.

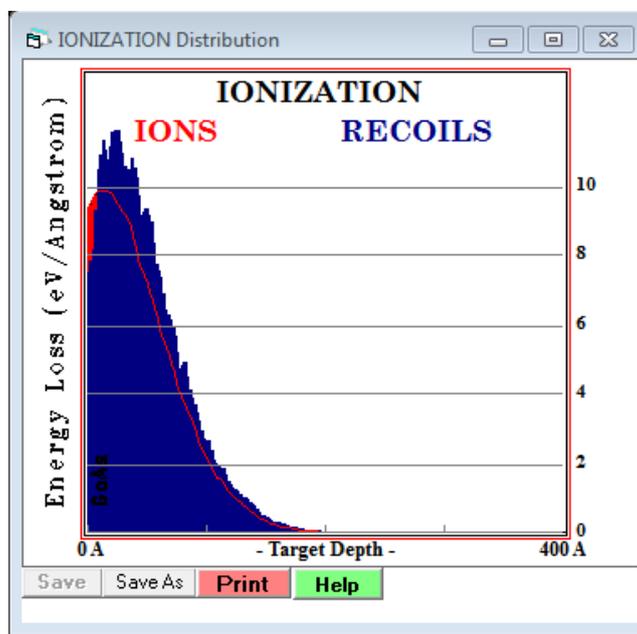


Figure II.6 Perte d'énergie pour le phénomène d'ionisation par les ions directs et les ions de recul

Tableau II.2 : TRIM data des différents paramètres du bombardement ionique de Ar⁺ sur GaAs

Energie (keV)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
backscatered	752	687	681	612	622	529	540	545	553	523
Vacancies	11.8	23.6	35.1	45.5	57.7	68.9	79.7	90.5	101.3	111.9
Dimension de la poire formée par les ions Ar ⁺ dans GaAs										
Longitu (Å)	24	35	46	58	64	72.4	80	87	95	103
Latérale(Å)	11	16	20	25	28	31	35	38	41	44
radiale(Å)	17	25	32	38	44	49	55	59	65	70
Perte d'énergie des ions directs										
Ionisation	9.56	10.34	10.90	11.33	11.8	12.22	12.85	12.90	13.21	13.50
Vacancies	1.57	1.18	0.99	0.86	0.77	0.71	0.66	0.61	0.58	0.55
Phonons	8.34	5.43	4.17	3.50	2.73	3.03	2.73	2.49	2.28	2.13
Perte d'énergie des ions de recule										
Ionisation (eV)	10.85	12.17	12.92	13.42	13.81	14.09	14.22	14.58	14.73	14.88
Vacancies (eV)	1.71	2.19	2.40	2.53	2.60	2.65	2.69	2.72	2.74	2.76
Phonons (eV)	67.96	68.62	68.36	67.97	67.61	67.97	66.96	68.60	66.26	66.21

Tenant compte des données du tableau N°1 nous pouvons tracer différentes courbes de variation des différents paramètres enregistrés par le logiciel TRIM concernant le bombardement ionique par l'ion argon de la couche superficielle de notre échantillon GaAs.

La forme de la poire (forme blanche sur fond noir, figure 3) varie en fonction de l'énergie du faisceau des ions Ar⁺. Les paramètres qui caractérisent cette poire sont donnés par les dimensions longitudinale (profondeur atteinte), latérale (largeur latérale) et radiale (rayon de courbure). La courbe de variation de ces trois paramètres est représentée sur figure 6. On constate que les dimensions augmentent d'une manière quasi proportionnelle avec l'énergie cinétique des ions Ar⁺ incident sur la surface du matériau GaAs. Par contre la dimension longitudinale augmente rapidement suivi par la dimension latérale.

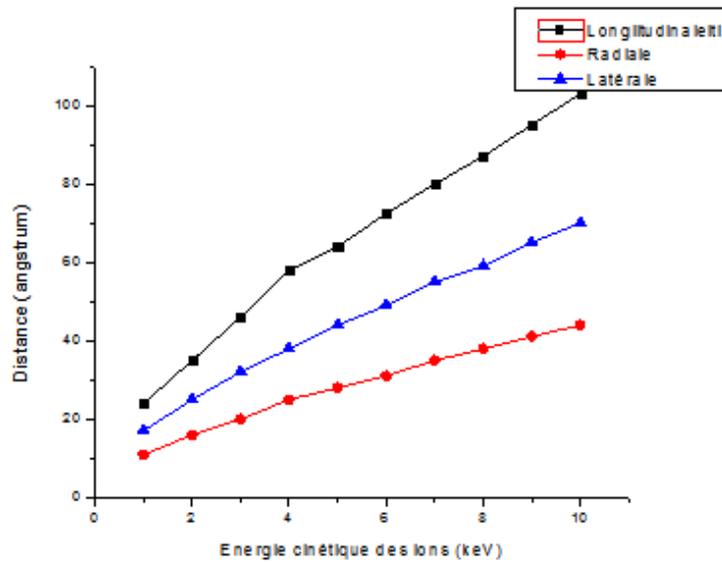


Figure II.7 Variation des dimensions longitudinale, latérale et radiale de la poire formée par le bombardement ionique Ar^+ sur GaAs

Le nombre des défauts portés sur la figure 6 par l'axe des ordonnées dépend beaucoup de l'énergie cinétique des ions Ar^+ atteignant la surface de GaAs. Cette dépendance est représentée sur la figure 8. La pente est assez importante et on conclut que pour des énergies importantes de 100 keV par exemple, le matériau va se détériorer et le cristal GaAs deviendra amorphe sur la partie bombardée.

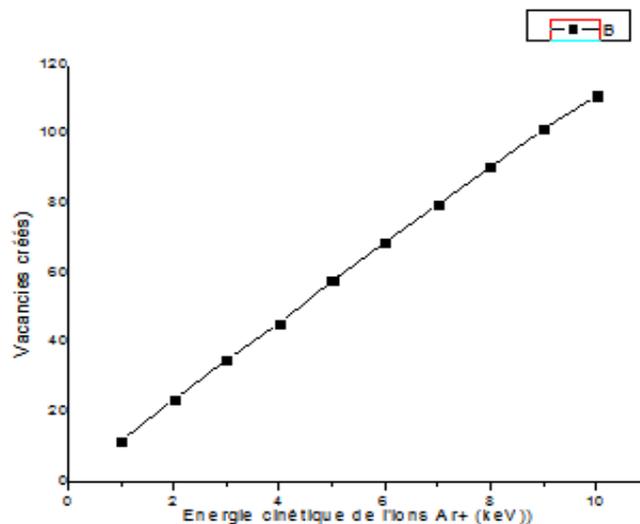


Figure II.8 Variation du nombre de défauts créés sur la surface du matériau GaAs en fonction de l'énergie cinétique de l'ion Ar^+

Expérimentalement après le bombardement ionique la surface du cristal GaAs est effectivement détériorée et des îlots (repérés par un microscope à force atomique AFM)

apparaissent sur la surface de GaAs mais, après un recuit thermique de l'échantillon la surface se reconstruit et on observe un phénomène de coalescence des ilots qui s'estompent rapidement. Ce phénomène de coalescence est possible pour de faibles énergies. Pour les hautes énergies, le phénomène de coalescence n'est plus possible.

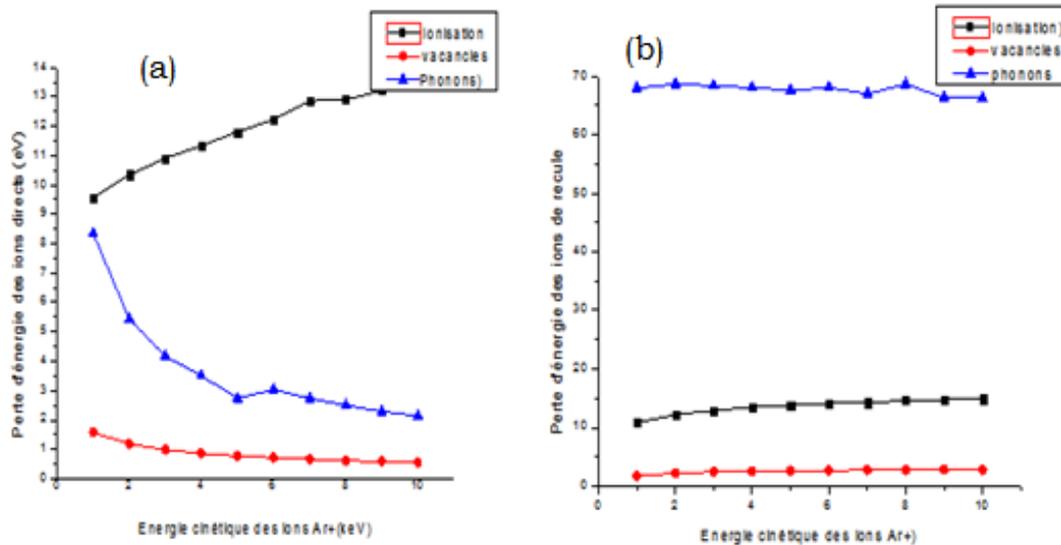


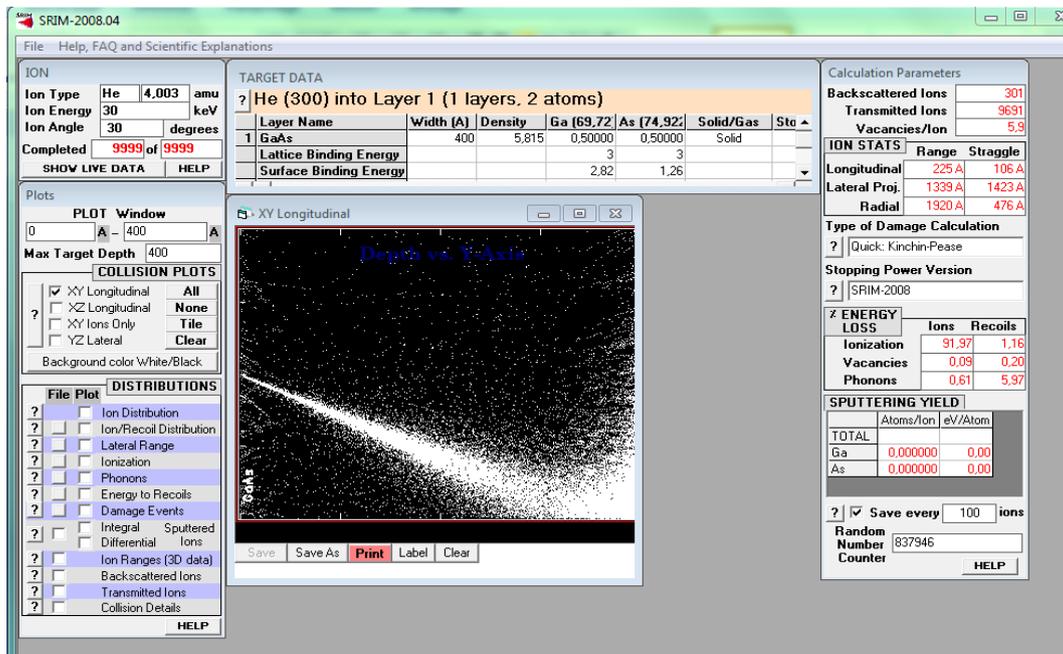
Figure II.9 Variation des pertes d'énergie pour les différents processus : ionisation Vacancielles (défauts) et phonons dans la matrice GaAs après bombardement par des ions Ar+ à différentes énergies cinétiques. (a) Ions directs, (b) ions de recul

II.3 Bombardement ionique de GaAs avec la particule hélium

L'étude de la pénétration du rayonnement dans les matériaux semi-conducteurs a été d'un intérêt théorique et pratique de grande importance dans ces dernières années, en raison de la nécessité de contrôler les propriétés des matériaux à l'échelle nanométrique. Arséniure de Gallium (AsGa) est un matériau photonique de base pour la plupart des communications de la technologie spatiale, et, par conséquent, il sera très intéressant de le préparer pour telles applications et pour cela une simulation des propriétés devient nécessaire avant de commencer les expériences

Dans cette étude nous avons choisi l'élément chimique hélium (He) correspondant à la particule alpha. Cette particule se trouve en abondance dans l'espace cosmique avec la particule gamma encore plus énergétique. Nous savons que les composantes optoélectroniques comme les cellules solaires, les LED, les diodes lasers utilisée dans l'espace sont à base des composés III-V comme le GaAs. Ces composantes sont en

permanence sujettes à des bombardements ioniques cosmiques, une simulation de ces bombardement avec variation de l'angle d'incidence est possible avec le logiciel TRIM et SRIM. Dans le tableau de bord figure 9, nous avons fixé le paramètre énergie à 30 keV et nous fait varier l'angle d'incidence entre 0° et 60° avec un pas de 10°. Les résultats sont regroupés sur le tableau N°2



La figure 10 donne les différentes dispositions obtenues pour les différents angles choisis.

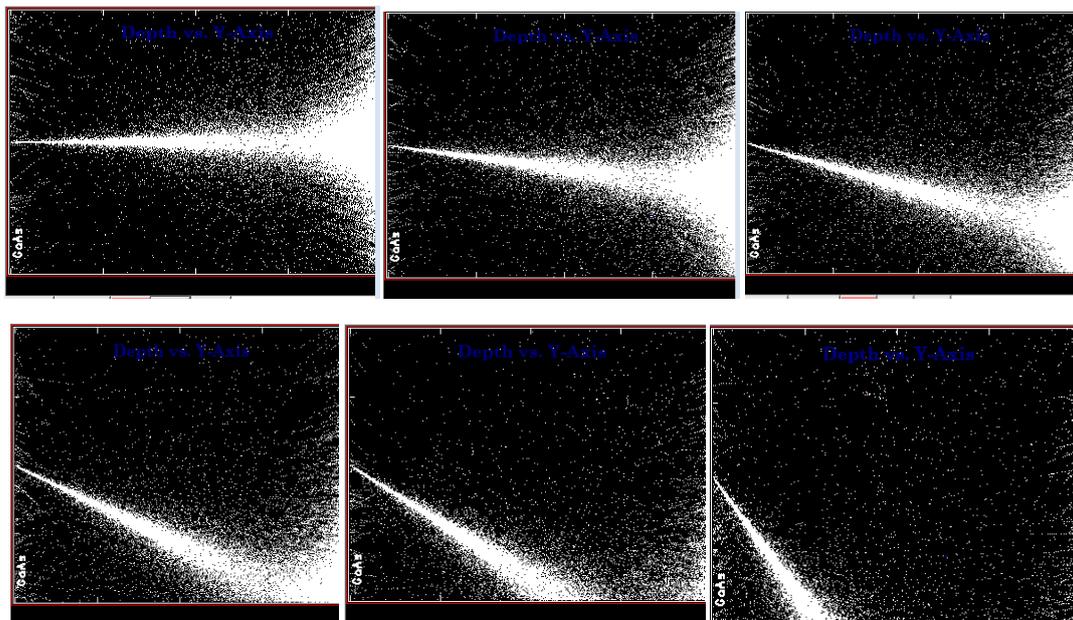


Figure II. 10 Différentes Inclinaisons prises par le faisceau des particule He dans le matériau GaAs

Pour une énergie fixée à 30 keV, le tableau N°2 donne les variations des paramètres en fonction de l'angle que fait le faisceau ionique avec la normale à la surface de la cible GaAs. Les paramètres qui nous intéressent sont les suivants :

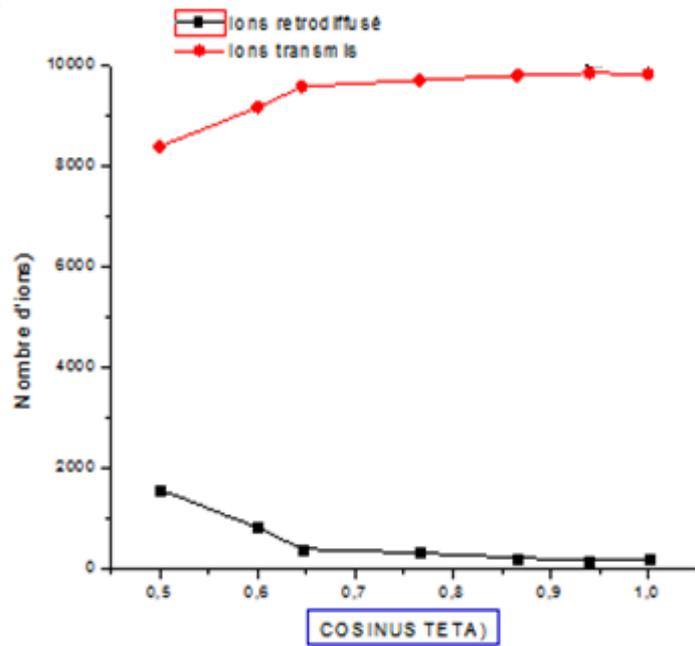
1. Le nombre des ions rétrodiffusés
2. le nombre des ions transmis
3. Le nombre de défaut (vacancies) formés dans la matrice GaAs
4. La perte d'énergie par : a) ionisation b) création de défaut c) création de phonon.

