

République Algérienne Démocratique et Populaire  
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
جامعة الجيلالي بونعامة خميس مليانة  
Université Djilali Bounaâma de Khemis Miliana  
Faculté des Sciences et de la Technologie  
Département des Sciences de la Matière



**Mémoire de fin d'étude**  
En vue de l'obtention d'un diplôme de **MASTER EN PHYSIQUE**  
*Spécialité: Physique théorique*

**Sur le Thème :**

# Simulation du dopage du semi-conducteur par TRIM software

**Devant le jury composé de :**

-Mr .M. Sadouk	Docteur à l'Université de Khemis Miliana	Président
-Mr A. ouerdane	Docteur à l'Université de Khemis Miliana	Encadreur
-M kouider Akil	Docteur à l'Université de Khemis Miliana	Examinatrice

**Présenté par :**

- ✓ Echcherki Hanane
- ✓ Mattei Zahra

**Année universitaire : 2018 / 2019**

## Remerciements

En premier lieu , nous remercierons Allah le tout- puissant, qui nous a facilité le chemin et nous a donné la persévérance pour réaliser ce modeste travail.

Nous remercions notre encadreur le docteur Abdallah OUERDANE de nous avoir guidé lors de la réalisation de ce travail, sans oublier tous les professeurs du département « sciences de la Matière ».

Nous voudrions aussi remercier les enseignants qui ont accepté d'être membres de notre jury et d'avoir évalué ce travail et d'apporter leurs critiques et leur corrections.

Nous remercions en particulier, notre président de Jury le docteur Mustapha Sadoki qui nous a beaucoup éclairé sur notre mémoire.

Nous tenons à remercier vivement notre enseignante H..Ouled Arab qui a accepté de lire ce manuscrit et de nous examiner.

Nos vives remerciements vont vers tous nos enseignants qui tout le long de notre scolarité ont donné de leur mieux pour nous former dans le domaine des sciences des matériaux et en particulier en physique théorique.

Enfin, nous remercions tous les étudiants du groupe de « physique théorique », Hanane ,Hakima ,kalthouma ,Amina , Khadîdja .....etc.

# *Dédicace*

*A' l'aide de Dieu Tout puissant , qui m'a tracé le chemin de ma vie j'ai pu réaliser ce modeste travail que je dédie :*

*A' la lumière de mes yeux , l'ombre de mes pas et le bonheur de ma Vie :mes chers parents est mes frères « Ahmed, Ben yousef » qui m'ont apporté leur appui durant toutes mes années d ' étude, pour leur sacrifice et soutien qui m'ont donné confiance ,courage et sécurité.*

*A' ma très chère grand-mère que je lui souhaite une longue vie ,*

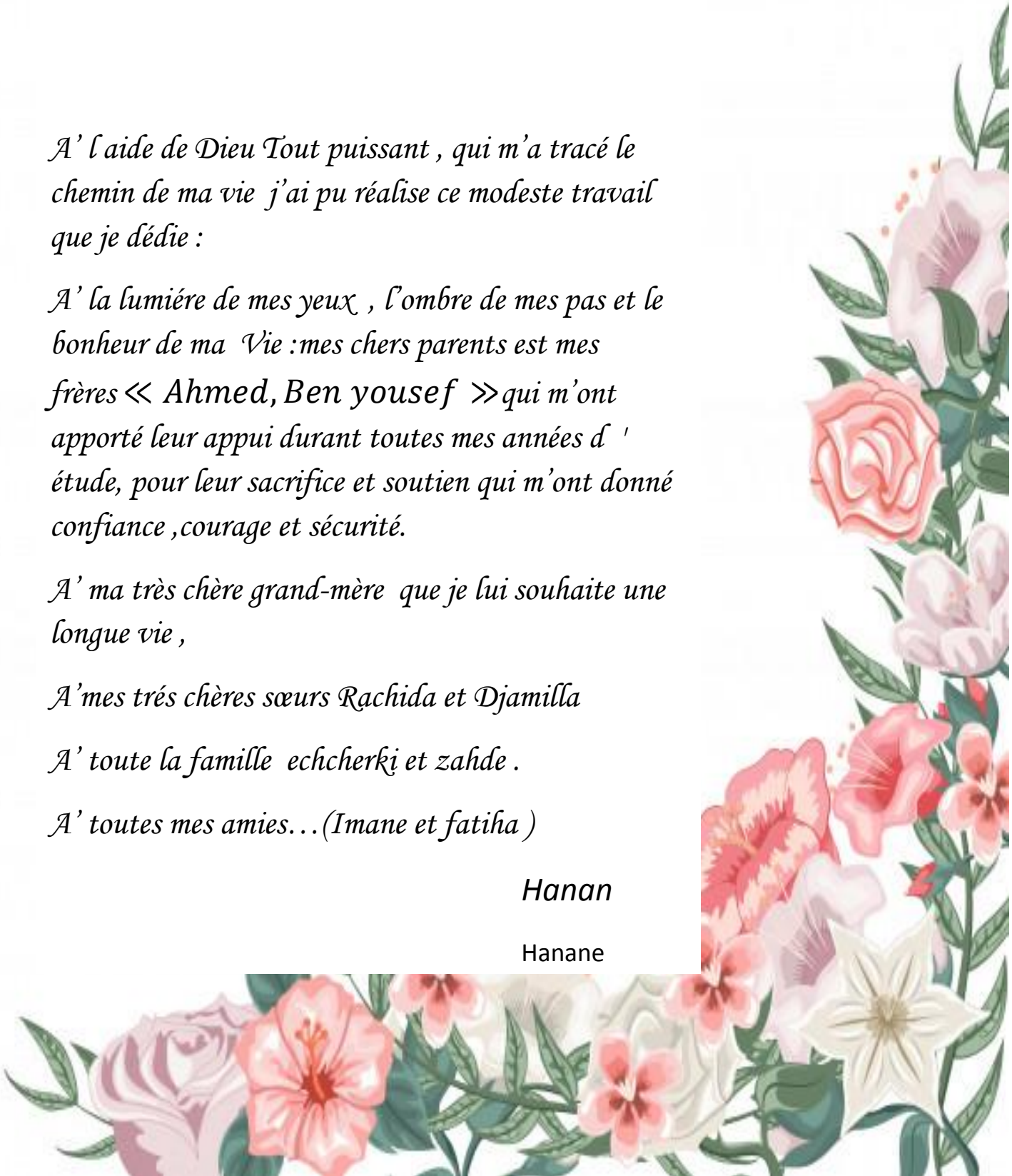
*A' mes très chères sœurs Rachida et Djamilla*

*A' toute la famille echcherki et zahde .*

*A' toutes mes amies... (Imane et fatiha )*

*Hanan*

*Hanane*



# *Dédicace*

*J'ai toujours pensé faire ou offrir quelque chose à mes parents en signe de reconnaissance pour tout ce qu'ils ont fait pour moi, rien que pour me voir réussir, et voilà, l'occasion est venue.*

*A ceux qui m'ont donné la vie, symbole de beauté, de fierté, de sagesse et de patience.*

*A ceux qui sont la source de mon inspiration et de mon courage, à qui je dois présenter de l'amour et de la reconnaissance : mes parents. Que Dieu les garde à moi.*

*A mes frères « Ali, Mohammed, Hicham, Semyane*

*A mes sœurs « Noura, Aicha, Hamida, Nassira, Fatima, Maroua »*

*A toute ma famille sans exception.*

*A toutes mes amies « Khawla, Safia, Soumia, Ahlem, Zienb, Bouchra, Zahia, Salha, Imane hindo, Kalthoum, Halima, Chaima . »*

*Les enfants de mes soeurs*

*« Narjess, Abdou, Haitham, Mouman, Mariem, Abd rahim, Abd raeouf, Aya, Tasnim, Salsabil »*

ZAHRA



ملخص :

توجد عديد من طرق لتطعيم المواد الشبه الموصلات: التطعيم عن طريق التحويل النووي؛ تطعيم بتقنية الليزر والتطعيم عن طريق قذف الأيونات, إن التقنية الأكثر تطورا هي التطعيم بواسطة قذف الأيونات وإسكانها في المادة. يمكن محاكاة هذه التقنية الأخيرة بواسطة برنامج TRIM (النقل ومدى الأيونات في المادة) (Transport and Range of Ions in Mater) الذي طوره Ziegler.

تم تناول التطعيم النوعي N باستخدام عناصر العمود V من الجدول الدوري لمند ليف و كذا التطعيم النوعي P بالاستعمال عناصر العمود III من الجدول الدوري لمند ليف.

من نتائج المحاكاة تم دراسة المعاملات متعددة ذات علاقة بالتطعيم بنوعيه نذكر منهم :حساب تركيز التطعيم, فقدان الطاقة للأيونات داخل المصفوفة البلورية للمادة , طاقات الأيونات الارجاعية, الأيونات والأيونات المبعثرة. وتم دراسة تغيرات هذه المعاملات وتسجيل منحنياتها وتمت مقارنة النتائج المتحصل عليها ومناقشتها لكلا النوعين من التطعيم.

## Résumé :

Il existe plusieurs méthodes pour effectuer le dopage d'un matériau :le dopage par diffusion, le dopage par transmutation nucléaire , le dopage par la technique laser et le dopage par implantation ionique. La technique la plus développée est celle correspondant à l'implantation ionique. Cette dernière technique peut être simulée par le logiciel TRIM. Dans ce travail, en utilisant le logiciel TRIM (Transport and Range of Ions in Mater) élaboré par Ziegler, les deux types de dopage( P et N) ont été abordés en utilisant les éléments de la colonne V (dopage n) et les éléments de la colonne III (dopage p) du tableau périodique de Mendeleïev. Des effets physiques intéressants ont été simulés pour les deux types de dopage, on cite : la concentration du dopage, la perte d'énergie des ions dans la matrice du cristal, les ranges projectiles, les phonons reculés, les ions rétrodiffusés , les variations de ces paramètres ont étudiés et des courbes ont été enregistrées. Des comparaisons des résultats ont été faites et discutées concernant les deux types de dopage.

## Abstract :

There are several methods for doping a material: diffusion doping; doping by nuclear transmutation; doping by laser technique and doping by ion implantation The most developed technique is that corresponding to ion implantation. This last technique can be simulated by the TRIM software (Transport and Range of Ions in Mater). In this work, using the TRIM software developed by Ziegler, the two types of doping (P and N) were approached using the elements of column V (doping n) and the elements of column III (doping p) of the periodic table of Mendelejev. Interesting parameters were simulated for both types of doping. The concentration of the doping, losses of the ions in the crystal matrix, the longitudinal of the ions, phonons recoils, the backscattered ions are mentioned. The variation of these parameters has been studied and their curves recorded. Comparisons of results were made and discussed regarding both types of doping

## Liste des figures

- Figure I- 1 : Schéma de la structure électronique d'un semi conducteur. Les traits représentent les électrons de valence.
- Figure I- 2: structure de bande des isolants, des métaux et des semi-conducteurs
- Figure I- 3 : tableau périodique des éléments chimiques utilisés dans le dopage des semi-conducteurs.
- Figure I- 4: dopage de type N et dopage de type P dans un semi-conducteur.
- Figure I- 5: recombinaison des électrons et des trous donnant un photon
- Figure I- 6 : Technologie d'une LED obtenue par dopage d'un semi-conducteur par dopage électronique
- Figure I- 7 : Principe de fonctionnement d'une cellule solaire avec dopage électronique
- Figure II-1: collision élastique ente deux particules dans le système de référence du laboratoire
- Figure II-2: Schéma d'un générateur à implantation ionique de type Van de Graf
- Figure II-3: Distribution des ions et des défauts en fonction de la profondeur dans un matériau.
- Figure II-4 : (a) positions des défauts engendrés par implantation du phosphore dans le silicium dans le cas (a) l'implantation n'est pas amorphisante (b) Le cas ou elle est amorphisante la photovoltaïque .
- Figure II-5: Mécanisme de freinage d'un ion dans un solide
- Figure II-6 : Energies de l'ionisation en fonction du PKA (MeV)
- Figure II-7 : Représentation schématique d'une cascade de déplacements.
- Figure III-1 : Tableau de commande du logiciel TRIM
- Figure III-2 : Tableau de bord des résultats de simulation du bombardement de l'ion Ga<sup>+</sup> sur SiO<sub>2</sub>
- Figure III-3 : représentation de l'arrêt électronique (a) et de l'arrêt nucléaire (b) des ions (As, B, P, Sb N) dans la matrice Silicium
- Figure III-4 : représentation de l'arrêt électronique (a) et de l'arrêt nucléaire (b) des ions (Th, In, Ga, B. Al) dans la matrice Silicium
- Figure III-5 : Simulation des deux pouvoirs d'arrêt de l'implantation de l'ion Ag<sup>+</sup> dans la matrice cristalline de SnO<sub>2</sub>
- Figure III-6: Variation de perte d'énergie pour la création de phonons pour les ions de dopage de type N : Azote N, Phosphore P, Arsenic As, Antimoine Sb, et Bismuth Bi dans la matrice ZnO en fonction des énergies cinétiques des ions

- Figure III-7: variation de perte d'énergie pour la création de phonons pour les ions de dopage de type N et de type P dans la matrice ZnO/ SiO<sub>2</sub> en fonction des énergies cinétiques des ions.
- Figure III-8 : variation de perte d'énergie pour la création d'ions pour les ions de dopage de type N et de type P dans la matrice ZnO/SiO<sub>2</sub> en fonction des énergies cinétiques des ions.
- Figure III-9 : Implantation du Bore pour différentes concentrations (a) et différentes énergies (b)
- Figure III-10: variation des fluences de dopage pour les ions de dopage de type N et de type P en fonction des énergies cinétiques de ces ions bombardant la cible ZnO/SiO<sub>2</sub>
- Figure III-11: variations des énergies des ions de dopage de type N et de type P dissipées dans la matrice cible ZnO
- Figure III-12: Variation du range projectile des ions de dopage N et P en fonction des leurs énergies cinétiques

### Liste des tableaux

Tableau III-1 : Tableau des valeurs du pouvoir d'arrêt de l'ion Ga<sup>+</sup> sur SiO<sub>2</sub>

Tableau<sup>0</sup> III-2: TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion thallium de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>

Tableau N<sup>0</sup> III-3: TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion phosphore de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>

## Sommaire

	<b>Page</b>
<b>Introduction Générale</b>	5
<b>Chapitre I : Généralités sur le dopage des semi-conducteurs</b>	
Introduction	7
I : Modèle classique	7
I-2:Modèle quantique des bandes d'énergie	8
I-3 -1 : les conducteurs	8
I-3-2 : Les isolants	8
I-3-3 : Les semi-conducteurs	10
I-4 : Dopage des semi-conducteurs	11
I-4-1 : Principe	11
I-4-2 : Dopage de type N	11
I-4-3 : dopage de type P	11
I-4-4 : Tableau de Mendeleïev	12
I-4-5 : Exemple dopage du silicium	13
I-4-6 : Application du dopage en technologie	14
I-4-6 :1 Exemple d'une LED	14
I-4-7 : Fonctionnement des cellules photovoltaïques en silicium cristallin	17
<b>Chapitre II: Etude d'une technique de dopage: Implantation ionique</b>	
<b>Implantation ionique</b>	
Introduction	18
II-1 : Principe de l'interaction ion matière	18
II-1-2 : Principe	18
II-1-2: Processus de perte d'énergie	19
A : Collision élastique	19
B : Collision inélastique	19
II-1-3 : Générateur de Van de Graf	20
II-1-4 : Distribution des ions dans la matrice cristalline	22
II-2 : Défauts cristallins créés par dopage	23
II-3 : Le pouvoir d'arrêt	24
II-3-1 : Principe	24



II-3-2 : Théorie du pouvoir d'arrêt	25
II-3-2 : 1 Pouvoir d'arrêt nucléaire	26
II-3-2-2 : Pouvoir d'arrêt électronique	30
II-4 : Profil d'ions implantés	31
II-4-1 : défauts dans le silicium générés par implantation-Notion de DPA	32

### **Chapitre III: Résultats de la simulation TRIM (Transport and Range of Ions in Mater)**

III-1 : Présentation du programme TRIM	34
III-2 : Simulation du pouvoir d'arrêt	35
III-2-1 : L'étude du pouvoir d'arrêt des ions Gallium Ga <sup>+</sup>	36
III-3 : Simulation de création de lacunes	41
III-4 : Simulation de création de phonons	43
III-5 : Simulation de perte d'énergie par ionisation	44
III-6 : Simulation de la fluence ou la dose d'implantation	45
III-7 : Simulation de la rétrodiffusion des ions	47
III-8 : Simulation des ranges projectiles des ions	48
Conclusion	49
Conclusion générale	
Annexes	
Références	

---

## Introduction Générale

Dans le domaine des semi-conducteurs, le dopage est l'action d'ajouter des impuretés en petites quantités à une substance pure afin de modifier ses propriétés de conductivité. Les propriétés des semi-conducteurs sont en grande partie régies par la quantité de porteurs de charge qu'ils contiennent. Ces porteurs sont les électrons ou les trous. Le dopage d'un matériau consiste à introduire, dans sa matrice, des atomes d'un autre matériau. Ces atomes vont se substituer à certains atomes initiaux et ainsi introduire davantage d'électrons ou de trous [1].

Il existe plusieurs méthodes pour effectuer le dopage d'un matériau le dopage par diffusion, le dopage par transmutation nucléaire, le dopage par la technique laser et le dopage par implantation ionique. La technique la plus développée est celle correspondant à l'implantation ionique. C'est cette dernière que nous allons traiter. Cette technique dite (l'implantation ionique) va être l'objet d'une simulation par le logiciel TRIM (Transport and Range of Ions in Mater) [2]

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 arrêté ou éjecté du solide. Dans ce travail, il est question d'étudier deux types d'interactions (pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire) en utilisant le logiciel TRIM (Transport and Range of Ions in Mater) élaboré par le savant allemand James Ziegler. [3]

La technique d'implantation ionique est devenue un outil très utile dans le domaine de la fabrication de dispositifs à semi-conducteurs, elle représente un moyen de modification des propriétés de surface pour une grande variété de matériaux. Elle est utilisée dans plusieurs domaines, en particulier, en microélectronique, c'est une méthode de dopage et de fabrication de semi-conducteur intéressant tel que le carbure de silicium (SiC) [4]. Cette technique est employée aussi dans d'autres domaines tels que les céramiques, les métaux et les polymères. L'implantation ionique consiste à introduire les atomes ionisés d'un matériau, avec suffisamment d'énergie, pour pénétrer dans l'échantillon cible (en général une plaquette). Elle permet un contrôle précis de la quantité totale d'atomes implantés (dose d'implantation ou fluence) et du profil de concentration des ions implantés. Elle permet aussi de changer les

---

propriétés chimiques et structurales de la cible (amorphisation partielle ou générale de la cible qui nécessite un recuit thermique de recristallisation).[5]

Dans un premier chapitre nous allons donner des généralités sur les semi-conducteurs et en particulier leur dopage par bombardement ionique, les deux types de dopage N et P correspondent respectivement aux injections des électrons et des trous dans la matrice d'un semi conducteur et ceci par l'implantation des éléments de la colonne III (Bore, Thallium, Aluminium, Indium et Galium) les éléments de la colonne V( Phosphore, Antimoine, Bismuth, Azote et Arsenic ).

Dans un deuxième chapitre on s'intéresse à la technique et à la théorie de l'implantation ionique. On mettra en évidence l'intérêt de cette technique dans le dopage des semi-conducteurs, on s'intéresse au différents processus d'interaction qui se produisent lors d'une implantation des ions dans la matrice d'un cristal semi-conducteur comme la trajectoire d'un ion, le processus de perte d'énergie, les pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire d'un cristal semi-conducteur.

