

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**Université Mentouri de Constantine
FACULTE DES SCIENCES DE L'INGÉNIEUR
DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE**

N° d'ordre :.....
Série :.....

THESE

Présentée pour obtenir le diplôme

DOCTORAT EN SCIENCES

Option

Semiconducteurs

Par

FAYÇAL BOULSINA

**Contribution à l'amélioration de la résolution en
profondeur lors de l'analyse SIMS par des techniques
de traitement du signal**

Devant le jury :

Président	: F. HOBAR	Prof. Université de Constantine
Rapporteur	: S. LATRECHE	Prof. Université de Constantine
Examineurs	: F. MANSOUR	Prof. Université de Constantine
	: A. MAHDJOUR	Prof. Université d' Oum El Bouaghi
	: R. MAHAMDI	M.C. Université de Batna

Cette thèse a été proposée et dirigée par Feu le Professeur **M. BERRABAH**

Remerciements

Avant tout je tiens à présenter mes sincères remerciements à ALLAH qui m'a donné la force et la volonté afin de réaliser cette thèse.

Je tiens à exprimer la reconnaissance et la gratitude que j'ai envers Mme. **M. BERRABAH**, Professeur à l'université Mentouri de Constantine, qui reste pour moi l'exemple qu'il faut suivre. En effet, malgré son état de santé, elle a suivi ce travail jusqu'aux derniers jours de sa vie. Elle n'est pas là pour voir le résultat de son travail, mais elle n'est pas absente dans nos cœurs.

J'exprime toute ma reconnaissance à Mme. **S. LATRECHE**, Professeur à l'université Mentouri de Constantine, pour la chance qu'elle a donnée à ce travail pour être terminé, pour ses encouragements, et ses conseils.

Pour l'honneur qu'elle m'a accordé, en acceptant de présider le jury de cette thèse, je remercie sincèrement Mme. **F. HOBAR**, Professeur à l'université Mentouri de Constantine.

J'adresse mes vifs remerciements à Mme. **F. MONSOUR**, Professeur à l'université Mentouri de Constantine, d'avoir accepté de faire partie du jury.

J'adresse toute ma gratitude à M. **A. MAHDJOUR**, Professeur à l'université d'Oum El Bouaghi, qui m'a fait l'honneur d'accepter de juger mon travail.

Je tiens à remercier sincèrement M. **R. MAHAMDI**, Maître de conférence à l'université de Batna, d'avoir bien voulu être examinateur de mon travail.

Merci à M. **J. C. DUPUY**, Professeur à l'INL-INSA de Lyon (INL : Institut de Nanotechnologies de Lyon), pour les profils expérimentaux fournis.

Merci également à tous les membres de ma famille, sans leur soutien, la réalisation de ce travail n'aurait pas possible.

Enfin, je remercie tous les membres du laboratoire LHS chacun en son nom, mes amis et mes collègues et tous ceux qui contribué de près ou de loin à ce travail.

Sommaire

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE.....	1
----------------------------	---

Chapitre 1 : État de l'art sur l'analyse en profondeur par SIMS
--

1. INTRODUCTION.....	3
2. SPECTROMETRIE DE MASSE D'IONS SECONDAIRES SIMS.....	3
2.1 Principe.....	3
2.2 Description de l'analyseur ionique.....	4
2.3 Caractéristiques générales.....	6
2.3.1 Analyse élémentaire.....	6
2.3.2 Analyse de surface	7
2.3.3 Analyse en profondeur	7
2.3.4 Le taux de pulvérisation	7
2.3.5 Le taux d'ionisation	8
2.3.6 Le facteur de transmission.....	9
2.3.7 L'équation ionique SIMS.....	9
2.4 Les limites de la technique.....	9
3 RESOLUTION EN PROFONDEUR.....	10
3.1 Mécanismes essentiels gouvernant la résolution en profondeur.....	10
3.1.1 Le mixage collisionnel.....	11
3.1.2 Développement de rugosités.....	15
3.2 Effets de l'oxygène.....	20
3.2.1 La ségrégation de certaines espèces.....	20
3.2.2 Le gonflement de la matrice : le swelling.....	21
3.2.3 L'utilisation du soufflage d'oxygène.....	22
3.3 Évaluation de la résolution en profondeur.....	23
3.3.1 Évaluation par front montant ou descendant.....	24
3.3.2 Évaluation sur un delta-dopage.....	25
3.3.3 Séparabilité de deux deltas-dopage.....	28
4. POSITON DU PROBLEME : AMELIORATION DE LA RESOLUTION	

PROFONDEUR.....	29
5.CONCLUSION.....	30

Chapitre2 : Techniques de déconvolution développés relatives aux profils SIMS

1. INTRODUCTION.....	32
2. RAPPELS.....	32
2.1 Nature des signaux SIMS mesurés.....	33
2.2 Domaine temporel discret.....	33
2.3 La transformée de Fourier discrète (TFD).....	33
2.4 Relations utiles.....	33
3. MODELISATION D'UNE ANALYSE SIMS PAR CONVOLUTION.....	34
3.1 Longueur des signaux, convolution linéaire et convolution circulaire.....	37
3.2 Equation de convolution dans l'espace matriciel.....	38
3.3 Equation de convolution dans l'espace fréquentiel.....	39
3.4 La réponse impulsionnelle en SIMS (fonction de résolution en profondeur).....	39
3.4.1 Spécificité de la fonction de résolution.....	40
3.4.2 Modélisation de la DRF.....	40
3.4.3 Causalité et positionnement de la DRF.....	46
3.4.4 Fittage des données expérimentales par la forme analytique choisie.....	48
3.4.5 Évolution des paramètres de la DRF en fonction des conditions expérimentales.....	49
3.4.6 Relation entre les paramètres de la DRF et les phénomènes physiques.....	51
3.5 Bruit SIMS.....	52
3.5.1 Caractéristiques fréquentielles d'un bruit.....	52
3.5.2 Caractéristiques probabilistes d'un bruit.....	53
3.5.3 Nature du bruit SIMS.....	54
4. DECONVOLUTION DES PROFILS SIMS.....	55
4.1 La déconvolution : un problème inverse mal posé.....	55
4.2 Solution du problème de déconvolution par la méthode des moindres carrés.....	57
4.3 Régularisation d'un problème mal posé.....	59
4.3.1. Introduction à la régularisation.....	59
4.3.2 Formulation générale de la régularisation.....	59
4.3.3. Régularisation de Tikhonov-Miller.....	60

4.4 Contraintes dures appliquées à un signal.....	63
4.5 Algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures.....	65
4.5.1 L'algorithme de Van Cittert.....	65
4.5.2 Régularisation et introduction des contraintes dures dans l'algorithme de Van Cittert.....	66
4.6 Proposition d'une nouvelle méthode de déconvolution en SIMS.....	67
4.7 Calcul des erreurs.....	68
4.7.1 Erreur vraie.....	69
4.7.2 Erreur de reconstruction.....	69
5. CONCLUSION.....	70

Chapitre 3 : Application des techniques de déconvolution aux profils SIMS simulés

1. INTRODUCTION.....	71
2. PROCEDURE DE SIMULATION.....	71
3. SIGNAUX-TYPES UTILISES POUR LES SIMULATIONS.....	74
3.1 Gaussienne.....	74
3.2 Créneau.....	74
3.3 Delta dopage.....	74
4. COMPARAISON ENTRE LES DEUX ALGORITHMES –AVEC ET SANS TERME DE REGULARISATION-.....	75
4.1 Déconvolution d'un profil gaussien.....	76
4.2 Déconvolution d'un créneau de 300 Å de largeur.....	79
4.3 Déconvolution d'un delta-dopage.....	81
4.4 Conclusion.....	85
5. CRITERES D'ARRET DE L'ALGORITHME.....	85
5.1. Cas des profils gaussien et en créneau.....	85
5.1.1. Contrôle visuel des résultats au cours des itérations.....	85
5.1.2. Utilisation de la courbe de l'erreur de reconstruction.....	88
5.1.3. Utilisation du "discrepancy principal".....	90
5.2. Cas du delta dopage.....	94
6. LA DECONCOLUTION : PERFORMANCES ET LIMITES.....	95
6.1. Déconvolution de gaussiennes.....	95
6.2. Déconvolution de créneaux.....	99

6.3. Déconvolution des deltas-dopage.....	106
7. DECONVOLUER AVEC UNE FAUSSE DRF.....	109
7.1 Cas où la DRF utilisée pour la déconvolution est plus étroite que la vraie DRF.....	110
7.2 Cas où la DRF utilisée pour la déconvolution est plus large que la vraie DRF.....	111
8. PERFORMANCES DE L'ALGORITHME EN TERMES DE SEPARABILITE.....	114
8.1. Séparation de deux deltas-dopage analysés à haute énergie (5.5 keV/ O ₂ ⁺).....	114
8.2. Séparation de deux deltas-dopage analysés à basse énergie (500 eV/ O ₂ ⁺).....	116
9. DECONVOLUTION DANS LE CAS OU LA DRF EST VARIANTE.....	119
10. CONCLUSION.....	121

Chapitre 4 : Étude des profils en profondeur SIMS expérimentaux

1.INTRODUCTION.....	124
2. DECONVOLUTION D'UN ECHANTILLON <i>MULTI DELTAS-DOPAGE</i>	124
2.1 Composition de l'échantillon et conditions expérimentales de l'analyse.....	124
2.2 Résultats de la déconvolution.....	126
2.3 Reconstruction du profil.....	132
3. DECONVOLUTION DE DEUX CRENEAUX DE 100 Å.....	132
3.1 Échantillon considéré.....	132
3.2 Résultats de la déconvolution.....	133
4. DECONVOLUTION DANS UN CAS OU LA DRF EST VARIANTE.....	136
4.1 Conditions expérimentales de l'analyse.....	136
4.2 Déconvolution avec une DRF constante.....	137
4.3 Déconvolution avec une DRF variante.....	139
4.4 Variation de la vitesse d'érosion et calibration en profondeur.....	142
5. DECONVOLUTION PARTIELLE.....	143
5.1 Principe et position du problème.....	143
5.1.2 Principe.....	143
5.1.2 Description de l'échantillon et conditions expérimentales de l'analyse.....	145
5.1.3 Déconvolution par la procédure de Yang et al. et position du problème.....	146
5.2 Proposition des procédures pour améliorer les performances de la déconvolution partielle.....	147
5.2.1 Préfiltrage du profil mesuré.....	147

5.2.2 Utilisations de la régularisation de Tikhonov-Miller.....	148
5.2.3 Utilisation d'un algorithme itératif.....	150
6. CONCLUSION	151
CONCLUSION GENERALE	153
REFERENCES	157

Introduction Générale

INTRODUCTION GENERALE

La miniaturisation des dimensions des dispositifs de la microélectronique nécessite l'appel à la technologie des couches minces et ultra minces pour leur réalisation. Mais l'efficacité de ces dispositifs est fortement liée aux techniques de caractérisation accompagnant ces réalisations. Parmi ces techniques, nous citons la spectrométrie de masse des ions secondaires (SIMS). Elle constitue une technique d'analyse de choix, grâce à sa sensibilité et ses performances en matière de résolution en profondeur. Elle offre la possibilité de détecter des éléments présents en faible quantité dans une matrice semiconductrice et de réaliser ainsi des profils de concentration en fonction de la profondeur.

Les performances présentées par l'analyse SIMS l'ont imposée comme un outil incontournable pour caractériser les jonctions. Cependant la réduction continue des dimensions des composants induit une amélioration continue des performances des techniques d'analyse en profondeur et non seulement de l'analyse SIMS. Un considérable effort au niveau instrumental est mené pendant ces dernières années pour améliorer les performances de la méthode. Cependant les développements SIMS ne sont pas aussi prononcés et rapides que ceux des techniques de fabrication des matériaux de la microélectronique. Additionnant à cet effet que la mesure SIMS, de par son principe, implique un élargissement des profils mesurés même en utilisant les appareils les plus précis et dans les meilleures conditions expérimentales, il apparaît nécessaire pour progresser dans ce domaine de dépasser les résultats expérimentaux bruts en leur adjoignant un traitement numérique. Ce traitement doit être capable de remonter à une meilleure approche du profil réel à partir du profil expérimental.

Dans ce contexte, ce travail a été consacré à l'application des techniques de traitements du signal, en particulier la déconvolution, aux profils expérimentaux pour améliorer la résolution en profondeur de l'analyse SIMS.

Dans un premier chapitre, après une description de la technique d'analyse par SIMS, nous présenterons l'analyse en profondeur, l'aspect où l'accent sera mis dans ce travail. Nous nous attacherons plus longuement aux phénomènes physiques sur lesquels est fondée cette analyse. Ce chapitre décrit également la nécessité de l'amélioration de la résolution en profondeur pour les besoins actuels de la microélectronique.

Le deuxième chapitre présente les principes de la déconvolution, nous nous attacherons en particulier à son application en SIMS. Cela nous amènera à l'étape préliminaire indispensable à la mise en œuvre de la déconvolution, à savoir la réponse impulsionnelle du système d'analyse,

appelé fonction de résolution en profondeur, où depth resolution function (DRF). Une forme analytique de cette fonction parmi celle existantes sera donc choisie. Nous passerons ensuite en revue différentes méthodes de déconvolution, et nous terminerons par la présentation d'un nouvel algorithme dans le domaine de l'analyse SIMS.

Dans le troisième chapitre les performances et les limites de la technique proposée sont évaluées en détail. Ceci est rendu possible grâce à l'utilisation des profils SIMS simulés par nous-même. Cette technique sera dans un premier temps comparée avec une technique déjà connue en SIMS. Nous définirons ensuite des critères d'arrêt pour cette méthode, et étudierons sa capacité en termes de séparabilité (sa capacité à séparer deux couches très fines).