On constate que le paramètre nombre d'ions transmis apparait quand l'énergie est fixée à 30 keV. Ceci nous informe sur le fait que le composant optoélectronique est en danger certain. Nous allons voir comment on peut remédier à ce problème en particulier pour les cellules solaires soumis directement au rayonnement cosmique pour récupérer l'énergie photovoltaïque nécessaire au fonctionnement des stations spatiales.

Tableau II.3 : variation des paramètres avec l'angle d'incidence θ du faisceau d'ions He

Angle (θ°)	0	10	20	30	40	50	60
Cos θ	1	0.9396	0.866	0.766	0.6487	0.6	0.5
Ions rétrodiffusés	182	168	215	309	396	813	1571
Ions transmis	9814	9825	9781	9691	9557	9147	8371
Vacancies (défauts créés)	4.7	4.8	5.1	5.5	6.6	8.0	11.8
Perte d'énergie							
ionisation	92.28	92.28	91.57	92.15	91.53	91.1	91.06
vacancies	0.08	0.08	0.08	0.09	0.09	0.10	0.11
phonons	0.61	0.61	0.61	0.63	0.66	0.67	0.71

Dans cette analyse le tableau N°2 nous permet de tracer l'évolution du nombre d'ions He (alpha) traversant l'échantillon c'est-à-dire toute la couche de 40 nanomètres choisie comme cible. La figure 11 représente les variations du nombre d'ions (He) transmis par la couche en fonction du cosinus de l'angle θ que fait le faisceau d'ions He avec la normale à la surface du matériau GaAs. Sur la même figure on a représenté le nombre d'ions rétrodiffusés dans le matériau. Les deux courbes sont en nette disproportion faisant apparaître la transmission abondante des particules alpha. Ceci nous montre qu'une faible énergie de 30 keV pourra endommager le matériau GaAs. Que dire des énergies cosmiques en particulier les rayons gamma qui peuvent atteindre les MeV (10^6 eV).



La figure II.11 représente les variations des défauts en fonction de $\cos \theta$.

Le nombre de défauts (vacancies) varie exponentiellement avec l'angle θ (c'est-à-dire augmente quand l'angle augmente) car le cosinus qui diminue quand l'angle augmente.

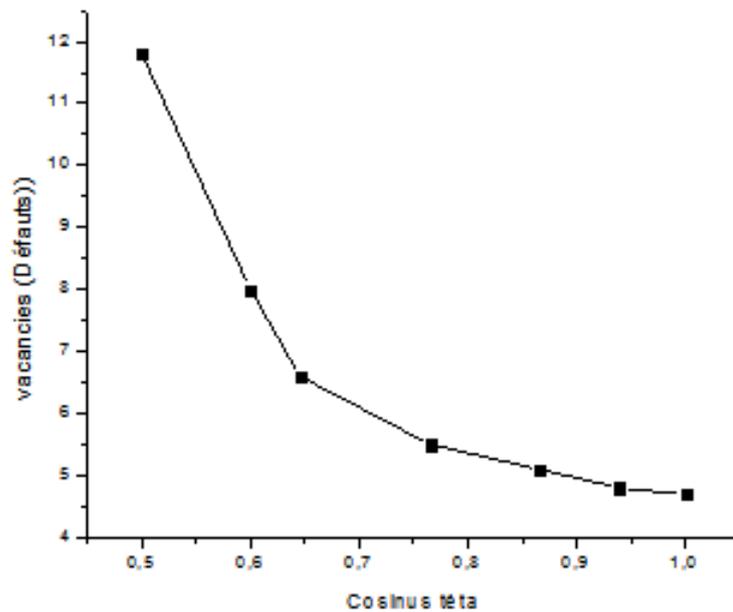


Figure II.12 Variation des défauts de Frenkel (vacancies) en fonction de l'angle de l'angle d'incidence du faisceau des électrons

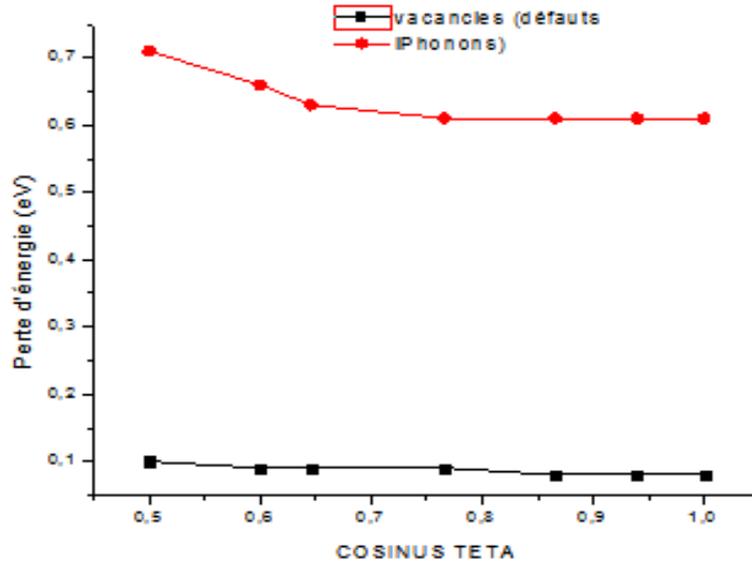


Figure II.13 Variation des défauts de Frenkel (vacancies) et des phonons en fonction de l'angle d'incidence du faisceau des électrons

II.4 Protection des composante par une couche d'oxyde transparent TCO.

Les cellules solaires photovoltaïques utilisées pour l'alimentation électrique des appareils et des systèmes électriques et électronique de détection et d'émission des signaux entre la station spatiale et la terre sont en majeure partie constitué des matériaux III-V comme le GaAs. En vu de les protéger on procède au dépôt d'une couche protectrice d'oxyde conducteur transparent TCO comme SnO_2 ; TiO_2 et In_2O_3 .

Le composant TCO le plus utilisé dans pour cet objectif est les l'oxyde d'étain SnO_2 . Il, possède trois propriétés très importantes l'une que l'autre à savoir la conduction électrique et il sera utilisé comme électrode et la transparence qui permet de laisser les rayons lumineux passer pour produire de l'électricité photovoltaïque. La troisième propriété est la protection du matériau GaAs qui coute plus cher et qui est le matériau sensible au rayonnement cosmique qui pourrait l'endommager.

Dans allons dans ce qui suit utiliser le code SRIM pour simuler ce processus de protection. La figure 14a montre le tableau de bord du code SRIM sur lequel on a fixé une énergie de 50 keV et nous utilisé deux couches la première est constituée du matériau SnO_2 et la deuxième du matériau GaAs. Sur la figure 14b nous allons conserver l'énergie à 50 keV et nous avons pris l'angle d'incidence du faisceau ionique égale à 50° .

Il apparait nettement que dans les deux configurations le matériau GaAs n'est touché par les ions nocifs alpha et gamma. Ce qui démontre combien ce TCO à savoir SnO_2 sera utile pour ces trois importantes fonctions citées auparavant.

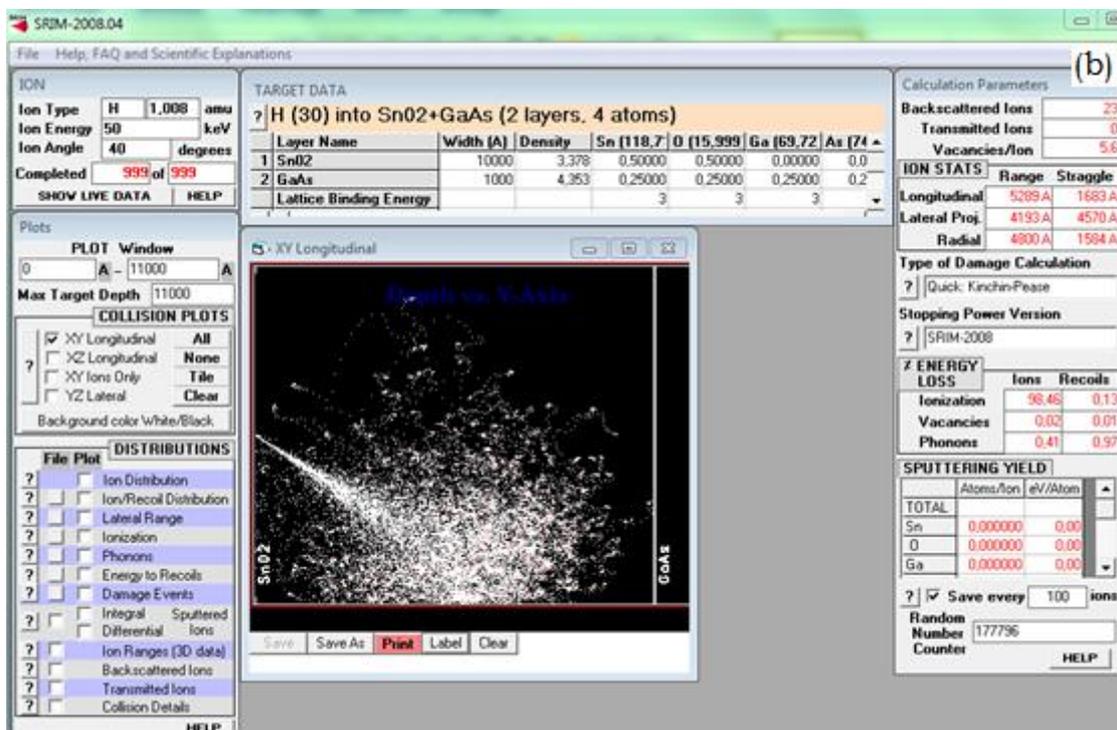
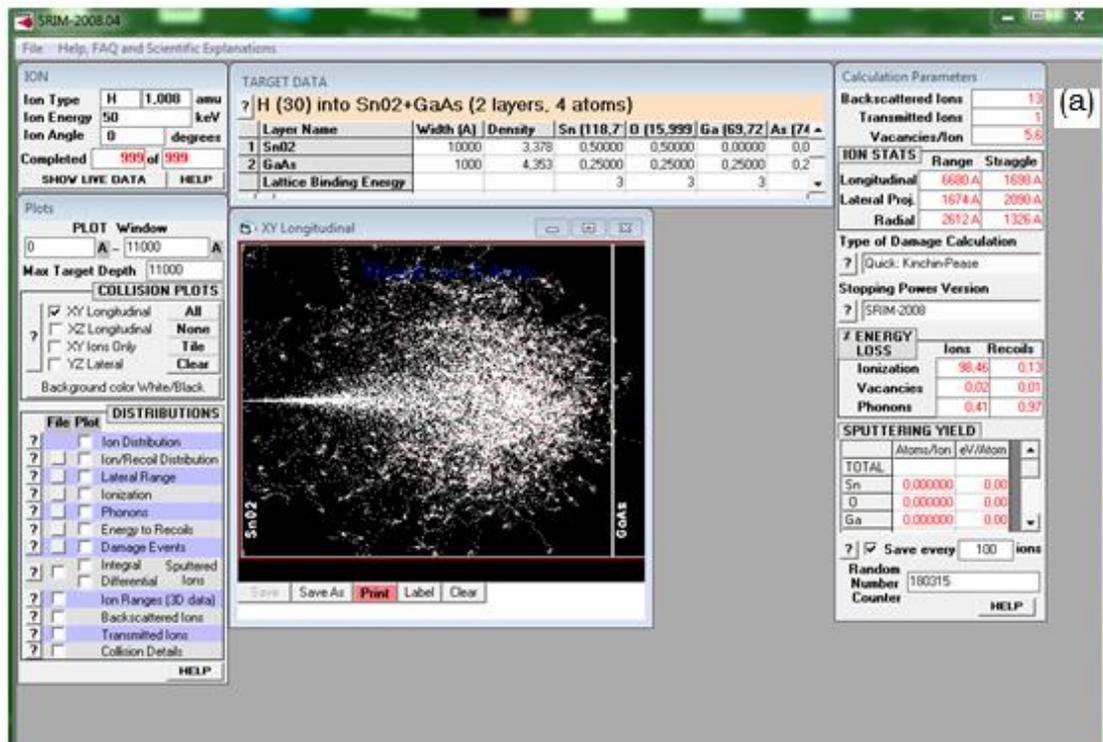


Figure II.14 (a) Couche d'oxyde SnO_2 protectrice de GaAs $\theta=0^\circ$ et (b) $\theta=50^\circ$ pour une énergie fixée à 50 keV

II.5 implantation d'ions H⁺ dans le Silicium

II-5.1 Introduction

L'atome de silicium est tétravalent il est au centre de quatre liaisons covalentes et donc tétra-coordonné selon une géométrie tétraédrique. Lorsqu'il est cristallisé, le silicium est donc solidifié de telle sorte que les atomes de silicium soient disposés les uns par rapport aux autres selon cette géométrie tétraédrique, chaque atome de silicium étant entouré par quatre autres atomes de silicium. Le silicium amorphe est caractérisé par le fait que ses atomes sont solidifiés de façon désordonnée : chaque atome de silicium est entouré par un nombre variable d'autres atomes de silicium, selon une disposition aléatoire qui ne respecte pas la géométrie tétraédrique du silicium.

Il s'ensuit que certaines liaisons covalentes sont « pendantes », c'est-à-dire qu'elles demeurent ouvertes dans le cristal, aucun autre atome de silicium ne venant les fermer. Ces liaisons pendantes sont autant de défauts cristallins susceptibles d'altérer les propriétés électroniques du matériau. Il est possible de passiver ces liaisons en traitant le silicium amorphe à l'hydrogène pour former du silicium amorphe hydrogéné, généralement abrégé **a-Si:H**, présentant suffisamment peu de défauts résiduels pour pouvoir être utilisé dans des composants électroniques [50-52].

II-5.2 Propriétés du silicium

Le silicium comme le germanium se cristallise suivant la structure diamant comme le montre la figure 15.

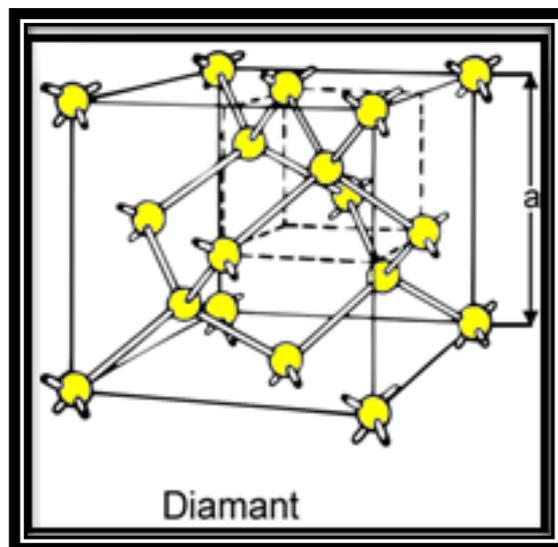


Figure II.15 Structure cristalline diamant de silicium ($a = 5.66\text{\AA}$).

Chaque atome du réseau est entouré de quatre proches voisins équidistants, formant un tétraèdre, avec lesquels il échange ses quatre électrons de valence. Dans ce réseau, La distance intra-atomique est de l'ordre de 2.35\AA . Elle correspond à la distance entre les premiers proches voisins [17].

ii. Structure de bande d'énergie :

Le rapprochement des atomes est lié à la distance interatomique d . Lorsqu'on considère les atomes du silicium arrangés suivant un réseau périodique, constituant une maille très grande de telle manière que les atomes puissent être considérés comme isolés. Les deux niveaux les plus énergétiques sont repérés par E_1 et E_2 , comme le montre le figure (I.2), le rapprochement des atomes jusqu'à la distance interatomique permet la formation de bande continues appelées bande de conduction (BC) et bande de valence (BV) séparées par une bande interdite appelée « gap ». La valeur de l'énergie du gap dépend de la nature du matériau [17,50].

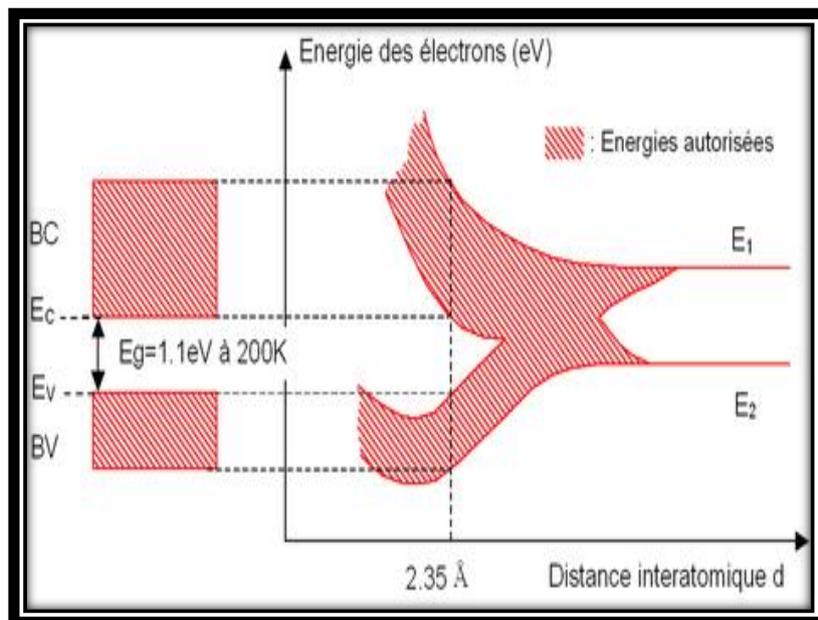


Figure II.16 Formation des bandes d'énergie du silicium.