Dans un troisième chapitre on utilise le logiciel TRIM permettant de simuler les interactions ions-matière. Les différents phénomènes comme les défauts Frenkel, les lacunes (vacancies) 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 les énergies cinétiques des ions incidents sur la surface de différents composants semi-conducteurs de notre choix. On donnera enfin les résultats et la discussion sur cette simulation qui sera présentée sous forme de tableaux et de courbes pour les deux types de dopage N et P représentés par leurs éléments respectifs de la colonne III et de la colonne V du tableau de Mendeleïev [6]

Nous donnerons enfin notre conclusion sur ce travail tout en projetant de réaliser expérimentalement une implantation ionique en vue de réaliser un composant électronique ou un composant optoélectronique en particulier celui relatif au contrôle de l'environnement en tant que détecteur de gaz nocifs[7] et les nez électroniques. [8]



## Généralités sur les semi-conducteurs

### Introduction

Dans ce chapitre nous allons décrire les principales propriétés des semi-conducteurs en les comparant tout d'abord aux matériaux isolant et aux matériaux conducteurs (les métaux). Nous donnons un aperçu sur leur état intrinsèque avant d'introduire des impuretés et leur état extrinsèque après l'introduction des impuretés. Nous montrerons que les impuretés introduites c'est le dopage qui est de deux sortes, dopage de type N c'est l'implantation d'éléments ayant la possibilité de donner des électrons libres dans la matrice du semi-conducteurs et dopage de type P qui se manifeste par l'introduction des éléments en manque d'électrons on les appelle des trous [9]. Nous donnerons aussi un troisième type de dopage appelé dopage chimique qui consiste à introduire des éléments chimiques quelconques dans la matrice d'un semi-conducteur pour changer sa constitution chimique en vue d'une amélioration de ces propriétés physiques (électrique et optique).

Dans ce chapitre on notera aussi l'intérêt du dopage dans la technologie en particulier en électronique et en optoélectronique.

Nous énumérons, dans ce chapitre, les principaux éléments chimiques du tableau de Mendeleïev intervenant dans le dopage des semi-conducteurs.

Nous donnerons enfin l'application technologique nécessitant le dopage comme les cellules solaires [10] et les composantes optoélectroniques comme les LED [11].

### I-Modèle classique

Dans le modèle classique, un corps est isolant s'il ne contient pas d'électrons mobiles. Dans un conducteur, des électrons sont peu liés aux noyaux et peuvent se déplacer dans le réseau cristallin. Si  $n$  est la densité des électrons libres,  $\vec{v}$  leur vitesse moyenne, dans une barre de longueur  $L$ , de section  $S$  avec une tension  $V$  entre les extrémités, la densité de courant  $J=I/S$  est égale à

$\vec{J} = ne\vec{v}$ . La vitesse des électrons est proportionnelle à la force à laquelle ils sont soumis donc au champ électrique  $E=V/L$ . Si  $\mu$  désigne la mobilité, on a : [12]

$$\vec{v} = \mu\vec{E} \quad (1)$$

$$\vec{J} = ne\vec{v} = ne\mu\vec{E} \quad , \quad \vec{J} = \sigma\vec{E} \quad (2)$$

### I-2 Modèle quantique des bandes d'énergie

Le modèle classique a été remplacé par le modèle quantique des bandes d'énergie. Le modèle de bande permet de préciser la différence entre métaux, isolants et semi-conducteurs. L'influence périodique du réseau d'ions positifs sur le mouvement des électrons (électrons « quasi libres » soumis à un potentiel périodique en opposition au modèle des électrons dits « libres », soumis à un potentiel constant) conduit à la notion de structure de bandes d'énergies permises ou interdites pour les électrons. Dans l'atome isolé les électrons occupent des niveaux d'énergie discrets. Dans un cristal, par suite des interactions entre les atomes, ces niveaux discrets s'élargissent et les électrons occupent des bandes d'énergie permises séparées par des bandes interdites. La répartition des électrons dans les niveaux obéit aux lois de la thermodynamique statistique. Au zéro absolu, seuls sont peuplés les niveaux de plus basse énergie. [12]

#### I-3-1 Les conducteurs

Dans les conducteurs, la dernière bande occupée est partiellement remplie : il existe beaucoup de niveaux disponibles et la conduction est grande. Un conducteur est un corps qui permet le passage d'un courant électrique lorsqu'on impose une tension entre ses bornes. Ce passage est assuré, dans les solides, par les électrons libres. Un conducteur possède plus de  $10^{22}$  électrons libres par  $\text{cm}^3$  permettant la conduction. Sa résistivité  $\rho$  (caractérisant la capacité d'un matériau à s'opposer à la circulation du courant électrique) est donc très faible :  $\rho \leq 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$ . Pour des métaux bons conducteurs, on obtient : [12]

$$\rho_{\text{Ag}} = 1.6 \cdot 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}.$$

$$\rho_{\text{Cu}} = 1.710^{-8} \Omega \cdot \text{m}.$$

$$\rho_{\text{Al}} = 2.810^{-8} \Omega \cdot \text{m}.$$

#### I-3-2 Les isolants

Dans les isolants, les électrons libres sont très peu nombreux et la résistivité est élevée :  $\rho > 10^6 \Omega \cdot \text{m}$ . leurs bandes d'énergie les plus faibles sont entièrement pleines. La hauteur de la bande interdite est grande  $\approx 5\text{eV}$ . Il n'y a pas de niveaux d'énergie accessibles et pas de conduction. Par exemple, la résistivité du diamant est  $\rho=10^{12} \Omega \cdot \text{m}$  et celle du mica varie entre  $10^{10}$  et  $10^{15} \Omega \cdot \text{m}$ . [12,13]

**I-3-3 Les semi-conducteurs**

Pour les semi-conducteurs, le taux de remplissage de la dernière bande occupée est soit très faible soit très important. La hauteur de la bande interdite est faible  $1eV$ . La conduction est faible et varie beaucoup avec la température. Pour le silicium et le germanium, on mesure à  $300\text{ }^\circ\text{K}$  : [12, 13,14]

$$\rho_{\text{Si}} = 2400\ \Omega.m$$

$$\rho_{\text{Ge}} = 0.5\ \Omega.m$$

La structure du silicium et du germanium est la même que celle du diamant (cubique Fd3m). Chaque atome est lié à 4 voisins placés aux sommets d'un tétraèdre par une liaison covalente : (La figure I-1) correspond à une représentation sur un plan de la structure. Les traits représentent les électrons de valence.

La théorie des bandes appliquée aux semi-conducteurs amène à considérer une bande de valence entièrement pleine qui est séparée d'une bande de conduction par une bande interdite distante de  $\Delta E$  appelée énergie du gap. (Figure I-2)

Si on apporte une énergie thermique ou lumineuse suffisante à un électron, il peut passer de la bande de valence à la bande de conduction avec une probabilité  $P$  proportionnelle à :

$$P \approx \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right) \quad (3)$$

$\Delta E$  est l'écart en énergie séparant les deux bandes.  $T$  est la température absolue.

$K = 1,38 \cdot 10^{-23}\ \text{JK}^{-1}$  est la constante de Boltzmann.

Pour  $T = 300\ \text{K}$ ,  $kT = 0,0025\ \text{eV}$

Diamant  $\Delta E = 7\ \text{eV}$  ; Silicium  $\Delta E = 1,12\ \text{eV}$  ; Germanium  $\Delta E = 0,7\ \text{eV}$

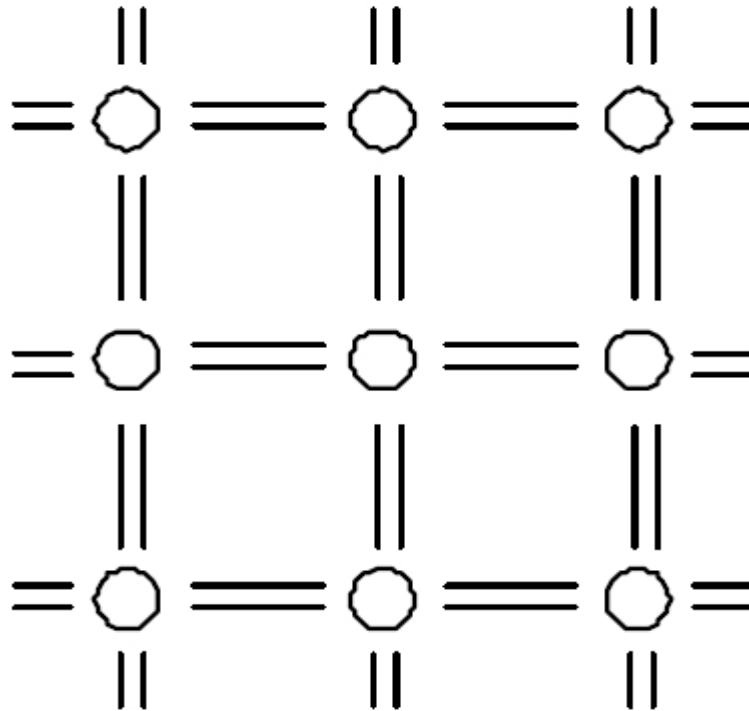


Figure I.1 : Schéma de la structure électronique d'un semi-conducteur. Les traits représentent les électrons de valence. : [12]

Dans un semi-conducteur,  $\Delta E$  est assez faible pour autoriser, à température ambiante, le passage d'un petit nombre d'électrons de la bande de valence vers la bande de conduction.

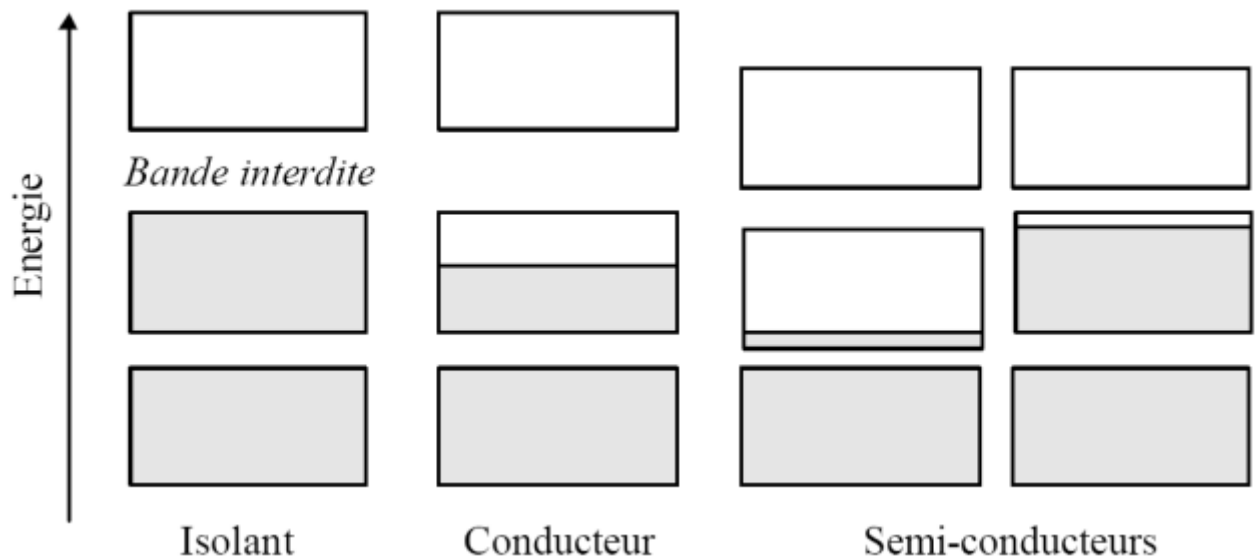


Figure I.2: structure de bande de l'isolant, des métaux et des semi-conducteurs [12]



## I-4 Dopage d'un semi-conducteur

### I-4-1 Principe

Dans un matériau pur, on introduit des impuretés par dopage. Pour que celui-ci soit contrôlable, il faut que le degré de pureté initial global soit supérieur au taux du dopage. Les taux de dopage utilisés sont de l'ordre de  $10^{-8}$  à  $10^{-11}$ . Une mole de silicium (28g) correspond à  $6,023 \cdot 10^{23}$  atomes et la densité du silicium est voisine de 7. Le silicium contient donc environ  $1,5 \cdot 10^{23}$  atome. Avec un taux de dopage de l'ordre  $10^{-10}$ , il y a environ  $1,5 \cdot 10^{13}$  atome d'impureté par  $cm^3$  [1, 15,16]

### I-4-2 Dopage de type n

On introduit dans la matrice de silicium des atomes d'impuretés pentavalents tels que l'azote N, le phosphore P, l'arsenic As et l'antimoine Sb. L'azote, candidat naturel pour le dopage de type n s'insère facilement en sites substitutionnels grâce à son rayon covalent (0.079 nm). Le phosphore est aussi le donneur substitutionnel donnant les meilleurs résultats expérimentaux à l'heure actuelle pour le dopage de type n. [15-17]

Chaque atome d'impureté amène un électron de valence supplémentaire. Cet électron est peu lié au noyau et passe aisément dans la bande de conduction. La conductivité du matériau (conductivité extrinsèque) devient à cause du taux de dopage, très supérieure à celle du matériau pur. Les atomes pentavalents ou donneurs deviennent des ions positifs après le passage des électrons excédentaires dans la bande de conduction.

Les données numériques précédentes montrent que le nombre des électrons dans le matériau, fonction du taux de dopage, est supérieur au nombre des trous, fonction de la température, d'un facteur supérieur à  $10^3$ . La conduction dite de type n (négative) est assurée par des électrons. On dira que les électrons sont les porteurs majoritaires.

### I-4-3 dopage Type p

On introduit dans le réseau une impureté trivalente : bore B, aluminium Al, gallium Ga, indium In. Il manque à l'impureté un électron de valence pour assurer les 4 liaisons avec les atomes de silicium voisins. Un faible apport d'énergie suffit pour qu'un électron d'un silicium voisin soit capté par l'impureté : il y a formation d'un trou peu lié et donc mobile. Les atomes trivalents deviennent des ions négatifs par capture d'un électron. Compte tenu des taux de dopage, ces trous sont beaucoup plus nombreux que les porteurs intrinsèques du cristal pur. Par exemple dans le précipitation du bore dans le silicium, les mécanismes susceptibles de

modifier la distribution du bore et par conséquent le profil des dopants, on peut citer la diffusion transitoire et accélérée du bore, appelée couramment « TED », et la formation d'agglomérats mixtes bore/auto-interstitiel de silicium : les « BIC » (pour « Born Interstitiel Clusters »). [18]

**I-4-4 Tableau de Mendeleïev**

Le tableau périodique de Mendeleïev donne les principaux éléments chimiques utilisés dans le dopage de type N de type P ou encore le dopage chimique de n'importe quel élément en vue de changer la constitution en surface du matériau semi-conducteur. Nous retenons en particulier les éléments de la colonne III contenant les éléments Bore (B), Aluminium (Al), Gallium (Ga), Indium (In) et Thallium (Tl). Tous les éléments précités contiennent trois électrons sur leur couche périphérique et sont en manque d'un électron qui sera le trou une fois le dopage par un de ces éléments sera effectué sur un matériau semi-conducteur. [6]

D'autre part les éléments de la colonne V contiennent cinq électrons sur leur couche périphérique, ils ont donc un électron non lié qui pourra devenir un électron libre une fois le dopage effectué sur un matériau semi-conducteur. Ces éléments sont: L'azote (N), le Phosphore (P), Arsenic (As), Antimoine (Sb) et le Bismuth (Bi).

Le dopage chimique est l'implantation des autres éléments dans le tableau périodique en vue de changer les propriétés structurales et physiques des matériaux semi-conducteurs dopés. Les éléments ajoutés prennent le nom d'additifs, il est à l'origine des variations de la surface sensible à tout environnement extérieurs comme les détecteurs des gaz ou les nez électroniques

Le tableau périodique des éléments chimiques est présenté avec des éléments de dopage mis en évidence :

- Éléments de la colonne III (Bore, Aluminium, Gallium, Indium, Thallium) : B, Al, Ga, In, Tl.
- Éléments de la colonne V (Azote, Phosphore, Arsenic, Antimoine, Bismuth) : N, P, As, Sb, Bi.

Le tableau inclut également des légendes pour le numéro de groupe, le nombre atomique, le symbole et le nom de l'élément.

Figure I.3 : tableau périodique des éléments chimiques utilisés dans le dopage des semi conducteurs. [6]

**I-4-5 Exemple de dopage du Silicium**

Un réseau monocristallin d'atomes de silicium, Si, est un semi-conducteur. L'atome de silicium ayant quatre électrons de valence, il établit quatre liaisons covalentes avec quatre atomes voisins. Un semi-conducteur au silicium a une conductivité quasi nulle. Afin d'augmenter sa conductivité, on insère dans la structure cristalline des atomes d'autres éléments, appelés dopants. Pour un semi-conducteur au silicium dopé au phosphore, un atome de phosphore, P, remplace un atome de silicium dans le réseau. L'atome P ayant cinq électrons de valence, il forme quatre liaisons covalentes avec des atomes de silicium voisins; il reste un électron libre qui peut participer à la conduction électrique. L'atome de phosphore étant donneur d'électron, on parle de dopage de type n (n pour négatif). Par un raisonnement analogue, un atome dopant possédant trois électrons de valence, comme le bore, B, conduit à un déficit d'électron de valence dans le réseau, appelé trou. Ce trou peut être comblé par un électron de valence d'un atome de silicium voisin, déplaçant ainsi le trou. L'atome de bore étant accepteur. (Figure I-4) [1]

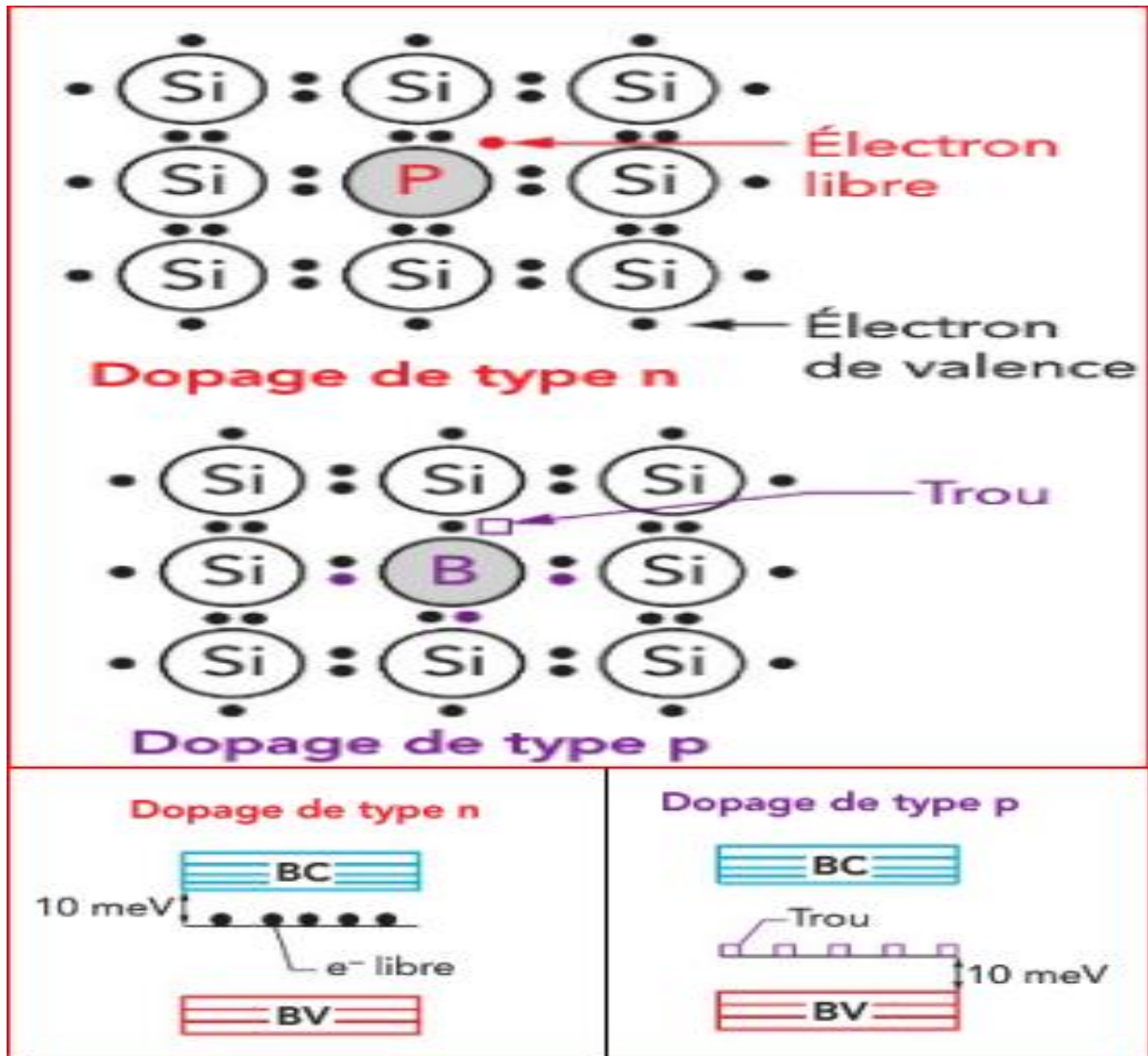


Figure I.4: dopage de type N et dopage de type P dans un semi-conducteur. [1]

## I-4-6 Application du dopage en technologie

### I-4-6-1 Exemple d'une LED

Le développement des LED à base de GaN et de nitrure est l'un des principaux moteurs du développement technologique des LED. En effet, suivant le dopage donné au GaN et combiné avec l'AlN et l'InN pour former une large panoplie de composés ternaires et quaternaires, dont les bandes interdites couvrent une large gamme. Cela permet de produire notamment des LED ou diodes lasers émettant des longueurs d'ondes allant du proche infrarouge jusqu'à l'ultraviolet en passant par le visible. [19]

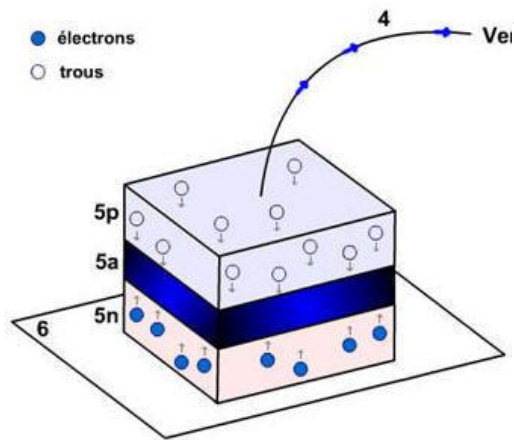
Dans une LED, il y a émission de photons lorsqu'un électron passe de la bande de conduction à la bande de valence. Cet électron franchit donc la bande d'énergie interdite qui sépare les deux niveaux d'énergie et se recombine avec un trou. L'émission d'un photon est donc subordonnée par une recombinaison trou-électron. Le photon ainsi émis est doté d'une énergie, régie par la relation  $E_g = h \cdot \nu$  avec  $h$  la constante de Planck,  $\nu$  la fréquence reliée à la longueur d'onde par la relation  $\nu = \frac{c}{\lambda}$ ,  $E_g$  est appelé le gap.