Dans ce chapitre nous essaierons également de déconvoluer différents types de structures et donnerons des explications aux difficultés rencontrées par la déconvolution lors de la récupération de chaque structure. L'influence des incertitudes dans la mesure de la DRF sur les résultats de la déconvolution sera également étudiée. Ce sera l'occasion pour nous de traiter le problème de la déconvolution avec une DRF variante.

Enfin, le quatrième et dernier chapitre verra l'application de la méthode de déconvolution que nous avons proposée dans ce travail à des profils de concentration expérimentaux. Nous étudierons également une autre méthode de déconvolution dite partielle, et nous essaierons de proposer quelques techniques pour surmonter ses limitations.

Chapitre 1

Etat de l'art sur l'analyse en profondeur par SIMS

1. INTRODUCTION

La demande en résolution en profondeur est de plus en plus pressante dans le domaine de la microélectronique. Les développements récents des circuits intégrés à base de silicium conduisent à contrôler des jonctions très peu profondes par implantation de dopants à très faible énergie (quelques dizaines d'électrons-volts). Dans le contexte de ce développement, l'analyse SIMS est devenue en quelques années un outil incontournable grâce à sa sensibilité et ses performances en matière de résolution en profondeur. Cependant les développements de l'instrumentation SIMS ne sont pas aussi prononcés et rapides que ceux des techniques de fabrication des matériaux de la microélectronique moderne.

Dans ce premier chapitre, après une description de la technique d'analyse par SIMS, nous aborderons l'analyse en profondeur, l'aspect qui nous intéresse le plus dans ce travail. Nous nous attacherons plus longuement aux phénomènes physiques sur lesquels est fondée cette analyse. La nécessité de l'amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse pour les besoins actuels de la microélectronique sera aussi mise en évidence.

2. SPECTROMETRIE DE MASSE D'IONS SECONDAIRES (SIMS)

2.1. Principe

Le principe de l'analyse par SIMS est simple : il consiste à éroder progressivement et très lentement un échantillon au moyen d'un faisceau d'ions, et d'étudier la nature ainsi que la quantité des espèces chimiques présentes dans cet échantillon et qui ont été éjectées par l'érosion. Le faisceau d'ions incidents est dit *primaire*, par comparaison avec le faisceau d'ions *secondaires* provenant de l'échantillon analysé. Le bombardement de l'échantillon par les ions primaires induit une émission de diverses particules (électrons, photons, atomes et molécules neutres, ions mono et polyatomiques). Les ions secondaires émis constituent l'information recherchée. Ils sont accélérés par une tension d'extraction, triés en énergie grâce à un champ électrostatique puis triés en masse par un champ magnétique, et enfin comptés.

La discrimination entre les différentes espèces pulvérisées est faite selon le rapport de leur masse sur leur charge. Ceci nous permet d'avoir des informations sur la composition de l'échantillon. Le principe général de l'érosion et de l'émission des ions secondaires est schématisé sur la figure (1-1).

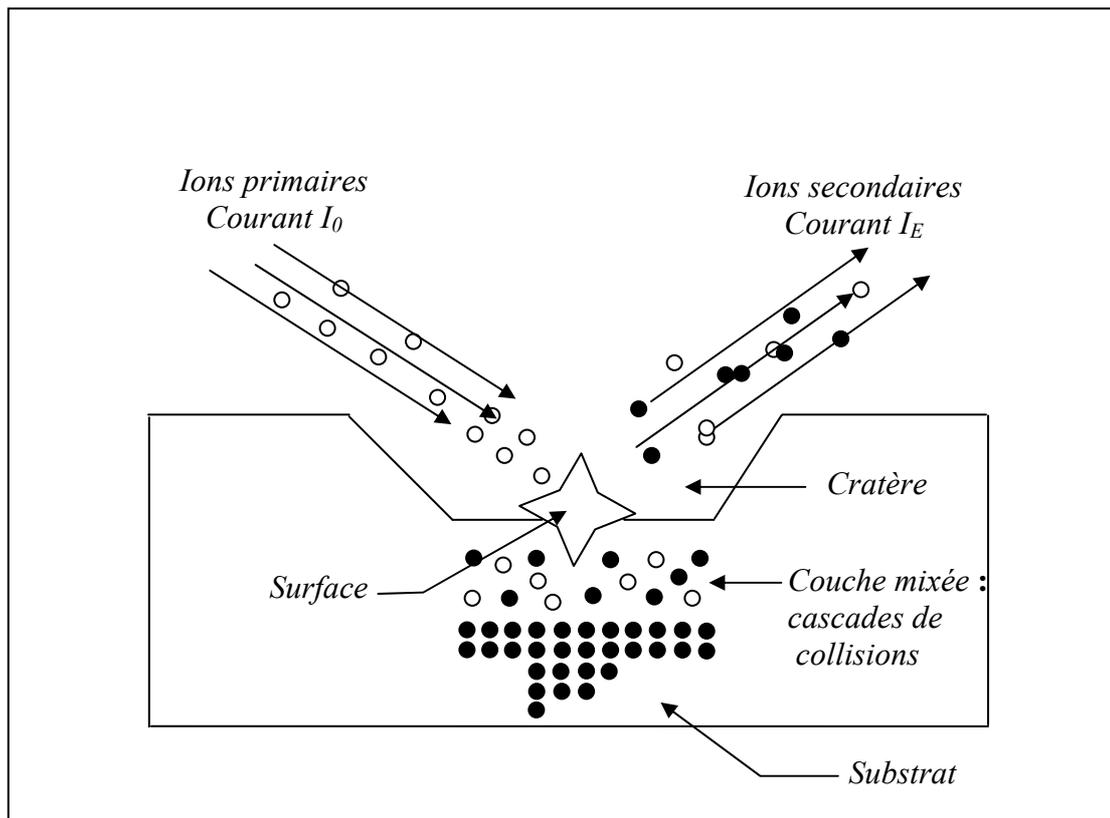


Figure (1-1) : Schéma de principe de l'analyse par SIMS.

A partir de ce principe, quelques remarques s'imposent:

- Il s'agit d'une méthode destructive car l'échantillon est pulvérisé.
- C'est une méthode d'analyse physico-chimique directe puisque l'on détecte directement le constituant de la cible.
- Enfin, la spectrométrie de masse est une technique très sensible qui permet de compter effectivement les ions secondaires avec un bruit de fond extrêmement faible comparativement aux spectrométries électroniques.

2.2. Description de l'analyseur ionique

Il existe plusieurs types de spectromètres de masse: quadrupolaire, à secteur magnétique et à temps de vol, chacun présente ses propres avantages et inconvénients. Le choix de l'un ou de l'autre de ces appareils sera fonction de l'utilisation principale qu'on désire en faire.

La figure (1-2) représente le schéma de principe de l'analyseur ionique CAMECA IMS 4/5/6f (analyseur ionique à secteur magnétique fabriqué par CAMECA). On peut distinguer les parties essentielles suivantes :

- La colonne d'ions primaires : elle produit sur l'échantillon à analyser une sonde d'ions primaires. La colonne primaire peut être équipée de deux sources, produisant respectivement des ions d'éléments chimiques électronégatifs (Oxygène) ou électropositifs (Césium). Les ions primaires sont transportés de la source à l'échantillon grâce à une optique de transfert ionique.
- La colonne secondaire : elle amène les ions secondaires de l'échantillon au système de tri.
- Le secteur électrostatique trie les ions secondaires en énergie. A la sortie de ce secteur, on peut discriminer les ions monoatomiques des ions polyatomiques.
- Le secteur magnétique trie en masse les ions sortis du secteur électrostatique.
- Le système de détection des ions secondaires (une cage de Faraday pour les forts courants ioniques et un multiplicateur d'électrons pour des faibles intensités).

Le lecteur intéressé par plus des détails pourra consulter les références [1, 2,3].

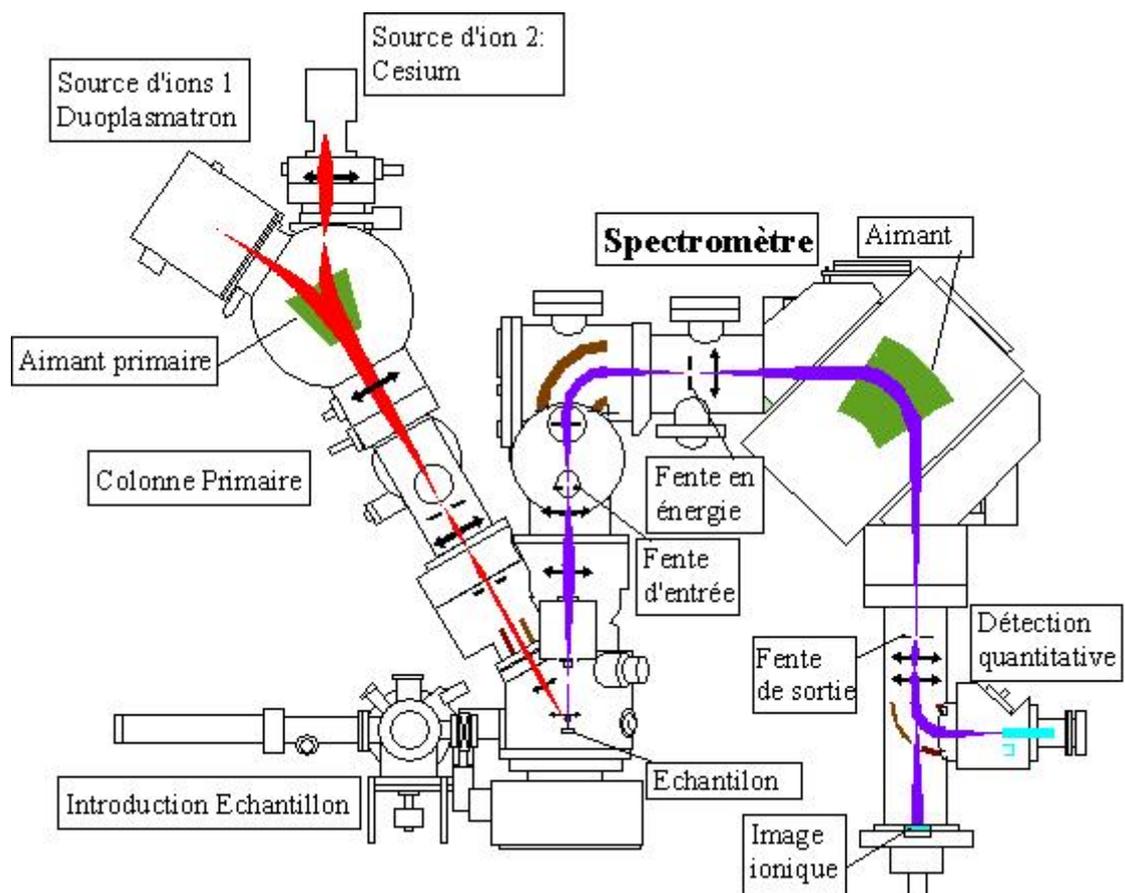


Figure (1.2) : Schéma de l'analyseur ionique CAMECA IMS 6f (de Wikipédia 1994).

Source d'ions primaires

Les ions primaires utilisés habituellement en analyse SIMS peuvent être des ions d'Oxygène ou de Césium, mais on peut aussi prendre d'autres types d'ions comme l'Azote (N_2^+) ou le Xénon (Xe^+).

Une source d'oxygène peut produire des ions O^+ , O^- , O_2^+ et O_2^- . C'est un duoplasmatron à cathode froide qui les crée, ce qui permet, en changeant la bouteille d'oxygène par une bouteille d'argon, d'obtenir des ions Ar^+ , également employés en SIMS. L'utilisation extensive d'ions O_2^+ tient au fait que le faisceau d'oxygène est réactif et provoque une modification de la composition des premières couches atomiques de la cible. Cette modification se traduit principalement par une augmentation du taux d'ionisation des éléments électropositifs qui améliore fortement la dynamique du signal (le nombre de décade entre le maximum et le minimum du signal).

L'analyse par SIMS des éléments de la microélectronique (Arsenic, phosphore...) peut être également conduite sous faisceau de césium. Les ions Cs^+ sont obtenus à partir d'un composé solide et non gazeux comme dans le cas du duoplasmatron.

Le bombardement par des ions Cs^+ exalte l'émission ionique secondaire des éléments électronégatifs. Leur utilisation connaît un regain d'intérêt grâce à ses vertus dans le domaine de la quantification des profils en profondeur. Dans certains cas, l'utilisation des ions en détection MCs^+ , où M est l'espèce étudiée, minimise les effets de matrice (le rendement d'ionisation d'un élément peut varier de plusieurs ordres de grandeur d'une matrice à l'autre), qui handicape la quantification des profils SIMS [4]. Les ions en détection MCs_2^+ sont aussi utilisés et présentent des avantages par rapport à MCs^+ [5, 6].

2.3. Caractéristiques générales

2.3.1. Analyse élémentaire

L'analyse se fait par spectrométrie de masse: toutes les espèces sont détectables de l'hydrogène (H) à l'uranium (U). On peut également réaliser des analyses isotopiques.

Il s'agit d'une méthode très sensible car contrairement aux techniques spectroscopiques, la détection des ions ne s'accompagne ni de rayonnement parasites, ni de fond continu. La sensibilité est de l'ordre du ppm pour beaucoup d'éléments, et même du ppb dans certains cas (Bore). C'est donc une technique très bien adaptée au domaine des semiconducteurs où la détection de dopants, donc d'éléments présents en faible concentration dans une matrice donnée,

est cruciale. La résolution en masse de la technique est tout aussi performante : on arrive à des pouvoirs de séparation ($M/\Delta M$) supérieurs à 10^4 .