La largeur de la bande interdite (*gap*) à 0°K est de l'ordre de $E_g = 1.1\text{eV}$ est donnée par le calcul en considérant la zone de Brillouin, comme le montre le figure 16, elle correspond à un gap indirect.

II.6- Simulation de l'Implantation d'ions Hydrogène

Afin de définir les paramètres des implantations de l'ion hydrogène H^+ dans le silicium Si on commence par effectuer des simulations TRIM. Lorsque l'on souhaite obtenir une distribution homogène de défauts structuraux sur toute l'épaisseur de la couche, il est nécessaire d'utiliser plusieurs énergies d'implantation. En effet, les ions introduits avec une seule énergie s'incorporent très localement dans la couche selon une distribution gaussienne. Et les défauts structuraux qu'ils créent sont également localisés. Il est donc nécessaire d'avoir recours à des implantations multi-énergie pour uniformiser la densité de défauts en sommant les différentes contributions des implantations à différentes énergies [17].

II-6.1 Perte d'énergie par implantation d'ions H^+

La perte d'énergie, dE/dx de l'ion H^+ dans le silicium peut être divisé en deux parties: l'énergie transférée par les ions H^+ aux électrons Si (appelé arrêt électronique ou de la perte d'énergie inélastique) et les noyaux de Si (appelé arrêt nucléaire ou élastique perte d'énergie).

La perte d'énergie d'électrons est due aux mécanismes suivants:

- 1) directs transferts d'énergie cinétique à électrons Si ce qui est principalement causée par les collisions électron-électron
- 2) l'excitation et l'ionisation des atomes de la cible,
- 3) Excitation de bande ou de la conduction des électrons,
- 4) l'excitation, l'ionisation ou la capture électronique du projectile lui-même

Pour simuler le pouvoir d'arrêt, on utilisera sur le tableau de bord de TRIM et SRIM l'entrée dénommée « Stopping Range Tables ». Ce choix nous amène à un autre tableau de bord qui demande d'indiquer l'ion avec lequel on va bombarder la cible. Bien sûr notre choix est prédéfini l'ion H^+ est celui qui va bombarder le cristal de silicium.

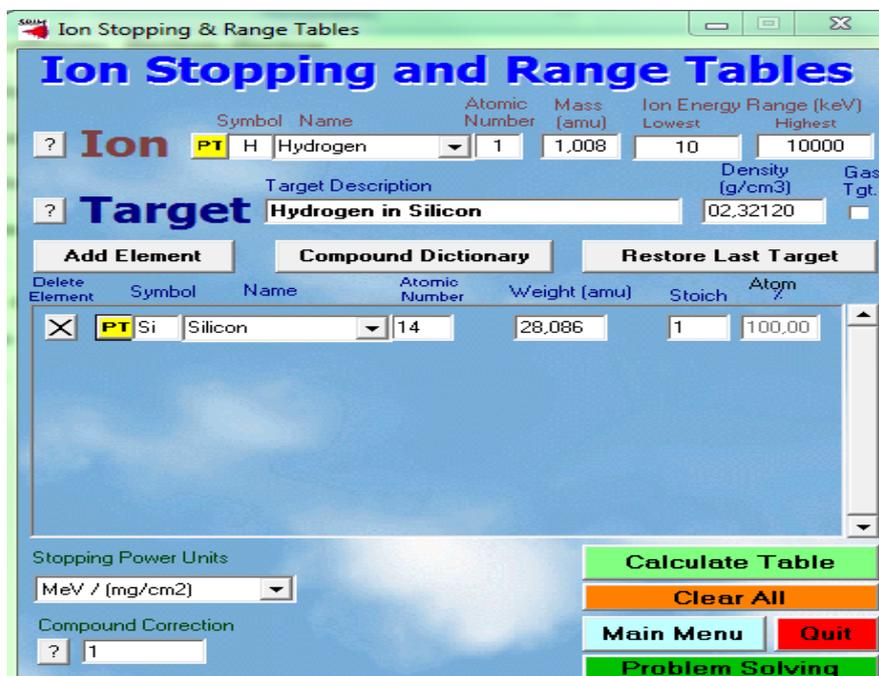


Figure II.17 Tableaux de bord de la simulation des pouvoir d'arrêt nucléaire et électronique sur le code SRIM et TRIM

L'arrêt nucléaire et l'arrêt par perte d'énergie des ions H^+ dans le silicium pour différentes énergie cinétique du faisceau d'ions sont indiqués dans le tableau 3. On constate que le pouvoir d'arrêt des électrons est toujours supérieur au pouvoir d'arrêt nucléaire. Ce tableau indique les dimensions longitudinales, transversales et radiales formées par les ions traversant la matrice du silicium. La représentation de ces courbes est donnée sur la figure II-18a et II-18b respectivement pour les deux arrêts électronique et nucléaire.

On relève sur ces deux courbes que les deux maximums correspondant aux pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique sont respectivement à 10 keV et 55 keV.

```

=====
Calculation using SRIM-2006
SRIM version --> SRIM-2008.04
Calc. date --> avril 22, 2016
=====

Disk File Name = SRIM Outputs\Hydrogen in Silicon

Ion = Hydrogen [1] , Mass = 1,008 amu

Target Density = 2,3212E+00 g/cm3 = 4,9770E+22 atoms/cm3
===== Target Composition =====
Atom Atom Atomic Mass
Name Numb Percent Percent
-----
Si 14 100,00 100,00
=====

Bragg Correction = 0,00%
Stopping Units = MeV / (mg/cm2)
See bottom of Table for other Stopping units

```

Ion Energy	dE/dx Elec.	dE/dx Nuclear	Projected Range	Longitudinal Straggling	Lateral Straggling
10,00 keV	3,131E-01	4,222E-03	1342 A	519 A	488 A
11,00 keV	3,277E-01	3,995E-03	1452 A	538 A	511 A
12,00 keV	3,419E-01	3,794E-03	1558 A	554 A	532 A
13,00 keV	3,566E-01	3,615E-03	1662 A	569 A	552 A
14,00 keV	3,688E-01	3,455E-03	1762 A	583 A	571 A
15,00 keV	3,813E-01	3,310E-03	1861 A	596 A	589 A
16,00 keV	3,933E-01	3,179E-03	1957 A	608 A	605 A
17,00 keV	4,046E-01	3,059E-03	2051 A	619 A	621 A
18,00 keV	4,152E-01	2,949E-03	2143 A	629 A	636 A
20,00 keV	4,346E-01	2,755E-03	2323 A	648 A	664 A
22,50 keV	4,556E-01	2,549E-03	2540 A	669 A	696 A
25,00 keV	4,732E-01	2,375E-03	2751 A	688 A	726 A
27,50 keV	4,878E-01	2,226E-03	2956 A	704 A	752 A
30,00 keV	4,999E-01	2,097E-03	3157 A	720 A	778 A
32,50 keV	5,097E-01	1,984E-03	3355 A	734 A	801 A
35,00 keV	5,177E-01	1,883E-03	3550 A	747 A	824 A
37,50 keV	5,240E-01	1,794E-03	3744 A	759 A	845 A
40,00 keV	5,289E-01	1,713E-03	3937 A	771 A	866 A
45,00 keV	5,352E-01	1,575E-03	4320 A	793 A	905 A
50,00 keV	5,380E-01	1,459E-03	4701 A	814 A	942 A
55,00 keV	5,382E-01	1,360E-03	5084 A	833 A	977 A
60,00 keV	5,365E-01	1,276E-03	5468 A	852 A	1011 A
65,00 keV	5,334E-01	1,202E-03	5855 A	869 A	1044 A
70,00 keV	5,293E-01	1,137E-03	6246 A	886 A	1077 A
80,00 keV	5,192E-01	1,028E-03	7041 A	922 A	1140 A
90,00 keV	5,077E-01	9,403E-04	7856 A	957 A	1203 A
100,00 keV	4,957E-01	8,673E-04	8692 A	991 A	1265 A
110,00 keV	4,836E-01	8,057E-04	9550 A	1024 A	1326 A
120,00 keV	4,717E-01	7,531E-04	1,04 um	1058 A	1388 A
130,00 keV	4,603E-01	7,075E-04	1,13 um	1091 A	1451 A
140,00 keV	4,492E-01	6,675E-04	1,23 um	1124 A	1513 A
150,00 keV	4,387E-01	6,322E-04	1,32 um	1158 A	1577 A
160,00 keV	4,286E-01	6,008E-04	1,42 um	1192 A	1641 A
170,00 keV	4,190E-01	5,726E-04	1,52 um	1226 A	1706 A
180,00 keV	4,099E-01	5,471E-04	1,62 um	1261 A	1772 A
200,00 keV	3,930E-01	5,030E-04	1,83 um	1347 A	1907 A
225,00 keV	3,741E-01	4,576E-04	2,11 um	1466 A	2081 A
250,00 keV	3,573E-01	4,203E-04	2,40 um	1587 A	2261 A
275,00 keV	3,423E-01	3,890E-04	2,70 um	1710 A	2447 A
300,00 keV	3,288E-01	3,624E-04	3,02 um	1835 A	2638 A
325,00 keV	3,166E-01	3,395E-04	3,35 um	1961 A	2836 A
350,00 keV	3,055E-01	3,194E-04	3,69 um	2089 A	3039 A
375,00 keV	2,954E-01	3,018E-04	4,05 um	2219 A	3248 A
400,00 keV	2,861E-01	2,862E-04	4,41 um	2351 A	3463 A
450,00 keV	2,696E-01	2,596E-04	5,18 um	2727 A	3908 A
500,00 keV	2,554E-01	2,379E-04	5,99 um	3098 A	4373 A
550,00 keV	2,430E-01	2,197E-04	6,85 um	3468 A	4857 A
600,00 keV	2,321E-01	2,043E-04	7,75 um	3838 A	5360 A
650,00 keV	2,224E-01	1,911E-04	8,69 um	4209 A	5881 A
700,00 keV	2,137E-01	1,795E-04	9,67 um	4582 A	6418 A
800,00 keV	1,986E-01	1,604E-04	11,74 um	5719 A	7542 A
900,00 keV	1,861E-01	1,452E-04	13,97 um	6806 A	8728 A
1,00 MeV	1,755E-01	1,328E-04	16,33 um	7871 A	9972 A

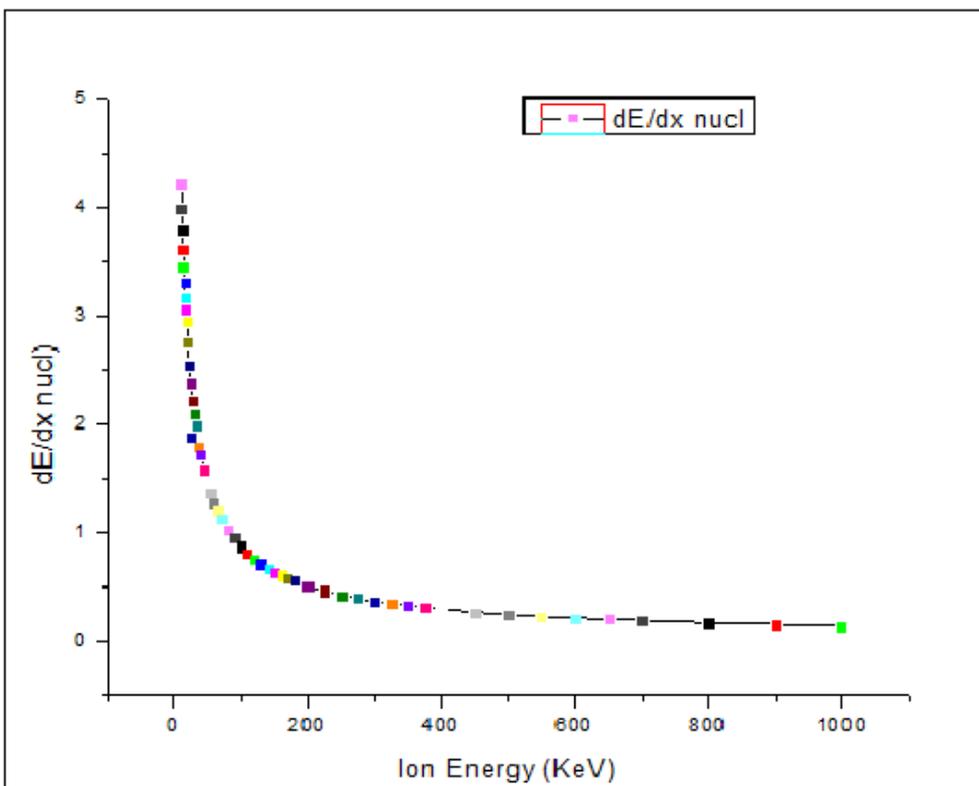
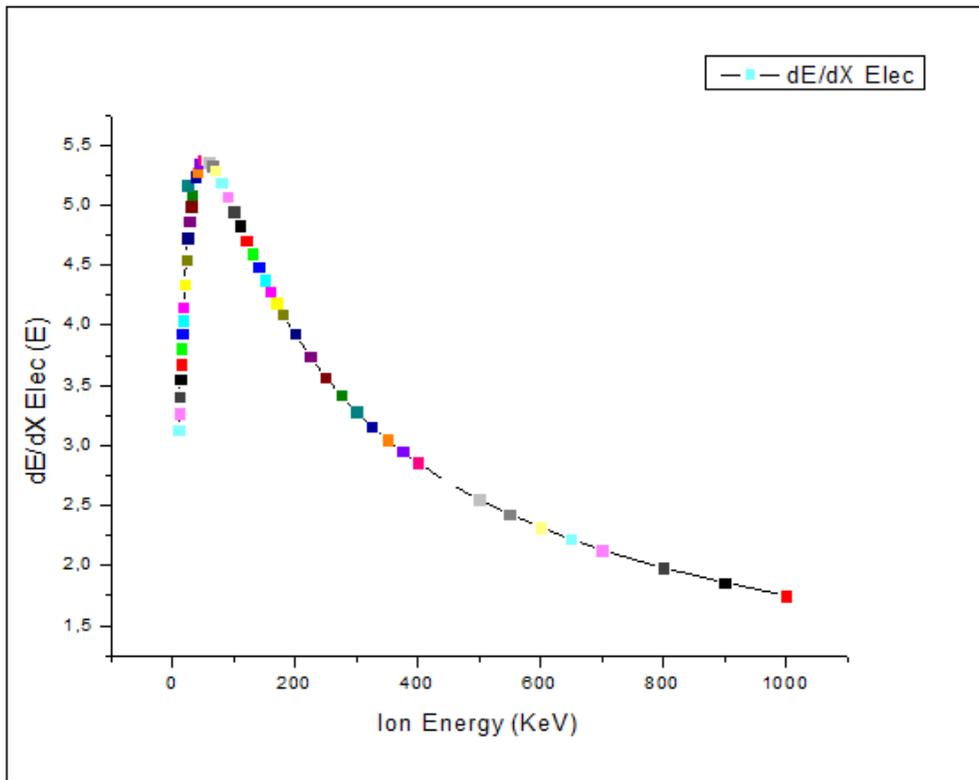


Fig.II.18 représentation de l'arrêt électronique (a) et de l'arrêt nucléaire (b) des ions H^+ dans la matrice Silicium

Figure II.19 et la Figure II.20 montrent la trajectoire de l'ion H^+ aux deux énergies $E_H = 10 \text{ keV}$ et $E_H = 1 \text{ MeV}$ avec un angle d'incidence de 0° et 30° respectivement. Les points rouge sur la trajectoire des ions représentent la vacance créée par l'incident ion H^+ ce qui signifie qu'un atome dans le Si est déplacé de son site dans le réseau cristallin. Les points rouges montrent que l'ion H^+ crée constamment des dommages. Les points verts sont les postes laissés vacants par les atomes de Si éjectés.