Dans la pratique les photons émis ne sont pas tous de la même longueur d'onde  $\lambda$ . Il existe une dispersion que l'on quantifie par  $\Delta\lambda$ , appelée largeur spectrale.

En règle générale, la structure d'une LED est à transition directe. C'est-à-dire qu'entre la bande de conduction et la bande de valence, l'électron ne change pas de vecteur d'onde. Il en résulte que de nombreux semi conducteurs simples ne sont pas utilisés. Nous pouvons citer, entre autre, le silicium (Si) ou le Germanium (Ge).

Une structure à transition indirecte n'est pas envisageable. En effet, il arrive qu'elles soient utilisées. Toutefois, le rendement de ce type de LED, par exemple celles au Gap (Gallium-Phosphores) fortement dopé, est plus faible.

Sous l'effet d'une différence de potentiel appliquée entre les deux couches, des électrons pénètrent dans la couche de type N. Ce qui équivaut à une injection de trous dans la couche de type P. A l'interface de ces deux zones, les électrons et les trous se recombinent en donnant naissance à un photon. D'où l'émission de lumière (figureI- 5).[\[20\]](#)



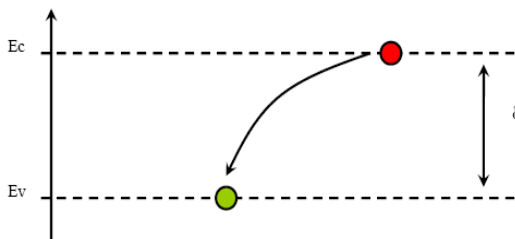
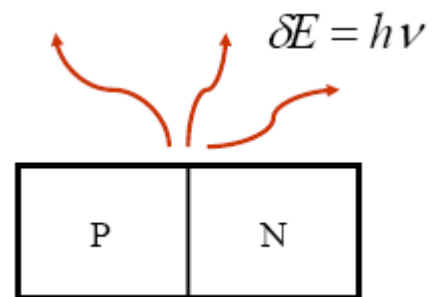
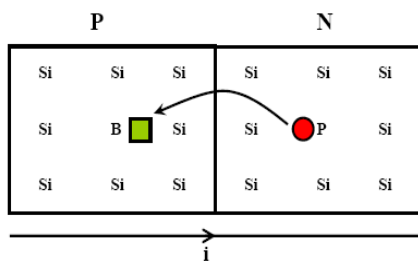
4 : fil de bonding

5p : couche de type P (en excès de trous c'est à dire en déficit d'électron)

5n : couche de type N (en excès d'électrons)

5a : couche active

6 : coupelle réflectrice



- : Electrons Si : 4 électrons de valence
- : B : 3 électrons de valence
- et ○ : Torus P : 5 électrons de valence
- Ec : énergie de la bande de conduction
- Ev : énergie de la bande de valence

Figure I. 5: recombinaison des électrons et des trous donnant un photon [20].

Pour obtenir des zones où est présent un excès ou un déficit d'électrons, on dope ces dernières. Le dopage consiste à incorporer un peu d'atomes étrangers dans le semi conducteur. Cela constitue un dopage chimique ( figure I- 6) écrans plats. Mais il existe aussi les dopages

physiques dus à des imperfections sensibles de la structure cristalline (lacune, atome interstitiel, dislocation Light Emitted diode LED



Figure I. 6 : Technologie d'une LED obtenue par dopage d'un semi-conducteur par dopage électronique [21]

#### I-4-7 Fonctionnement des cellules photovoltaïques en silicium cristallin

La Figure I-7 représente la structure la plus classique des cellules solaires en silicium cristallin. Cette structure, formée sur une base en silicium de type p, sera notée « cellule standard » par la suite. Elles sont principalement composées de :

- Une base, plaquette en silicium de type p (dopé au bore)
- Un émetteur de type n+ (dopé au phosphore)
- Une zone de charge d'espace (ZCE) à l'interface entre l'émetteur et la base
- Un champ répulsif arrière : BSF (dopé à l'Aluminium)
- Une couche antireflet en face avant (ARC)
- Des contacts métalliques en face avant (Ag) sous forme de grille et en face arrière (Al) pleine plaque [21,22]

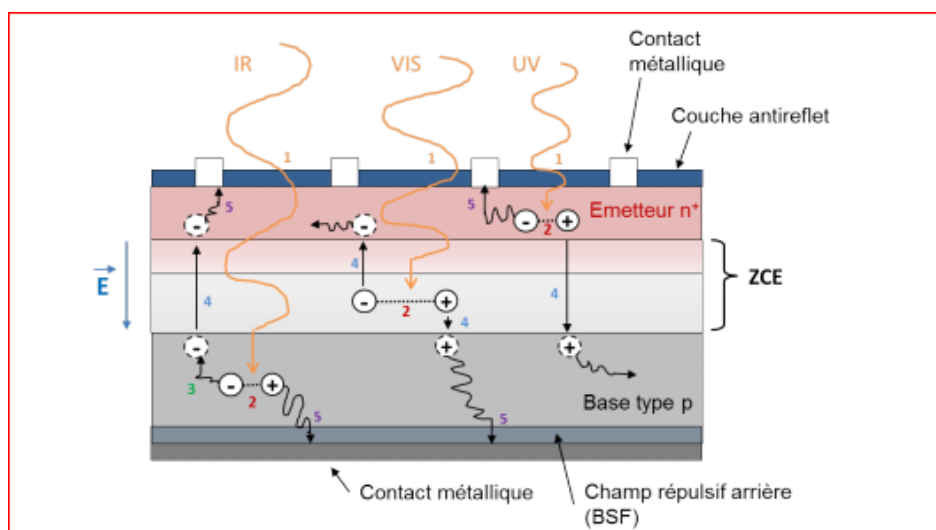


Figure I.7: Principe de fonctionnement d'une cellule solaire avec dopage électronique [22]

## Implantation ionique

### Introduction

L'implantation ionique a été utilisée initialement pour le nettoyage des surfaces, la modification des propriétés physiques sous la surface bombardée entraîna l'utilisation de l'implantation dans le dopage des semi-conducteurs.[22]

Dans le cas de l'implantation ionique la concentration de dopants introduits n'est pas limitée par leur solubilité dans le matériau cible. Le contrôle de la distribution des dopants, l'endommagement du matériau cible suite à l'implantation ionique, sa "guérison" par recuit thermique et surtout les caractéristiques électriques du semi-conducteur après implantation ionique et recuit post-implantation, sont les facteurs qui caractérisent l'efficacité du dopage par implantation ionique. La quantité de matière implantée par unité de surface, c'est à dire la dose implantée, est mesurée en comptant la charge arrivant sur la cible en intégrant le courant pour une surface bien déterminée sur la durée de l'implantation ionique. [23]

### II-1 Principe de l'interaction ion matière

#### II-1-2 Principe

On dit qu'il y a collision quand deux ou plusieurs objets se rapprochent et subissent une interaction mutuelle sans forcément qu'un impact ait eu lieu. Dans le cas d'une collision élastique l'énergie totale et la quantité de mouvement totale se conservent.(Figure II.1)

[24-25]

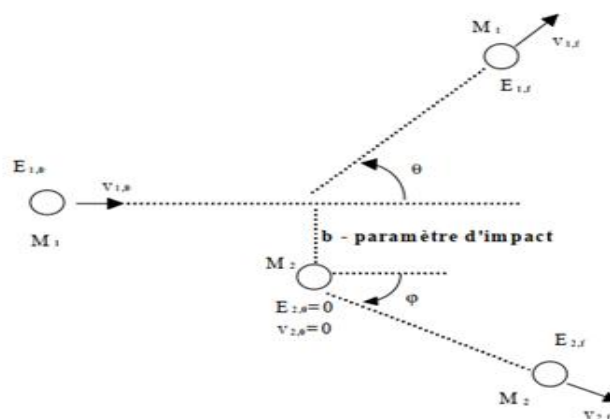


Figure II.1 : Collision élastique entre deux particules dans le système de référence du laboratoire [24]

#### II-1-2 Processus de perte d'énergie



L'implantation ionique consiste à envoyer un faisceau d'ions accélérés sur la surface d'un matériau et permet ainsi d'introduire un élément (sous forme d'ion) dans la zone superficielle de ce matériau, avec une concentration et une profondeur contrôlées. Les processus de pertes d'énergie dépendent essentiellement de la vitesse ( $v_1$ ) de la particule incidente et de sa nature. Afin de pouvoir relier directement les énergies cinétiques des ions avec leur vitesse, nous exprimerons l'énergie cinétique en  $\text{MeV}\text{\AA}^{-1}$ . L'énergie cinétique est ainsi la même pour des ions ayant la même vitesse. Le ralentissement de l'ion résulte de deux processus [26] : des collisions élastiques et inélastiques.

### **a-Collisions élastiques**

Dans le domaine de faible énergie cinétique (keV), le processus d'interaction entre un ion et un atome cible est considéré comme une collision élastique binaire entre deux corps. Ce mécanisme de collision se traduit par la conservation de l'énergie cinétique du système de particules impliquées dans la collision, l'énergie interne individuelle de chaque particule reste inchangée, ce qui implique que la configuration électronique des deux partenaires n'est pas modifiée lors d'une collision élastique [26,27].

### **b-Collision inélastique**

Ce processus de ralentissement domine à haute vitesse, les collisions inélastiques sont des collisions entre l'ion incident et les électrons de la cible, l'énergie cinétique totale du système de particules n'est pas conservée. Ainsi l'énergie interne noyau cible électrons est modifiée au cours de l'interaction. Dans le cas d'une collision ion-atome, chacun des deux partenaires peut voir sa population électronique modifiée. Les modifications des configurations électroniques des deux partenaires dépendent des processus fondamentaux tels que, l'excitation, l'ionisation, et le capteur électronique. Dans le cas de l'excitation, le transfert d'énergie peut laisser le projectile ou l'atome cible dans un état excité. Dans le cas d'ionisation, un électron est arraché à un atome cible ou au projectile. En ce qui concerne le capture électronique, l'atome cible perd un électron qui est capturé par le projectile. Ce phénomène de capture mène à un changement d'état de charge du projectile et par conséquent à l'ionisation de l'atome cible. [28]

A grande vitesse, les collisions élastiques ne contribuent pas de façon prépondérante à la perte d'énergie de l'ion, par contre, pour des vitesses faibles, ces collisions ne sont plus négligeables. Si le solide irradié possède une épaisseur suffisante, l'ion est arrêté dans le solide ; il s'agit de l'implantation ionique. Dans tous les cas, le passage de l'ion entraîne la création d'un certain

nombre de défauts dans le matériau irradié. Ces défauts sont issus des chocs nucléaires entre l'ion et les atomes cibles. Ils résultent notamment des cascades de collisions. Les processus de création des défauts par chocs inélastiques sont plus complexes [28-29].

### **II-1-3 Générateur de Van de Graf**

L'implantation ionique est un processus générique qui consiste à bombarder un matériau cible avec des ions d'une impureté spécifique. Les ions peuvent être accélérés avec une tension de quelques keV (implantation plasma) à quelque MeV (implantation haute énergie). Dans ce cas, la source THT est un générateur de type Van de Graf. Le diamètre maximum des échantillons est de 100mm. Un schéma de type Van de Graf est représenté sur figure II-2. [30-29].

Il comprend:

1-Un compartiment source dans lequel des électrons émis par un filament chauffant ionisent un gaz.

2-Un champ électrostatique primaire qui, directement appliqué à la sortie de la chambre d'ionisation permet l'extraction des ions du compartiment source.

3-Un champ magnétique utilise pour effectuer une analyse physique du faisceau ions émis. Chaque ions est dévié proportionnellement à sa masse, à sa vitesse et à la valeur du champ magnétique. Une fente placée en sortie permet de sélectionner une espèce d'ions d'une énergie déterminée.

4-Le faisceau d'ions est alors accéléré avec des énergies comprises entre 10keV et quelque MeV, puis focalisé sur l'échantillon.

5-Un système de déflexion électrostatique qui avant que les ions ne frappent la cible permet de balayer l'échantillon.

La quantité de matériaux implantée, appelée dose ou fluence est l'intégrale sur le temps du courant ionique. Les courants électriques en jeu dans les implanteurs sont de l'ordre du microampère. Les atomes à implanter sont tout d'abord introduits dans la chambre d'ionisation sous forme de gaz. L'ionisation du gaz se fait au moyen d'un canon à électrons, la source la plus utilisée étant la source de Freeman. Une fois émis par le filament, les électrons entrent en collision avec les atomes du gaz provoquant la formation du plasma. Le champ électrique, appliqué en sortie de la chambre d'ionisation, permet d'extraire les ions du

plasma et de les accélérer à une première énergie intermédiaire. Le faisceau d'ions ainsi formé passe ensuite dans un filtre de masse, qui permet au moyen d'un champ magnétique de sélectionner, selon l'angle de déviation, une seule masse ionique. Le faisceau d'ions sélectionnés est ensuite accéléré à l'énergie voulue, de 5 keV à quelques MeV, et focalisé jusqu'à l'échantillon par l'intermédiaire de lentilles quadripolaires et magnétiques. Enfin, un balayage électrostatique du faisceau et/ou un balayage mécanique de l'échantillon permet d'obtenir une implantation homogène sur tout l'échantillon. Celui-ci, placé dans une chambre sous vide, est généralement refroidi pendant l'implantation. [29].

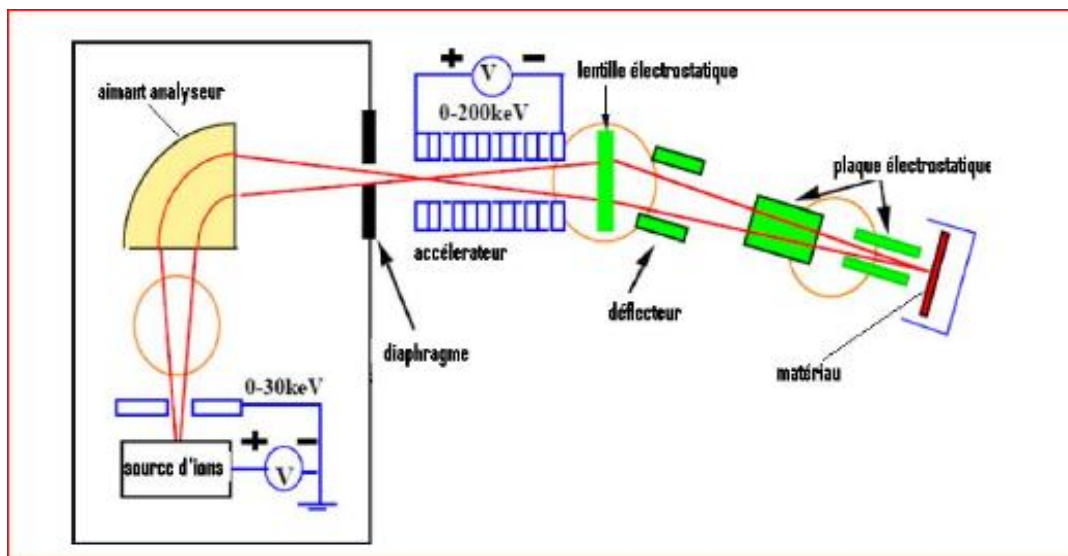


Figure. II.2: Schéma d'un générateur à implantation ionique de type Van de Graaf [29]

Toutefois, il est possible de se limiter à des énergies inférieures à 10 keV, mais dans ce cas la pénétration ne dépasse jamais quelques nanomètres. On trouve également des accélérateurs qui sont capables d'accélérer des ions jusqu'à 5 MeV, mais cela provoque des dégâts structurels importants de la cible. Par ailleurs, étant donné que la distribution de la profondeur de pénétration est large, le changement de composition en un point donné est relativement faible car les profils de composition ne sont pas toujours des gaussiennes parfaites : il peut y avoir une légère déformation (ou asymétrie, kurtosis en anglais) rendant le profil asymétrique. Ces profils sont généralement calculés avec le logiciel TRIM (Transport Range Implantation), il nous donne une idée de la distribution en profondeur des ions dans le matériau [31].

#### II-1-4 Distribution des ions dans la matrice cristalline.

Les ions dopants sont vaporisés, projetés sur le matériau cible (porté à une certaine température) dans lequel se produisent de nombreuses collisions. Ces ions subissent alors une perte graduelle d'énergie,

jusqu'à ce qu'ils s'arrêtent à une profondeur. Ce traitement, qui utilise des faisceaux d'ions de haute énergie, permet une profondeur moyenne de pénétration des atomes allant de  $100\text{Å}$  à  $1\ \mu\text{m}$ . La profondeur moyenne est contrôlée en ajustant l'énergie d'accélération, et la dose d'impuretés implantées est fixée par le courant ionique et la durée du balayage. Le principal effet secondaire est la création des défauts ponctuels ou étendus dans le matériau, dus principalement aux collisions nucléaires. Afin d'éliminer ces défauts et aussi d'activer les dopants par diffusion de ceux-ci en sites substitutionnels, un traitement thermique (recuit) est ensuite nécessaire.

Au cours d'une implantation ionique, une longue séquence de collisions atomiques successives est observée. Un phénomène important lié à l'implantation ionique est la formation de défauts. En effet, lors du freinage nucléaire, l'ion incident peut transférer des quantités de mouvement importantes aux atomes du réseau. Si l'énergie transmise est supérieure à une valeur seuil  $E_d$ , appelée énergie de déplacement, un atome va être déplacé et mis en position interstitielle, laissant un site vacant (lacune). Ce couple de défauts composé d'un interstitiel et d'une lacune est appelé paire de Frenkel. C'est le défaut le plus simple créé par implantation. La distribution de défauts est aussi généralement de type gaussien et est centrée de part et d'autre d'une profondeur  $R_d$ , où le pouvoir d'arrêt nucléaire est maximal. La profondeur d'arrêt des ions  $R_p$  est elle plus grande que la profondeur  $R_d$ . La figure II-3 représente la concentration d'ions (impuretés) et de défauts en fonction de la profondeur dans un matériau.[32].