2.3.2. Analyse de surface

La profondeur d'échappement des ions secondaires ne dépasse pas les trois premières couches atomiques sous la surface de l'échantillon. On peut donc obtenir des images ioniques de la surface, en balayant le faisceau primaire sur celle-ci. La résolution latérale est généralement meilleure que le μm .

2.3.3. Analyse en profondeur

Il s'agit de la collection des ions secondaires en fonction du temps pour obtenir le profil de concentration en profondeur. Ce dernier est donc un découpage plan par plan du volume de l'échantillon couplé à une mesure dans chaque plan de concentration de l'espace voulu. C'est un aspect très important qui se place au centre de notre travail.

➤ *Relation Temps-Profondeur*

Moyennant l'hypothèse de vitesse d'érosion constante, la conversion temps d'analyse-profondeur peut être faite en mesurant la profondeur du cratère final au moyen d'un profilomètre. La calibration en profondeur peut être aussi faite au moyen d'un étalon de profondeur (une structure multi-deltas par exemple). Dans ce dernier cas, on peut déterminer la vitesse d'érosion pour un réglage de l'appareil donné, et l'on pourra l'utiliser pour calibrer le profil d'intérêt acquis dans les mêmes conditions d'analyse [7].

➤ *Relation Intensité-Concentration*

Comme il n'existe pas de modèles théoriques fiables pour estimer la constante de proportionnalité entre intensité ionique et concentration, pour faire la conversion intensité – concentration, on fait généralement usage d'un échantillon étalon (de dose connue) analysé dans les mêmes conditions que l'échantillon considéré.

2.3.4. Le taux de pulvérisation

Lors du bombardement ionique, la partie des cascades de collisions localisée vers la surface engendre l'éjection d'atomes hors de l'échantillon. Au bout d'un certain temps, tous les atomes sont bien sûr pulvérisés, mais il est intéressant de comparer le nombre d'atomes éjectés

par rapport au nombre d'ions incidents. On définit pour cela le *taux de pulvérisation* qui correspond au nombre d'atomes de la cible pulvérisés par l'arrivée d'un ion primaire. Si la cible contient plusieurs espèces atomiques, auxquelles on associe l'indice k , on a :

$$Y_t = \sum_k Y_k . \quad (1.1)$$

Où Y_k est le rendement de pulvérisation spécifique à l'espèce k , Y_t est le taux de pulvérisation total. De plus, les atomes éjectés sont susceptibles de provenir de différentes profondeurs, si bien qu'on définit un rendement de pulvérisation différentiel en profondeur, y_k , tel que [7]:

$$Y_k = \int_0^{\infty} y_k dz \quad (1.2)$$

A partir de la fonction $y_k(z)$, on peut définir une *profondeur moyenne d'échappement*. Une expérience a permis de déterminer sa valeur, dans le cas du silicium : Elle est de l'ordre de 2 Å [8].

Le taux de pulvérisation pour un matériau donné parfaitement homogène, dépend principalement des paramètres du faisceau primaire : masse, énergie d'impact, angle d'incidence.

On note que les atomes de la cible ne sont pas forcément pulvérisés proportionnellement à leur concentration dans la matrice, c'est ce qu'on appelle *la pulvérisation préférentielle*. Ce phénomène provoque pour l'espèce pulvérisée préférentiellement un appauvrissement de la surface. L'appauvrissement d'une espèce, et donc l'enrichissement d'une autre à la surface de l'échantillon va initier un régime transitoire des concentrations locales jusqu'à ce qu'un certain rapport de concentration entre les deux espèces soit atteint [3]. Le régime permanent pour la pulvérisation est alors installé. Ce phénomène complique très sérieusement la quantification des profils.

2.3.5. Le taux d'ionisation

La sensibilité du SIMS dépend directement des taux d'ionisation des différentes espèces pulvérisées. Le taux d'ionisation représente en fait une probabilité d'ionisation d'une espèce après sa pulvérisation. Il est noté $\alpha^{n\pm}$ et représente le rapport du nombre de particules ionisées n

fois sur le nombre total d'atomes pulvérisés pour cette espèce. De la même façon que le taux de pulvérisation, il est spécifique à un élément donné dans une matrice donnée et variera avec la composition de la matrice et les conditions expérimentales.

2.3.6. Le facteur de transmission

Les atomes pulvérisés puis ionisés seront acheminés vers le détecteur. Comme dans tout appareillage, la transmission n'est pas idéale. L'instrument ne détecte qu'une fraction des ions, puisque une partie seulement des ces ions est transmise à travers l'appareillage. On définit donc un facteur de transmission T_k qui caractérise le nombre d'ions effectivement détectés par rapport au nombre d'ions créés à la sortie de l'échantillon. Il est noté avec indice k car il peut également varier selon l'espèce considérée.

2.3.7. L'équation ionique SIMS

A partir des taux de pulvérisation et d'ionisation, ainsi que du facteur de transmission, on peut comparer le nombre d'ions de l'espèce analysée avec le nombre d'ions primaires bombardés sur l'échantillon. En l'absence de pulvérisation préférentielle, on peut écrire:

$$I_K = I_P C_k Y_t \alpha_K^\pm T_k \quad (1.3)$$

Où I_P et I_k sont respectivement les intensités ioniques primaire et secondaire, C_k étant le profil de concentration de l'espèce k .

L'équation (1.3) est dite « équation SIMS de base ». Elle est utilisée dans la quantification de l'analyse SIMS. Nous la donnons pour mémoire. Dans ce travail, l'accent sera mis sur la résolution en profondeur plutôt que sur la quantification.

2.4. Les limites de la technique

Plusieurs limitations résultent du procédé de la mesure elle-même. Tout d'abord, l'analyse est destructive, puisque l'échantillon est soumis à une pulvérisation au cours de son analyse. A chaque analyse, il faut donc sacrifier une partie de la surface de l'échantillon (environ $500 \mu\text{m} \times 500 \mu\text{m}$). Il faudra donc effectuer les analyses avec circonspection si l'échantillon s'avère rare ou précieux.

Par ailleurs, la petitesse du cratère analysé ne permet d'obtenir qu'une étude locale de l'échantillon, et l'étude d'un échantillon hétérogène ou de structure latérale complexe n'est pas possible avec une seule mesure. On peut cependant accumuler des images à différentes profondeurs.

L'inconvénient majeur de l'analyse SIMS est la difficulté concernant la quantification des résultats obtenus. En effet, la complexité de chaque processus de la mesure ne permet pas de modéliser totalement l'analyse, et encore moins de la quantifier. Comme nous avons déjà vu, pour connaître une concentration, on a besoin d'un échantillon étalon mesuré dans les mêmes conditions expérimentales que l'échantillon à analyser. L'analyse est donc « semi-quantitative ». En microélectronique, on fait appel à des échantillons standards préparés par implantation ionique pour calibrer les mesures.

3. RESOLUTION EN PROFONDEUR

L'une des utilisations les plus importantes de l'analyse SIMS en microélectronique est la réalisation de profils de concentration en profondeur.

Nous allons définir la résolution en profondeur plus en détail dans ce qui suit, mais on peut dire pour fixer les idées qu'elle est reliée à la largeur d'une couche supposée infiniment fine d'un élément dans une matrice donnée après analyse en profondeur. Elle fixe également la distance minimale entre deux couches contenant un élément donné pour qu'elles soient distinguées par la mesure.

3.1. Les mécanismes essentiels gouvernant la résolution en profondeur

Il est fondamental de bien comprendre les mécanismes qui gouvernent la résolution en profondeur de l'analyse par SIMS afin d'espérer l'améliorer, tant par des moyens instrumentaux que par des moyens numériques. En effet, le processus d'analyse n'est pas parfait, et les paramètres mis en jeu lors de la pulvérisation de l'échantillon ont tendance à dégrader la résolution en profondeur.

Dans des conditions idéales, les ions pulvérisés proviennent tous de la couche la plus superficielle, et l'érosion de l'échantillon se fait monocouche par monocouche et permet de tracer la concentration d'un élément donné en fonction du nombre de monocouches érodées. Dans ces conditions, les interfaces abruptes et les couches très fines semblent inchangées après analyse. En réalité, outre que les ions pulvérisés ne proviennent pas tous de la première couche atomique, les ions primaires déclenchent des cascades de collisions sur une épaisseur

significative en dessous de la surface d'une part, et s'incorporent dans la cible d'autre part. Pendant l'analyse, on a donc dans les premières couches atomiques de la cible un mélange composé du mixage de ces couches et des ions primaires. Le profil de concentration réel est modifié par ce mixage et le profil mesuré par l'analyse SIMS n'est pas rigoureusement identique au profil réel.

Par ailleurs, l'impact des ions primaires et leur interaction avec les ions de la cible provoquent d'autres phénomènes, qui dégradent également la résolution en profondeur: ségrégation, apparition d'une rugosité au fond du cratère...etc.

D'une manière générale, les phénomènes dégradant la résolution en profondeur contribuent à l'élargissement des profils. Une couche supposée infiniment fine par exemple, paraît lors de l'analyse avec une largeur Δz , cette largeur sert de référence pour caractériser la résolution en profondeur. Il en résulte qu'une interface très abrupte, une couche très fine, ou encore deux couches très peu éloignées ne puissent être analysées avec une précision suffisante pour les caractériser entièrement.

3.1.1. Le mixage collisionnel

Le mixage collisionnel résulte du transfert de l'énergie cinétique des ions primaires aux atomes de la cible. En effet, l'énergie cinétique des ions incidents transférée à l'intérieur de la cible sous forme de déplacement d'atomes. Il en résulte une nouvelle distribution locale des espèces. Ce phénomène est le phénomène le plus problématique dans l'analyse SIMS, puisqu'il est inhérent de la mesure elle-même. Il se rencontre quelque soit la nature du solide étudié. Il sera toujours possible de le minimiser en optimisant les paramètres du bombardement, mais pas de l'éliminer totalement. Il est peut être classifié en deux types:

- Le mixage par choc direct (Recoil mixing): il concerne uniquement le premier choc de l'atome incident avec un atome de la cible. Ces chocs sont très énergétiques et fortement anisotropes: les atomes frappés par les chocs directs sont projetés de préférence vers l'intérieur du matériau.
- Le mixage par cascades (Cascad mixing): produit par l'ensemble des chocs secondaires entre les atomes de la cible. Ces chocs sont très nettement moins énergétiques que les précédents mais infiniment plus nombreux. Un seul atome incident provoque ainsi un nombre considérable de chocs par cascade jusqu'à ce que l'énergie transférable d'un atome à un autre devienne inférieure à l'énergie de déplacement des atomes de la cible, c'est-à-dire une vingtaine d'eV environ. Après un nombre de choc relativement faible, la cascade de

collisions perd la mémoire de la direction initiale de l'ion incident et devient pratiquement isotrope. L'énergie cinétique restant après extinction des cascades de collisions se dissipe sous forme de phonons [2].

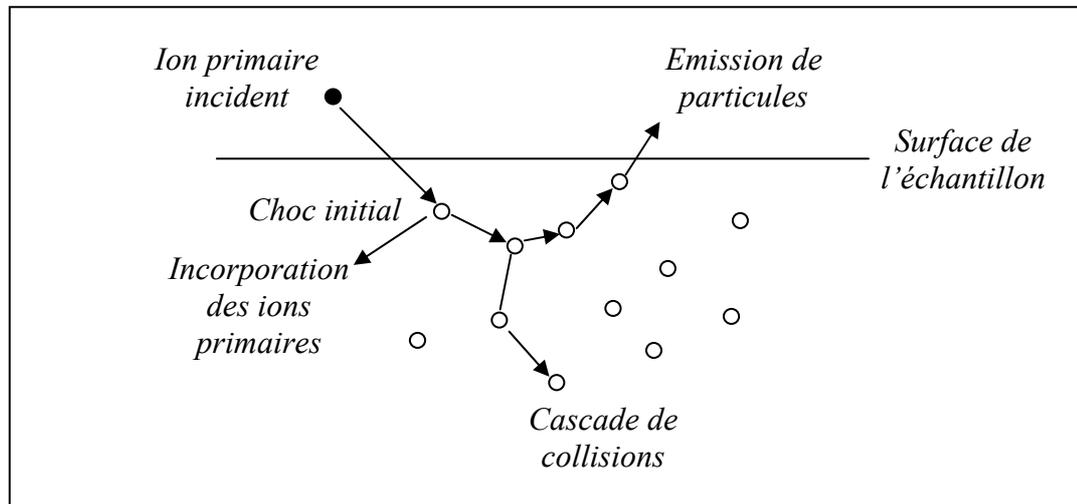


Figure (1-3) : Principe du mixage collisionnel.

➤ **Les conséquences du mixage collisionnel**

Dans l'analyse SIMS, l'étude de l'effet du mixage collisionnel sur la résolution en profondeur est très importante. Les prévisions théoriques du mixage collisionnel n'ont qu'un caractère qualitatif. Les méthodes utilisées donnent une idée assez bonne des dommages créés dans les couches mixées, mais la complexité des phénomènes ne permet ni de quantifier ni de prévoir un profil de concentration de manière précise [3].