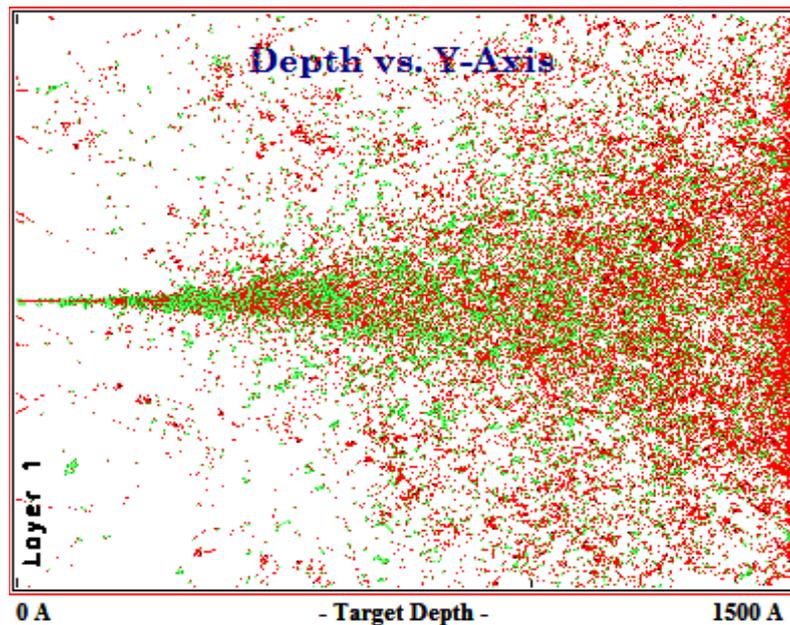


Figure II.19 Les ions H^+ bombardant le Si à l'énergie $E_H = 10 \text{ keV}$ à $\theta = 0^\circ$

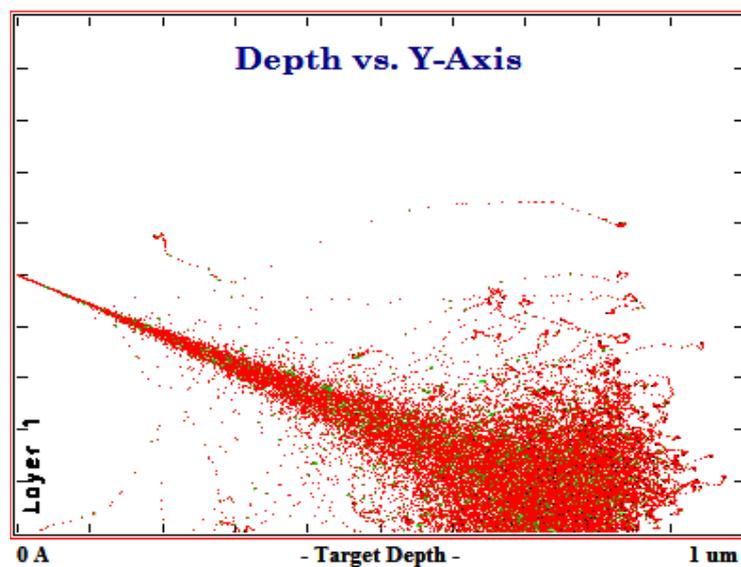


Figure II.20 Les ions H^+ bombardant le Si à l'énergie $E_H = 30 \text{ keV}$ à $\theta = 30^\circ$

Figure II.21 et la Figure II.22 montrent le nombre de déplacements des atomes Si par ions par Angstrom le long du faisceau d'ions à $E_H = 10 \text{ keV}$ et $E_H = 1 \text{ MeV}$ respectivement. La courbe la plus élevée (rouge) montre les déplacements cibles tandis que la courbe inférieure (bleu) donne les postes vacants créés dans la matrice. La courbe la plus basse montre la collision de remplacement indiquant le nombre d'incidents ion H^+ , qui ont remplacé les postes laissés vacant par l'atome Si reculant.

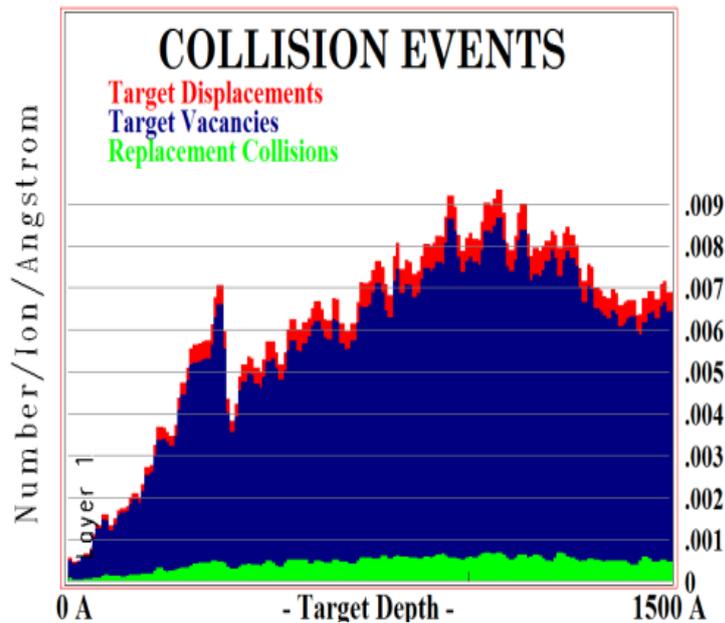


Figure II.21 Répartition des postes créés par bombardement d'ions H^+ sur Si (épaisseur max 1500Å)

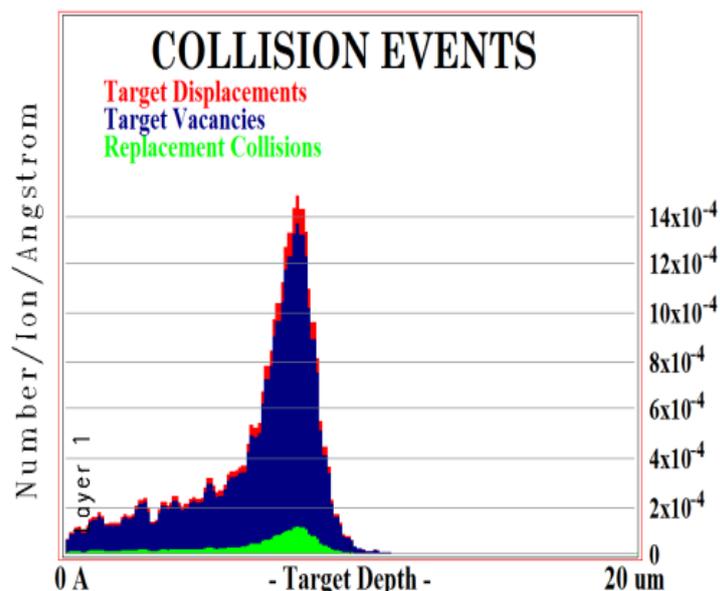


Figure II.22 Répartition des postes créés par bombardement d'ions H^+ sur Si (épaisseur max 20 μm)

Le code TRIM est capable aussi de nous donner une représentation à trois dimensions de la distribution des ions hydrogène pour une énergie donnée. Les trois formes d'interaction citée sur les figures précédentes. La figure II-23 nous donne la représentation 3D enregistrée sur SRIM version 2013 pour le bombardement H^+ sur Silicium.

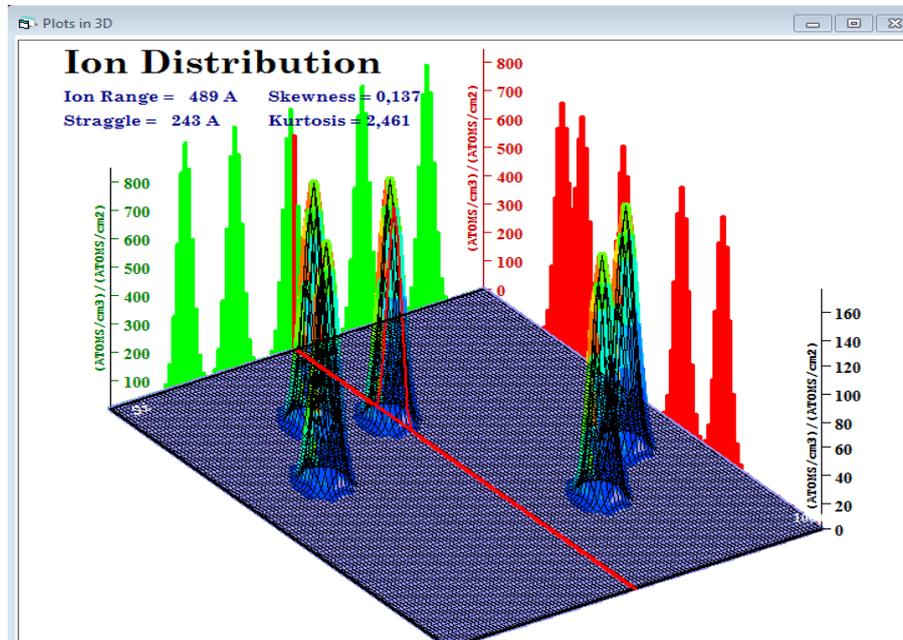


Figure II.23 Enregistrement 3D par code SRIM 2013 du bombardement des ions H^+ sur la cible Si

Le tableau N°3 montre les résultats de simulation pour la perte d'énergie des ions H^+ et de recul pour différentes énergies et différents angles d'incidence. Le tableau récapitule les pertes d'énergie causées par l'ion H^+ introduisant une ionisation suivie par la création de phonon à l'intérieur de la matrice Silicium.

Tableau II.4 Perte d'énergie pour la création d'ions et de phonons dans la matrice Si pour différents angles d'incidence θ

Energie de l'ion (keV)	θ (°)	Perte d'énergie directe		Perte d'énergie de recul	
		Ionisation	Phonons	ionisation	phonons
10	0	96.17	0.92	0.57	2.16
	30	95.93	1.01	0.59	2.29
	60	95.86	1.07	0.59	2.29
100	0	99.22	0.16	0.14	0.45
	30	99.25	0.16	0.13	0.43
	60	99.5	0.16	0.13	0.43
1000	0	99.84	0.03	0.04	0.09
	30	99.84	0.03	0.04	0.09
	60	99.84	0.03	0.04	0.09

Tableau II.5 : paramètre d'implantation d'ions hydrogène sur une couche de silicium d'épaisseur 1µm

Dose (at/cm ²)	Energie (keV)
2,1.10 ¹³	25
2,7.10 ¹³	70
3,45.10 ¹³	120
6,75.10 ¹³	180

II.7 Conclusion

L'évolution des dommages dus au rayonnement ionique est simulée dans des couches nanométriques GaAs en utilisant SRIM (Stopping and Range of Ions in Mater). TRIM (Transport and Range of Ions in Mater) .Le calcul est également utilisé pour simuler la quantité d'énergie dissipée par les collisions et les événements de recul.

. D'après les résultats, on constate que la plupart des dommages formés dans la couche de GaAs induite par les radiations est provoquée par la création de défaut ponctuel (défaut de Frenkel). Ceci est dû à l'énergie transférée par l'ion cible énergétique ou reculant à l'atome dans la matrice ciblée est supérieure à l'énergie de déplacement. Cependant, lorsque la couche de GaAs est réduite (à l'échelle nanométrique), on a constaté que la couche de GaAs peut résister à une énergie de rayonnement plus élevée en termes de dommages de déplacement lorsque celle-ci est protégée par une couche d'oxyde d'étain SnO₂.

L'implantation d'ions hydrogène a été simulée par le code TRIM en vu de montrer comment s'introduisent ces ions H⁺ pour créer des liaisons sous la forme Si-H avec les ions du Silicium

CHAPITRE III

Simulation de l'interaction électrons-matière logiciel casino

III.1 Introduction

L'avancement de la théorie de l'interaction électron-matière et le développement des méthodes de simulation de type Monte Carlo a permis de trouver des réponses aux différentes questions relatives au volume d'interaction qui n'est pas facile à obtenir expérimentalement. [39]. Il existe plusieurs logiciels de simulation de cette interaction mais le plus rapide et le plus accessible sur le net est Casino sous plusieurs versions. Le logiciel casino V2.42 et V2.64 dont l'acronyme est monte **Carlo Simulation of electroN trajectory in sOlid** apparaît le mieux adapté à notre étude de l'interaction électron –matière. Ce logiciel nous permet d'utiliser une gamme d'énergie des électrons allant de 0 à 30 keV. Ce qui est largement suffisant pour simuler les interactions électron matière solide. Ce logiciel est applicable aux cibles massives pures ou multicouches [4].

Le logiciel Casino, version 2.42 en deux dimensions axisymétriques, s'attache au calcul microscopique de la trajectoire d'un électron unique, interaction après interaction. Plusieurs centaines de milliers de trajectoires peuvent être calculées lors d'une simulation. La simulation d'une trajectoire d'un électron primaire peut se séparer en trois phases: la pénétration initiale de l'électron dans la cible sans subir de déviation angulaire, puis le régime permanent de diffusion et enfin la fin de la trajectoire. Cette dernière a lieu lorsque l'énergie de l'électron incident du faisceau primaire passe en dessous d'un seuil.

Les paramètres d'entrée de la simulation considérés sont les suivants : - le nombre d'électrons simulés : en effet, pour générer un résultat précis, plusieurs dizaines de milliers de trajectoires doivent être simulées.

Dans notre cas, nous allons faire des calculs avec 10000 particules. - la trajectoire d'un électron ou la profondeur de pénétration maximale d'un électron dépend de son énergie. L'énergie de l'électron varie entre 10 et 30 keV dans notre simulation. - l'angle entre la direction d'incidence du faisceau d'électrons et la normale à la surface de l'échantillon α . Le faisceau d'électrons arrive perpendiculairement à la surface de l'échantillon ($\theta = 0$), le volume d'interaction est symétrique et la profondeur de pénétration de la trajectoire est maximale. Par contre, si $\theta \neq 0$, le volume d'interaction est asymétrique et la trajectoire de l'échantillon est moins visible. Dans un premier cas, nous considérons le faisceau d'électrons perpendiculaire à la surface de l'échantillon.

III.2 Principe du mode opératoire.

On choisit les paramètres liés au microscope électronique car casino est une simulation du processus utilisé par les différents types de microscope comme le MEB (Microscope à Balayage Electronique). Ces paramètres sont : l'énergie du faisceau d'électron, le diamètre du faisceau. La taille du faisceau d'électron doit être constante pour ne pas affecter la résolution.

1. Le rayon du faisceau d'électron est calculé en fonction de la taille du spot qui est expérimentalement proche de la valeur 4 nm.
2. On fixe le nombre des électrons qui seront utilisés dans l'interaction avec la cible choisie
3. L'inclinaison du faisceau des électrons reste toujours égale à zéro.
4. L'option « scan the beam to create an image » doit être cochée
5. Choisir le matériau et son épaisseur
6. Dans le cas de multicouches on choisit l'option « multilayers »

La figure III-1 donne un aperçu sur le tableau de commande du logiciel CASINO V2.48 après une première commande introduisant les données précédemment citées, le logiciel nous demande de choisir le matériau. Après notre choix il le caractérise chaque élément chimique de l'étain et l'oxygène par leur numéro atomique Z fig.III.1a, leur fraction molaire massique et leur fraction atomique c'est-à-dire le nombre d'atome de Sn sur leur nombre d'atome d'oxygène.

Il nous demande ensuite les caractéristiques de la deuxième couche ou du substrat. Effectivement on introduit tout de suite qu'il y en a et après introduction de la formule chimique de la deuxième couche qui est le composé GaAs. Il le caractérise de la même manière que précédemment fig.III.1b.

La figure III.1.c montre qu'il a accepté les données des couches. Il nous demande de passer aux gammes de variation en énergie et en distance choisie pour scanner la surface. La figure III.1d nous montre le choix qui a été imposé au logiciel casino.