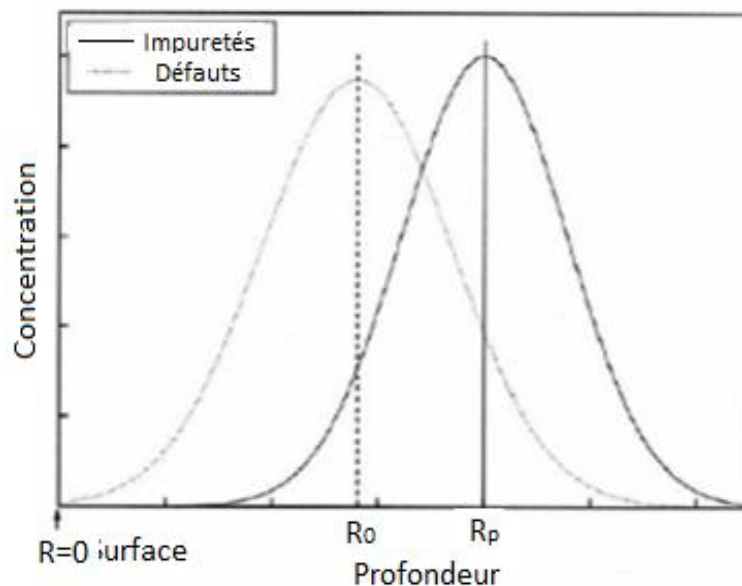


Figure II.3: Distribution des ions et des défauts en fonction de la profondeur dans un matériau [32]

## II-2 cristallins créés par dopage

Lors du dopage du silicium, l'impact des ions dopants (bore, phosphore, arsenic...) sur le silicium cristallin engendre un nombre de défauts importants dans la maille cristalline. La génération de ces défauts sera traitée lors d'un recuit thermique. Ce recuit thermique est nécessaire dans le cas du dopage par implantation ionique pour « activer » les atomes dopants introduits dans le matériau. Les déplacements des atomes de la cible, provoqués lors de l'implantation, génèrent deux types de défauts ponctuels. Dans le cas d'une implantation dans du silicium cristallin, d'atome entraîne la formation d'un auto-interstitiel de silicium, noté I, et d'une lacune, notée V. L'auto-interstitiel de silicium, communément appelé « interstitiel », correspond à un atome de Si positionné en dehors des sites du réseau cristallin, tandis que la lacune correspond à un atome manquant dans le réseau. Ces deux défauts vont jouer un rôle majeur dans la diffusion des dopants, ils forment ensemble une paire lacune interstitiel, appelée paire de Frenkel. Lors de la cascade de collision, qui ne dure que quelques picosecondes, la majorité des paires de Frenkel se recombinent (repositionnement de l'interstitiel en substitution, lors de son passage à côté d'une lacune) pour ne laisser qu'une fraction des défauts initialement créés. Suivant l'endommagement restant, on distingue deux types d'implantation : les implantations avec et sans amorphisation du substrat (cf. Figure II-2). Dans le cas où l'ordre cristallin est conservé malgré la présence d'une forte quantité de défauts, les interstitiels sont situés plus en profondeur que les lacunes à cause du recul des atomes lors des collisions (Figure II4a)

Lorsque l'endommagement dépasse le seuil critique d'amorphisation (déplacement de plus de 10% des atomes une zone amorphe continue est créée. Dans l'exemple présenté sur la Figure II-4-b, celle-ci comprend le pic de concentration en dopants ainsi que la zone en excès de lacunes. À l'arrière de cette zone se trouve une région avec un fort excès d'interstitiels, à l'origine de la formation des défauts de fin de parcours. [33-34]

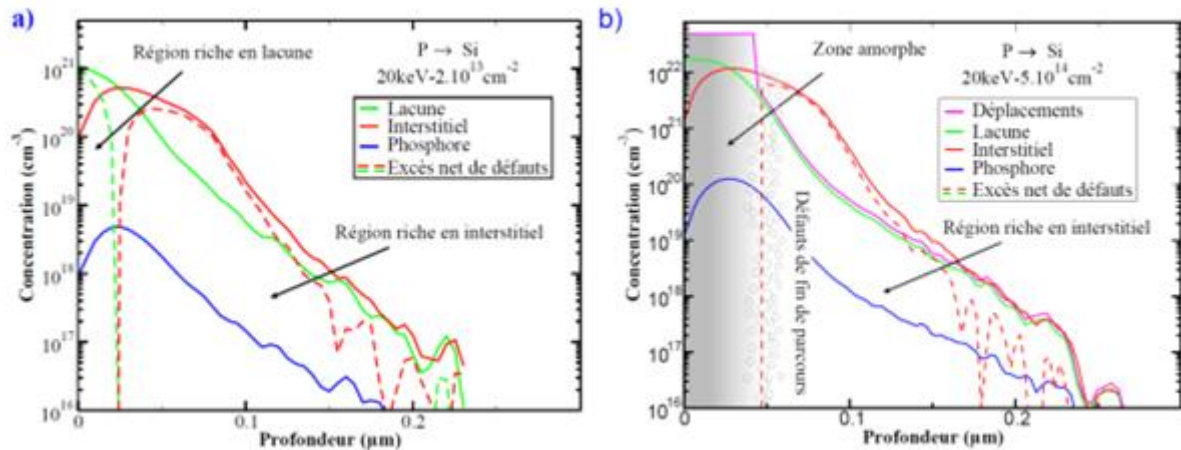


Figure II.4 (a) position des défauts engendrés par implantation du phosphore dans le silicium dans le cas (a) l'implantation n'est pas amorphisante (b) Le cas ou elle est amorphisante [34]

## II-3Le pouvoir d'arrêt

### II-3-1 Principe

Lorsqu'un ion incident pénètre dans un matériau-cible, il est freiné sous l'effet de deux mécanismes complémentaires:

a-Des interactions ions-électrons de valence inélastiques c'est le pouvoir d'arrêt électronique noté  $S_e$ .

b-Des collisions nucléaires élastiques .c'est le pouvoir d'arrêt nucléaire noté  $S_n$ .

-Dans le premier cas (pouvoir d'arrêt électronique) les ions incidents perdent leurs énergies sans que les directions de propagation soient affectées.

-Dans le deuxième cas (pouvoir d'arrêt nucléaire) les ions perdent leurs énergies par collision élastiques avec les atomes cibles. La direction des ions est fortement changée et les atomes qui ont subit une collision peuvent être déplacés de leur position d'équilibre. Ceci entraine un très fort endommagement du réseau, avec l'apparition des défauts d'implantation, tels que les sites vacants ou lacunes, des sites interstitiels occupés etc. [35]

Ces processus sont schématisés sur la figure(II-5).On y voit en particulier qu'il peut exister un nombre important de collisions nucléaires avec le matériau-cibles qui participent à l'endommagement du cristal.

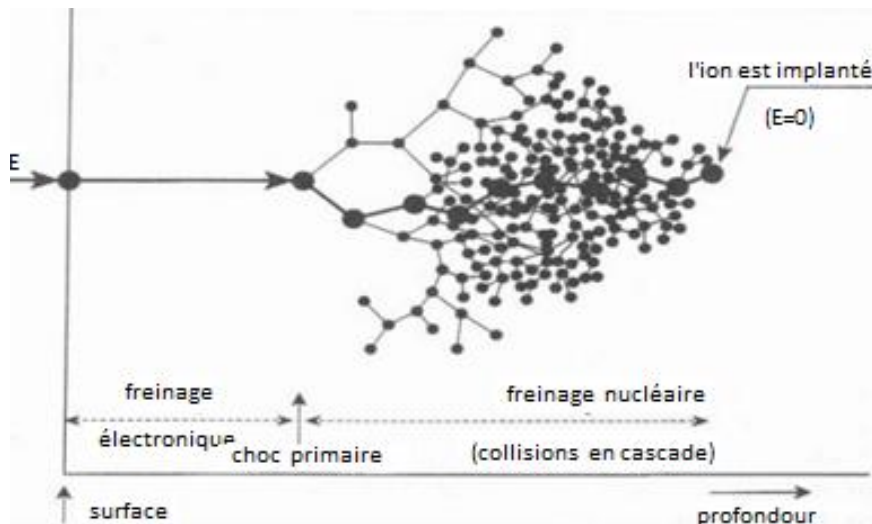


Figure II.5: Mécanisme de freinage d'un ion dans un solide [29]

Dans les deux processus, l'évènement élémentaire est la collision binaire ion-atome et il s'agit d'une interaction coulombienne. En règle générale, ces deux processus de freinage sont indépendants et peuvent s'ajouter, mais souvent l'un des deux est négligeable. En effet, leurs sections efficaces varient différemment selon l'énergie des ions incidents : elle est maximale à haute énergie (environ 1 MeV) pour le freinage électronique, et à faible énergie (de l'ordre du keV) pour le freinage nucléaire [36].

Un autre effet de l'implantation dont on doit tenir compte est la pulvérisation de la surface bombardée, qui peut être importante si la dose des ions implantés est élevée et l'énergie faible. Ce phénomène est aussi observé lors d'une implantation d'ions suffisamment énergétiques ou lourds (la masse atomique plus grande que celle des atomes du substrat); ces ions peuvent alors arracher des atomes à la surface. On parle ainsi d'une pulvérisation de surface. L'émission ne concerne pas exclusivement les atomes du matériau cible, cela peut aussi se traduire par la rétrodiffusion d'ions incidents, de photons ou encore d'électrons.

L'implantation ionique présente un attrait particulier car elle permet de contrôler divers paramètres avec précision :

- La profondeur moyenne de l'espèce implantée par rapport à la surface en ajustant l'énergie d'accélération des ions.
- La quantité de l'espèce introduite en agissant sur le courant ionique et la durée d'exposition au faisceau.

- Le profil de l'espèce implantée en effectuant des implantations multiples à différentes énergies.

### II-3-2 Théories du pouvoir d'arrêt

#### II-3-2-1 Pouvoir d'arrêt nucléaire

Si l'énergie transférée par collisions nucléaires aux atomes du matériau cible est supérieure à l'énergie de liaison, ces noyaux vont acquérir une énergie de déplacement qui leur permettra d'interagir avec d'autres noyaux du matériau cible, en les délocalisant à leur tour. On assiste à un processus en cascade de création de défauts, ce qui endommage le matériau. On peut avoir une pulvérisation de la cible quand ce processus a lieu en surface, les noyaux peuvent être éjectés du matériau. On précise aussi que si la masse des ions incidents est plus faible que celle des atomes du matériau cible, les ions incidents peuvent rebondir sur les noyaux, en ayant un phénomène de rétrodiffusion.[29,36]

Ce sont des collisions élastiques qui ont lieu à faible vitesse, avant l'arrêt de la particule ionique dans le matériau implanté. S'agissant d'une collision élastique entre deux particules l'énergie transmise au noyau du matériau cible ou la perte d'énergie de la particule incidente s'exprime par : [29]

$$T_{max} = \frac{4M_{ion}M_{atome}}{(M_{ion}+M_{atome})^2} E_{ion.0} \quad (4)$$

$$T = \frac{4M_{ion}M_{atome}}{(M_{ion}+M_{atome})^2} E_{ion.0} \cos^2(\varphi) \quad (5)$$

$$T = T_{max} \cos^2(\varphi) = T_{max} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \text{ Avec } \varphi = \frac{\pi - \theta}{2} \quad (6)$$

Avec  $b$ , le paramètre d'impact. On définit également la section efficace de diffusion

$$\sigma = \pi b^2 \text{ ou } d\sigma = 2\pi b db \quad (7)$$

La perte d'énergie sur une profondeur  $\Delta x$  de matériau traversée :

$$\Delta E = -N \Delta x \int_0^\infty T(E_{ion.0}, b, \varphi) d\sigma = -N \Delta x \int_0^\infty T(E_{ion.0}, b, \varphi) 2\pi b db \quad (8)$$

Le pouvoir et la section efficace d'arrêt nucléaire s'expriment :

$$P_{E.n} = - \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta E}{\Delta x} = N \int_0^\infty T(E_{ion.0}, b, \varphi) 2\pi b db$$



$$et \quad S_n = \frac{PE_n}{N} = \int_0^\infty T(E_{ion.0}, b, \varphi) 2\pi b. db \quad (9)$$

On détermine l'angle  $\phi$  en fonction de l'énergie potentielle d'interaction  $V(r)$ :

$$\varphi = \frac{\Phi}{2} \text{ avec } \Phi = \pi - \Theta \text{ et } \Theta = -2 \int_{r_{ion}}^{+\infty} \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E'_{c.0}}}} dr ; E'_{c.0} = \frac{M_{atome}}{(M_{ion} + M_{atome})} E_{ion.0} \quad (10)$$

Pour le calcul de l'angle de déflexion et en conséquence le pouvoir d'arrêt nucléaire, on utilise des potentiels coulombiens (en  $1/r$ ) ion-noyau cible écrantés par la charge électronique suivant la méthode de Thomas-Fermi.

A la base de la méthode de Thomas-Fermi on trouve le modèle statistique de l'atome dans lequel on suppose une distribution continue des charges électriques ayant une densité de charge satisfaisant à l'équation de Poisson par rapport au potentiel du champ électrique. La densité de charge est calculée indépendamment, à l'aide de la statistique de Fermi-Dirac et en tenant compte du principe d'exclusion de Pauli.[29]

$$V(r) = \frac{Z_{ion} Z_{atome} e^2}{r} f_{TF}\left(\frac{r}{a}\right) \quad (11)$$

Le potentiel coulombien écranté est le produit entre le potentiel Colombie et la fonction de Thomas-Fermi d'écrantage où le rayon d'écrantage  $a$  s'exprime par:

$$a = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} a_0 (Z_{ion}^x + Z_{atome}^x)^{-\frac{y}{3}} \quad (12)$$

Où  $a_0$  est le rayon de Bohr qui a pour valeur  $0,529\text{\AA}$ .[35]

Dans la physique des particules on décrit le comportement des particules dans un potentiel électrostatique défini, mais l'expression  $V(r)$  qu'on donne est en fait l'expression de l'énergie potentielle du système de particules. Le potentiel coulombien écranté a été calculé numériquement et tabulé. Des expressions empiriques ont été proposées pour son utilisation (Gambas, Firsov, Lindhard, Molière, ZBL (Ziegler, Biersack et Littmark)). Pour le rayon d'écrantage le produit  $xy$  est égal à l'unité dans le modèle de Thomas-Fermi. Firsov propose pour  $x$  la valeur de  $1/2$  et Lindhard lui donne la valeur de  $2/3$ ,

Dans le modèle de Ziegler, Biersack et Littmark,  $xy=0,69$ , avec  $x=0,23$ :

$$a = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} a_0 (Z_{ion}^{0,23} + Z_{atome}^{0,23})^{-1} \quad (13)$$

Pour le calcul du potentiel Thomas-Fermi, Brinkman (1954) propose la relation :

$$V(r) = \frac{AZ_{ion}Z_{atome}e^2}{1-\exp(-Ar)} \exp(-Br) \quad (14)$$

Avec A et B deux paramètres à ajuster.

Lindhard (1965) propose une forme algébrique simplifiée : [29]

$$f_{TF} \left( \frac{r}{a} \right) = \frac{\frac{r}{a}}{\left[ \left( \frac{r}{a} \right)^2 + C^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (15)$$

Avec C un paramètre à ajuster, la valeur  $C = \sqrt{3}$  étant prise en général.

Avec l'apparition de la possibilité d'utiliser des calculs numériques à l'aide des ordinateurs, des expressions plus complexes sont prises en compte comme par exemple le potentiel de Molière :

$$f_{TF} \left( \frac{r}{a} \right) = 0,35 \exp \left( -0,3 \frac{r}{a} \right) + 5,5 \exp \left( -1,2 \frac{r}{a} \right) + 0,1 \exp \left( -6 \frac{r}{a} \right) \quad (16)$$

Ou le potentiel de Ziegler, Biersack et Littmark connu sous le nom de "potentiel universel" et utilisé par une multitude de simulateurs d'implantation ionique comme par exemple SRIM :

[29]

$$f_{TF} \left( \frac{r}{a} \right) = 0,1818 \exp \left( -3,2 \frac{r}{a} \right) + 0,5099 \exp \left( -0,9423 \frac{r}{a} \right) + 0,2802 \exp \left( -0,4028 \frac{r}{a} \right) + 0,02817 \exp \left( -0,2016 \frac{r}{a} \right) \quad (17)$$

Pour trouver l'angle de déflexion, l'intégration peut être faite analytiquement d'une manière explicite uniquement dans le cas d'un potentiel Coulombien

$$V(r) = \frac{Z_{ion}Z_{atome}e^2}{r} \quad (18)$$

En notant  $u = \frac{1}{r}$  l'intégrale de diffusion devient :

$$\Theta = \pi - 2b \int_0^{u_{max}} \frac{du}{\sqrt{1 - b^2 u^2 - \frac{V(u)}{E'_{C,0}}}} \quad (19)$$

Avec  $u_{max}$  Donnée par:

$$1 - \frac{V(U_{max})}{E'_{C.0}} - b^2 u_{max}^2 = 0 \quad (20)$$

On considère d'un potentiel coulombien, C'est un potentiel représenté par l'expression:

$$V(r) = \frac{Z_{ion}Z_{atome}e^2}{r} \quad (21)$$

On note également  $\delta$  la distance minimale d'approche entre l'ion et l'atome pour une collision frontale, dans ce cas on aura: [29]

(  $b=0$  et  $1 - \frac{V(\delta)}{E'_{C.0}} = 0$  ) :

$$\int_0^{U_{max}} \frac{du}{\sqrt{1 - \delta u - b^2 u^2}} = \frac{1}{2b} \int_0^{u_{max}} \frac{du}{\sqrt{1 - \left(\frac{\delta + 2b^2 u}{\sqrt{4b^2 + \delta^2}}\right)^2}} = \int_{\frac{\delta}{\sqrt{4b^2 + \delta^2}}}^1 \frac{d\alpha}{b\sqrt{1 - \alpha^2}} = \frac{1}{b} \int_{\arcsin\left(\frac{\delta}{\sqrt{4b^2 + \delta^2}}\right)}^{\frac{\pi}{2}} d\beta$$

$$\delta = r_{min} \text{ si } b=0 : \delta = \frac{Z_{ion}Z_{atome}e^2}{E'_{C.0}} = \frac{Z_{ion}Z_{atome}e^2}{E_{ion}} \frac{M_{atome} + M_{ion}}{M_{atome}}$$

$$\frac{1}{b} \left( \frac{\pi}{2} - \arcsin \left( \frac{\delta}{\sqrt{4b^2 + \delta^2}} \right) \right) = \frac{1}{b} \left( \frac{\pi}{2} - \arctan \left( \frac{\delta}{2b} \right) \right) \quad (22)$$

On trouve finalement :

$$\Theta = \pi - 2b \frac{1}{b} \left( \frac{\pi}{2} - \arctan \left( \frac{\delta}{2b} \right) \right) = 2 \arctan \left( \frac{\delta}{2b} \right) \text{ ou } b = \frac{\delta}{2} \cot \left( \frac{\Theta}{2} \right)$$

$$b^2 = \frac{\delta^2}{4} \cot^2 \left( \frac{\Theta}{2} \right) = \frac{\delta^2}{4} \left( \frac{1}{\sin^2 \left( \frac{\Theta}{2} \right)} - 1 \right) = \frac{\delta^2}{4} \left( \frac{T_{max}}{T} - 1 \right) \quad (23)$$

$$d\sigma = 2\pi b \cdot db = d(\pi b^2) = -\frac{\pi \delta^2}{4} \frac{T_{max}}{T^2} dT \quad (24)$$

La section efficace d'arrêt nucléaire s'exprime par:

$$S_n = \int_0^\infty T(E_{ion,0}, b, \varphi) d\sigma = \int_{T_{max}}^{T_{min}} -\frac{\pi \delta^2}{4} \frac{T_{max}}{T} dT = \frac{\pi \delta^2}{4} T_{max} \ln \left( \frac{T_{max}}{T_{min}} \right) \quad (25)$$

L'intégration est faite jusqu'à  $T_{min}$  et non pas 0 pour cause de convergence, en supposant une non interaction si l'ion est suffisamment loin de l'atome. En exprimant  $T_{max}$  et  $\delta$  en fonction des masses des particules et  $E_{ion,0}$ : [29]

$$S_n = \frac{\pi Z_{ion}^2 Z_{atome}^2 e^4}{E_{ion.0}} \frac{M_{ion}}{M_{atome}} \ln \left( \frac{T_{max}}{T_{min}} \right) \text{et} \left( \frac{dE}{dx} \right)_n = - \frac{\pi N Z_{ion}^2 Z_{atome}^2 e^4}{E_{ion.0}} \frac{M_{ion}}{M_{atome}} \ln \left( \frac{T_{max}}{T_{min}} \right) \quad (26)$$

On trouve une variation en  $1/E_{ion.0}$  du pouvoir d'arrêt nucléaire.