Considérons un delta-dopage (couche infiniment fine constitué d'une seule couche atomique d'un élément donné dans une matrice donnée), par exemple du bore dans du silicium. L'analyse d'une telle couche, nous permet d'accéder directement à la réponse impulsionnelle de l'analyse SIMS. L'expérience nous montre qu'après une analyse SIMS, un profil de concentration initial supposé être un delta-dopage, est représenté par une courbe en forme de cloche, asymétrique, possédant un front de montée rapide et une traînée décroissante beaucoup moins rapide. Ces parties montante et descendante ont généralement une allure exponentielle, alors que la partie haute de la courbe est de forme arrondie : gaussienne. La figure (1-4) nous montre l'exemple d'un delta-dopage de bore implanté dans le silicium, analysé à 2 keV d'énergie d'impact, sous ions d' O_2^+ . On s'aperçoit qu'on est loin d'observer une simple couche fine de

quelques angströms seulement. Ceci est la conséquence du mixage collisionnel et de tous les autres mécanismes subis par les ions secondaires lors de l'analyse.

Le paramètre qui retient généralement toute l'attention est la décroissance exponentielle du signal, car sa longueur relative la rend responsable d'une très grande partie de la perte de résolution. Il a été montré au moyen de simulations que la décroissance exponentielle est principalement le résultat du mixage collisionnel [9].

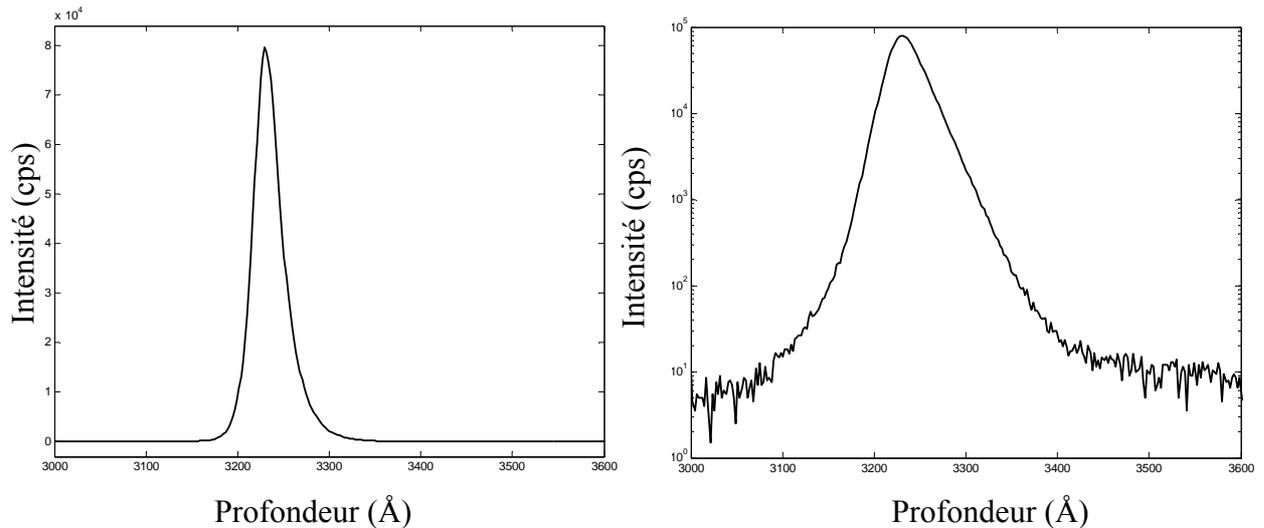


Figure (I-4) : Analyse d'un delta-dopage de bore dans du silicium à $2\text{keV} / \text{O}_2^+$

Représentation linéaire et logarithmique

Dans la littérature, les parties exponentielles sont associées aux constantes Λ_u et Λ_d , elles représentent la longueur nécessaire pour que le signal croisse ou décroisse d'une décade. Etant donné que cette courbe sera exploitée analytiquement, on préfère lui associer une fonction exponentielle en base e , donc de type $Ae^{\pm \frac{z}{\lambda}}$, et par suite on utilise plutôt $\lambda = \Lambda / 2.3$, qui représente donc la distance où le signal varie d'un facteur e .

De même, la mesure d'une marche de concentration descendante fait apparaître très nettement une décroissance exponentielle, qui gêne fortement l'analyse, car elle dissimule d'éventuels détails utiles. Les marches montantes sont moins dégradées par la partie composante exponentielle montante, beaucoup moins sévère.

➤ **Modélisation du comportement exponentiel décroissant**

La littérature compte quelques théories visant à prévoir la valeur de λ_d . Le modèle le plus simple du mixage est dû à Liau et al. [10]. Ils supposent que la redistribution atomique est restreinte à une zone d'épaisseur w sous la surface bombardée et y est instantanée. Considérons une couche infiniment fine δ de dose D d'une impureté dans une matrice, située à la profondeur z_δ . Cette couche est instantanément diluée sur une distance w lorsque la couche $z_\delta - w$ est sur le point d'être pulvérisée (donc à la surface de l'échantillon).

La pulvérisation de la couche supérieure d'épaisseur dz entraîne une diminution de la dose, qui devient alors $D_I = D \cdot (w-dz)/w$. Cette nouvelle dose est instantanément diluée sur une distance w : la concentration a alors diminué de $(w-dz)/w$.

À chaque épaisseur dz pulvérisée, la dose et donc la concentration locale sont divisées par $(w-dz)/w$; ceci explique le comportement exponentiel de la concentration [3]. Ce modèle ignore donc le front de montée et fait débiter la réponse à une couche δ par une décroissance exponentielle de paramètre w .

L'épaisseur de la zone mixée w est directement reliée à l'énergie primaire E_i , et w augmente avec E_i . Ce modèle du mixage collisionnel permet alors de relier la décroissance exponentielle λ_d à l'énergie primaire des ions incidents, et de se faire une idée assez claire de l'origine de ce paramètre.

On désigne par R_p la *profondeur moyenne de pénétration* des ions primaires dans la cible, qui est elle-même directement liée à l'épaisseur de la zone mixée w . le logiciel TRIM (TRansport of Ions in Matter), qui utilise la méthode de Monte Carlo, développé par Ziegler et al. [11], permet de calculer cette valeur en fonction de l'énergie d'impact E_i , de l'angle d'incidence θ , et de la nature des espèces mis en jeu. Elle est de la forme :

$$R_{p(\text{\AA})} = A E_i^n \cos \theta \quad (1.4)$$

n est compris entre 0.5 et 1, et A entre 20 et 60.

➤ **Observations expérimentales de λ_d**

Il a été observé expérimentalement que λ_d a un comportement globalement linéaire en fonction de la profondeur de pénétration des ions R_p . Petravic et al. [12] ont constaté cette

linéarité dans le cas du Ge dans le Si et du Si dans le GaAs, et cela quelque soit le type du faisceau primaire employé, alors que Meuris et al. [13] ainsi que Smirnov et al. [14] ont également constaté un comportement similaire dans le cas de l'arsenic et du bore dans le silicium.

Cependant la pente de la relation linéaire dépend fortement de la nature des ions primaires ainsi que des éléments constituant l'échantillon [12] [13]. L'utilisation d'un faisceau d'oxygène est par exemple bien connue pour générer des pentes λ_d plus faibles, grâce au phénomène de gonflement de la matrice ou swelling (incorporation des ions O_2^+ sous la surface), auquel nous consacrerons un paragraphe.

Petravic et al. ont également vérifié que λ_d est proportionnel à $\cos\theta$. L'ensemble des observations semble corroborer une loi de variation quadratique de λ_d^2 selon la relation [15] :

$$\lambda_d^2(E, \theta) = \lambda_{d(\text{int})}^2 + (AE^{0.5} \cos\theta)^2 \quad (1.5)$$

Où A est une constante d'ajustement et $\lambda_{d(\text{int})}$ est supposé être la pente intrinsèque du profil de concentration réel, ce qui suppose que ce dernier est de forme exponentielle.

Malgré cette loi empirique, la complexité des mécanismes physiques et leur méconnaissance ne permettent pas malheureusement de prévoir de manière exacte la valeur de λ_d .

3.1.2 Développement de rugosités

On désignera par «rugosités» le relief ou le phénomène conduisant à l'apparition d'un relief sur la surface d'un matériau initialement plan et soumis à un bombardement ionique [7], elle est induite sous deux formes :

a) Une rugosité induite par le faisceau primaire

La focalisation du faisceau primaire et son balayage sur la surface de l'échantillon peuvent dans certains cas influencer la forme finale du cratère creusé. La figure (1-5) représente différents cas possible :

- a- Le faisceau primaire se défocalise lorsqu'il se déplace le long du cratère, les bords sont donc pulvérisés moins efficacement que le centre. Cet effet est symétrique et conduit à un cratère qui s'arrondit sur les bords.
- b- L'angle d'incidence varie lors du balayage ce qui provoque une variation du taux de pulvérisation de l'échantillon. Cet effet est plus prononcé lorsque l'angle d'incidence est élevé (l'énergie faible dans le cas du CAMECA).
- c- Dans le cas où l'angle d'incidence est très élevé cela mène à l'existence d'un angle mort qui tend à masquer une partie du cratère de l'impact avec les ions primaires.
- d- Certains auteurs [2] ont rencontré d'autres cas où le balayage du faisceau primaire n'est pas tout à fait uniforme et s'attarde en fin du balayage, ce qui induit l'existence d'un fond plus accru sur les bords du cratère.

Les rugosités provoquées directement par le faisceau primaire sont de plus en plus prononcées avec l'augmentation du temps de manipulation. Certains auteurs [16, 17] considèrent que la perte de résolution dans ce cas (c'est-à-dire l'élargissement du profil mesuré Δz) est strictement linéaire avec la profondeur z ($\Delta z \propto z$).

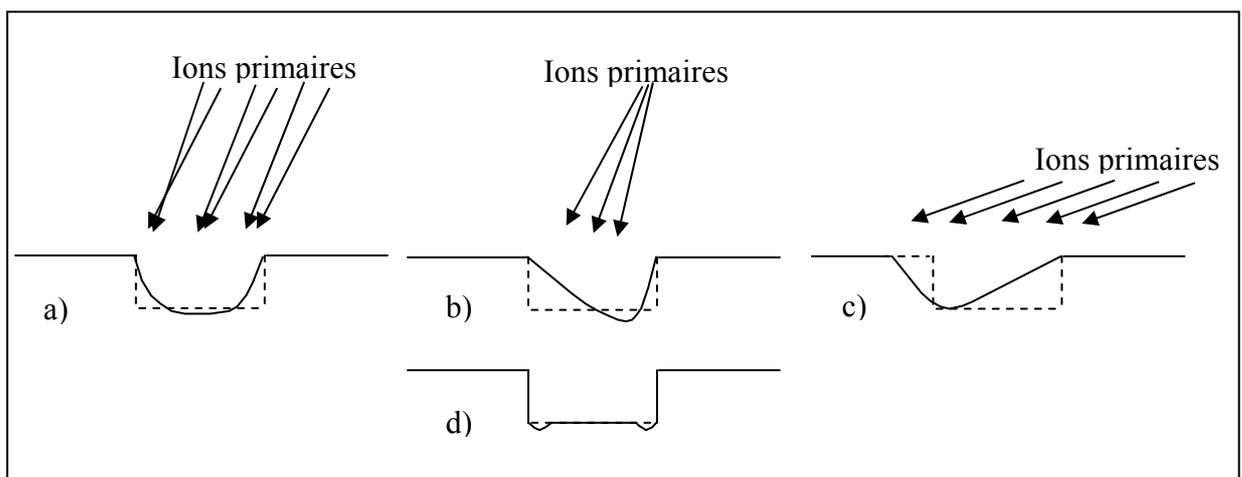


Figure (1-5) : Rugosité induite par le faisceau primaire : a) mauvaise focalisation du faisceau sur les bords du cratère b) variation de l'angle d'attaque avec le point de focalisation c) effet de l'inclinaison du faisceau (crater shadowing) d) effet d'un défaut de balayage du faisceau [17].

b) Une rugosité induite à la surface de l'échantillon

La rugosité induite par des problèmes de mauvaise focalisation ou balayage du faisceau primaire sur la surface de l'échantillon, est un problème purement instrumental qu'il faut le

régler à part. Ce cas particulier et le cas d'un matériau hétérogène soumis à un bombardement homogène, bien qu'ils conduisent au développement d'un certain relief de la surface bombardée n'entrent pas généralement dans la définition de la rugosité. On ne parlera de rugosité que lorsque, au début de l'érosion, la vitesse de pulvérisation est homogène sur la surface balayée par le faisceau primaire [7]. En effet, même lorsque le faisceau primaire est focalisé correctement, des problèmes de rugosité peuvent intervenir (dans certaines conditions d'analyses) toutes les fois que le taux de pulvérisation connaît une variation locale pendant l'analyse (y compris sur des échantillons dont la surface initiale est plane).

Dans certaines conditions expérimentales, des matériaux comme par exemple le GaAs ou le Si développent une texture de surface [2, 14]. La texture développée apparaît sous la forme d'ondulations ou des vagues perpendiculaires à un vecteur d'onde, alignées avec la direction du bombardement pour les incidences faibles et perpendiculaires à cette direction pour les incidences importantes, ainsi que sous la forme de cônes et pyramides [18]. La morphologie de la rugosité évolue en fonction de la profondeur d'érosion, de l'énergie d'impact et de l'angle d'incidence. Les ondulations changent de forme : presque sinusoïdale aux alentours de la profondeur critique de l'apparition de la rugosité d_c (d_c : profondeur de transition à partir de laquelle les rugosités commencent à se développer), et triangulaire pour des grandes profondeurs d'érosion [19].