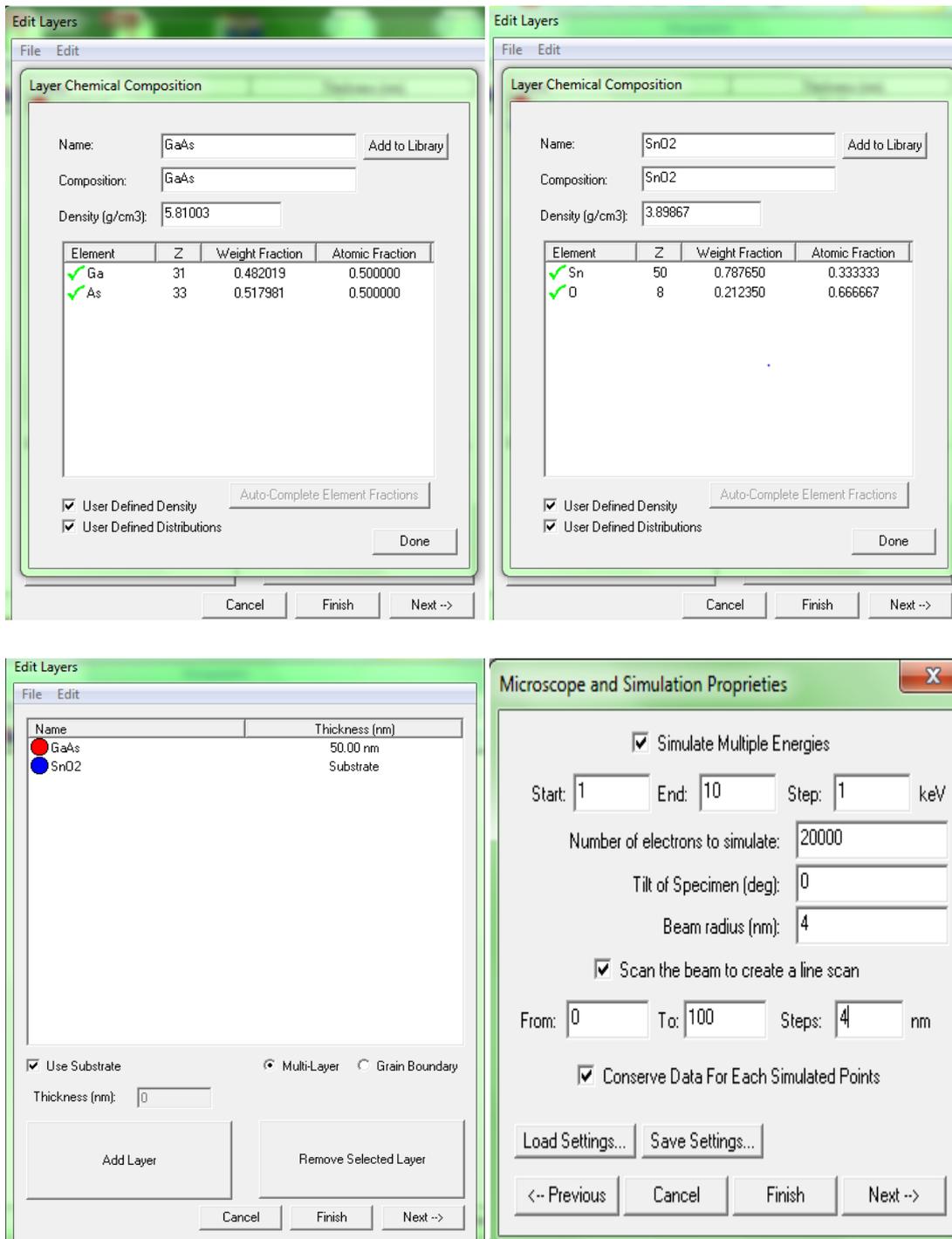


Figure III.1 (a) donnée GaAs (b) donnée de SnO₂ (c) réponse du code casio(d) introduction des données en énergie et distance de scan, de l'angle d'incidence du faisceau des électrons

III-3 Résultats et discussions

Une fois les données injectées et en particulier le nombre d'électron fixé (20000) comme affiché sur figure III.1, le logiciel commence son calcul numérique et montre les trajectoires

aléatoires prises par les différent électrons dans le matériau SnO₂ et le matériau GaAs normalement protégé par l'oxyde d'étain comme montré sur fig.III.2

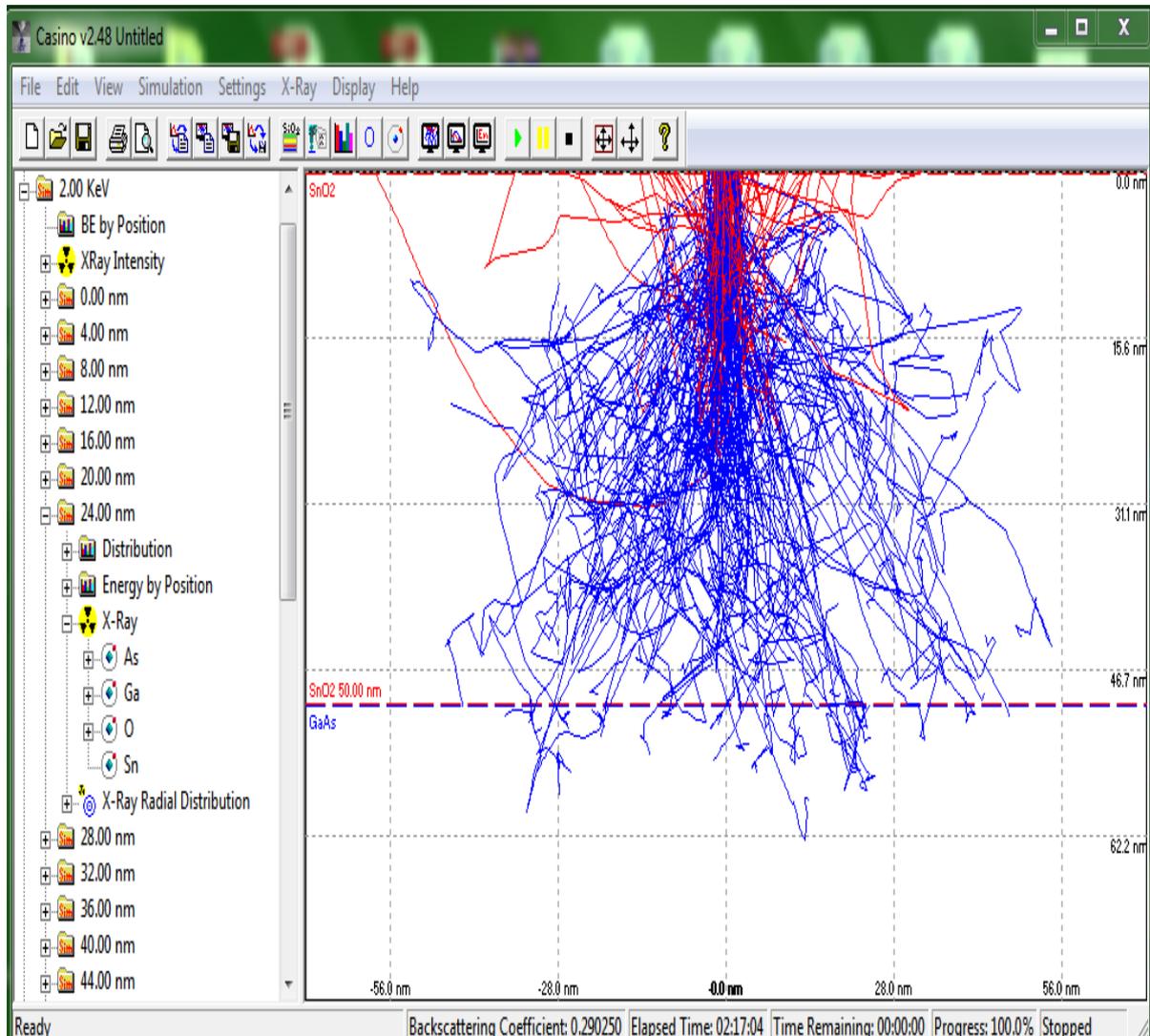


Figure III.2 : Trajectoire des électrons dans les matériaux SnO₂ et GaAs avec les donnée du tableau de bord sur le calcul numérique exécuté par le logiciel.

La figure III.3 montre la répartition en pourcentage des électrons bombardant la surface de l'échantillon à une incidence normale. Cette répartition forme la poire d'interaction rayonnement électronique –matière. A L'énergie de 5 keV représentant l'énergie cinétique du faisceau d'électrons, on voit que les majeures parties de ces électrons sont localisés sur la couche protectrice de SnO₂. Un nombre réduit d'électron atteint la couche de GaAs. Mais si l'énergie cinétique dépasse cette valeur le faisceau des électrons peut outrepasser la couche SnO₂ et excite le matériau GaAs.

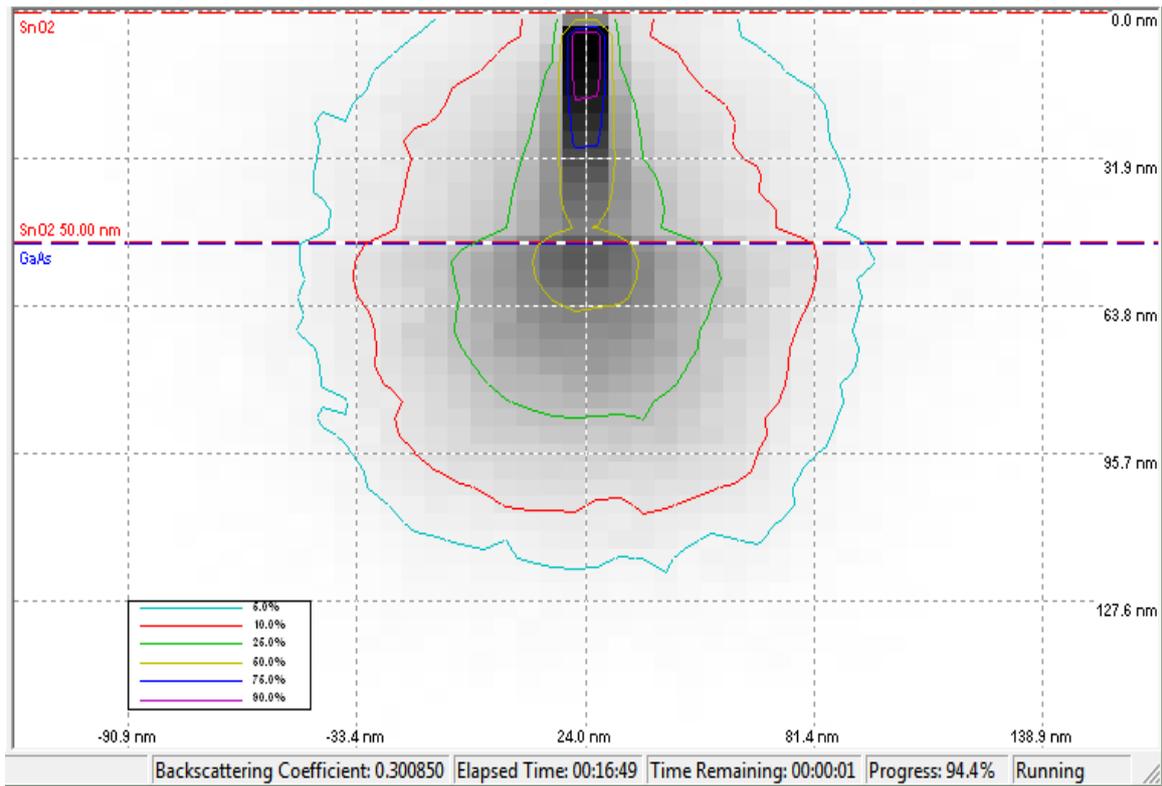
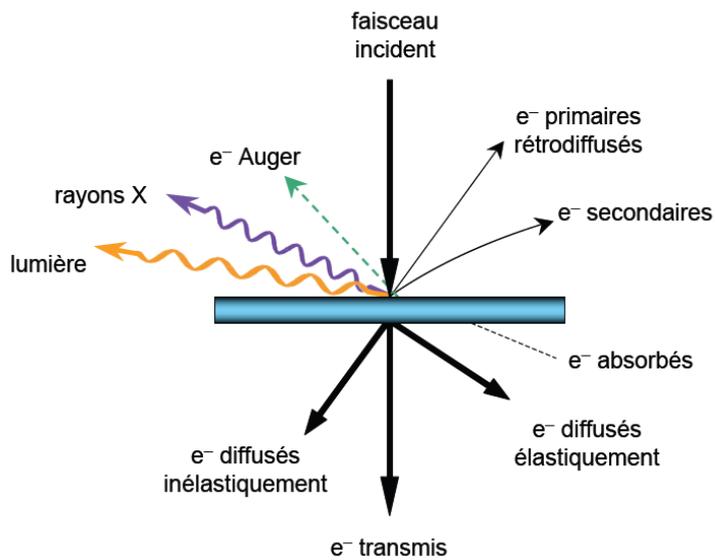


Figure III.3 : répartition des électrons dans la poire d'interaction électrons-matière SnO₂/GaAs

III-3.1 Interaction du faisceau des électrons avec la surface du matériau GaAs



Au sein de l'atome, cet apport d'énergie se traduit généralement par l'ionisation d'un niveau atomique provoquant l'émission d'un électron (qualifié de « secondaire »), le plus souvent situé sur un des niveaux de valence et donc possédant une très faible énergie cinétique (en moyenne 5 à 10 eV). Le retour à l'équilibre de l'atome ionisé sera accompagné d'une émission, soit électromagnétique (transition radiative, principalement constituée par un spectre de rayons X), soit électronique (transition Auger). Ces deux émissions sont caractéristiques de la composition chimique locale de la cible.

Les électrons interagissent de manière prépondérante avec les électrons des atomes constituant le milieu traversé. Si l'énergie transférée par l'électron incident est supérieure à l'énergie de liaison ($E > 30$ eV) d'un électron de l'atome cible, celui-ci est expulsé du cortège et il y a ionisation de l'atome. Les électrons atomiques concernés sont les électrons fortement liés de la couche K [53,54].

Si l'énergie transférée par l'électron incident est exactement égale à la différence entre les énergies de liaison de 2 couches électroniques de l'atome cible, un électron de cet atome saute sur une couche moins liée et il y a excitation. Les électrons atomiques concernés sont les électrons faiblement liés des couches externes.

Les collisions inélastiques des électrons d'atomes cibles, qui sont soit éjectés de leurs orbites, avec une perte d'énergie et un faible transfert de vitesse, provoque une dispersion inélastique qui donne naissance à une grande variété de signaux de processus utiles tel que : figure III.4

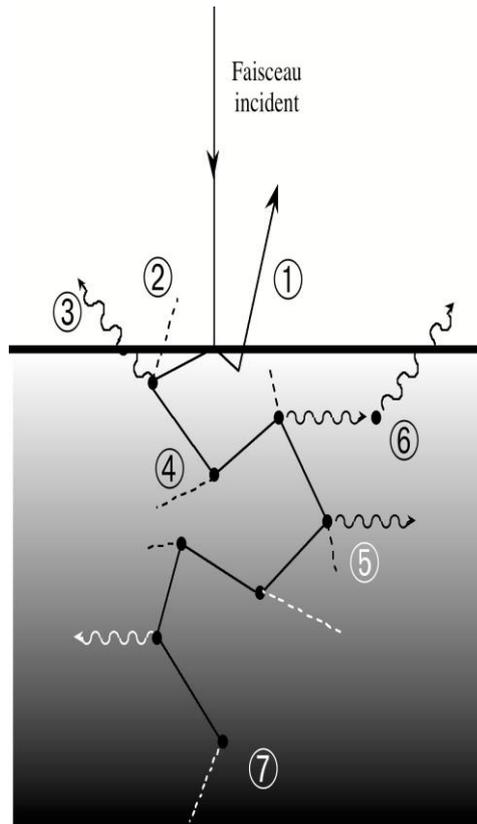


Figure III.4 : interaction électron matière 1.Électrons rétrodiffusés 2. Électrons secondaires 3. Rayons X émis 4. Électrons secondaires absorbés 5. Rayons X absorbés Électrons absorbés 6.Fluorescence 7.Électrons absorbés

III-3.2 Production de RX par les électrons sur la surface du SnO₂/ GaAs

Comme nous l'avons rappelé au chapitre I, le faisceau des électrons va créer un ensemble de phénomènes successifs et aléatoire dont la génération de rayons X dont une partie sera absorbée par le matériau et une deuxième partie non absorbée. Ce processus est visualisé par la simulation utilisant le logiciel casino décrit auparavant. Les matériaux avec lesquels les électrons vont interagir sont le SnO₂ et le GaAs. Ces mêmes matériaux ont été précédemment sujets à une interaction ions-matière [54].

Les fig. III.4 correspond à l'émission des RX par la couche L_{III} du gallium après interaction du faisceau des électrons avec le composé GaAs.

III-3.3 Interaction des rayons X avec la matière

Les rayons X produits par les électrons incidents réagissent avec la matière SnO_2/GaAs . Nous donnons tout d'abord un aperçu sur le mécanisme d'interaction des Rayons X avec la matière. Nous expliquons ensuite pourquoi certains Rayons X sont absorbés et d'autres ne le sont pas. Nous entamons ensuite la présentation et la discussion des résultats obtenus par le logiciel CASINO .Celui-ci nous donne des courbes indiquant les deux types d'interactions [4,57].