### II-3-2-2 Pouvoir d'arrêt électronique

La section efficace d'arrêt obtenue dans le cas d'une collision nucléaire avec un potentiel de Coulomb nous donne le pouvoir d'arrêt nucléaire soit: [35]

$$S_n = \frac{\pi Z_{ion}^2 Z_{atome}^2 e^4}{E_{ion.0}} \text{et les} \frac{M_{ion}}{M_{atome}} \ln \left( \frac{T_{max}}{T_{min}} \right) \quad (27)$$

Ce qui devient dans le cas d'une interaction ion-électron :

$$S_e = \frac{\pi Z_{ion}^2 e^4}{E_{ion.0}} \frac{M_{ion}}{m_{electron}} \ln \left( \frac{T_{max}}{T_{min}} \right) \quad (28)$$

Avec  $m_{electron}$  la masse élémentaire de l'électron. et  $M_{ion}$  la masse de l'ion incident.

En incluant dans la section efficace d'arrêt, l'interaction avec les  $Z_{atome}$  électrons périphériques de l'atome cible, on obtient

$$S_e = \frac{\pi Z_{ion}^2 Z_{atome} e^4}{E_{ion.0}} \frac{M_{ion}}{m_{electron}} \ln \left( \frac{T_{max}}{T_{min}} \right) \quad (29)$$

La validité de cette expression, pour la section efficace d'arrêt électronique, connue également sous le nom de formule de Bethe, s'étend pour à des énergies potentielles plus faibles par rapport à l'énergie cinétique relative ion-électron.

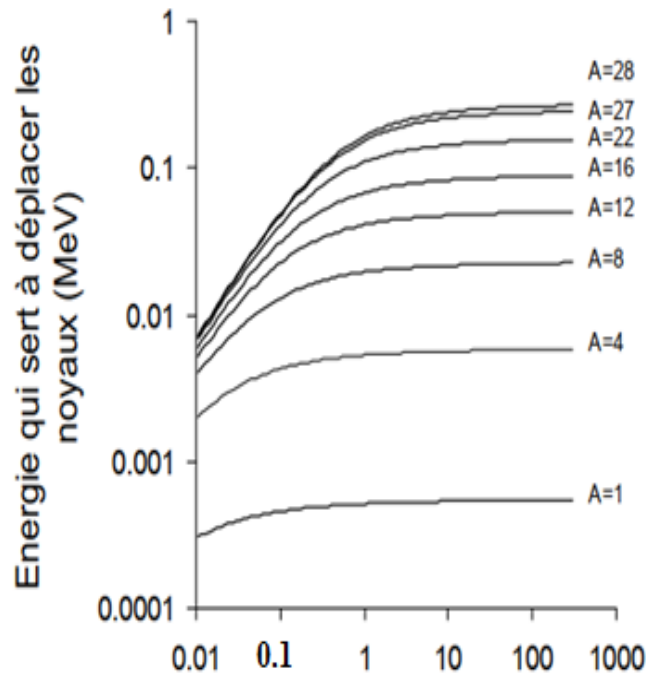


Figure II.6: Energie de l'ionisation en fonction du PKA (MeV)[35]

**II-4 Profil d'ions implantés**

Du fait de l'implantation d'ions mono-énergétiques et du caractère aléatoire des collisions dans le matériau, le profil de distribution des ions après implantation est en première approximation une gaussienne. Celle-ci est détaillée par la relation (30), avec C(x) la concentration des atomes dopants à une profondeur x sous la surface (en at. /cm<sup>3</sup>), D la dose de dopant (en at. /cm<sup>2</sup>),  $\sigma_p$  l'écart moyen et R<sub>p</sub> la profondeur moyenne des ions implantés.[29,35]

$$C(x) = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} \exp\left[-\frac{(x-R_p)^2}{2\sigma_p^2}\right] \tag{30}$$

Cette relation met en évidence l'impact direct de la dose d'implantation sur la concentration maximale du profil d'ions implantés. Cette dose est mesurée très précisément tout au long de l'implantation par la relation ci dessous avec I le courant d'implantation (en A), S la section implantée (en cm<sup>2</sup>), t le temps d'implantation (en s) et q la charge élémentaire (en C)

$$D = \frac{I}{qS} \times t \tag{31}$$

**III-4-1 Défauts dans le silicium générés par implantation - Notion de DPA****(Déplacements par atome)**

En pénétrant dans l'échantillon les ions incidents vont entrer en collision avec les atomes de la cible. Au moment de la collision, une partie de l'énergie cinétique des ions est transférée aux Atomes cibles. L'atome de recul ne sera pas éjecté de son site, mais oscillera autour de sa position d'équilibre. L'énergie transmise se dissipera à travers les vibrations du réseau, ce qui peut engendrer un échauffement local. Mais si l'énergie transférée par l'ion incident à l'atome cible est supérieure à  $E_d$ , ce dernier va subir un recul qui va l'éjecter de sa position initiale. Une fois éjecté l'atome, appelé atome primaire, peut avoir différents comportements en fonction de la quantité d'énergie absorbée lors de la collision : figure II-7

- Si l'énergie  $T$  transmise à l'atome de recul est insuffisante pour déplacer d'autres atomes, l'atome collisionné se positionnera dans un site interstitiel et laissera une lacune à l'endroit où il se trouvait initialement. Dans un cristal cette paire interstitiel-lacune est appelée paire de Frenkel. Pour que cette paire soit stable, il faut que l'atome en site interstitiel soit assez loin de la lacune afin que l'énergie de recombinaison soit supérieure à l'énergie de déstabilisation due à la formation de cette paire. [29, 35]

- Si l'énergie  $T$  transmise à l'atome primaire est grande ( $T > 2E_d$ ), il pourra lui-même aller collisionner d'autres atomes et les éjecter de leur position initiale. Les atomes déplacés de leur site par les atomes primaires sont appelés des atomes secondaires. L'ensemble des déplacements des atomes primaires et secondaires, jusqu'à l'arrêt total de l'ion.

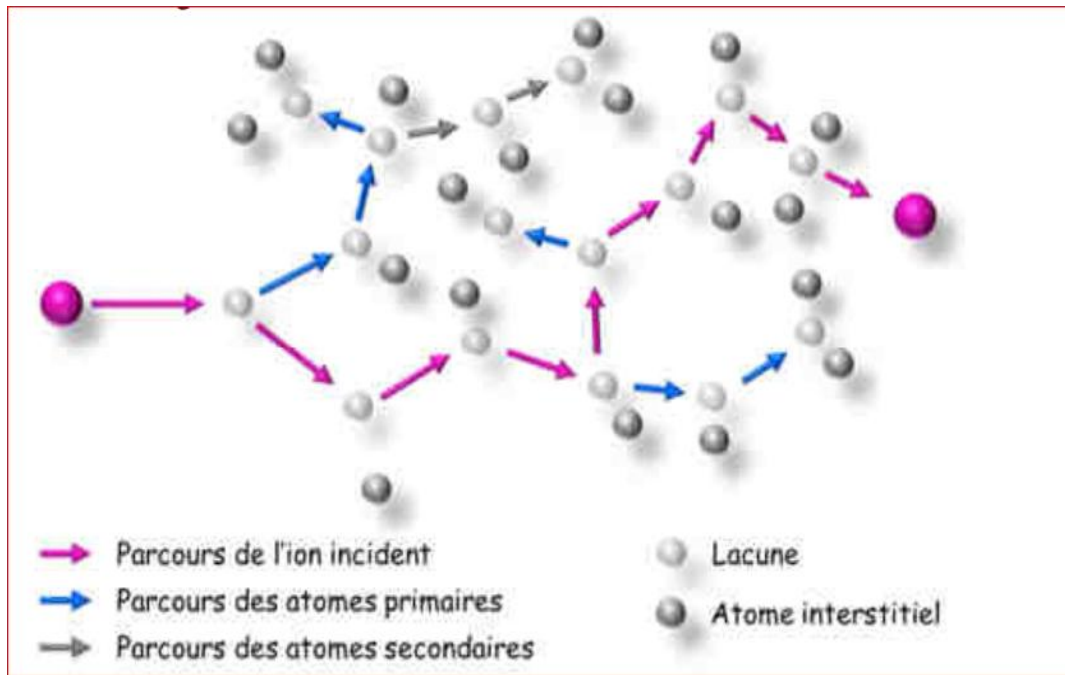


Figure II.7 : Représentation schématique d'une cascade de déplacements.[04-27]

### III-1 Présentation du programme TRIM

Ce logiciel permet de prévoir la trajectoire d'un ion incident durant son parcours dans le matériau cible. Le programme différencie les pertes d'énergie nucléaire et électronique en les considérant comme indépendantes. Le ralentissement électronique est considéré comme linéaire entre chaque choc. Pour le calcul du ralentissement nucléaire, le programme effectue un tirage aléatoire par la méthode Monte-Carlo pour déterminer s'il y a choc ou non, avec quel type d'atome et la valeur du paramètre d'impact, qui représente la distance entre la droite qui porte la trajectoire de l'ion (supposée linéaire) et la droite parallèle à sa trajectoire passant par le centre de la cible. Une fois ces valeurs tirées au sort, l'énergie transmise et la trajectoire après le choc sont déterminées par les lois de l'électrodynamique. Le programme SRIM permet d'accéder à plusieurs données intéressantes : la distribution suivant les trois dimensions de l'espace des ions implantés, la quantité et la nature des atomes pulvérisés, le profil de perte d'énergie des ions dans le matériau en fonction de la profondeur, le nombre de chocs générés, etc. Le programme donne notamment accès à la probabilité de présence de l'ion implanté par unité de flux d'ions incident et donc à la concentration atomique. Le tableau de commande de ce logiciel figure III-1 permet l'accès suivant deux fenêtres d'action.

[2, 31]

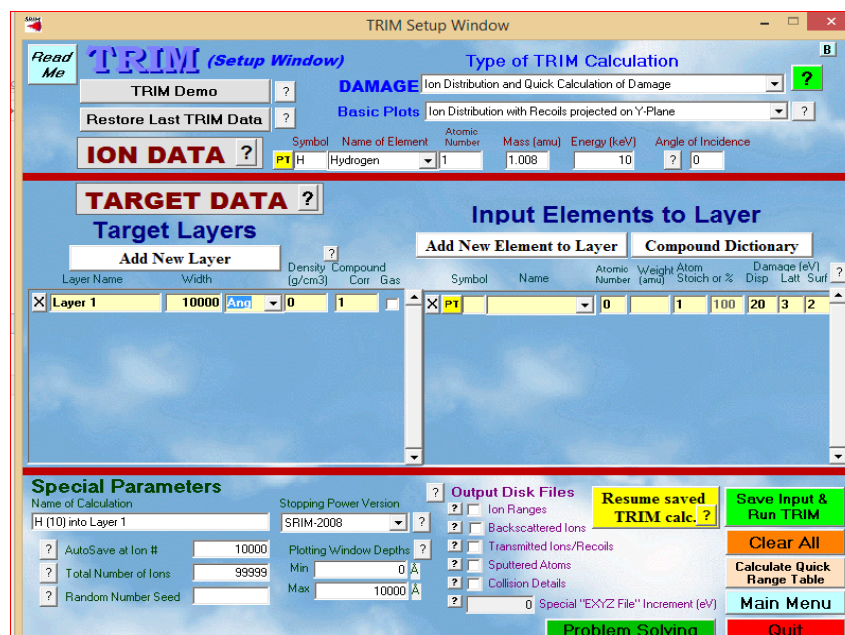


Figure III-1 Tableau de commande du logiciel TRIM



La fenêtre de gauche donne accès au calcul numérique des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique alors que la fenêtre de droite donne l'accès au range projectile et permet de relever plusieurs paramètres précités.

### III-2 Simulation du pouvoir d'arrêt

Les simulations des pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire, des taux de pulvérisation et de la quantité de défauts créés en fonction de la profondeur du matériau cible sont réalisées avec le logiciel TRIM (Transport and Range of Ions in Mater [31,30]. Ce logiciel utilise le code TRIM basé sur une méthode de calcul type Monte-Carlo [39,40]. Le logiciel TRIM calcule les trajectoires des ions dans un solide. Ce logiciel permet d'obtenir rapidement une idée de la profondeur à laquelle les ions sont implantés. Les défauts créés sont simulés en fonction de la nature, de l'énergie et de l'angle d'incidence d'un faisceau d'ion et de la nature de la cible. Cependant plusieurs approximations sont faites lors de ces calculs. En effet ils sont effectués en se basant sur l'approximation qu'il existe uniquement des collisions binaires, l'ion incident ne voit que l'atome de la cible qu'il va collisionner, les voisins sont négligés. De plus SRIM ne génère que des défauts ponctuels, chaque atome collisionné avec une énergie supérieure à son énergie de déplacement devient un atome interstitiel et laisse une lacune derrière lui. Pour mettre en œuvre le code de simulation, l'utilisateur doit introduire différents paramètres. Evidemment, le choix de ces paramètres est crucial et le chercheur doit se mettre dans les conditions qui se rapprochent le plus du cas réel. En ce qui nous concerne, dans un premier temps, nous nous sommes mis dans un cas général destiné à l'étude des interactions ions matière. Au cours de la seconde étape, nous avons considéré le cas particulier où les conditions suivantes ont été impliquées : nous avons choisi une cible de silicium (épaisseur = 10000 Å) sur laquelle nous avons supposé une fine couche d'oxyde SiO<sub>2</sub> (épaisseur = 15 Å). Cet oxyde a été introduit pour représenter l'oxyde de silicium natif sur la surface de Si. La croissance de l'oxyde et sa qualité dépendent de la qualité du substrat de silicium et en particulier de sa surface, à partir de laquelle il doit croître. Une surface rugueuse donnera un oxyde de mauvaise qualité. C'est pour cela que des procédés de nettoyage sont mis en œuvre avant l'oxydation afin d'assurer une surface propre et lisse [41]. Le type des ions sélectionnés suivant que l'on désire avoir un dopage de type N ou un dopage de type P. Le nombre des ions utilisés est 10000. Alors que la valeur proposée, par défaut, par le logiciel est 99999. On doit noter que nous avons essayé des nombres plus élevés, et nous avons remarqué que ceci augmentait le temps de calcul sans améliorer la précision des résultats. S'agissant de l'orientation de la cible par rapport au faisceau d'ions, nous avons utilisé les deux cas les plus

répandus en implantation ionique, c'est-à-dire  $0^\circ$ . Enfin, on signale que le logiciel SRIM ne tient compte que des cibles amorphes. [41]

### III-2-1 L'étude du pouvoir d'arrêt des ions Gallium $\text{Ga}^+$

Le tableau de commande est illustré sur le tableau III-1. Ce tableau de bord donne tous les paramètres introduits et les résultats de calcul. Il note pour  $\text{Ga}^+$  sa masse atomique qui de 68.93 uma, l'énergie cinétique de son parcours qui est de 100keV. Il indique aussi la cible  $\text{SiO}_2$ . Ainsi que l'épaisseur des deux couches qu'il va traverser dans la cible. D'autre part il donne les paramètres calculés comme le nombre d'ions rétrodiffusés, le nombre d'ions transmis, le nombre de vacances créées dans la matrice de la cible. Les dimensions de la poire créée. Celle ci est colorée en rouge dans le schéma du tableau de bord figure III-2.

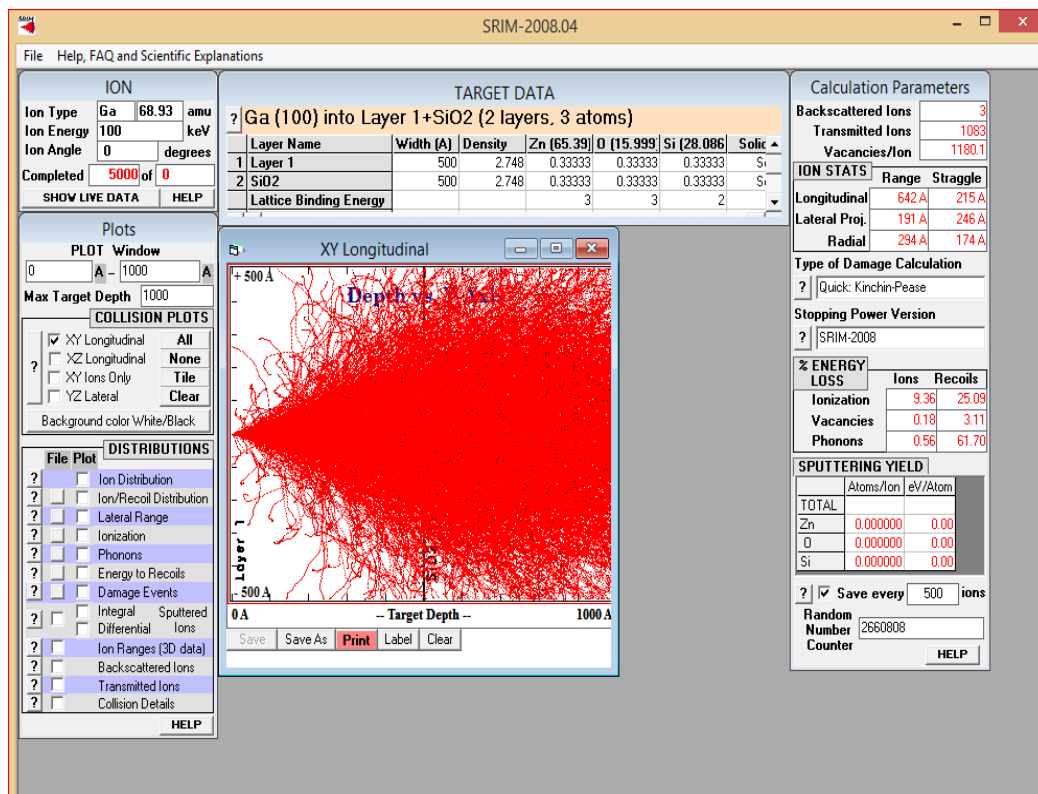


Figure III-2 Tableau de bord des résultats de simulation du bombardement de l'ion  $\text{Ga}^+$  sur  $\text{SiO}_2$

D'autres paramètres sont indiqués comme l'énergie absorbée ou perdue par l'ion dans son parcours, l'énergie d'ionisation, l'énergie des phonons etc. Nous verrons que tous ces paramètres vont dépendre de l'énergie et la masse atomique de l'ion. [31]. L'exécution de l'opération du pouvoir d'arrêt donne le tableau de valeurs figure III-3 qui indique les différentes énergies du pouvoir d'arrêt électronique  $(dE/dx)_{\text{elec}}$  et le pouvoir d'arrêt nucléaire