L'apparition de la rugosité dépend du substrat des matériaux analysés, de la nature des ions primaires (Oxygène, Césium, Argon...) et des conditions de bombardement ionique.

À ce jour, la rugosité reste un phénomène mal compris et mal maîtrisé, et n'en finit pas de faire parler d'elle car son origine diffère d'un auteur à un autre. Dans le cas pratique, on cherche toujours les conditions expérimentales optimales, où la rugosité n'apparaît pas.

➤ *Mise en évidence de rugosités*

La mise en évidence de la rugosité peut se faire par différentes manières :

- *Observation directe* : plusieurs méthodes d'observation directe peuvent être employées pour décrire les *inhomogénéités* de surface induites par bombardement particulaire. Lorsque l'amplitude du relief ainsi générée est suffisante, la microscopie électronique par balayage (MEB) ou la microscopie électronique à transmission (TEM) sont parfaitement adéquates. Si, par contre, les dimensions caractéristiques de cette surface sont faibles, il est nécessaire d'utiliser une technique telle que la microscopie à force atomique (AFM) [19].

- *Mise en évidence in situ* : une première méthode consiste à suivre des signaux secondaires de matrice. En effet, plusieurs auteurs [17], [20] ont observé la corrélation entre le changement des signaux de la matrice et le développement de la rugosité au fond du cratère SIMS. Une autre méthode est d'analyser un profil constitué par des deltas-dopage, l'apparition de la rugosité entraîne une perte de la résolution en profondeur (élargissement des pics en fonction de la profondeur, diminution de la dynamique du signal). Sur ce même type d'échantillon, si la distance entre les deltas-dopage est connue, on peut s'intéresser à la vitesse d'érosion moyenne entre motifs. On suppose alors que la variation de cette vitesse est symptôme de rugosités.

➤ *Evaluation de rugosités*

La mesure de la rugosité est une tentative de chiffrer un état de surface. A partir de l'image topographique, il est possible d'évaluer la rugosité de l'échantillon. Pour cela, plusieurs paramètres sont utilisés [19] (figure 1-6).

- R_a : moyenne des hauteurs mesurées :

$$R_a = \frac{\sum z_i}{n} \quad (1.6)$$

- RMS (Root Mean Square) : valeur quadratique moyenne des hauteurs mesurées :

$$RMS = \sqrt{\frac{\sum z_i^2}{n}} \quad (1.7)$$

- R_{max} : différence de hauteur entre le point le plus haut et le point le plus bas de la section relativement au plan média, soit la hauteur maximale d'un pic de la section :

$$R_{max} = [Max(z(x, y) - Min(z(x, y)))] \quad (1.8)$$

- Rugosité 10 points R_z : représente la différence moyenne en hauteur entre les 5 plus hauts pics de la section et les 5 plus bas, relativement à la ligne médiane

- Période spectrale L_c : elle correspond à la densité spectrale de la section.

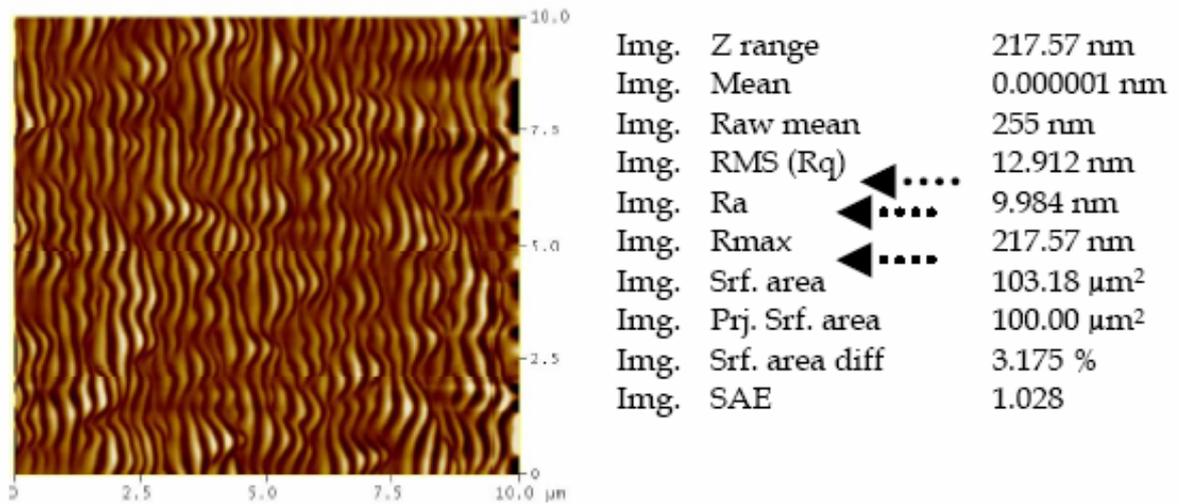


Figure (1-6) : Exemple de mesures de paramètres de la rugosité pour un cratère SIMS [19]. (Conditions expérimentales : Si (100), (10-4.5) keV, 42.4° et 2.8 μm de profondeur)
Image AFM en « mode tapping ».

Dans la littérature, le paramètre *RMS* est le plus souvent utilisé et cité. Il décrit correctement les surfaces homogènes (il est inadapté aux surfaces contenant des bosses ou des pics).

➤ *Conséquences de la rugosité sur la résolution en profondeur*

L'apparition des motifs, en faisant varier localement l'angle d'incidence du faisceau primaire sur la surface de l'échantillon, conduit d'une part à une dégradation importante de la résolution en profondeur et d'autre part à une baisse de la vitesse d'érosion. L'application d'une procédure de calibration en profondeur conventionnelle peut donc induire une erreur importante sur l'échelle des profondeurs.

➤ *Rotation de l'échantillon*

La technique de rotation d'échantillon pendant l'analyse a été présentée pour enlever l'effet nuisible de la rugosité au fond du cratère [21], [22]. Il a été montré, dans le cas du faisceau d'oxygène en incidence oblique, que les effets de la formation d'ondulations et la dégradation de la résolution en profondeur peut être évités en utilisant la rotation d'échantillon [23].

3.2. Effets de l'oxygène

L'utilisation intensive de l'oxygène comme source d'ions primaires trouve son origine dans l'amélioration de la résolution en profondeur. Voyons rapidement les conséquences diverses de l'utilisation de l'oxygène dans l'analyse SIMS.

3.2.1. La ségrégation de certaines espèces

Le bombardement du silicium par des ions O_2^+ s'accompagne d'une incorporation importante d'ions primaires dans la cible. Ceci conduit à une oxydation des couches atomiques proches de la surface de l'échantillon, et donc à la création d'une interface dynamique SiO_2/Si qui se déplace vers l'intérieur de l'échantillon au fur et à mesure de l'analyse. Certaines impuretés, tel que le cuivre [24], l'argent, ou encore l'arsenic [25], réagissent à ce phénomène et migrent vers l'interface SiO_2/Si , là où il n'y a plus d'oxygène. Ceci est le phénomène de ségrégation. Il entraîne une dégradation supplémentaire à celle due au mixage collisionnel : Les impuretés ségréguées fuient constamment vers l'intérieur, ce qui se traduit par des queues de profils très longues (λ_d prend des valeurs très élevées), et donc une résolution en profondeur très mauvaise.

La ségrégation est très dépendante de la quantité d'oxygène présent dans la couche mixée, et donc de l'angle d'incidence du faisceau primaire. Lorsqu'une couche de SiO_2 est formée à la surface de l'échantillon, la ségrégation sera très présente. Il est bien connu dans le cas du silicium, que son bombardement par un faisceau d'ions d'oxygène conduit à la formation d'une couche de SiO_2 stœchiométrique lorsque l'angle d'incidence n'excède pas une certaine valeur critique, qui suivant l'énergie des ions, varie entre 20° et 40° [26]. Choisir un angle d'incidence inférieur à la valeur critique favorise donc la ségrégation.

Le Germanium possède un comportement plutôt atypique face à l'incorporation d'oxygène dans la cible. Cet élément réagit à l'oxydation en se regroupant en couche de Ge pur puis en amas de Ge. Contrairement à la ségrégation, ce phénomène ne nuit pas forcément à la résolution en profondeur, tout du moins au niveau expérimental [27], et semble au contraire l'améliorer dans certaines conditions d'analyse. Cependant, ce comportement pose un problème au niveau théorique car une bonne valeur de λ_d (λ_d petit : comme on peut en obtenir en analysant du Ge dans Si), n'indique pas que le mixage collisionnel est peu influant, et que l'analyse SIMS par conséquent est bonne, puisque le mixage collisionnel n'est pas le seul phénomène responsable de la distribution du Germanium.

3.2.2. Le gonflement de la matrice : le swelling

Lorsque le problème de ségrégation ne se présente pas, les faisceaux réactifs ont la propriété d'améliorer la résolution en profondeur dans le silicium de manière très sensible. Dans ce cas, l'oxydation des premières couches atomiques de la matrice s'accompagne, d'un point de vue géométrique, d'un gonflement local de la matrice, lié à l'incorporation des ions primaires. Ce phénomène, apparemment transparent pour l'opérateur, est désigné en SIMS par le nom swelling. Il va en fait provoquer d'une part une augmentation très importante du taux d'ionisation des espèces à analyser, et d'autre part une dilution locale de toutes les espèces par la présence des atomes d'oxygène incorporés.

Des modèles théoriques, tente d'expliquer l'origine de l'amélioration de la résolution en profondeur par l'utilisation d'ions primaires O_2^+ , ont été développés [2], [13]. Le modèle proposé par Gautier [2], montre que le gain dû à l'incorporation de l'oxygène est essentiellement dû au fait que l'oxygène initialement absent au départ, s'incorpore dans la matrice et se trouve pulvérisé à la place du silicium initial. La quantité de silicium (donc la profondeur érodée) nécessaire à la pulvérisation d'une même quantité d'impureté est donc moins importante lorsque l'incorporation se produit que dans le cas contraire. L'approche développée par Gautier montre que le gain obtenu par le swelling est de 2.35, alors que Meuris et al trouvent un facteur de 2.26.

Les résultats expérimentaux sont de l'ordre de ces valeurs: Petravac et al [12] obtiennent des gains de 1.8 à 2.3 pour le Ge dans le Si. Meuris et al [13] obtiennent des données dispersées mais dont le gain est compris entre 1.4 et 2.2, avec une moyenne autour de 1.7 pour l'As dans le Si. Ils ont attribué cette faible valeur à un effet opposé à l'amélioration de la résolution, à savoir la ségrégation de l'arsenic en présence d'oxygène.

D'autre part, l'analyse d'une impureté dans une matrice de SiO_2 est équivalente en résolution, que ce soit avec des ions primaires O_2^+ ou des ions primaires non réactifs [13]. En effet, il n'y a pas d'incorporation d'oxygène dans la matrice, déjà saturée en oxygène dès le départ, et donc le phénomène de swelling n'a pas lieu.

On note que dans certains matériaux comme le GaSb, le gonflement s'accompagne d'une dégradation de la résolution en profondeur due à la polycristallisation du matériau [28].

3.2.3. L'utilisation du soufflage d'oxygène

L'analyse sous soufflage d'oxygène se diffère de l'analyse habituelle par l'existence d'une pression d'oxygène ($> 2.10^{-7}$ Torr) dans la chambre de l'échantillon, au lieu d'un vide poussé.

Parmi les avantages de cette technique on trouve que:

- Elle est bénéfique pour l'analyse des métaux propices à l'apparition d'une topographie de surface : l'oxydation locale de la surface de la cible évite la formation d'une rugosité tout au long de l'analyse et conduit à une amélioration spectaculaire de la résolution en profondeur. Ce résultat a été mis en évidence dans le cas de l'analyse d'un échantillon composé de couches alternées de Fer et de Titane [1]. L'utilité de l'utilisation du soufflage d'oxygène dans le cas de l'apparition de la rugosité a été aussi montrée dans le cas du Bore dans le Silicium. Fares [19] dans une étude faite à basse énergie en incidence oblique sous bombardement oxygène, sur un échantillon multi-delta dopage de Bore dans le Silicium, constate que la rugosité est beaucoup moins prononcée avec soufflage d'oxygène que dans le cas sans soufflage. De plus, l'utilisation du soufflage peut conduire même à une disparition de la rugosité dans le cas de l'analyse à : 0.5 keV 44°.
- La présence de l'oxygène permet de diminuer considérablement la longueur du régime transitoire de la mesure. Grâce à la pression d'oxygène, une couche oxydée apparaît pratiquement immédiatement à la surface, permettant d'entrer rapidement dans le régime permanent de l'analyse. En effet, sans la fuite d'oxygène, les premiers instants de bombardement par des ions réactifs s'accompagnent de la modification progressive de la composition de la couche mixée, période pendant laquelle les taux d'ionisation et de pulvérisation sont en perpétuel changement. Ce phénomène, très complexe et souvent mis de côté lors de l'interprétation, dure jusqu'à ce qu'un équilibre ait lieu entre les ions incorporés et les ions incidents. Ce régime devient problématique lorsque les structures à analyser sont enterrées un peu profondément, à quelques dizaines d'angströms de la surface.
- Elle conduit à une augmentation du taux d'ionisation des impuretés électropositives (comme le bore). Ce taux est peut être amélioré par l'utilisation de l'oxygène comme faisceau primaire. Cependant, à basse énergie et sans pression d'oxygène, le swelling devient insuffisant puisque la profondeur de pénétration des ions est faible et l'angle d'incidence est élevé. En utilisant le soufflage, l'incorporation est plus importante, ce qui augmente l'ionisation et améliore la résolution en profondeur.