Les différents types d'interaction entre le faisceau de rayons X et un matériau sont décrits comme suit :

Les rayons X peuvent être :

- transmis sans changer de direction : on parle de radiographie X que l'on utilise pour la détection de porosités ou de fissures,
- transmis en changeant de direction (selon un angle) ou diffusés ; la diffusion pouvant se faire :
 - sans perte d'énergie : on parle alors de diffusion élastique, elle est à l'origine de la diffraction des rayons X par les cristaux,
 - avec perte d'énergie (une partie de l'énergie est cédée à un électron) : on parle alors de diffusion inélastique, elle est à l'origine de l'effet Compton.
- absorbés par les atomes : sous l'action du rayonnement incident, un électron d'un atome de l'échantillon peut être éjecté de la couche électronique qu'il occupait, c'est l'effet photoélectrique, l'électron éjecté étant appelé photo-électron. L'électron éjecté peut être remplacé par un électron d'une couche supérieure. Ce saut électronique s'accompagne d'un rayonnement X appelé rayonnement de fluorescence, il est utilisé pour l'analyse chimique des cristaux [53-57].
- enfin, notons que tous ces phénomènes s'accompagnent d'un dégagement de chaleur

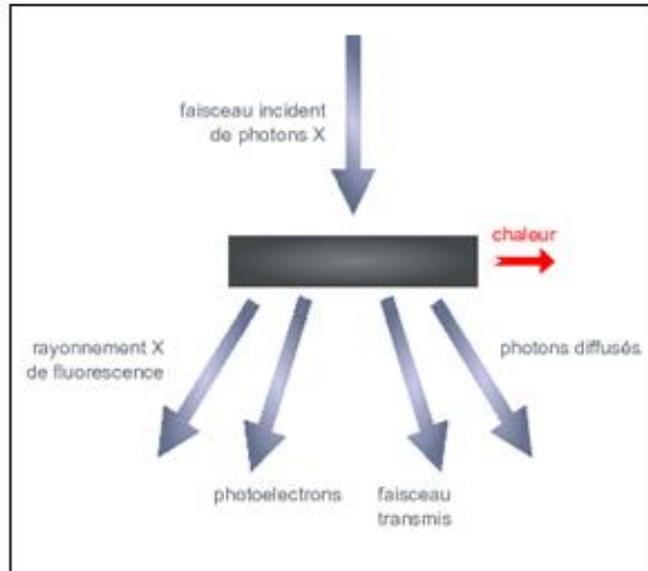


Figure III.5 mécanisme d'interaction des rayons X avec la matière

III-4 Absorption des rayons X par la matière

Quand un faisceau de rayons X d'intensité I traverse une très fine couche de matériau d'épaisseur dx , l'intensité du faisceau émergent décroît d'une quantité telle que :

$$dI = -\mu \cdot I \cdot dx \quad \text{III.1}$$

Où μ est le coefficient d'absorption linéaire (homogène à l'inverse d'une longueur).

Le coefficient d'absorption μ croît avec la longueur d'onde. Les radiations de courtes longueurs d'onde, énergétiques, sont peu absorbées : ce sont des radiations dites "dures" ou pénétrantes. Cependant, la croissance de μ avec la longueur d'onde n'est pas continue et de brusques discontinuités apparaissent pour certaines longueurs d'onde.

Représentation schématique de l'évolution du coefficient d'absorption avec la longueur d'onde et principe de production d'un rayonnement monochromatiques

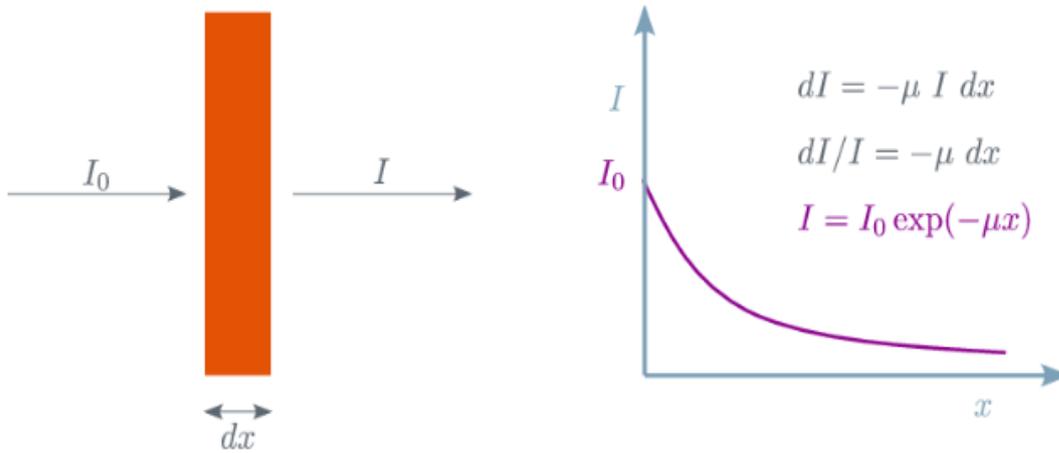


Figure III.6 Mécanisme d'absorption des rayons X dans la matière

Nous avons relevé les variations des intensités absorbées et non absorbées des rayons X produits par le faisceau des électrons tombant sur le composé SnO₂/GaAs à des énergies cinétique différentes et émis par chacun des quatre atomes constituant à savoir l'étain Sn ; l'oxygène O ; le gallium Ga et l'arsenic As. Ces rayons X sont de deux types les RX absorbés et les RX non absorbés par la matrice du composant SnO₂/GaAs.

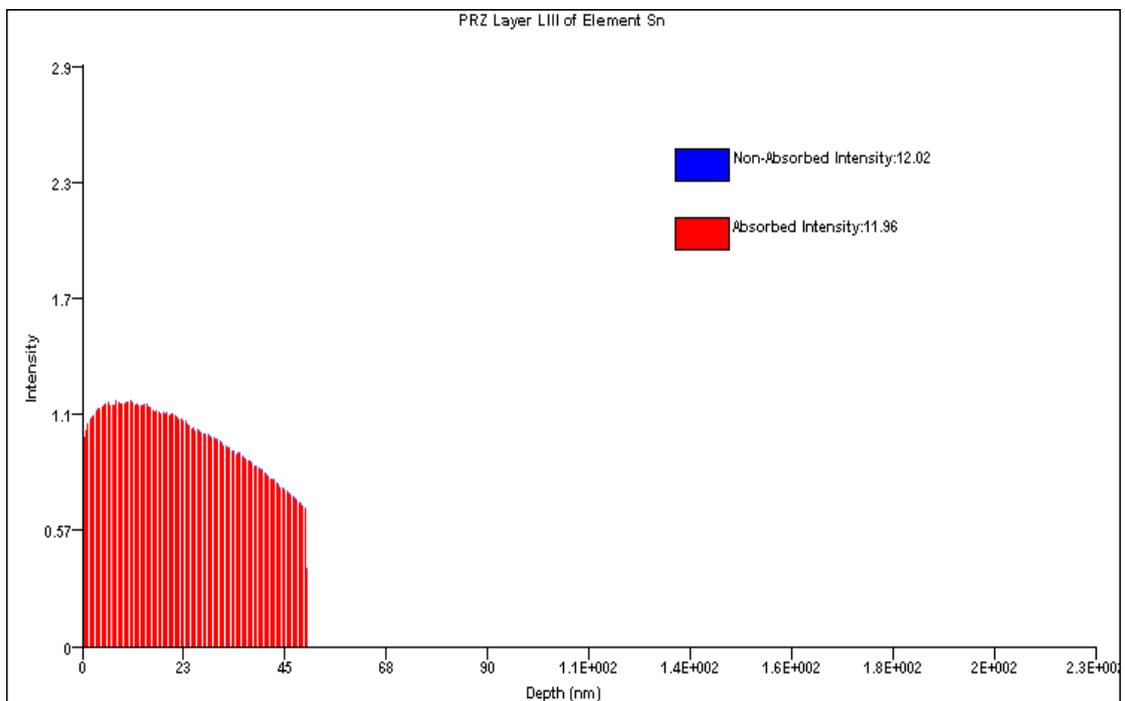


Figure III.7 variation de l'intensité RX émis par l'atome d'étain Sn

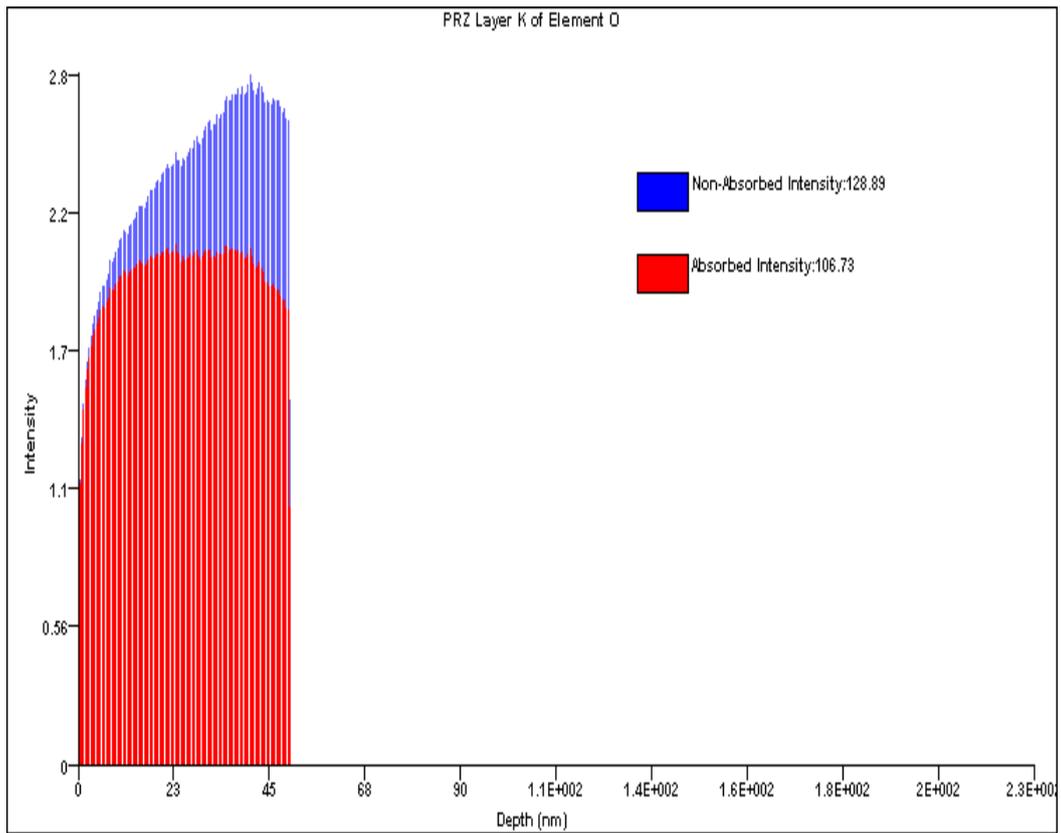


Figure III.8 variations de l'intensité RX émis par l'atome d'Oxygène

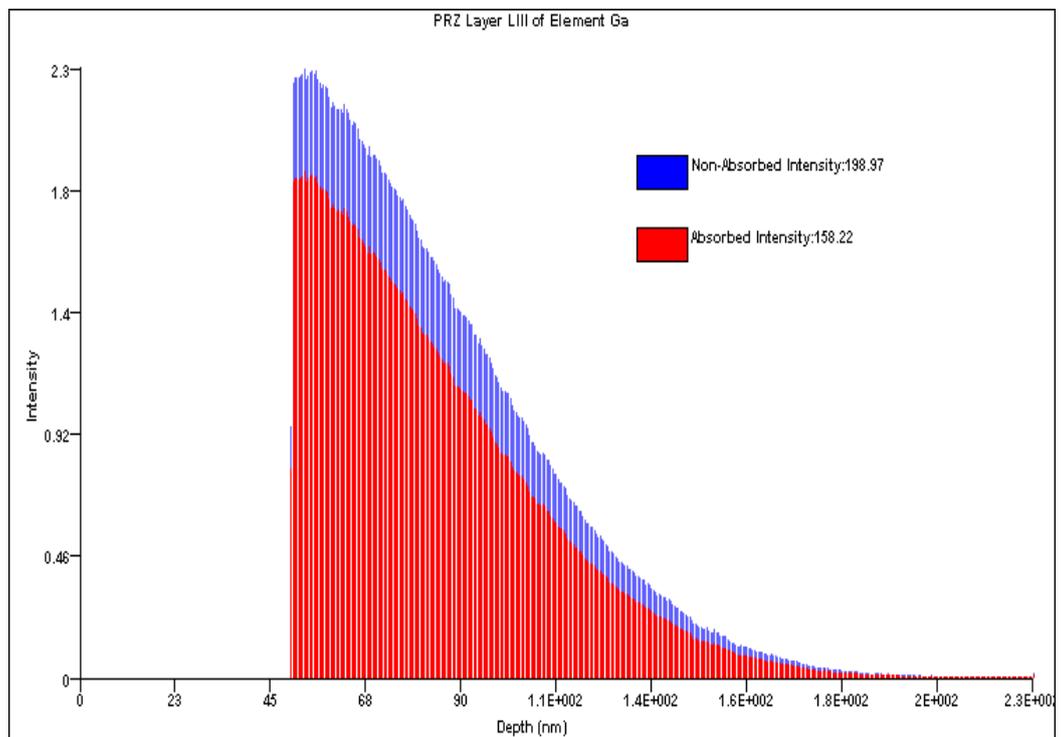


Figure III.9 variations des intensités RX émis par l'atome du Gallium

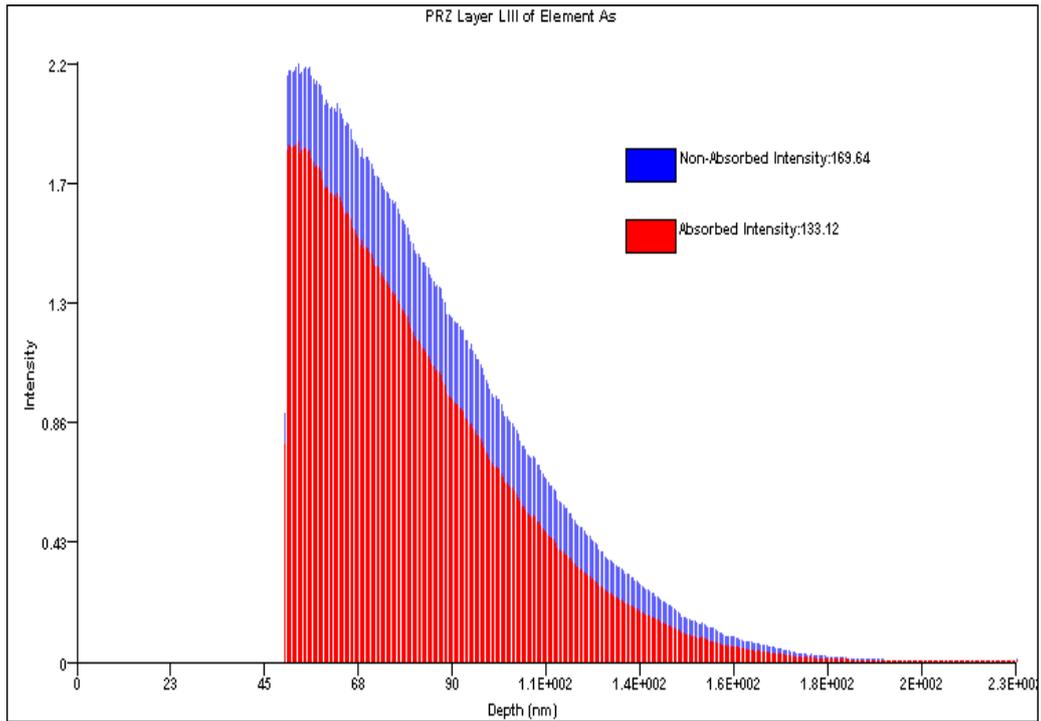


Figure III.10 variation des intensités RX émis par l'atome d'arsenic As

Les valeurs données par le logiciel Casino sont ci-dessous tabulées séparément pour les quatre éléments chimiques

Tableau III.1 donnant les variations des intensités RX émis par l'atome du Gallium

Energie (keV)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Intensité abs	00	00	0.75	1.4	1.8	2	2.1	2.2	2.25	2.3
Intensité non abs	00	00	0.9	1.8	2.3	2.5	2.7	2.8	2.9	3.0

Tableau III.2 : donnant les variations des intensités RX émis par l'atome d'Oxygène

Energie (keV)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Intensité abs	1.2	1.7	1.9	2	2.15	2.1	2.0	1.9	1.8	1.75
Intensité non abs	1.3	1.8	2.1	2.4	2.7	2.9	2.7	2.6	2.55	2.5

Tableau III.3 : donnant les variations des intensités RX émis par l'atome d'étain Sn

Energie (keV)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Intensité abs	00	00	00	0.7	1.1	1.4	1.6	1.7	1.8	1.9
Intensit non abs	00	00	00	0.75	1.15	1.45	1.65	1.75	1.85	1.95

Tableau III.4 : donnant les variations des intensités RX émis par l'atome d'arsenic As

Energie (keV)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Intensité abs	00	00	0.8	1.3	1.8	1.9	2.1	2.15	2.2	2.25
Intensit non abs	00	00	1	1.5	2.1	2.4	2.6	2.7	2.8	2.9

Ces tableaux de variation des intensités absorbées et non absorbées respectivement par les éléments chimiques Gallium Ga, oxygène O, étain Sn et arsenic As sont représentées sur les figures III-11.

Nous constatons sur toutes les courbes une croissance non linéaire et en particulier pour l'oxygène ou les deux courbes prennent une allure de croissance jusqu'à une certaine valeur maximale pour laquelle l'absorption et la non absorption commencent à décroître. Cette propriété est due probablement au fait que cet élément est un gaz comparé aux trois autres qui sont des métaux solides.