(dE/dx)<sub>nucal</sub> ainsi que la variation des paramètres de la poire le long du trajet de l'ion dans la cible.

```

=====
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	2,293E-01	2,231E-01	223 A	199 A	150 A	2,25 MeV	3,213E+00	1,903E-02	2,12 um	3161 A	3708 A
11,00 keV	2,405E-01	2,224E-01	242 A	213 A	161 A	2,50 MeV	3,296E+00	1,757E-02	2,27 um	3216 A	3809 A
12,00 keV	2,511E-01	2,214E-01	261 A	227 A	171 A	2,75 MeV	3,364E+00	1,633E-02	2,42 um	3265 A	3903 A
13,00 keV	2,614E-01	2,203E-01	280 A	240 A	182 A	3,00 MeV	3,419E+00	1,527E-02	2,57 um	3310 A	3990 A
14,00 keV	2,713E-01	2,190E-01	298 A	253 A	192 A	3,25 MeV	3,466E+00	1,436E-02	2,72 um	3352 A	4072 A
15,00 keV	2,808E-01	2,177E-01	317 A	266 A	202 A	3,50 MeV	3,505E+00	1,355E-02	2,87 um	3391 A	4150 A
16,00 keV	2,900E-01	2,163E-01	335 A	278 A	212 A	3,75 MeV	3,537E+00	1,284E-02	3,01 um	3428 A	4223 A
17,00 keV	2,989E-01	2,148E-01	354 A	291 A	221 A	4,00 MeV	3,565E+00	1,221E-02	3,16 um	3463 A	4294 A
18,00 keV	3,076E-01	2,134E-01	372 A	303 A	231 A	4,50 MeV	3,608E+00	1,113E-02	3,44 um	3540 A	4426 A
20,00 keV	3,242E-01	2,103E-01	409 A	326 A	250 A	5,00 MeV	3,639E+00	1,023E-02	3,72 um	3611 A	4550 A
22,50 keV	3,439E-01	2,065E-01	455 A	355 A	273 A	5,50 MeV	3,661E+00	9,484E-03	4,01 um	3678 A	4668 A
25,00 keV	3,625E-01	2,028E-01	500 A	383 A	295 A	6,00 MeV	3,676E+00	8,846E-03	4,29 um	3741 A	4779 A
27,50 keV	3,802E-01	1,991E-01	546 A	410 A	317 A	6,50 MeV	3,685E+00	8,294E-03	4,57 um	3801 A	4886 A
30,00 keV	3,916E-01	1,955E-01	591 A	436 A	338 A	7,00 MeV	3,689E+00	7,813E-03	4,84 um	3859 A	4989 A
32,50 keV	4,053E-01	1,920E-01	636 A	462 A	359 A	8,00 MeV	3,688E+00	7,011E-03	5,40 um	4009 A	5186 A
35,00 keV	4,212E-01	1,886E-01	682 A	487 A	379 A	9,00 MeV	3,676E+00	6,369E-03	5,96 um	4150 A	5373 A
37,50 keV	4,380E-01	1,854E-01	727 A	511 A	399 A	10,00 MeV	3,657E+00	5,843E-03	6,53 um	4286 A	5553 A
40,00 keV	4,551E-01	1,823E-01	772 A	535 A	419 A						
45,00 keV	4,882E-01	1,763E-01	860 A	579 A	457 A						
50,00 keV	5,186E-01	1,709E-01	948 A	622 A	493 A						
55,00 keV	5,458E-01	1,658E-01	1034 A	662 A	528 A						
60,00 keV	5,700E-01	1,610E-01	1120 A	701 A	562 A						
65,00 keV	5,913E-01	1,566E-01	1205 A	738 A	595 A						
70,00 keV	6,102E-01	1,524E-01	1290 A	774 A	626 A						
80,00 keV	6,419E-01	1,449E-01	1461 A	842 A	688 A						
90,00 keV	6,676E-01	1,382E-01	1631 A	907 A	747 A						
100,00 keV	6,894E-01	1,322E-01	1802 A	969 A	804 A						
110,00 keV	7,089E-01	1,268E-01	1973 A	1029 A	859 A						