Tous ces avantages assurent une meilleure reproductibilité des profils. Cependant, en ce qui concerne la résolution en profondeur dans le cas où seul le phénomène du mixage collisionnel est à prendre en compte, les résultats sont contradictoires pour le soufflage d'oxygène avec divers impuretés. A haute énergie, on obtient une λ_d meilleure ou comparable pour le bore ou le phosphore dans le silicium, mais elle apparaît moins bonne dans le cas de l'arsenic ou du gallium dans le silicium [29]. Par contre à basse énergie et à angle d'incidence rasante, le soufflage d'oxygène mène pour tous ces éléments à une baisse de la résolution en profondeur, sauf pour le bore.

Notons, maintenant, les inconvénients de l'utilisation d'un soufflage d'oxygène lors de l'analyse qui se résument à :

- La diminution de la vitesse d'érosion par un facteur de 2 à 4 (pour le silicium) [3], et donc l'allongement des temps de mesures.
- La difficulté de régler le faisceau primaire, en particulier à basse énergie où la focalisation est déjà difficile dans le vide [30].
- Si elle a lieu, la ségrégation est amplifiée par l'incorporation importante de l'oxygène.
- Effets mémoires (espèces préexistantes dans l'appareil) dus à l'atmosphère d'oxygène, notamment lors de l'analyse du Bore dans le Silicium [30]. L'effet mémoire réduit la dynamique du signal par addition de bruit de fond. Il se traduit dans le cas du Bore dans le Silicium par un signal de bore décroissant lors de l'analyse d'un échantillon qui n'est pas censé contenir cette impureté, mais analysé juste après un échantillon en contenant [2].

3.3. Evaluation de la résolution en profondeur

La résolution en profondeur est un paramètre essentiel de toute méthode d'analyse en profondeur. Elle est nécessaire pour quantifier l'aspect fidélité de la reproduction au profil réel.

Pour pouvoir comparer les performances de divers appareils et de divers expérimentateurs, on a besoin de pouvoir mettre des chiffres concrets sur la résolution en profondeur. Cela peut être fait de plusieurs façons, selon le processus de dégradation dont on veut rendre compte, ou bien selon le type d'échantillon analysé : on définira ainsi des résolutions adaptées à l'analyse d'interfaces, de couches minces rapprochées, ou de delta-dopages.

3.3.1. Evaluation par front montant ou descendant

Certains auteurs ont l'habitude de mesurer la résolution en profondeur directement à partir du profil mesuré d'une marche de concentration montante ou descendante supposée parfaitement abrupte. Dans ce cas, la résolution en profondeur Δz est couramment définie comme l'intervalle où l'intensité du signal chute de 84 % à 16% du signal maximum, pour un front descendant [31]. Ces bornes ne sont pas absolues : elles proviennent de l'hypothèse que l'interface possède après l'analyse par SIMS l'allure d'une fonction erreur, résultat de la convolution d'une interface abrupte avec une gaussienne d'écart-type σ . Dans ce cas, la distance $\Delta z_{16}^{84} = 2\sigma$ (figure 1-7).

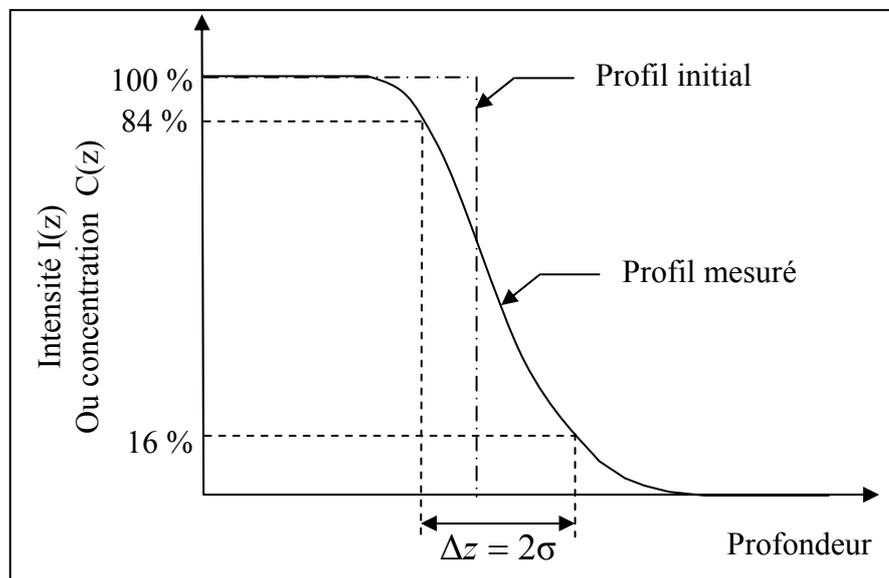


Figure (1-7) : Définition de la résolution en profondeur à partir d'une interface abrupte

D'autres critères en relation avec la fonction erreur sont aussi utilisés dans la littérature : (90%-10%) du signal maximum, ce qui correspond à $\Delta z_{10}^{90} = 2.564 \sigma$, ou (95%-5%) pour $\Delta z_5^{95} = 3.29\sigma$. Étant donné que la fonction de résolution n'est pas réellement gaussienne (comme nous allons le voir dans la suite de ce travail), le choix de l'un ou l'autre de ces critères n'a pas d'importance fondamentale.

En effet, la mesure d'une interface abrupte descendante par SIMS se traduit par une traînée exponentielle qui élimine la possibilité d'une fonction de résolution uniquement gaussienne. La résolution en profondeur peut alors être caractérisée par la distance nécessaire

pour que le signal chute d'une décade [32]. Comme l'acquisition des courants ioniques est souvent effectuée en échelle logarithmique, cette queue exponentielle se traduit par une droite dont la pente est facile à exprimer.

Dans certain cas, une interface montante possède elle aussi une partie exponentielle, mais son paramètre est souvent inférieur à celui du front descendant (Ceci est dû à une dissymétrie de la réponse impulsionnelle du système). Certains auteurs [14], [33] peu convaincus de la nature exponentielle du front de montée utilisent un paramètre noté δ qui mesure la distance entre 1% et 50% de l'intensité maximale.

3.3.2 Evaluation sur un delta-dopage

Un delta-dopage est par définition la plus petite structure géométrique qui puisse exister pour un couple impureté-matrice, c'est-à-dire une seule couche atomique contenant une impureté, à l'intérieur d'une matrice. La mesure d'un delta-dopage donne donc directement une idée de la plus petite largeur qu'il est possible d'obtenir lors de l'analyse SIMS. La courbe obtenue peut alors être considérée comme le résultat de la plus petite structure mesurable, et permet des comparaisons directes par l'un de ses paramètres caractéristiques.

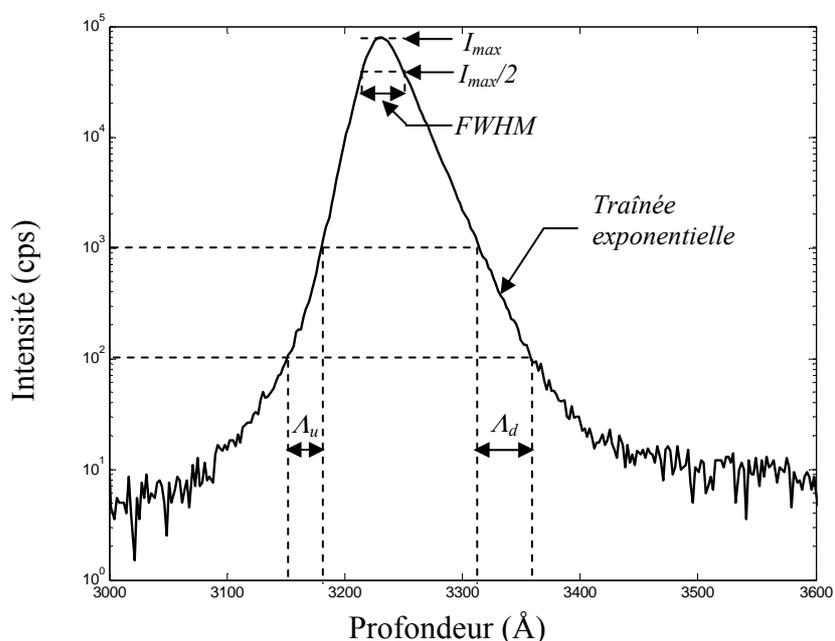


Figure (I-8) : Evaluation de la résolution en profondeur à partir du profil mesuré d'un delta-dopage.

L'élaboration de telles couches n'est pas toujours possible dans les semi-conducteurs. Les technologies actuelles permettent, à partir de certains couples impureté-matrice seulement, d'élaborer de telles couches : par exemple B, Ge, As, dans Si ou Si dans GaAs. Dans le cas où son élaboration est possible, la particularité d'un delta-dopage est de donner directement, par sa mesure, la réponse impulsionnelle du système de mesure.

➤ *Paramètres exponentiels et partie arrondie*

Comme le montre la figure (1-8), la mesure d'un delta-dopage par SIMS conduit à une courbe asymétrique possédant un front montant de montée rapide et une traîne exponentielle décroissante beaucoup moins rapide. On se focalise généralement sur la pente exponentielle décroissante, puisque c'est elle qui reflète en grande partie la perte de résolution en profondeur due au mixage collisionnel. On peut la caractériser comme dans le cas des interfaces par la distance nécessaire pour que le signal décroisse d'une décade : Λ_d ou d'un facteur e : λ_d ($\Lambda_d = 2.3 \lambda_d$).

De nombreuses études de résolution en profondeur à partir de delta-dopage ou de marches de concentration descendantes assimilent la résolution en profondeur obtenue au paramètre λ_d . Ceci est justifié par la prépondérance du mixage collisionnel dans la déformation des profils en profondeur, ce qui suppose que la dégradation est entièrement décrite par le mixage collisionnel.

Lorsque le mixage collisionnel n'est pas prépondérant, par exemple lors d'une analyse à basse énergie, la seule donnée de λ_d devient insuffisante pour caractériser la résolution, car la partie montante du signal et la partie arrondie qui caractérise le sommet du profil deviennent non négligeable.

➤ *Largeur à mi-hauteur*

Ce type de courbes peut être aussi caractérisé par la largeur à mi-hauteur FWHM (pour « Full Width at Half Maximum »). Ce paramètre est simple à obtenir et assez intuitif, mais il faut l'utiliser avec précaution étant donné la nature asymétrique de la courbe. Dans le cas d'une gaussienne, la FWHM est donnée par la relation :

$$\text{FWHM} = 2.335 \sigma \quad (1.9)$$

Où σ représente l'écart type de la gaussienne.

➤ *Moments*

S'il existe une forme analytique qui s'ajuste de manière satisfaisante à la mesure, une manière précise d'évaluer la résolution en profondeur est de calculer le *moment centré d'ordre 2* de cette forme analytique (dispersion de la fonction autour de sa valeur moyenne). L'avantage de ce moment est son objectivité, c'est-à-dire le fait qu'il prenne en compte la totalité de la courbe, ce qui n'est pas le cas ni pour la FWHM, ni pour les paramètres exponentiels.

Soit $f(z)$ la fonction représentant analytiquement le delta-dopage mesuré. Le moment d'ordre n de $f(z)$ est défini par :

$$\mu_n = \int_{-\infty}^{+\infty} z^n f(z) dz \quad (1-10)$$

Le moment d'ordre 0 (μ_0 : qui est aussi l'intégrale de $f(z)$) représente la surface sous la courbe de $f(z)$, ce qui correspond à la dose totale contenue dans la couche analysée.

Le moment d'ordre 1 (μ_1 : représente la moyenne de $f(z)$), notée $\langle z \rangle$ ou \bar{z} . On définit à partir de \bar{z} un nouveau moment, le moment centré d'ordre n ($n \geq 2$), par :

$$\mu_n^c = \int_{-\infty}^{+\infty} (z - \bar{z})^n f(z) dz \quad (1-11)$$

Le moment centré d'ordre 2, ou variance, est donc donné par :

$$\mu_2^c = \int_{-\infty}^{+\infty} (z - \bar{z})^2 f(z) dz \quad (1-12)$$

Si $f(z)$ est une gaussienne, son écart-type $\sigma = \sqrt{\mu_2^c}$.

Les moments d'ordre supérieurs peuvent également être utilisés pour caractériser la forme d'une distribution. Ces indicateurs n'ont de sens que dans le cas d'une distribution

unimodale, c'est-à-dire avec un seul maximum. μ_3^c reflète l'asymétrie de la courbe et μ_4^c son aplatissement.

3.3.3 Séparabilité de deux deltas-dopage

La question de la résolution en profondeur peut également se poser en termes de limite de séparation : si l'on considère deux couches très fines, de quelle distance d doivent-elles être séparées pour qu'elles soient détectables par la mesure?

En effet, lorsque deux deltas dopage très proches sont analysés par SIMS, les profils en profondeur de ces deltas dopage s'interpénètrent. Ceci conduit à un profil en profondeur possédant deux maxima séparés par un minimum local, comme il est montré sur la figure (1-9). Dans le cas d'une grande superposition, il en résulte une courbe simple en forme de cloche (avec un seul maximum), plus large qu'une courbe représentant la mesure d'un seul delta dopage.