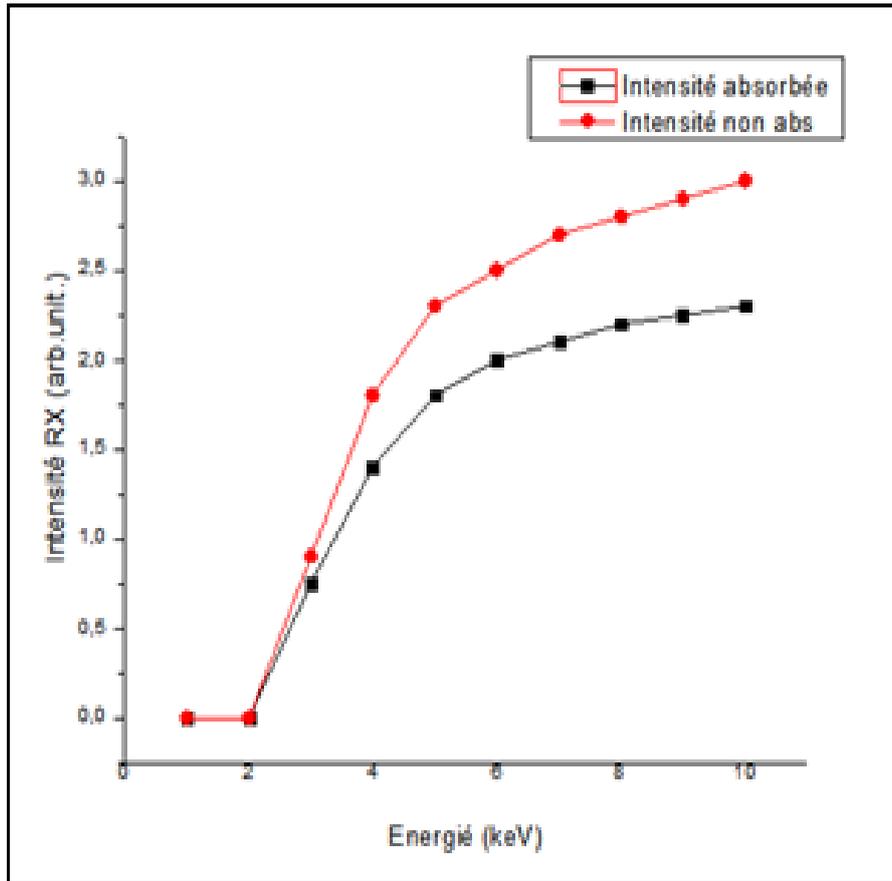


Figure III.11 : variation des intensités absorbée et non absorbée des rayons X émis par les atomes de Gallium dans la matrice SnO₂/GaAs en fonction de l'énergie des électrons

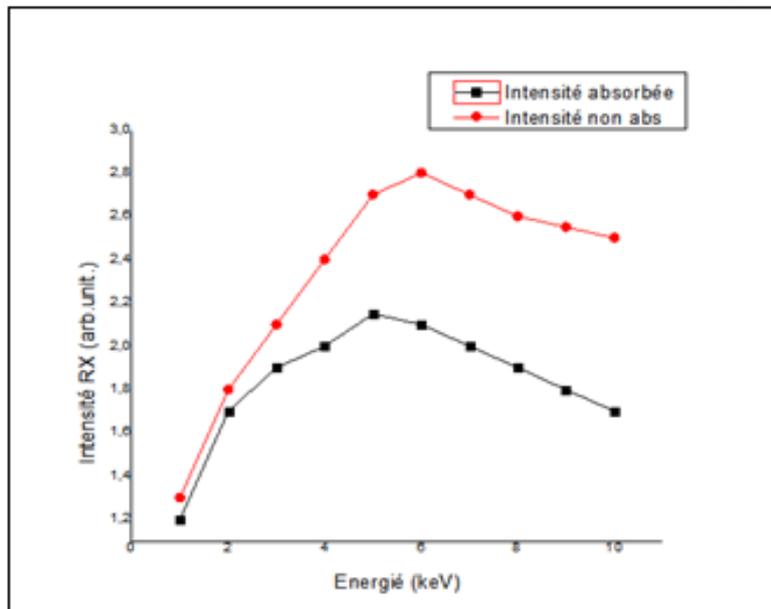


Figure III.12 variation des intensités absorbée et non absorbée des rayons X émis par les atomes d'oxygène dans la matrice SnO₂/GaAs en fonction de l'énergie des électrons

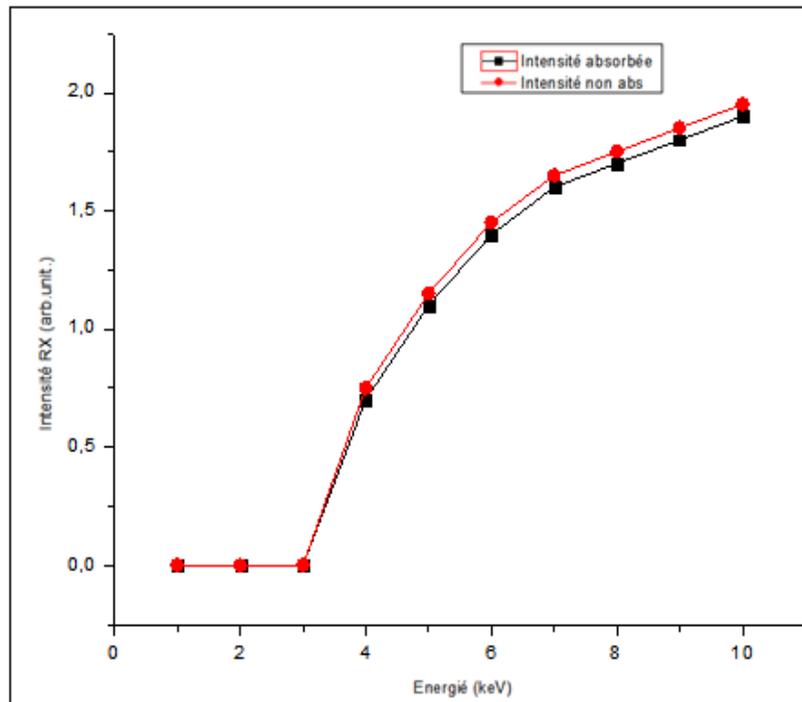


Figure III.13 variation des intensités absorbées et non absorbées des rayons X émis par les atomes d'étain Sn dans la matrice SnO₂/GaAs en fonction de l'énergie des électrons.

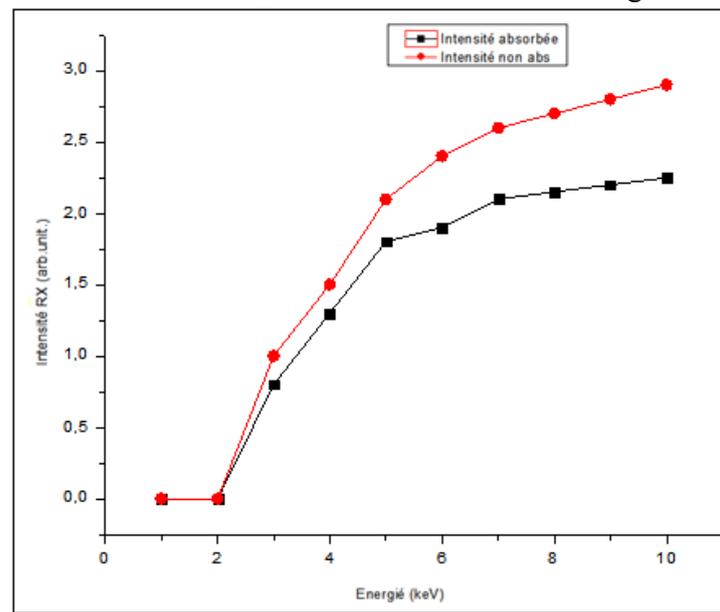


Figure III.14 variation des intensités absorbées et non absorbées des rayons X émis par les atomes d'arsenic As dans la matrice SnO₂/GaAs en fonction de l'énergie des électrons

III-5 Prédiction de la morphologie de la surface à l'aide du programme casino

Lors d'un choc entre les électrons primaires du faisceau et les atomes de l'échantillon, un électron primaire peut céder une partie de son énergie à un électron peu lié de la bande de conduction de l'atome, provoquant ainsi une ionisation par éjection de ce dernier. On

appelle électron secondaire cet électron éjecté. Ces électrons possèdent généralement une faible énergie (environ 50 eV). Chaque électron primaire peut créer un ou plusieurs électrons secondaires.

De par cette faible énergie, les électrons secondaires sont émis dans les couches superficielles proches de la surface. Les électrons qui peuvent être recueillis par les détecteurs sont souvent émis à une profondeur inférieure à 10 nanomètres. Grâce à cette faible énergie cinétique, il est assez facile de les dévier avec une faible différence de potentiel. On peut ainsi facilement collecter un grand nombre de ces électrons et obtenir des images de bonne qualité avec un bon rapport signal/bruit et une résolution de l'ordre de 40 Å (Angström) pour un faisceau de 30 Å de diamètre.

Étant donné qu'ils proviennent des couches superficielles, les électrons secondaires sont très sensibles aux variations de la surface de l'échantillon. La moindre variation va modifier la quantité d'électrons collectés. Ces électrons permettent donc d'obtenir des renseignements sur la topographie de l'échantillon.

Lorsqu'un échantillon est bombardé par un certain flux d'électrons incidents, environ 50 % de ces éléments sont réémis sous forme d'électrons rétrodiffusés et 10 % sous forme d'électrons secondaires. Le reste du flux d'électrons se propage à travers l'échantillon jusqu'à la terre [57].

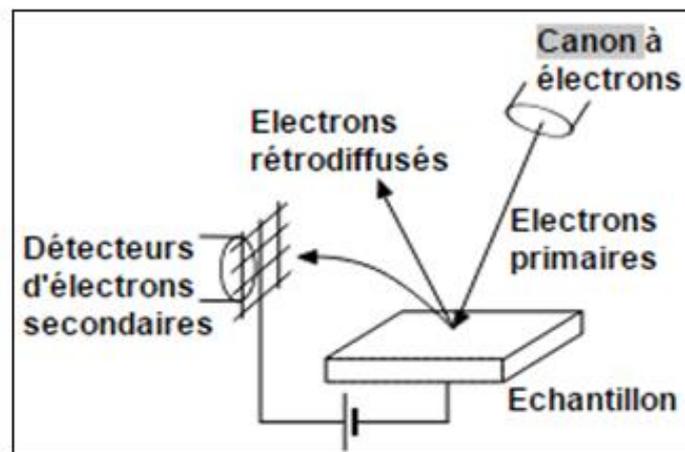


Figure III.15 : Principe de fonctionnement d'un MEB

Le logiciel Casino est conçu pour simuler une grande quantité de trajectoires d'électrons dans un semi-conducteur. L'idée principale est de simuler des trajectoires des électrons suffisants pour représenter la condition utilisée à des structures d'image dans un microscope

électronique à balayage (MEB). Ainsi, il est théoriquement possible de prédire les signaux observés dans la MEB. Ce programme Monte Carlo utilise différents modèles pour simuler l'interaction des électrons avec un solide [57].

Dans ce qui suit, suite à la programmation de l'opération « scanne » visualisée sur la figure III-15 nous avons obtenu les différentes réponses de ce programme relatif à chaque élément chimique. Les résultats sont donnés sur les figures suivantes caractérisant l'état de la surface du composé SnO_2/GaAs .

La figure III-16 présente une prédiction de la morphologie de la surface du composé GaAs tel que lue par les rayons X générée par la surface du composé GaAs lors de son bombardement par des électrons. On constate l'existence de pics de la raie L_{III} de l'arsenic d'intensité variable avec les positions prises par le faisceau des électrons arrivant sur la surface. La distance moyenne séparant deux pics consécutifs est de 14 nm. Ce qui donne au logiciel une très bonne résolution.

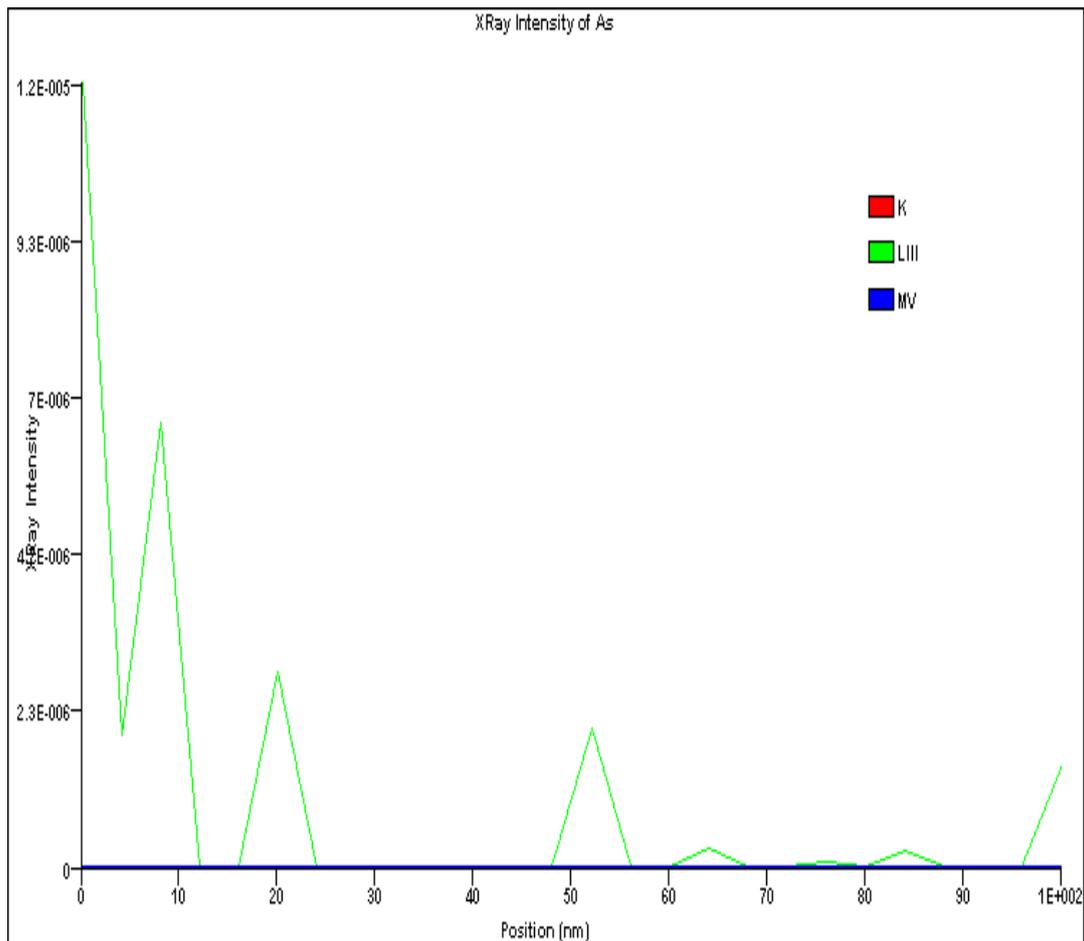


Figure III.16 : morphologie de la surface du GaAs prédite par l'élément chimique Arsenic As suivant la couche L_{III}

La figure III.16 nous donne un aperçu sur la morphologie de la surface du GaAs cette fois lue par les atomes du gallium liés à l'arsenic par une liaison covalente. Nous constatons l'existence de pics d'intensité variable et dont la distance qui les séparent reste la même soit 14 nm. Ceci confirme le résultat concernant la porosité de la surface. Les grains GaAs sont distants en moyenne de 14 nm. Deu

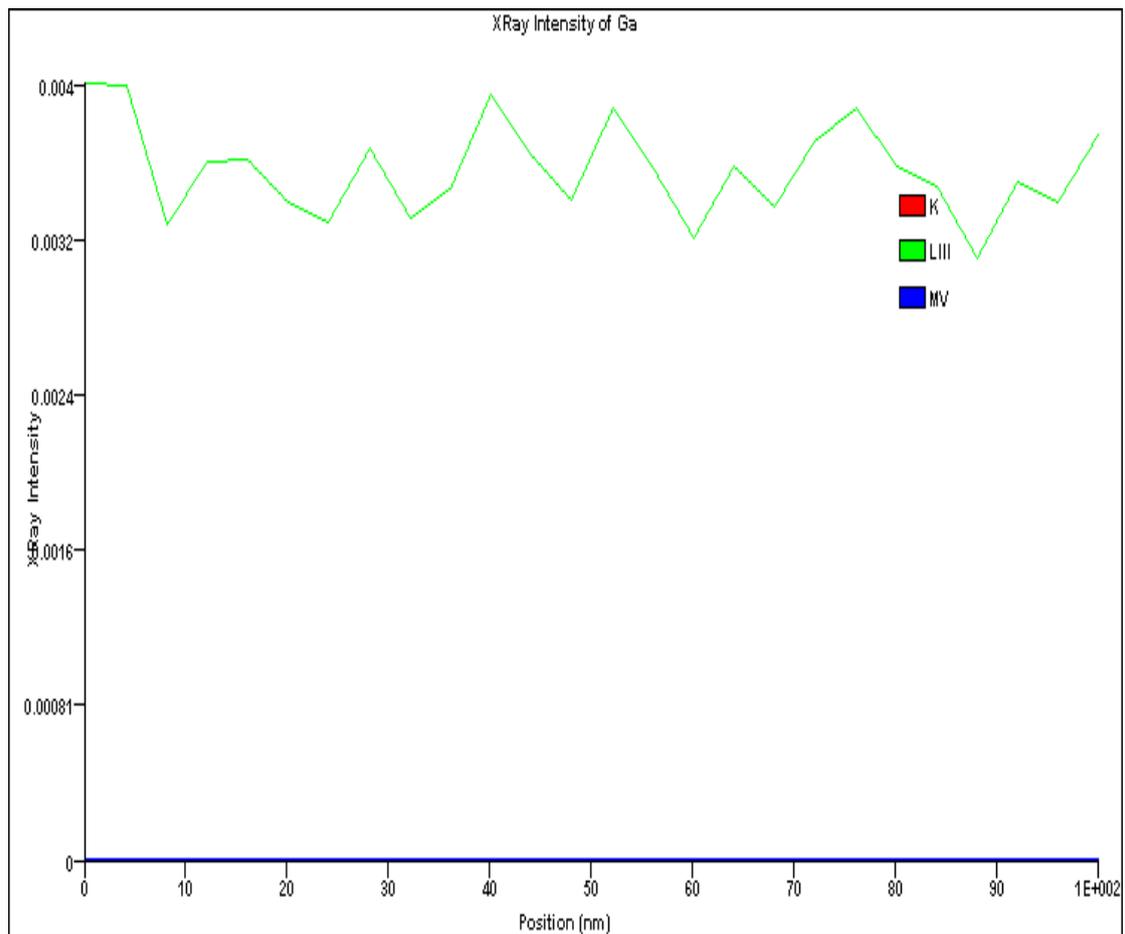


Figure III.17 morphologie de la surface du GaAs prédite par l'élément chimique gallium Ga suivant la couche L_{III}

L'élément chimique oxygène donne un aperçu sur la morphologie de la surface du composé SnO₂ telle que prédite par les Rayons X générés par les atomes d'oxygène après le bombardement de la surface par des faisceaux d'électrons balayant la surface du matériau SnO₂/GaAs.