```

-----
Multiply Stopping by      for Stopping Units
-----
4,8012E+01                eV / Angstrom
4,8012E+02                keV / micron
4,8012E+02                MeV / mm
1,0000E+00                keV / (ug/cm2)
1,0000E+00                MeV / (mg/cm2)
1,0000E+03                keV / (mg/cm2)
1,2188E+02                eV / (1E15 atoms/cm2)
1,4876E+00                L.S.S. reduced units
=====

```

Tableau III-1 : Tableau des valeurs du pouvoir d'arrêt de l'ion Ga<sup>+</sup> sur SiO<sub>2</sub>

Le tableau de bord sus cité nous permet de relever des paramètres intéressants variant avec les énergies des ions. Nous étudions le bombardement du matériau ZnO/SiO<sub>2</sub> avec les différents éléments chimiques en relation avec les deux types de dopage. Les paramètres relevés sur le tableau N°2 sont :

1. Le nombre d'ions rétrodiffusés dans la matrice cristalline du matériau cible bombarde ZnO. Pour le tableau N°2 les ions rétrodiffusés correspondent à l'élément chimique phosphore se trouvant sur la colonne V. On constate que ce nombre diminue quand l'énergie de l'ion augmente. Ceci nous paraît normal puisque plus l'énergie augmente plus l'ion est noyé en profondeur, il lui sera difficile d'avoir une rétrodiffusion. Seuls les ions qui tombent sur les

couches périphériques de la surface du matériau auront beaucoup plus de chance d'être rétrodiffusés [42] .

Tableau N°1: TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion thallium de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>

Energie (keV)	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Ions Rétrodiffusion	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Vacanciers Ions	140.1	273.9	403.9	530.9	657.1	779.5	901.2	1021.5	1138.8	1256.4
Range projectile	90	129	161	190	218	242	267	290	312	333
Ionisation	6.99	7.35	7.64	7.90	8.20	8.41	8.67	8.81	8.98	9.08
Phonons	2.34	1.45	1.11	0.92	0.80	0.71	0.64	0.59	0.55	0.52
Phonons reculés	69.34	68.16	66.30	65.59	64.95	64.35	63.86	63.39	63.39	62.94
Dopage	4,5.10 <sup>4</sup>	4,5.10 <sup>4</sup>	4.10 <sup>4</sup>	2,8.10 <sup>4</sup>	2,8.10 <sup>4</sup>	3,5.10 <sup>4</sup>	3,5.10 <sup>4</sup>	3,5.10 <sup>4</sup>	3,5.10 <sup>4</sup>	3.10 <sup>4</sup>
Fluence	51.5	51.20	50.10	50	48.80	48.44	48.18	48.02	47.57	47.23

Tableau N° 2: TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion phosphore de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>

Energie (keV)	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Ions Rétrodiffusion	106	89	67	77	61	58	51	49	45	43
Vacanciers ions	133.5	253.9	365.7	472.6	517	669.7	760.7	844.8	927.7	1005.9
Range projectile	141	249	356	459	574	678	794	901	998	1116.9
Ionisation	11.46	14.19	16.57	18.45	20.36	21.93	23.54	25.25	26.58	28.13
Phonons	2.26	1.57	1.30	1.13	1.03	0.95	0.89	0.84	0.8	0.7
Phonons reculés	65.37	62.43	60.06	58.20	56.47	55.03	53.63	52.21	51.07	49.77
Dopage	3,5.10 <sup>-23</sup>	2,4.10 <sup>-23</sup>	2.10 <sup>-23</sup>	1,6.10 <sup>-23</sup>	1,2.10 <sup>-23</sup>	1,2.10 <sup>-23</sup>	0,9.10 <sup>-23</sup>	0,8.10 <sup>-23</sup>	0,8.10 <sup>-23</sup>	0,8.10 <sup>-23</sup>
Fluence	50.47	49.05	48.18	47.46	46.84	46.45	46	45.66	45.35	45.16

2. Les lacunes (vacancies) : on constate que le nombre de lacune créés dans la matrice augmente beaucoup avec l'énergie de l'ion phosphore incident. ZnO présente effectivement des sites interstitiels permettant au phosphore de diamètre plus petit que celui du Zinc de s'installer dans ces interstitiels. Ces lacunes forment alors des défauts qui sont bénéfiques pour le dopage de ZnO en particulier pour des applications technologiques en photovoltaïque [44,45].

D'autres paramètres sont relevés sur ces deux tableaux, nous allons les représenter par des courbes de variations en fonction des énergies cinétiques des ions.

Sur la figure III-3 a, on représente les variations des pertes d'énergie, électronique et nucléaire, des ions azotes N, Bismuth Bi, Antimoine Sb, Arsenic As, phosphore P en fonction de son énergie d'incidente. Ces ions sont sensés être des dopant de type N du fait de leur présence dans la colonne V. A partir de cette figure, plusieurs domaines sont à distinguer.

Pour les énergies d'accélération inférieures à 2000 keV, le pouvoir d'arrêt nucléaire est prédominant.

En plus, il passe par une valeur maximale, après cela, le freinage des cinq ions est assuré par les deux mécanismes à parts égales. A partir de 2000 keV, le freinage d'origine électronique devient prépondérant par rapport à l'arrêt nucléaire. Rappelons que le pouvoir d'arrêt électronique est une interaction inélastique qui se fait avec les électrons orbitaux du milieu ralentisseur. Il est responsable de l'excitation et l'ionisation des atomes cibles.

La quantité d'énergie transférée lors de chaque collision est une très faible portion de l'énergie cinétique de la particule incidente. Notons que la valeur maximum du pic du pouvoir d'arrêt nucléaire est plus faible pour l'ion Bismuth suivi par l'ion antimoine Sb. La valeur maximum de ce pic est prise par l'ion azote. Ce dernier résultat est d'une grande importance. L'azote est le premier candidat pour le dopage de type N.

La variation du pouvoir d'arrêt électronique, les ions des azotes N, Bismuth Bi, Antimoine Sb, Arsenic As, phosphore P en fonction de son énergie d'incidente présente une variation différentes. On constate une augmentation exponentielle puis diminue linéairement jusqu' à atteindre une valeur asymptotique. Le pouvoir d'arrêt électronique pour les quatre ions excepte l'azote varie plus rapidement pour les grandes énergies. Le pouvoir d'arrêt électronique de l'azote prend une variation asymptotique quand son énergie cinétique devient grande.

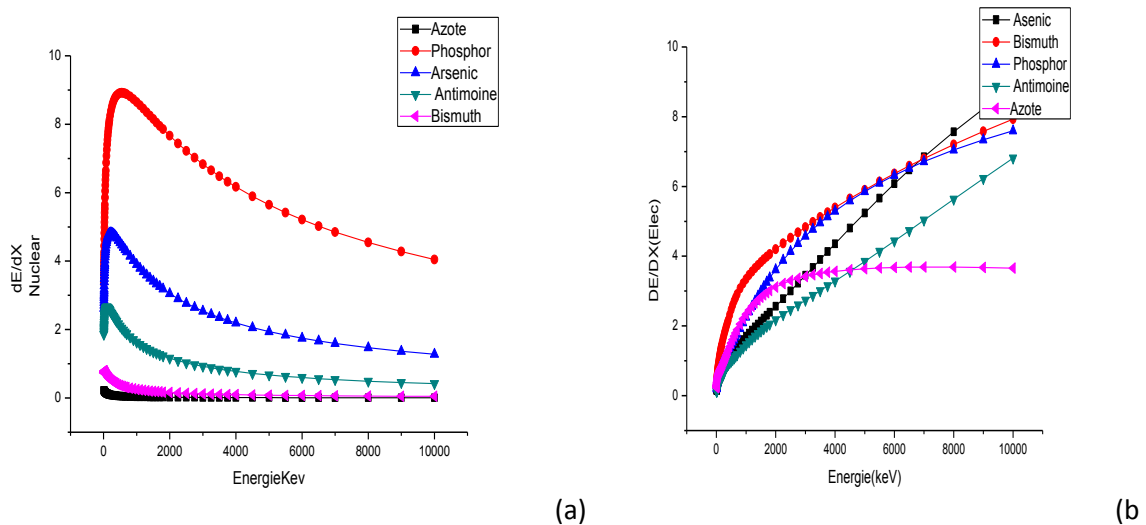
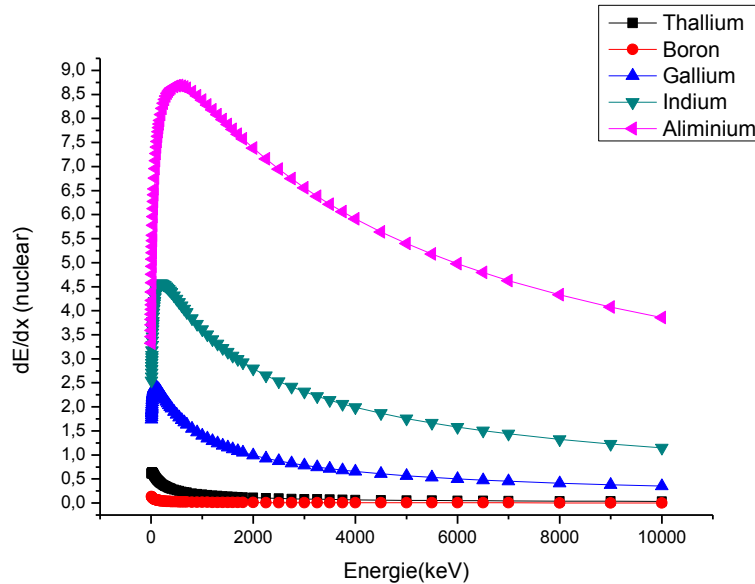
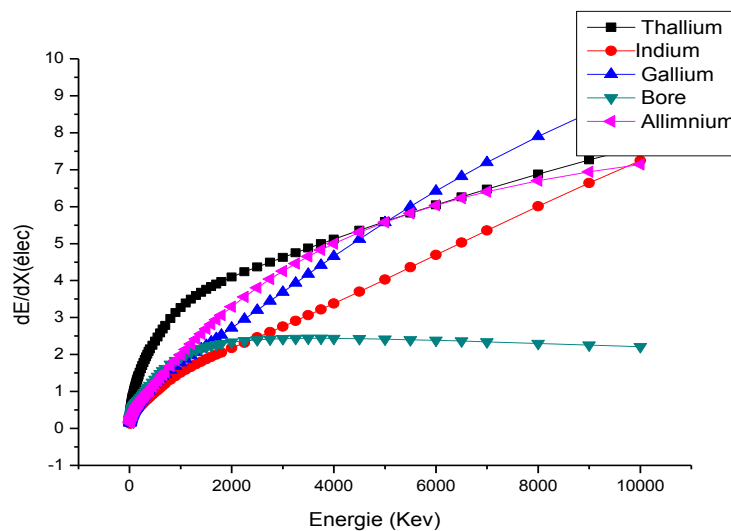


Figure III-3 représentation de l'arrêt électronique (a) et de l'arrêt nucléaire (b) des ions (As, B, Ph, Sb N) dans la matrice Silicium

Sur la figure III-4, on représente les variations des pertes d'énergie, électronique et nucléaire, des Thallium Tl, Bore B, indium In, Gallium Ga, Aluminium Al, en fonction de leurs énergies d'incidente respectives. Ces ions sont sensés être des dopant de type P du fait de leur présence dans la colonne III. La valeur maximum du pic du pouvoir d'arrêt nucléaire est obtenue pour l'ion



(a)



(b)

Figure III-4. Représentation de l'arrêt électronique (a) et de l'arrêt nucléaire (b) des ions (Th, In, Ga, B, Al) dans la matrice SiO<sub>2</sub>

Aluminium suivi par l'ion Indium. La valeur minimum est obtenu par le Bore. Cette propriété est d'une grande importance. C'est d'ailleurs la raison pour laquelle le Bore est le plus utilisé dans le dopage de type P. On voit aussi que le pouvoir d'arrêt électronique du Bore qui prend

une allure asymptotique pour les grandes énergies cinétiques. Cette propriété est similaire à celle de l'azote dans la courbe du pouvoir d'arrêt électronique de l'azote, de la figure III-3b.

Nous concluons pour les deux études de simulation du pouvoir d'arrêt que les deux ions Azote et Bore sont les dopants privilégiés pour les deux types de dopages des semi-conducteurs de type N et P respectivement.

Sur la figure III-5 on représente un cas particulier du bombardement de l'ion Ag sur une cible de  $\text{SnO}_2$ , on constate la coexistence du pouvoir d'arrêt électronique et le pouvoir d'arrêt nucléaire avec leurs maximums respectives aux deux positions suivantes: pouvoir d'arrêt électronique à 12.5 keV alors que le pouvoir d'arrêt nucléaire est à 172 keV.

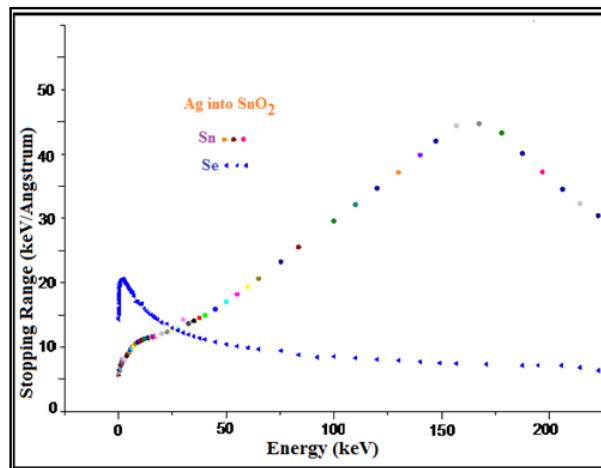


Figure III-5 Simulation des deux pouvoirs d'arrêt de l'implantation de l'ion Ag dans la matrice cristalline de  $\text{SnO}_2$

### III-3 Simulation de création de lacunes

Les ions énergétiques: azote, phosphore, Arsenic antimoine et Bismuth pénètrent à l'intérieur du matériau, perdent leur énergie par deux processus presque indépendants: (i) perte d'énergie électronique (collisions inélastiques avec des électrons: Se) et (ii) perte d'énergie nucléaire (collisions élastiques avec des noyaux atomiques: Sn). Généralement, la contribution majeure du transfert d'énergie provient du Se lorsque les vitesses des ions en collision sont beaucoup plus grandes que la vitesse orbitale des électrons de la couche K de la coquille liés aux atomes cibles. De ce fait on introduit un damage ou une déformation dans la matrice. Ce processus crée des lacunes (vacanciers). La figure III-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 III-6 par l'axe des ordonnées dépend beaucoup de l'énergie cinétique des ions dopant atteignant la surface de ZnO/SiO<sub>2</sub>

Nous constatons que ce phénomène de création de lacune est plus prononcé pour les ions lourds présents dans cette simulation soit l'Arsenic et le bismuth [46]. Ces deux ions voient leurs variations linéaires avec leurs énergies cinétiques respectives. La variation des deux ions phosphore et azote n'est pas linéaire avec les variations de leurs énergies cinétiques respectives. Cette différence de profil de courbe provient des masses atomiques respectives des quatre ions. Encore une fois les deux ions ont la même allure de variation dans la création des lacunes et se distinguent des autres ions de leur famille respectives.

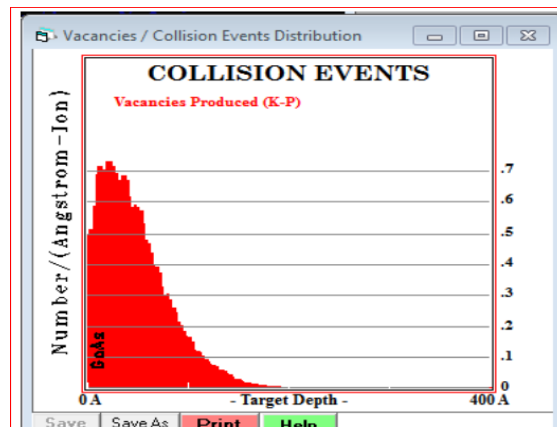
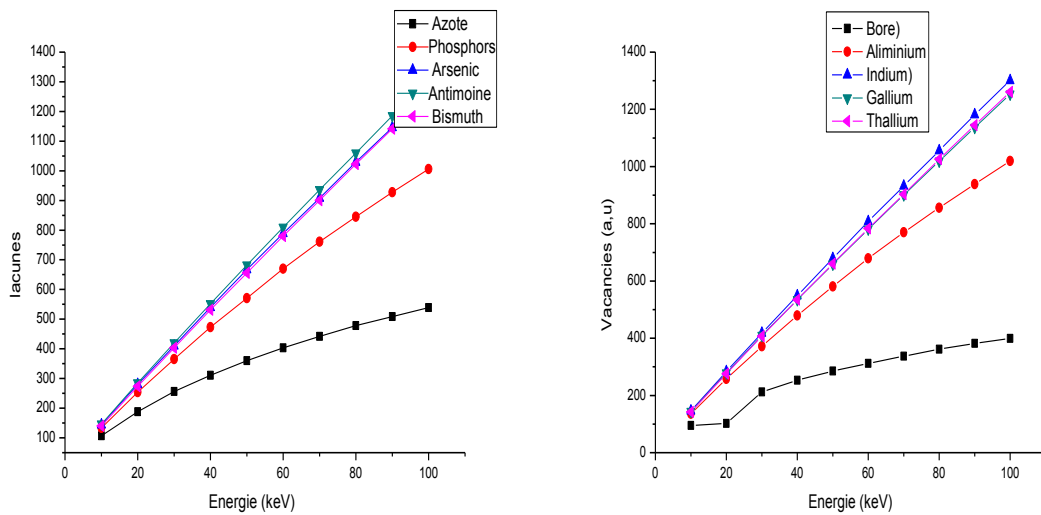


Figure III-6: variation de perte d'énergie pour la création de phonons pour les ions de dopage de type N : Azote N, Phosphore P, Arsenic As, Antimoine Sb, et Bismuth Bi dans la matrice ZnO /SiO<sub>2</sub> en fonction des énergies cinétiques des ions



### III-4 Simulation de création de phonons

En physique de la matière condensée, un phonon désigne un quantum d'énergie de vibration dans un solide cristallin : lorsqu'un mode de vibration du cristal de fréquence définie  $\nu$  cède ou gagne de l'énergie, il ne peut le faire que par paquets d'énergie  $h\nu$ ,  $h$  étant la constante de Planck. Ce paquet est considéré comme une *quasi-particule*, à savoir une particule fictive appelée phonon. Le cristal est alors réputé échanger des phonons lorsqu'il perd ou gagne de l'énergie. Le phonon est une notion de mécanique quantique faisant appel au concept de dualité onde-corpuscule : selon le contexte expérimental, il peut se manifester soit comme une onde, soit comme un paquet élémentaire. Si l'étude des phonons prend une part importante dans la physique de la matière condensée, c'est qu'ils jouent un rôle important dans un grand nombre de propriétés physiques des solides dont : la capacité calorifique, ou capacité à stocker la chaleur ; la conductivité thermique, ou capacité à conduire la chaleur ; la conductivité électrique, ou capacité à conduire le courant électrique ; la capacité à propager le son. Sur la figure III- 7 on représente la variation de l'énergie dissipée pour la formation des phonons en fonction des énergies cinétiques respectives des cinq ions Azote N Phosphore P, Arsenic, As Antimoine Sb, et Bismuth Bi dans la matrice ZnO/SiO<sub>2</sub>.

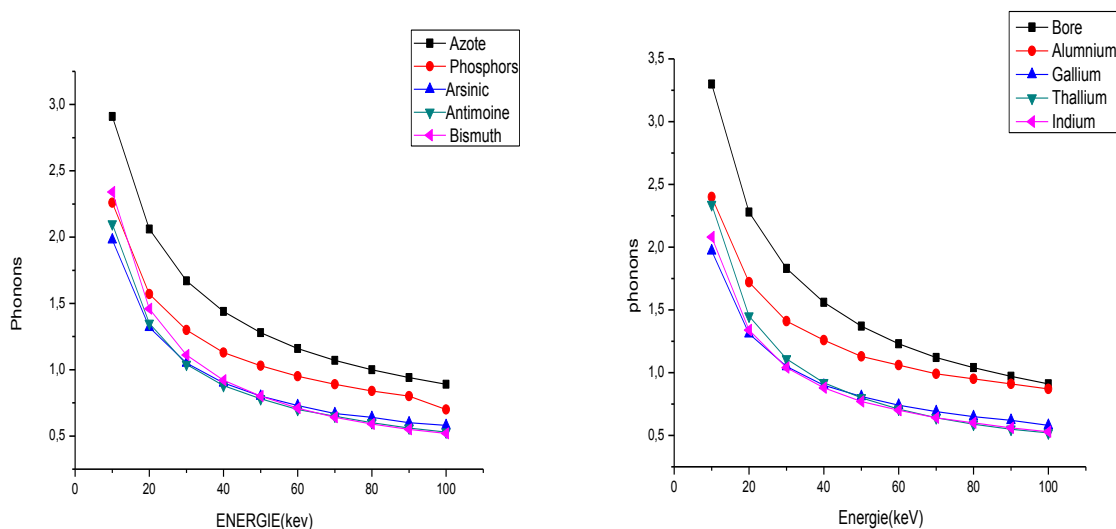


Figure III-7: variation de perte d'énergie pour la création de phonons pour les ions de dopage de type N et de type P dans la matrice ZnO/ SiO<sub>2</sub> en fonction des énergies cinétiques des ions.

On constate que cette énergie dissipée par création de phonons prend des valeurs maximum dans la région 0 jusqu'a 10 kev puis diminue exponentiellement avec l'énergie cinétique respectives des ions.

Elle est plus prononcée pour les ions azote et Bore qui sont les élément les plus remarquables sur toute les paramètres étudiés dans notre simulation.

### III-5 Simulation de perte d'énergie par ionisation

L'ionisation est l'action qui consiste à enlever ou ajouter des charges à un atome ou une molécule. L'atome ou la molécule perdant ou gagnant des charges n'est plus neutre électriquement. Il est alors appelé ion. Toute particule ayant plus d'électrons que l'atome ou que la molécule neutre reçoit le nom d'anion (elle a une charge nette négative). En revanche, les particules qui présentent moins d'électrons que l'atome ou que la molécule neutre sont les cations (elles sont chargées positivement). La figure III-8 représente l'énergie dissipée par ionisations dans la matrice ZnO/SiO<sub>2</sub> [46].

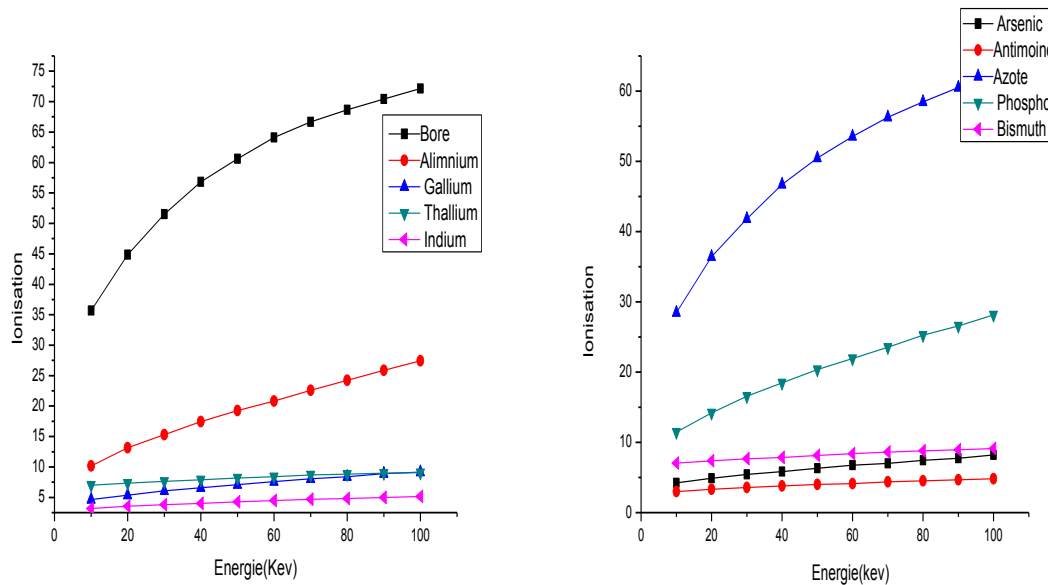


Figure III-8-: variation de perte d'énergie pour la création d'ions pour les ions de dopage de type N et de type P dans la matrice ZnO/SiO<sub>2</sub> en fonction des énergies cinétiques des ions.

On constate que cette ionisation est beaucoup plus prononcées pour l'azote et le Bore .Elle est la plus faible pour l'ion Bismuth et l'ion indium. Cette remarque est très importante quand on sait que l'azote et le bore sont les deux éléments utilisés dans les deux types de dopage de tous les semi-conducteurs. [47]

### III-6 Simulation de la fluence ou la dose d'implantation

La dose d'implantation sur le profil de concentration des ions implantés est représentée sur la Figure III-9a dans le cas d'une implantation d'ions dans du SiO<sub>2</sub>. On remarque que l'augmentation de la dose d'implantation ne modifie pas la profondeur moyenne des ions implantés  $R_p$ , mais augmente la concentration en dopants. [47] D'autre par et, l'augmentation de l'énergie d'implantation, illustrée sur la Figure III-9b, augmente la  $R_p$  et élargit la gaussienne. La variation de ces deux paramètres permet un réel contrôle du profil des ions implantés, aussi bien en concentration qu'en profondeur: Les simulations TRIM permettent de déterminer la profondeur à laquelle sont créés les défauts. [48]

Elles donnent également accès à la quantité de matière pulvérisée, au nombre de déplacements par atome (dpa), à la distance moyenne que parcourent les ions dans le matériau ( $R_p$ ) et aux pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique ;. Le nombre de défauts donné par TRIM étant normalisé par la fluence, il faut multiplier ce nombre de défauts par la fluence d'implantation pour avoir le nombre réel de défauts créés dans le matériau. Par exemple, à une énergie de 10 keV, le logiciel TRIM prévoit environ  $1,2 \cdot 10^8$  défauts.(Å-ion)<sup>-1</sup> au maximum du profil. Multiplier ce nombre par une fluence de  $10^{14}$  ion.cm<sup>-2</sup> conduit à une concentration d'atomes déplacés de  $1,2 \times 10^{22}$  défauts.cm<sup>-3</sup> à une profondeur de 9 nm. Considérant une densité atomique du silicium d'environ  $5 \cdot 10^{22}$  cm<sup>-3</sup>, ces conditions d'implantations provoquent approximativement le déplacement de 1 atome de silicium sur 5. (Figure III-9)

Tout au long de son parcours dans la cible, l'ion incident perd de l'énergie en raison des différents chocs qu'il subit avec les atomes de la cible. Comme la section efficace  $\sigma_R(E, \theta)$  est inversement proportionnelle à l'énergie des ions incidents  $E$ , il y a une plus grande concentration de déplacements à la fin du parcours de l'ion. Un paramètre important lorsque l'on parle d'implantation est le nombre de déplacements par atome (dpa), c'est le nombre d'atomes déplacés dans le volume de la cascade. Il se calcule à partir de la fluence des ions incidents  $\phi$  (en ions.cm<sup>-2</sup>), de la densité atomique du matériau  $N$  (en at.cm<sup>-3</sup>) et du nombre de défauts  $n$  crée à la profondeur souhaitée (en ion-1.Å<sup>-1</sup>). Ce dernier paramètre s'obtient avec les simulations. Les dpa s'expriment selon l'équation :

$$dpa = \frac{\phi \times n \times 10^8}{N} \quad (32)$$

Le nombre de dpa donne le nombre moyen de déplacements que subit chaque atome dans l'échantillon. Ce nombre reste une estimation surestimée, car le logiciel TRIM de simulation ne prend pas en compte les phénomènes de recombinaisons. L'ensemble des déplacements générés par les cascades de collisions entraîne d'importantes modifications structurales, en raison de l'éjection des atomes cibles de leur position initiale. Les dommages subis par la cible sont d'autant plus importants que la masse atomique de l'ion incident est élevée. Un atome lourd subira d'avantage de ralentissements par collision nucléaire qu'un atome léger. D'après les valeurs théoriques de rayon atomique, on peut voir qu'il est préférable de choisir un dopant de numéro atomique relativement proche de l'atome auquel il doit se substituer, si l'on veut qu'ils aient des dimensions proches [49]. Si l'atome dopant est trop petit, il risque de ne pas être stable au sein du réseau cristallin. Inversement, s'il est trop gros, il risque d'entraîner une déformation du réseau et d'être difficile à incorporer en site substitutionnel. [50]

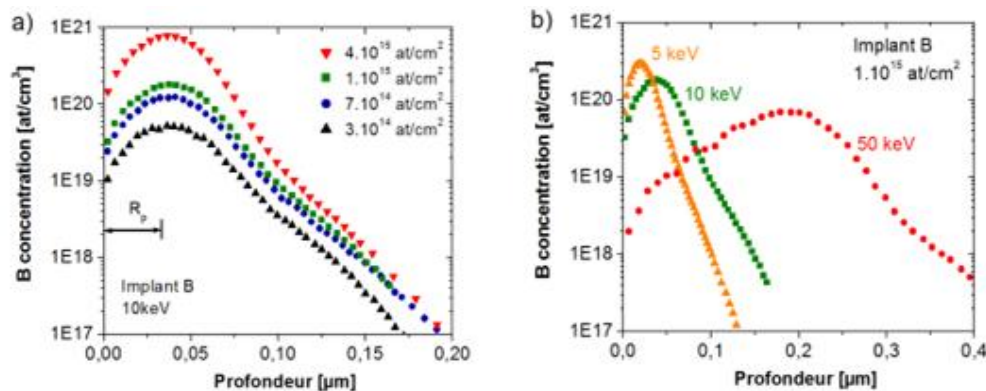


Figure III-9 Implantation du Bore pour différentes concentrations (a) et différentes énergie (b)[34]

La Figure III-10 représente la variation de la fluence des ions de dopage N et de dopage P sur la matrice cristalline ZnO/SiO<sub>2</sub> en fonction de l'énergie des ions. Nous constatons que pour les éléments lourds des deux colonnes III et V ont les fluences les plus importantes. Nous remarquons d'autre part que les fluences ou doses atteintes par les deux ions Bore et Azote ont les courbes en bas de l'échelle. Encore une particularité pour nos deux ions privilégiés.

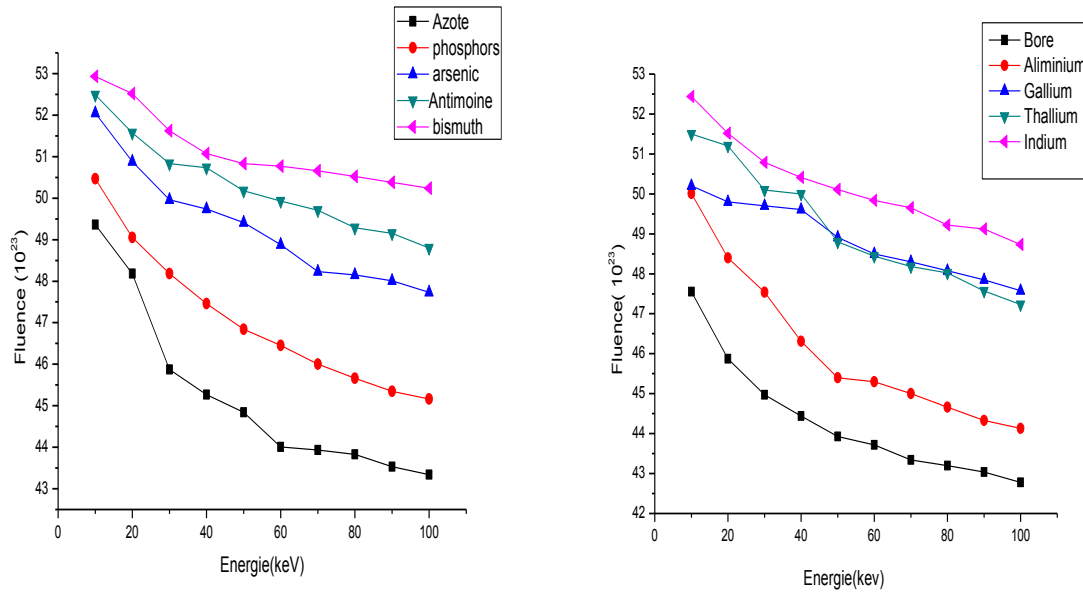


Figure III-10: variation des fluences de dopage pour les ions de dopage de type N et de type P en fonction des énergies cinétiques de ces ions bombardant la cible  $ZnO/SiO_2$

### III-7 Simulation de la rétrodiffusion des ions

La méthode RBS (Spectroscopie de rétrodiffusions Rutherford) est largement employée en sciences des matériaux, elle appartient à la classe des techniques groupées sous le vocabulaire générique de spectroscopie ionique. Le principe de la méthode repose sur l'analyse, en énergie, des particules rétrodiffusées par interaction élastique avec les atomes cibles. C'est donc une technique pour laquelle nous avons la conservation de l'énergie cinétique et de la quantité de mouvement du système projectile-cible. RBS permet de faire l'analyse non seulement de la composition de la surface du film mais aussi de son interface avec la ou les couche(s) adjacente(s), en opposition aux échantillons épais qui ne permettent que la détermination de la composition en surface. Comme les deux interfaces de l'échantillon peuvent être identifiées, on peut facilement mesurer la différence d'énergie entre les particules rétrodiffusées en surface et à l'arrière, ce qui permet de déterminer l'épaisseur du film. En outre, on peut mesurer le nombre de particules détectées par élément et donc leur concentration absolue dans le film.

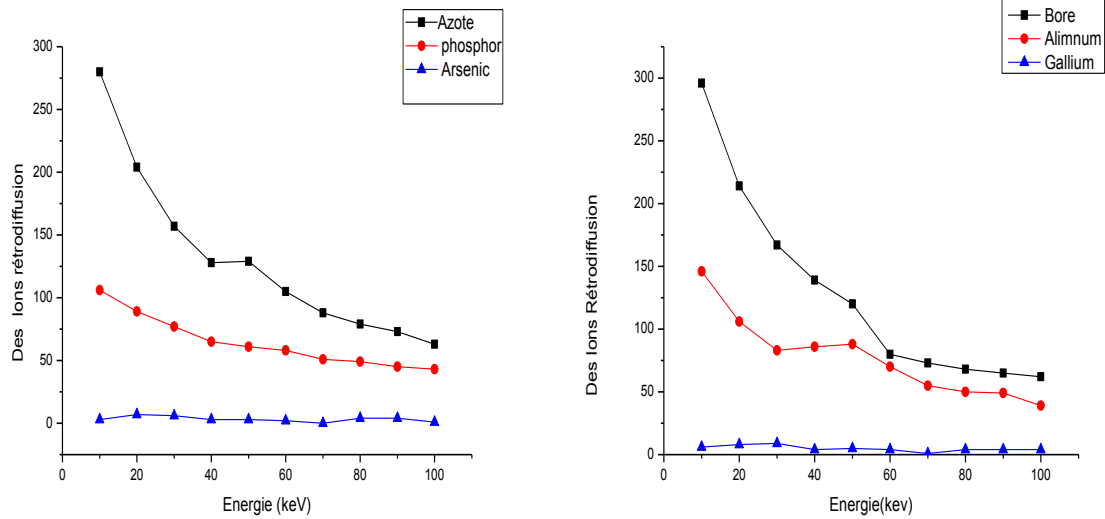


Figure III-11: variations des énergies des ions de dopage de type N et de type P dissipées dans la matrice cible ZnO