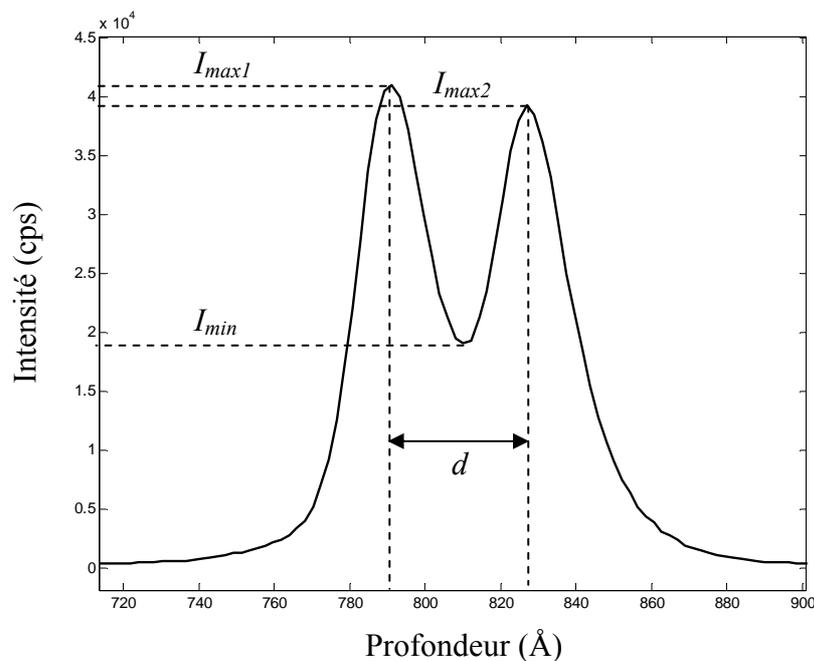


Figure (1-9) : Evaluation de la résolution en profondeur à partir de la mesure de deux couches fines très proche.

Cela peut être quantifié par la définition d'une contraste $C_{\%}$ tel que:

$$C_{\%} = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max}} * 100 \quad (1-13)$$

$C_{\%}$ a bien sûr une variation proportionnelle avec d . La résolution en profondeur est peut être assimilée à une distance critique d_0 , tel que d_0 est la plus petite profondeur qui permet d'obtenir une contraste $C_{\%}$ non nulle ($C_{\%} = 0\%$ correspondant au cas où les deux couches ne sont pas distinguées par la mesure).

4. POSITON DU PROBLEME : AMELIORATION DE LA RESOLUTION EN PROFONDEUR

L'application de l'analyse SIMS pour la réalisation des profils de concentration suivant la profondeur, dans le domaine des matériaux et des composants pour l'électronique moderne, est incontournable. La présence de dopants dans ces matériaux requiert une sensibilité d'analyse que peu de techniques à part l'analyse par SIMS peuvent apporter.

Cependant, plusieurs raisons motivent l'amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse :

- Comme nous avons déjà vu, le profil en profondeur mesuré par SIMS n'est pas une image fidèle du profil original (profil dit « réel ») existant réellement dans l'échantillon avant la pulvérisation. La technique est gouvernée par des phénomènes physiques (principalement le mixage collisionnel) causent l'élargissement des profils.
- La réduction continue des dimensions des composants pour la microélectronique silicium s'accompagne d'une diminution des épaisseurs des couches actives, qui sont maintenant de quelques nanomètres, et impose une amélioration continue des performances des techniques d'analyse.

La figure (1-8) nous donne une idée claire sur l'élargissement des profils mesurés causée par l'analyse : Un delta-dopage, qui est supposé constitué par une seule couche atomique (la distance inter-atomique est d'environ 1.25 Å), s'étale après son mesure sur une très grande profondeur.

Cette déformation est bien sûr inévitable en SIMS. Si on prend la caractérisation des jonctions comme un exemple : il apparait très clair que l'élargissement des profils conduit à une grande influence sur la détermination précise de la profondeur des jonctions p-n, comme il est schématisé sur la figure (1-10). L'amélioration de la résolution en profondeur est donc un passage obligé pour l'analyse de dopants dans les jonctions abruptes.

La résolution en profondeur est principalement liée à la profondeur de la zone mixée. En baissant l'énergie d'impact des ions primaires, la profondeur de cette zone est réduite, et la

résolution de l'analyse SIMS s'améliore, mais reste parfois insuffisante. De plus, la diminution de l'énergie d'impact conduit à l'allongement des temps de mesures, et dans certaines conditions à l'apparition du phénomène de la rugosité, qui peut dégrader fortement la résolution en profondeur. On note de plus que les limites physiques atteintes par l'analyse SIMS rendent difficilement envisageables d'autres améliorations techniques de l'appareillage sans que le coût devienne exorbitant. Dans ces conditions, il apparaît que l'utilisation des techniques de traitement du signal (telle que la déconvolution) pour améliorer la résolution en profondeur de l'analyse SIMS est plus que nécessaire. Ceci est l'objectif de notre étude.

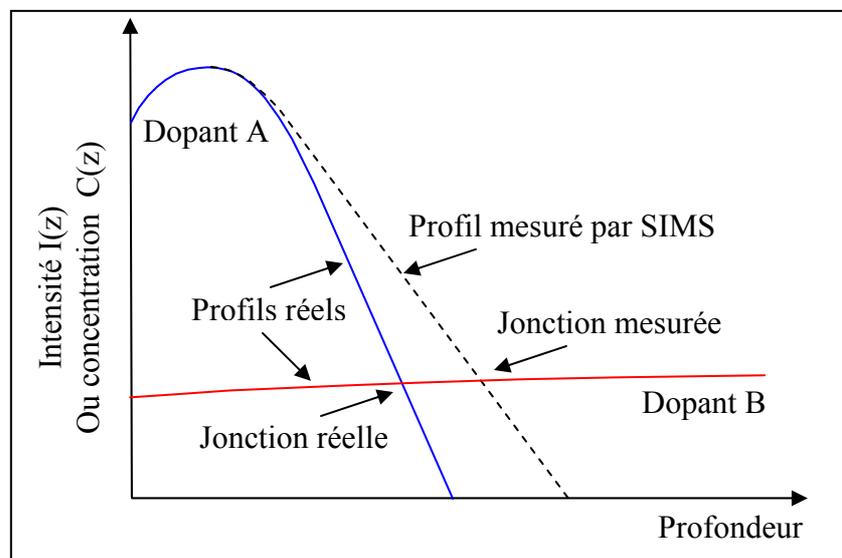


Figure (1-10) : Schéma montrant l'erreur introduite par l'analyse SIMS dans la mesure de la profondeur d'une jonction p-n. La profondeur réelle de la jonction est moins profonde que la profondeur déterminée par SIMS.

5. CONCLUSION

Dans ce premier chapitre, nous avons exposé des généralités concernant l'analyse SIMS, nous nous sommes plus particulièrement penchés sur la résolution en profondeur de la technique. Nous avons donc :

- Passé en revue les mécanismes essentiels qui influent sur la résolution en profondeur. Les phénomènes dégradant la résolution en profondeur ont pour effet de lisser ou de masquer les variations rapides de concentrations présentes dans l'échantillon. Le profil réel se transforme en un profil mesuré en apparence élargi. Ce phénomène est en particulier visible sur les

interfaces abruptes. Si les phénomènes de rugosité ou de ségrégation peuvent être relativement bien corrigés par des moyens instrumentaux adéquats, le mixage collisionnel sera toujours présent puisqu'il permet la mesure en même temps qu'il la dégrade.

- Donné des généralités concernant le phénomène de la rugosité qui apparaît sous deux formes : une rugosité induite par le faisceau primaire et une rugosité induite à la surface de l'échantillon.
- Montré l'effet de l'utilisation de l'oxygène comme source d'ions primaires en analyse SIMS, en décrivant la ségrégation responsable de la dégradation de la résolution en profondeur et le phénomène de swelling, responsable d'une amélioration de la résolution en profondeur.
- Montré les avantages et les inconvénients d'effectuer les analyses sous soufflage d'oxygène au lieu d'un vide poussé.
- Présenté les différentes manières utilisées pour évaluer la résolution en profondeur, et montré la nécessité de l'amélioration de celle-ci pour les besoins de la microélectronique moderne.

Chapitre2

Techniques de déconvolution développés relatives aux profils SIMS

1. INTRODUCTION

Nous avons montré dans le chapitre précédent la nécessité de l'utilisation des techniques de traitement numérique pour l'amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS. Parmi les techniques de traitement du signal les plus utilisées dans de nombreuses disciplines, La déconvolution. Elle est très utilisée en particulier dans le domaine des images numériques (imagerie médicale, photos astronomique...). Elle peut s'appliquer à tout signal ayant été dégradé par un dispositif linéaire et invariant. Elle s'agit de retrouver le signal ou l'image originale (ou plutôt d'en faire une estimation) à partir des données observées et de la réponse impulsionnelle.

La déconvolution se propose donc pour restaurer les informations perdues lors de la mesure. Nous verrons qu'elle permet d'obtenir dans certains cas une amélioration notable de la résolution en profondeur. Néanmoins, elle reste une opération délicate, qu'il ne faut pas mettre en œuvre sans précaution. Il est nécessaire de bien contrôler le processus de restauration et d'en comprendre les mécanismes, sous peine d'obtenir des résultats aberrants. Une déconvolution incontrôlée peut générer des aberrations, comme des structures inexistantes dans la réalité ou des concentrations négatives.

Il n'est bien sûr pas souhaitable d'effectuer un calcul numérique sur une mauvaise mesure. Pour un bon résultat, la fiabilité et la qualité de la mesure de départ reste une condition essentielle. L'amélioration de l'instrumentation reste une voie privilégiée vers l'amélioration ultime de la résolution en profondeur. La déconvolution vient s'ajouter aux performances instrumentales et permet de tirer le maximum de résolution d'un profil expérimental. La déconvolution peut être donc considérée comme le dernier maillon dans le processus d'obtention de la résolution en profondeur ultime de l'analyse SIMS.

Dans ce chapitre, nous allons exposer les principes de la déconvolution, nous nous attacherons en particulier à son application en SIMS. Cela nous amènera à définir la réponse impulsionnelle du système d'analyse, appelé fonction de résolution en profondeur, où depth resolution function (DRF). Nous allons passer en revue différentes méthodes de déconvolution, et nous terminerons par la présentation d'un nouvel algorithme dans le domaine SIMS.

2. RAPPELS

Avant d'entrer dans le vif de sujet, donnons quelques notions. Ils seront très utiles dans la suite.

2.1 Nature des signaux SIMS mesurés

Lors de l'acquisition d'un profil en profondeur, les ions secondaires sont émis de façon discontinue. C'est l'électronique de commande qui gère le comptage des ions secondaires frappant le détecteur, et cela est fait de manière discrète dans le temps. Les signaux SIMS sont donc des signaux discrets et de durée finie. Dans ce cas, la transformation d'un signal continu en signal discret, c'est-à-dire le problème d'échantillonnage, ne se pose pas. Les signaux SIMS seront donc traités comme des signaux discrets leur équivalent continu n'existe pas.

2.2 Domaine temporel discret

Une fonction à temps discret $f = [f_0, f_1, \dots, f_{N-1}]$ est notée comme étant une suite de points image d'une autre suite de points $t = [t_0, t_1, \dots, t_{N-1}]$ espacés d'un même intervalle, le pas d'échantillonnage T_e . On notera $f_e = 1/T_e$ la fréquence d'échantillonnage. Les théories formulées dans le domaine continu sont applicables dans le domaine discret, moyennant quelques précautions.

2.3 La transformée de Fourier discrète (TFD)

La transformée de Fourier discrète (TFD) est un outil mathématique de traitement du signal numérique, qui est l'équivalent discret de la transformée de Fourier continue qui est utilisée pour le traitement du signal analogique. En pratique, la TFD est généralement calculée par l'algorithme de Cooley et Tukey dit FFT (Fast Fourier Transform) [1], ceci permet un gain important dans les temps de calcul. La TFD d'un signal discret, périodique de période N , est définie par :

$$X(k) = \sum_{n=0}^{N-1} x(n) e^{-j2\pi \frac{k}{N}n} \quad K = 0, 1, \dots, N-1 \quad (2.1)$$

Notons que le FFT nécessite que le nombre de points de vecteur soit une puissance de 2. Si ceci n'est pas le cas pour un tel vecteur, il faut le prolonger par une suite de zéro jusqu'à ce que le nombre de point atteigne la puissance de 2 immédiatement supérieure.

2.4 Relations utiles

Soient A et B deux matrices quelconques, et x un vecteur quelconque.

- **Produit scalaire** : Dans le domaine discret, le produit scalaire de deux vecteurs x et y peut se représenter de plusieurs manières :

$$\langle x, y \rangle = \langle x / y \rangle = x^T y \quad (2.2)$$

où x^T est le vecteur transposé de x .

- **Norme** : La norme d'un vecteur x pourra s'exprimer au moyen d'un produit scalaire :

$$\|x\|^2 = \langle x / x \rangle = x^T x \quad (2.3)$$

De la même façon:

$$\|Ax\|^2 = \langle Ax / Ax \rangle = (Ax)^T (Ax) = x^T (A^T A) x \quad (2.4)$$

- **Transposition** $(AB)^T = B^T A^T \quad (2.5)$

- **Dérivation** $\frac{d}{dx}(Ax) = A^T \quad (2.6)$

$$\frac{d}{dx}(x^T x) = 2x \quad (2.7)$$

$$\frac{d}{dx}(x^T Ax) = Ax + A^T x \quad (2.8)$$

3. MODELISATION D'UNE ANALYSE SIMS PAR CONVOLUTION

Dans des conditions où effets de matrice et non-linéarité de la profondeur érodée avec le temps de pulvérisation sont inexistants (les deux effets sont typiquement observés lors du passage à travers une interface inhomogène), l'érosion ionique peut être considéré comme un système linéaire ; en effet, si on double le profil d'entrée, la réponse en sortie doublera tout en conservant la même forme. De même, la réponse à une somme de profils d'entrée sera égale à la superposition des réponses des profils d'entrée prises séparément [2].