Nous constatons une faible variations de l'intensité des rayons X émis suivant la couche $K\alpha$ excitée par les faisceaux des électrons balayant la surface en dépit de la grande intensité des RX comparé à ceux émis par les deux éléments Ga et As.

De faibles pics apparaissent sur la surface lui conférant une morphologie stable et une porosité faible. C'est ainsi que couvrir le matériau sensible GaAs par une couche de TCO tel que SnO_2 est une nécessité si on veut augmenter la durée de vie du composant électrique ou optoélectronique à base de GaAs

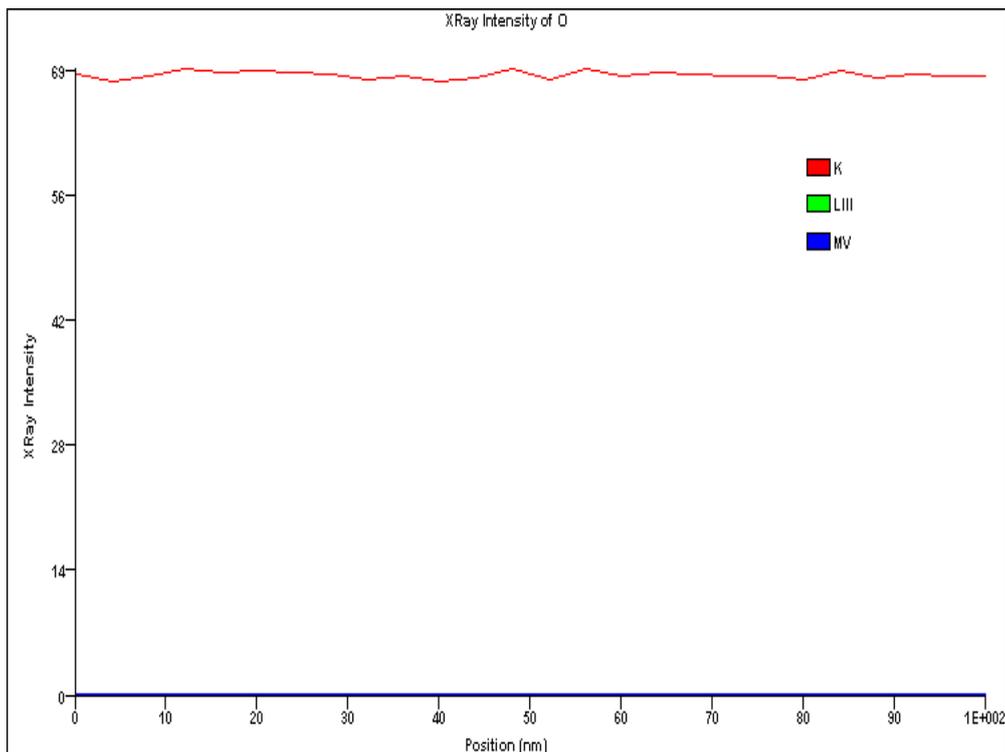


Figure III.18 morphologie de la surface du GaAs prédite par l'élément chimique oxygène O suivant la couche K.

III-6 Conclusion

Dans ce chapitre III ; il a été question de faire le point sur les interactions d'un faisceau d'électrons avec les matériaux choisis tel que GaAs et SnO_2/GaAs . Nous avons constaté que le logiciel Casino peut simuler cette interaction et peut simuler le fonctionnement d'un microscope à balayage électronique (MEB). Nous avons vu la génération de rayons X par les différents éléments chimiques constituant les matériaux tel que le gallium et l'arsenic entrant dans GaAs ainsi que l'élément chimique dans le matériau SnO_2 .

L'absorption des rayons X dans ces matériaux a été aussi l'objet de cette étude et nous avons suivi les variations de cette absorption accompagnée des RX non absorbés par le matériau. Ce processus de simulation réalisé avec le logiciel Casino répond au mieux à la théorie et aux résultats expérimentaux sur les rayonnements X.

Ce logiciel a été utilisé aussi dans sa deuxième fonction relation avec la morphologie de la surface. Cette morphologie a fait l'objet d'une étude en tenant compte des différentes courbes de la variation de l'intensité des RX sur différentes positions prises sur la surface du composé GaAs ou SnO₂.

IV. Conclusion générale

Ce travail nous permis de nous familiariser avec deux logiciels simulant l'interaction des électrons et l'interaction des ions avec la matière. Ces deux logiciels utilisent la méthode de Monte Carlo qui est un puissant outil mathématique permettant de résoudre beaucoup de problèmes liés au phénomènes aléatoires comme les trajectoires des ions et des électrons dans la matrice solide de certains semi-conducteurs étudiés dans le présent mémoire.

Les techniques de simulation des électrons et des ions bombardant une surface des matériaux est connue expérimentalement soit dans les MEB en tant que microscopie électronique ou dans le nettoyage des surfaces par les ions argon comme c'est le cas pour la majorité des échantillons semi-conducteurs avant de les introduire dans la chambre d'analyse pour les caractériser avec les techniques spectroscopiques.

Ce travail nous permis aussi de comprendre beaucoup de phénomène physiques et leur théorie et nous donné un aperçu sur les applications des cours que j'ai appris auprès de mes enseignants de la physique théorique. Les trois chapitres traités dans ce mémoire nous donne un idée claire sur la recherche scientifique et en particulier celle relative à la simulation des phénomènes physiques en relation étroites avec la physique théorique.

Ce travail nous permis en particulier de m'initier à la recherche scientifique que je compte aborder, dans un futur proche, avec une grande persévérance si l'occasion me sera donnée pour préparer une thèse de doctorat.

REFERENCES

- [1] Benaïcha Mouna, Etude des matériaux semi-conducteurs III-V Application à la conversion photovoltaïque, thèse de magistère, Université Hadj Lakhdar Batna(2007)
- [2] D. N. Baker, "Satellite Anomalies due to Space Storms," *in I.A. DAGLIS. ed.*
- [3] A.Zouke, étude des phénomènes d'interaction faisceau d'électron gaz –matière dans un MEB, Thèse Doctorat , Université LilleI (2013)
- [4] D. Drouin, A.R. Couture, D. Joly, X. Tastet, V. Aimez and R Gauvin, CASINO V2.42,(2007) a fast and easy-to-use modeling tool for scanning microanalysis, *Journal Scanning Electron.*101,p.4992(version 2013)
- [5] F. Zeigler, J.P. Beirsack, U. Littman, 1985, *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Pergamon Press, New York, version 2013
- [6] Xuan Truong NGUYEN, Étude de matériaux irradiés sous faisceau d'électrons, thèse Doctorat, Université de Toulouse (2014)
- [7] Alexandre Fafin, Modélisation numérique de l'interaction onde-matière dans des matériaux nanostructures, Thèse de doctorat, Université de Caen Basse-Normandie (2014)
- [8] Julien Toulouse, Introduction aux méthodes de Monte Carlo quantique, Université Pierre et Marie Curie Paris France (2015)
- [9] Choukria Sayah et al., Etude théorique du transport électronique par la simulation Monte Carlo dans le quaternaire InGaAsP0 *Afrique Science* 04(2) (2008)
- [10] B.G.Yacobi and D.B.Holt, "Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids", Edition Plenum Press, New York and London, 1990
- [11] J. Cazaux, « Calculated effects of work function changes on the dispersion of secondary electron emission data: Application for Al and Si and related elements », *J. Appl. Phys.*, **110**, (2011), pp.024906
- [12] Jérôme Garnier, élaboration de couches minces d'oxydes transparents et conducteurs, thèse de Doctorat , Ecole Art et Métiers Paris (2009)
- [13] Béchir DRIDI REZGUI, Etude des propriétés optiques, électriques et structurales de nanoparticules de silicium, thèse de doctorat, Institut des Sciences Appliquées de Lyon (2010)
- [14] A.Chovet et P.Masson, Cours de physique des semi-conducteurs, Ecole Polytechnique Université de Marseille (2005)

- [15] Samir Chelda, Simulation du parcours des électrons élastiques dans les matériaux et structures. Application à la spectroscopie du pic élastique multi-modes MM-EPES, thèse Doctorat université Blaise Pascal (2010)
- [16] Maxime Roger, modèles de sensibilité dans le cadre de la méthode de Monte-Carlo illustrations en transfert radiatif, thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse (2006)
- [17] Romain Clauzel, étude de la passivation du silicium dans des conditions d'irradiation électronique de faible énergie, Université Claude Bernard Lyon, thèse Doctorat (2006)
- [18] Pr. Eva Pebay-Peyrola, interaction rayonnement-matière, chap 10, Université Joseph Fourier de Grenoble (2012)
- [19] Frederik Faure, interaction entre le rayonnement et la matière, Notes de cours, Université Joseph Fourier (2003)
- [20] Bencharif Mohamed Fakhri, étude de l'interaction electron-matière par la méthode Monte Carlo application sur le GaAs type P, thèse de Magistère, Université Mentouri Constantine (2005)
- [21] Kunihiro Suzuki, applications of Monte Carlo Method in Science and Engineering, Published in print edition (Japan), 2011
- [22] Frances Salvat, José M. Fernández-Varea, Josep Sempau, PENELOPE-2006: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, Workshop Proceedings Barcelona, Spain 4-7 July 2006
- [23] Patrick Gailly, Etude de l'évolution de l'état de surface de matériaux optiques sous bombardement ionique à faible énergie, Université de Liège (2011)
- [24] Kunihiro Suzuki, Analysis of ion implantation for accurate process device simulation, Fujitsu Sci. And Tech. V46(2010)
- [25] S.F. Mao, Y.G. Li, R.G. Zeng, Z.J. Ding, « Electron inelastic scattering and secondary electron emission calculated without the single pole approximation », J. Appl. Phys., **104**, (2008), pp.114907.
- [26] B.G. Yacobi, D.B. Holt, J. Appl. Phys. 59(4) R1 1986
- [27] K. Kanaya, S. Okayama, J. Phys. D: Appl. Phys. 5, pp. 43, 1972
- [28] N. Balcon, D. Payan, M. Belhaj, T. Tondu, and V. Inguibert, "Secondary Electron Emission on Space Materials: Evaluation of the Total Secondary Electron Yield from Surface Potential Measurements," *Plasma Science, IEEE*
- [29] Pr. Laurent Dusseau, interactions rayonnement-matière, Institut d'Électronique du Sud(IES) (2009)

- [30]Horia POPESCU, Génération et transport des électrons rapides dans l'interaction laser-matière à haut flux,thèsedoctorat,Ecole Polytechnique X (2005)
- [31]J.P. Cussonneau, interaction rayonnement, matière, <https://indico.in2p3.fr/event/1603>
- [32]BabahaniOumelkheif,Simulation numérique par la méthode de Monte Carlo de la déposition de couches minces parprocédées CVD, thèse Doctorat université KasdiMerbah Ouargla
- [33]Julien roupie, Contribution à l'étude de l'émission électronique sous impact d'électrons de basse énergie ($\leq 1\text{keV}$) : application à l'aluminium, Thèse doctorat université de Toulouse (2013)
- [34]S. Bouchareb, L. Berquez et V. Griseri, "Implantation de la Méthode LMM au Sein de l'Enceinte d'Irradiation Electronique Matspace," 8ème conférence de la Société Française d'Electrostatique, Cherbourg-Octeville, France, 2012
- [35]Rudy Tuani, Dossier > Les Interactions Ions-Plasma Futura-Sciences, (2002)
- [36]Divic Rapin, interaction des particules avec la matière détecteurs , Université de
- [37]NadjimMerabet, DjaouidaSadaoui , Malek Benslama ,contribution à l'étude du phénomène de Latchup induit dans les circuits intégrés embarqués dans un environnement radiatif spatial, Rom. Journ. Phys., Vol. 52 (2007)
- [39]P. Sigmund, Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and PolycrystallineTargets , Physical Review, Vol 184, Number 2, 1969
- [40] P. Riccardi, M Pisatta, A. Cupolillo, M. Comisso, A. Sindonna, R.A. Baragiola, C.A. Dukes,« Secondary electron emission spectra form clean and cesiated Al surfaces : the role of plasmon decay and data analysis for applications », J. Phys. Condens. Matter, **22**, (2010), pp.305004
- [41]Hussein Hijazi , Interaction ions-surfaces, thèse doctorat Université de Caen Base-Normandie (2011)
- [43] Sami Hissoiny calculs Monte Carlo en transport d'énergie, Thèse doctorat, Université Montréal (2011)
- [44]Sandrine SCHLUTIG,Contribution à l'étude de la pulvérisation et de l'endommagement du dioxyde d'uranium par les ions lourds rapides, Thèse de Doctorat Université de Caen France (2001)
- [45] Moussa Sidibé,étude du comportement du tungstène sous irradiation, thèse Doctorat, Université d'Orléans (2014)

[46] Sandrine Miro, Etude de l'endommagement et de la diffusion de l'hélium..., Doctorat Université de Caen (2002)

[47] S Bouffard, Généralités sur le passage des ions dans la matière,
www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/Public/36/033/36033078.pdf

[48] Souad Merabet, Simulation à l'aide d'un modèle dit de Monte Carlo, thèse de Doctorat Es Sciences Université Mentouri (2009)

[49] S. Allag et al., A Monte Carlo Model for simulating the nitrogen diffusion effect into B-LPCVD- thinfilms. Sciences & Technologie A – N°35 (2012)

[50] Damien Lambert, analyse par simulation Monte Carlo de la sensibilité aux aléas logique des mémoires SRAM soumises à un environnement protonique spatial ou neutronique terrestre, thèse doctorat, Université Montpellier II (2006)

[51] Pierre Aubreton, simulation par la méthode de Monte Carlo des phénomènes physiques (par faisceaux d'électrons), thèse de Doctorat, Université de Limoges (2005)

[52] B. AMANA, Ch. RICHTER et O. HECKMANN, étude des cristaux par les rayons X, Université de Cergy-Pontoise, <https://www.u-cergy.fr>

[53] Absorption des rayons X -
[UQAC, uqac.ca/chimie_ens/Physique_atom/Chap_htm/CHAP_11.html](http://UQAC.uqac.ca/chimie_ens/Physique_atom/Chap_htm/CHAP_11.html)

[54] Propriétés et diffusion des RX, lescaner.tpe.free.fr/Pages/principes.html

[56] F. BRISSET, "Microscopie électronique à balayage et Microanalyse," Publication du Groupement National de Microscopie électronique à balayage et Microanalyses, EDP Sciences 2008, pp. 13-38 et pp. 587-609.