Nous donnons sur la figure III-11 les graphes représentant les variations des énergies des ions de dopage de type N et de type P dissipées dans la matrice cible ZnO/SiO<sub>2</sub>. Une décroissance exponentielle est prévisible sur toutes les courbes. On constate que les atomes lourds ne possèdent pas d'ions rétrodiffusés, par contre les atomes légers comme l'azote et le bore sont les plus rétrodiffusés dans cette simulation.

III-8 Simulation des ranges projectile des ions

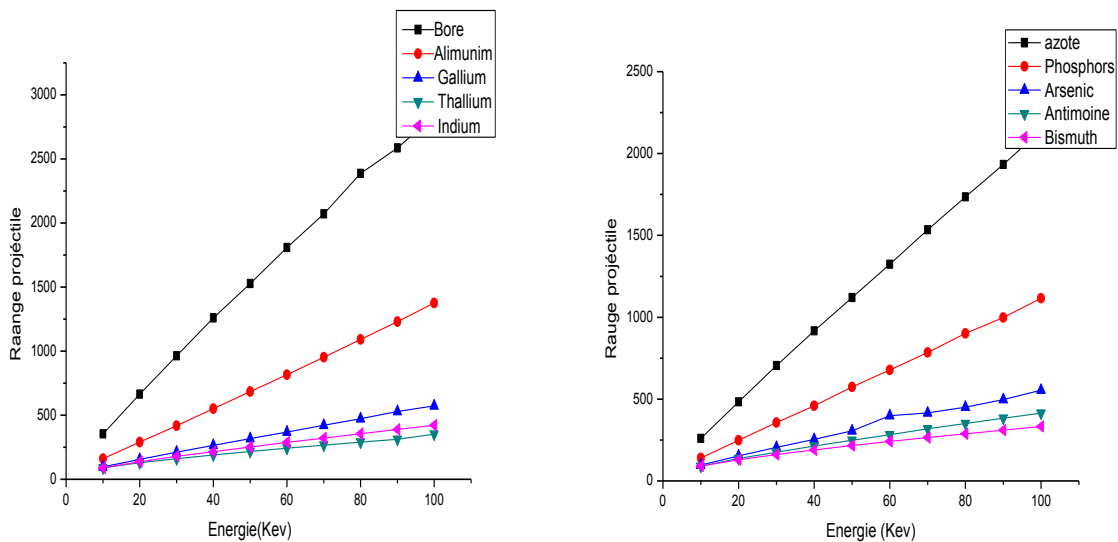


Figure III-12: Variation du range projectile des ions de dopage N et P en fonction de leurs énergies cinétiques

Sur la figure III-12 on représente les variations du range projectile  $R_p$ . Il représente la distance moyenne atteint par les ions dans la matrice du cristal. Le Bore et l'azote sont les éléments dopant qui atteignent rapidement des grandes profondeurs dans la cible comparés aux autres dopants.

### **Conclusion**

Il apparait dans cette étude de simulation des différents paramètres, ionisation, lacune formées, phonons créés, énergies dissipées pour la création des ions dans la matrice cible, que les ions Bore pour le dopage P et l'azote pour le dopage N sont les plus prometteurs. Nous avons remarqué aussi par le biais de cette simulation une confirmation de leur utilisation intensive dans les dopages industriels des semi-conducteurs. Ceci nous permet de dire, en se basant sur cette étude, que le logiciel utilisé TRIM ou SRIM est bien un outil efficace pour la simulation des dopages des semi-conducteurs.

Nous concluons que ce logiciel utilise une base théorique de pouvoir d'arrêt nucléaire et électronique bien justifiée.

# Conclusion Générale

---

## Conclusion générale

Ce travail nous a permis de nous familiariser avec le logiciel TRIM (Transport and Range of Ions in Mater) qui simule les interactions des ions avec la matière. Il utilise la méthode de Monte Carlo qui est un puissant outil mathématique permettant de résoudre beaucoup de problèmes liés aux phénomènes aléatoires comme les trajectoires des ions et des électrons dans la matrice solide de beaucoup de semi-conducteurs.

On sait que tous les semi-conducteurs sont utilisables après être dopés par les éléments chimiques de la colonne III pour le dopage P et par les éléments de la colonne V pour être dopés N. 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.

Nous avons aussi constaté que le logiciel utilisé est un outil efficace pour la prédiction des éléments chimiques les plus performants pour le dopage de type N ou de type P de n'importe quel matériau avant de passer à la réalisation du dit dopage.

Ce travail nous a permis aussi de comprendre beaucoup de phénomènes physiques et leurs théories et nous a donné un aperçu sur les applications des cours que nous avons appris auprès de nos enseignants de la physique théorique.

Les trois chapitres traités dans ce mémoire nous donnent une idée claire sur la recherche scientifique et en particulier celle relative à la simulation des phénomènes physiques en relation étroite avec la physique théorique. Ce travail nous a permis en particulier de nous initier à la recherche scientifique que nous comptons aborder très prochainement pour préparer une thèse de doctorat si l'occasion nous sera offerte.



# **Annexes**

Tableau N<sup>o</sup> 3 : TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion Arsenic de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>

Energie(keV)	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Ions Rétrodiffusion	3	7	6	3	3	2	0	4	4	1
Vacancies Ions	144.3	280.1	410.4	939.6	66.7	788.7	908.3	1029.1	1129.1	1262.8
Range projectile	97	153	205	254	306	355	399	450	497	554
Ionisation	4.25	4.89	5.42	5.85	6.32	6.74	7.02	7.45	7.74	8.20
Phonons	1.98	1.32	1.05	0.90	0.80	0.73	0.67	0.64	0.60	0.58
phonons recules	70.76	69.05	67.80	66.78	65.88	65.11	64.46	63.84	63.22	62.65
Dopage	4,6.10 <sup>32</sup>	3,5.10 <sup>32</sup>	2,4.10 <sup>32</sup>	2,8.10 <sup>32</sup>	2,8.10 <sup>32</sup>	2,4.10 <sup>32</sup>	2.10 <sup>32</sup>	1,8.10 <sup>32</sup>	1,8.10 <sup>32</sup>	1,6.10 <sup>32</sup>
Fluence	52.05	50.88	49.96	49.74	49.41	50.15	48.54	48.23	48.01	47.73

Tableau N<sup>o</sup> 4 : TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion Antimoine de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>

Energie(keV)	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Ions Rétrodiffusion	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Vacancies Ions	146.3	285.1	419.9	552.0	681.9	809.8	935.8	1059.4	1185.4	1306.5
Range projectile	90	137	176	214	249	282	318	351	383	414
Ionisation	3	3.32	3.56	3.78	4	4.14	4.39	4.51	4.66	4.80
Phonons	2.10	1.35	1.04	0.88	0.78	0.70	0.65	0.60	0.56	0.53
phonons recules	71.94	70.56	69.45	68.52	67.84	67.20	66.65	66.10	65.60	65.19
Dopage	4,5.10 <sup>23</sup>	4.10 <sup>23</sup>	3.10 <sup>23</sup>	2,4.10 <sup>23</sup>	3.10 <sup>23</sup>	3.10 <sup>23</sup>	3.10 <sup>23</sup>	2,4.10 <sup>23</sup>	2,4.10 <sup>23</sup>	2.10 <sup>23</sup>
Fluence	52.49	51.57	50.83	50.73	50.18	49.93	49.71	49.29	49.15	48.80

Tableau N<sup>o</sup> 5 : TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion bismuth de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>

Energie(keV)	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Ions Rétrodiffusion	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Vacancies Ions	140.1	273.6	403.6	531.1	655.9	779.7	900.8	1022.7	1141.3	1256.5
Range projectile	91	129	161	189	216	241	266	288	310	332
Ionisation	7.04	7.36	7.68	7.85	8.13	8.40	8.63	8.79	8.94	9.12
Phonons	2.34	1.46	1.11	0.92	0.80	0.71	0.64	0.59	0.55	0.52
phonons recules	69.35	68.16	67.16	66.34	65.65	64.98	64.40	63.93	63.43	62.98
Dopage	4,5 .10 <sup>23</sup>	4,5 .10 <sup>23</sup>	4 .10 <sup>23</sup>	2,8 .10 <sup>23</sup>	2,8 .10 <sup>23</sup>	3,5 .10 <sup>23</sup>	3,5 .10 <sup>23</sup>	35 .10 <sup>23</sup>	35 .10 <sup>23</sup>	3,5 .10 <sup>23</sup>
Fluence	52.93	52.52	51.72	51.07	50.83	50.85	50.66	50.52	50.38	50.24

Tableau N° 6 : TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion Azote de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>

Energie(keV)	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Ions Rétrodiffusion	280	204	157	128	105	102	88	79	73	63
Vacancies Ions	107.2	187.6	256.2	311.0	359.7	403	442	478.4	508.9	539.2
Range projectile	259	483	704	917	1120	1324	1534	1735	1933	2142
Ionisation	28.48	36.44	41.81	46.72	50.46	53.55	56.29	58.46	60.51	62.28
Phonons	2.91	2.06	1.67	1.44	1.28	1.16	1.07	1.00	0.94	0.89
phonons recules	52.80	46.60	42.38	38.62	35.76	33.41	31.36	29.71	28.19	26.87
Dopage	2.10 <sup>23</sup>	1,4.10 <sup>23</sup>	1.10 <sup>23</sup>	0,9 .10 <sup>23</sup>	0,8.10 <sup>23</sup>	0,6.10 <sup>23</sup>	0,6.10 <sup>23</sup>	0,6.10 <sup>23</sup>	0,5.10 <sup>23</sup>	0,5.10 <sup>23</sup>
Fluence	48.36	49.18	45.87	45.27	45.84	44.01	43.93	43.84	43.53	43.34

Tableau N° 7 : TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion Aluminium de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>

Energie (keV)	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Ions rétrodiffusion	146	106	88	86	80	70	55	50	49	39
Vacancies ions	135.5	257.9	371.5	479.5	580.8	678.8	770	856.2	938.5	1019.3
Range projectile	160	290	417	551	685	815	952	1091	1230	1376
Ionisation	10.17	13.16	15.32	17.47	19.27	20.82	22.57	24.25	25.87	27.42
Phonons	2.40	1.72	1.41	1.26	1.13	1.06	0.99	0.95	0.91	0.87
Phonons reculés	66.23	63.17	60.97	59.00	57.32	55.87	54.38	52.99	51.67	50.47
Dopage	3.10 <sup>23</sup>	2.10 <sup>23</sup>	1,6.10 <sup>23</sup>	1,2.10 <sup>23</sup>	1.10 <sup>23</sup>	1.10 <sup>23</sup>	0,8.10 <sup>23</sup>	0,7.10 <sup>23</sup>	0,7.10 <sup>23</sup>	0,7.10 <sup>23</sup>
fluence	50.01	48.40	47.54	46.31	46.40	45.30	45	44.66	44.33	44.13

Tableau N° 8 : TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion Bore de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>

Energie (keV)	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Des ions rétrodiffusion	296	214	167	139	120	80	73	68	65	62
Vacancies ions	95.1	102.3	212.3	252.8	285.2	312.2	337.2	361.6	381.9	399
Range projectile	354	665	964	1259	1527	1809	2071	2318	2586	2838
Ionisation	35.67	44.86	51.50	56.82	60.60	64.12	66.67	68.65	70.44	72.14
Phonons	3.30	2.28	1.83	1.56	1.37	1.23	1.12	1.04	0.97	0.91
Phonons reculés	47.34	40.39	35.37	31.35	28.53	25.95	24.05	22.54	21.22	19.98
Dopage	1,8.10 <sup>23</sup>	1.10 <sup>23</sup>	0,8.10 <sup>23</sup>	0,7.10 <sup>23</sup>	0,6.10 <sup>23</sup>	0,6.10 <sup>23</sup>	0,5.10 <sup>23</sup>	0,5.10 <sup>23</sup>	0,5.10 <sup>23</sup>	0,45.10 <sup>23</sup>
fluence	47.55	45.87	44.97	44.44	43.93	43.72	43.34	43.20	43.04	42.78

*Tableau N° 9 : TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion Gallium de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>*

Energie (keV)	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Des Ions rétrodiffusion	6	8	9	4	5	4	1	4	4	4
Vacanciers ions	143.6	278.5	409.5	534.5	659	781	900.5	1018.9	1136.4	1253.2
Range projectile	97	156	211	264	317	369	422	472	529	573
Ionisation	4.63	5.38	6.06	6.57	7.09	7.59	8.04	8.38	8.88	9.16
Phonons	1.97	1.31	1.05	0.90	0.81	0.74	0.69	0.65	0.62	0.58
Phonons reculés	70.42	68.67	67.30	66.24	65.34	64.52	63.79	63.14	62.51	61.98
Dopage	4,5.10 <sup>23</sup>	3,5.10 <sup>23</sup>	2,4.10 <sup>23</sup>	2,8.10 <sup>23</sup>	2,4.10 <sup>23</sup>	2.10 <sup>23</sup>	1,8.10 <sup>23</sup>	1,8.10 <sup>23</sup>	1,6.10 <sup>23</sup>	1,6.10 <sup>23</sup>
Fluence	50.2	49.8	49.7	49.61	48.91	48.5	48.3	48.08	47.85	47.58

*Tableau N°10 : TRIM data différents paramètres du bombardement ionique de l'ion Indium de dopage ZnO/SiO<sub>2</sub>*

Energie (keV)	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
Des Ions rétrodiffusion	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Vacanciers ions	145.9	283.8	418.0	549.6	679.3	807.9	932.4	1055.5	1181.4	1301.2
Range projectile	90	137	178	215	252	288	322	355	388	422
Ionisation	3.16	3.54	3.81	4.02	4.26	4.49	4.70	4.83	5	5.15
Phonons	2.08	1.34	1.04	0.88	0.77	0.70	0.64	0.60	0.56	0.53
Phonons reculés	71.79	70.35	69.26	68.35	67.60	66.95	66.34	65.79	65.31	64.88
Dopage	4,5.10 <sup>23</sup>	4.10 <sup>23</sup>	3.10 <sup>23</sup>	2,4.10 <sup>23</sup>	3.10 <sup>23</sup>	3.10 <sup>23</sup>	3.10 <sup>23</sup>	2,4.10 <sup>23</sup>	2.10 <sup>23</sup>	2.10 <sup>23</sup>
fluence	52.44	51.52	50.79	50.41	50.11	49.84	49.65	49.22	49.80	48.73

## Référence

---

- [1] Conducteurs – semi-conducteurs - supraconducteur, thème les matériaux, <http://spcts.e-monsite.com/medias/files/14-t3-conducteurs-semi-conducteurs.pdf>
- [2] J F. Ziegler, U. Littmark, and J. P. Biersack, The Stopping and Range of Ions in Solids, The Stopping and Ranges of Ions in Matter (logiciel) (2006)
- [3] N. Abdi, Modélisation des propriétés électriques du GaAs dopé par implantation ionique, mémoire de magistère, Université de Tébessa (2012)
- [4] A. Bouguerra, thèse de Doctorat Contribution à l'étude de l'implantation des ions de carbone dans le silicium, Université Mentouri Constantine, Algérie (2016)
- [5] S. Sato, H. Sai, T. Ohshima, M. Imaizumi, K. Shimazaki, and M. Kondo, "Anomalous enhancement in radiation induced conductivity of hydrogenated amorphous silicon semiconductors," Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. Mater. (2012)
- [6] P-Alexis. Gauchard, la classification périodique des éléments, Université Joseph Fourier de Grenoble (2012).
- [7] C. Chevalier César, Élaboration et caractérisation de capteurs de gaz à base de nanofils de ZnO, these de doctorat ,université Paris Est (2013)
- [8] H. Sambemana. Adaptation d'un nez électronique pour le contrôle de la concentration et de l'humidité d'une atmosphère chargée en huile essentielle destinée à un effet thérapeutique médical.thèse de doctorat , Université de Lorraine, (2012).
- [9] B. Grehant , physique des semi-conducteurs , dopage N et dopage P, Edition ebouk (2013)
- [10] Dj. diouf, " cellules photovoltaïques silicium à hétérojonctions et à structure interdigitée en face arrière", thèse de doctorat, Université Paris-Sud (2010)
- [11] S.RebiaiBenahmed , ouvrage , composants optoélectronique , esciences, (2016) <http://fac.umc.edu.dz/fstech/Electronique/2.pdf>
- [12] Les semi-conducteurs,[http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/j-j-rousseau/enseignements/physique/02/cours\\_elec/semicon.pdf](http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/j-j-rousseau/enseignements/physique/02/cours_elec/semicon.pdf)

## Référence

---

- [13] A. Chovet et P. Masson, cours de physique des semi-conducteurs, Ecole polytechnique universitaire de Marseille,(2016)  
[http://users.polytech.unice.fr/~pmasson/Enseignement/Cours semi-conducteurs](http://users.polytech.unice.fr/~pmasson/Enseignement/Cours%20semi-conducteurs)
- [14] Isolant, semi-conducteur, conducteur, cours, [http://www.optiqueingenieur.org/fr/cours/OPI\\_fr\\_M05\\_C02/co/Contenu\\_02.html](http://www.optiqueingenieur.org/fr/cours/OPI_fr_M05_C02/co/Contenu_02.html)
- [15] Éléments de physique des semi-conducteur.doc  
<file:///C:/Users/MOB/Downloads/elements-de-physique-des-semi-conducteurs.pdf>  
(2003)
- [16] N. Rodriguez, "Diffusion des dopants dans les dispositifs de la microelectronique:Co-diffusion de l'arsenic et du phosphore dans le silicium monocristallin,études unidimensionnelle et bidimensionnelle". thèse de doctorat, Université Paul Cézanne, (2008)
- [17] T. Kociniowski, Homoépitaxie et dopage de type n du diamant. thèse de doctorat, Université de Versailles (2006)
- [19] Th. Philippe, précipitation du bore dans le silicium . thèse de doctorat , université de Rouen France (2011)
- [20] A. Zhang,Gallium Nitride -Based Electronic Devices,Phd ,Univeristy of Floride (2001)
- [21] L. Massol, Fonctionnement d'une LED <https://www.futura-sciences.com/tech/dossiers/technologie-led-eclairage-demain-1762> , (2013)
- [22] A. Lanterne ,Étude, réalisation et caractérisationde dopages par implantation ionique pour une application aux cellulessolaires en silicium. thèse de doctorat ,Université de Grenoble , France(2014)
- [23] H. Serrar , étude théorique et expérimentale de l'implantation de ionique de Sb dans Si, thèse de magistère , UniversitéMentouri de Constantine, Algérie(2007)
- [24] A. Zouke, étude des phénomènes d'interaction faisceau d'électron gaz –matière dans un MEB, Thèse Doctorat , Université Lille I (2013)
- [25] R. Nouri , Etude par spectroscopie de rétrodiffusion Rutherford de l'implantation ionique. thèse de magistère , Université Mentouri de Constantine Algérie (2010).

## Référence

---

- [26] A.Tarek , Calcul de l'énergie déposée des particules chargées dans la matière. thèse de magistère, Université Ferhat Abbas (2010)
- [27] M. Christophe Inguibert , La création de défauts de déplacements atomiques dans le silicium et son impact sur les composants électroniques à applications spatiales. thèse de doctorat ,universités Toulouse (2011)
- [28] S. Coffa, J. M. Poate, D. C. Jacobson, and A. Polman, "Impurity trapping and gettering in amorphous silicon ," Appl. Phys . Lett. 58 (1991) , 2916–2918.
- [29] A. Bouguerra, Contribution à l'étude de l'implantation des ions de carbone dans le silicium. thèse de doctorat ,université Frères Mentouri Constantine (2016)
- [30] A. FopahLele, Etudes des nano-cavités en vue de la réalisation des matériaux alternatifs à base de semi-conducteurs. mémoire Master , Université de Yaoundé (2009)
- [31] F. Zeigler, J.P. Beirsack, U. Littman, 1985, The Stopping and Range of Ions in Solids, Pergamon Press, New York, version 2013
- [32] M. J. Caturla, T. D. de la Rubia, and G. H. Gilmer, "Recrystallization of a planar amorphous-crystalline interface in silicon by low energy recoils: A molecular dynamics study," J. Appl. Phys. 77 (1995), 3121–3125
- [33] M. BAZIZ, "Modélisation physique et simulation de défauts étendus et diffusion des dopants dans le Si, SOI et SiGe pour les MOS advances". thèse de doctorat, Université Toulouse, (2010).
- [34] A. Safiei, H. Windgassen, K. Wolter, and H. Kurz, "Emitter profile tailoring to contact homogeneous high sheet resistance emitter," Energy Procedia, (2012).
- [35] A. Defresne, Amélioration de la passivation de cellules solaires de silicium à hétérojonction grâce à l'implantation ionique et aux recuits thermiques. Thèse de doctorat, université Paris Sud , France (2016)
- [36] M. Chekirine, Etude expérimentale du pouvoir d'arrêt des ions légers et lourds dans les polymères, thèse de doctorat ,Université de Batna (2017)

## Référence

---

- [37] J.-Ph. Pérez, Contribution aux théories du pouvoir d'arrêt des solides pour des particules chargées relativistes, journal de Physique, (1983)
- [38] Sy. Rubenthaler, Université Nice Méthodes de Monte-Carlo cours (2018-2019)
- [39] P-Alain . Patard, Outils numériques pour la simulation Monte Carlo des produits dérivés complexes. Université de Lyon, France (2007)
- [40] Y. Maneglia, analyse en profondeur des défauts de l'interface Si-SiO<sub>2</sub> par la technique du pompage de charges. thèse de doctorat, université de Grenoble France (1992)
- [41] N. Bettou Application de la méthode de Monte Carlo à l'étude de l'interaction rayonnement-matière codes TRIM et Casino. mémoire de Master ,Université Djilali Bounaama Khemis Miliana (2016)
- [42] A. Naas « Étude de l'oxyde de silicium implanté krypton ou xénon : Evolution de la constante diélectrique ». thèse de doctorat, Université Orléans,( 2010).
- [43] J. Corbett, J. Bourgoin, les défauts ponctuels dans les semi-conducteurs, Journal de Physique Colloques,( 1978)
- [44] B. Leghighane, Etude des composés n-ZnO et p-ZnO et leur application en optoélectronique, thèse de magistère, ENPO Oran Algérie (2015)
- [45] E. Testa, Echanges de charge et perte d'énergie d'ions lourds ralentis, canalisés dans des cristaux de silicium. thèse de doctorat ,université Claude Bernard de Lyon (2005)
- [46] A. Valour Synthèse d'oxyde de zinc dopé azote sous formes de poudre et de couche mince : caractérisation du type de semi conductivité. thèse de doctorat , Université de Rennes France (2017)
- [47] H. Amekura et al., Fluence-dependent formation of Zn and ZnO nanoparticles by ion implantation and thermal oxidation: An attempt to control nanoparticle size, journal of applied physics 104, 114309 (2008)
- [48] A. Fafine, Modélisation numérique de l'interaction onde-matière dans des matériaux nanostructures. thèse de doctorat, Université de Caen Basse-Normandie (2014)
- [49] A. Lanterne ,Étude, réalisation et caractérisation de dopages par implantation ionique pour une application aux cellules solaires en silicium. thèse de doctorat, Université de Grenoble (2014)



## Référence

---

- [51] I. Rahmani, Etude et simulation de l'implantation ionique des dopants dans des structures MOS, thèse de magistère, Université Hadj Lakhdar Batna (2014)
- [52] N. Rodriguez, "Diffusion des dopants dans les dispositifs de la microélectronique: Co-diffusion de l'arsenic et du phosphore dans le silicium monocristallin, études unidimensionnelle et bidimensionnelle". thèse de doctorat, Université Paul Cézanne, (2008)