Dans le cas de la mesure d'une impureté dans une matrice (c'est-à-dire dans le cas « dilué »), il est raisonnable d'admettre que le processus de mesure par SIMS est linéaire. En

effet, dans ce cas, la vitesse d'érosion et le taux d'ionisation sont avant tout contrôlés par les atomes de la matrice. Cependant, cette linéarité peut être perdue dans le cas de l'analyse d'éléments majeurs, à cause des effets de matrice.

Les phénomènes qui participent à la dégradation de la résolution en profondeur (mixage collisionnel, la profondeur d'échappement des ions secondaires, la rugosité initiale de la surface de l'échantillon ... etc) sont supposés linéaires et indépendants les uns des autres.

La linéarité du processus autorise la description de l'analyse par une intégrale de convolution :

$$y(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(z, z')x(z') dz' + v(z) \quad (2.9)$$

Où z est la profondeur. $h(z, z')$ est la réponse impulsionnelle du système dite « fonction de résolution en profondeur » dans le cas d'analyse SIMS. $x(z)$: Le signal d'entrée recherché (profil réel). $y(z)$: Le signal de sortie observable (profil mesuré). $v(z)$ représente le bruit qui s'ajoute aléatoirement au signal.

Dans l'équation (2.9) la réponse impulsionnelle $h(z, z')$ n'est pas supposée invariante avec la profondeur, ce qui justifie la dépendance de h avec z et z' . En effet, si nous nous plaçons dans le cas le plus général, la résolution en profondeur est susceptible de varier avec la profondeur, comme dans le cas de l'apparition d'une rugosité. Dans ce dernier cas, la réponse impulsionnelle n'est pas invariante, ce qui entraîne une sérieuse complication du problème de la restauration du profil original. Ce cas particulier sera étudié dans les chapitres 3 et 4.

Dans le cas où les phénomènes responsables de la variation de la fonction de résolution en profondeur n'interviennent pas (Réponse impulsionnelle invariante), l'équation (2.9) s'écrit plus simplement :

$$y(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(z-z')x(z') dz' + v(z) \quad (2.10)$$

Cette équation est dite "équation de convolution bruitée". Nous avons vu que les signaux SIMS sont des signaux discrets. Il est plus convenable de l'exprimer par:

$$y[n] = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} x[i]h[n-i] + v[n] = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} h[i]x[n-i] + v[n] \quad (2.11)$$

On peut la noter plus simplement par :

$$y(n) = h(n) * x(n) + v(n) \quad (2.12)$$

La réponse impulsionnelle est par définition normée :

$$\sum_{i=-\infty}^{+\infty} h(i) = 1 \quad (2.13)$$

Le signal de sortie doit donc posséder la même aire que le signal d'entrée.

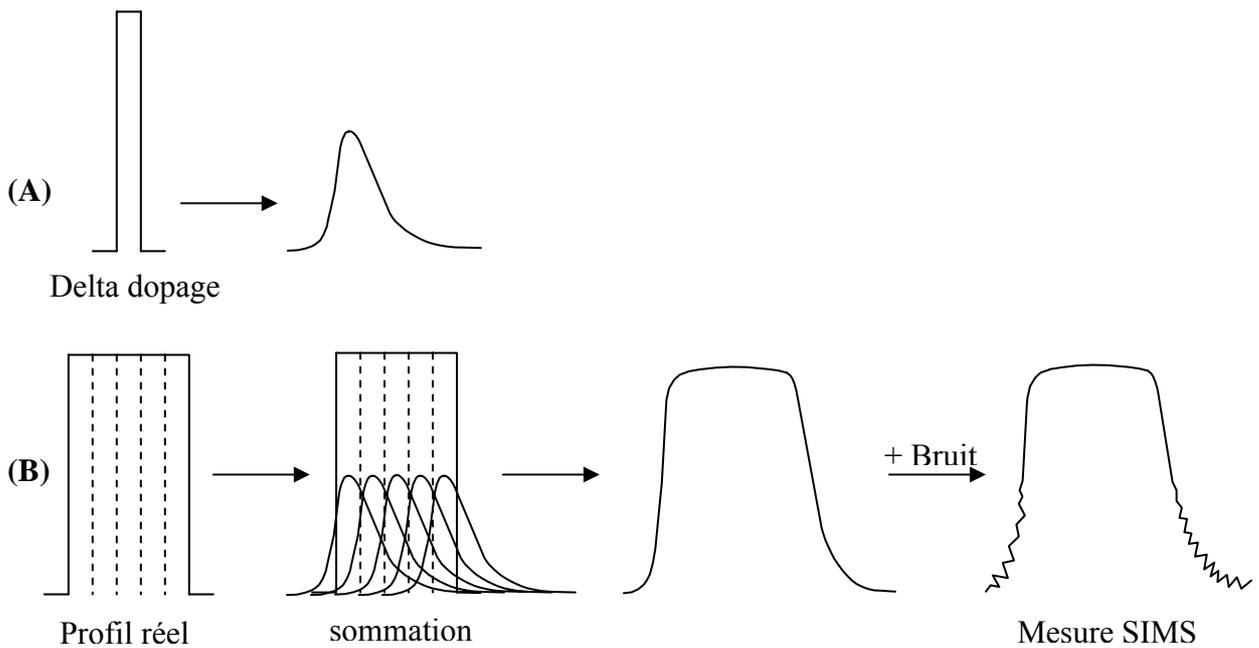


Figure (2-1) : Schéma montrant l'élargissement des profils après leur analyse par SIMS
 A) delta dopage B) profil rectangulaire (créneau).

L'élargissement des profils analysés par SIMS, et donc la dégradation de la résolution en profondeur, peut être expliqué à travers une opération de convolution entre le profil réel et la réponse impulsionnelle du système de la mesure. La figure (2-1) illustre ceci en supposant le cas

d'un profil créneau. La réponse impulsionnelle de l'analyse SIMS est obtenu à partir de la mesure d'un delta dopage (nous reviendrons sur le sujet en détail). On sait que, l'analyse SIMS d'un delta dopage conduit à son élargissement (figure (2-1A)). Considérant le créneau comme un ensemble des deltas-dopage (figure (2-1B)), chaque delta dopage donnera naissance à une réponse équivalente à celle donné par le delta dopage de la figure (2-1A), et le profil final sera égal à la superposition de ces réponses. Il en résulte un profil élargit de manière très significative sur ses fronts de montée et de descente. En particulier, le profil adopte le comportement exponentiel de la DRF de part est d'autre du profil. De plus, la symétrie initiale des interfaces est effacée.

3.1 Longueur des signaux, convolution linéaire et convolution circulaire

D'un point de vue pratique, on dispose lors d'une simulation sur ordinateur ou lors de l'acquisition expérimentale de signaux (profils) d'étendue finie. Il est donc inutile de définir le produit de convolution sur $]-\infty ; +\infty[$ comme dans l'équation (2.11). Il suffit d'effectuer ce produit sur le nombre de points N_x du vecteur x , ou sur N_h le nombre de points de la réponse impulsionnelle h (Le produit de convolution est commutatif) :

$$y[n] = \sum_{i=0}^{N_x-1} x[i]h[n-i] + v[n] = \sum_{i=0}^{N_h-1} h[i]x[n-i] + v[n] \quad (2.14)$$

En utilisant cette équation pour calculer le produit de convolution, on obtient un signal de sortie $y[n]$ plus long que les deux signaux qui le composent :

$$N_y = N_x + N_h - 1 \quad (2.15)$$

Cette convolution est appelée *convolution linéaire*. Si on souhaite travailler avec des signaux qui ne s'allongent pas lors de la convolution, on peut effectuer ce qu'on appelle une *convolution circulaire*, à l'origine employée pour les signaux périodiques. Afin que le résultat de la convolution circulaire soit le même que celui donné par la convolution linéaire, il suffit de prolonger chacun des vecteurs $x[n]$ et $h[n]$ en lui ajoutant des zéros, de manière à ce que la longueur de chacun soit égale à $N_x + N_h - 1$.

3.2 Equation de convolution dans l'espace matriciel

L'équation intégrale de convolution peut être mise sous forme d'une équation matrices-vecteurs :

$$y = \mathbf{H}x + b \quad (2.16)$$

\mathbf{H} est un opérateur linéaire. Ceci permet de le représenter par une matrice dite *matrice de Toeplitz*. Les matrices seront notées dans la suite de ce travail par une majuscule en gras et non italique.

➤ Les matrices de Toeplitz

La matrice \mathbf{H} doit être construite à partir de la réponse impulsionnelle h de telle sorte que le produit de la ligne i de la matrice \mathbf{H} par le vecteur x conduit à $y[i]$. Il s'ensuit que les éléments $h[i, j]$ de \mathbf{H} sont de la forme $h[i - j]$ avec $h[i - j] = 0$ si j est plus grand que i . Dans le cas de la convolution linéaire, la réponse impulsionnelle h est définie sur N_h points, la matrice de Toeplitz de h s'écrit alors:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} h[0] & 0 & 0 & \dots & 0 \\ h[1] & h[0] & 0 & \dots & 0 \\ \dots & h[1] & h[0] & 0 & \dots \\ h[N_h - 1] & \dots & h[1] & h[0] & 0 \\ 0 & h[N_h - 1] & \dots & h[1] & h[0] \\ 0 & 0 & h[N_h - 1] & \dots & h[1] \\ 0 & 0 & 0 & h[N_h - 1] & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h[N_h - 1] \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

(N_y lignes, N_x colonnes : matrice rectangulaire)

Dans le cas de la convolution circulaire, on rappelle que le vecteur x et le vecteur h sont remplis de zéros jusqu'à atteindre la taille du vecteur y . la matrice de Toeplitz s'écrit donc :

$$\mathbf{H}_c = \begin{bmatrix} h[0] & 0 & 0 & \dots & 0 & h[N_h - 1] & \dots & h[1] \\ h[1] & h[0] & 0 & \dots & 0 & 0 & h[N_h - 1] & \dots \\ \dots & h[1] & h[0] & 0 & \dots & 0 & 0 & h[N_h - 1] \\ h[N_h - 1] & \dots & h[1] & h[0] & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h[N_h - 1] & \dots & h[1] & h[0] & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h[N_h - 1] & \dots & h[1] & h[0] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h[N_h - 1] & \dots & h[1] & h[0] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h[N_h - 1] & \dots & h[1] & h[0] \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

(N_y lignes, N_y colonnes : matrice carrée)

3.3 Equation de convolution dans l'espace fréquentiel

En passant par une transformée de Fourier, la convolution devient un produit, et l'équation de déconvolution devient :

$$Y = HX + B \quad (2.19)$$

avec H, X, B représentés les transformées de Fourier de h, x , et b respectivement.

3.4 La réponse impulsionnelle en SIMS (fonction de résolution en profondeur)

La réponse impulsionnelle d'un système est la sortie de ce dernier lorsque l'entrée est une impulsion de Dirac. Le Dirac est une fonction théorique d'épaisseur nulle, qui prend une valeur infinie en 0, et la valeur zéro ailleurs, et dont l'intégrale sur \mathbf{R} est égale à 1. Dans le domaine de la physique, un tel signal n'existe pas, et il est remplacé par un signal fini, nul au quasi nul sur tout domaine de définition, sauf sur un intervalle très petit autour de 0, et dont l'intégrale est aussi égale à 1 (*pseudo-Dirac*). L'impulsion de Dirac est l'élément neutre de la convolution.

Dans le cas de l'analyse SIMS, il ne s'agit pas de signal électrique ou optique, mais de successions de plans atomiques. La plus petite structure existante sera alors une couche atomique, que l'on peut assimiler à un créneau d'épaisseur égal à la distance moyenne interatomique. La réponse à ce *pseudo-Dirac* est donc la réponse impulsionnelle de l'analyse. Elle est appelée *Fonction de Résolution en Profondeur*, ou DRF, pour *Depth Resolution Function*.

3.4.1 Spécificité de la fonction de résolution

La DRF n'est pas simplement fonction de la l'appareil, et on ne peut pas la fixer une fois pour toutes pour différentes mesures. Ceci est pour plusieurs raisons:

- Elle est spécifique à un élément donné, dans une matrice donnée : Chaque couple matrice-élément produit sa propre DRF.
- Elle est dépendante de tous les paramètres expérimentaux influençant la mesure : énergie des ions primaires, angle d'incidence...etc.
- Il n'est pas impossible que les conditions expérimentales soient reproductibles d'un instrument à l'autre. Cependant, la transposition de la DRF d'un appareil à secteur magnétique vers un appareil à quadrupole est encore assez hypothétique [3].

3.4.2 Modélisation de la DRF

Pourquoi une modélisation de la DRF ?

Il y a plusieurs avantages à caractériser la DRF par une fonction analytique [3, 4] :

- Immunité au bruit: En SIMS, on considère que le bruit n'est pas propre à la DRF mais vient s'y ajouter de manière aléatoire. Le fittage effectue un lissage local de la courbe représentant la DRF et permet de supprimer le bruit qui s'ajoute à la fonction de résolution lors de la mesure. De ce fait, les calculs seront plus justes et plus précis lorsque une forme analytique de la DRF est utilisée, et non la DRF telle qu'elle est mesurée. En particulier, L'existence d'une forme analytique permet de donner des chiffres précis pour la résolution en profondeur, grâce au moment centré d'ordre 2 dont nous avons déjà parlé. De plus, la suppression du bruit de la fonction de résolution mesurée améliore les performances de la déconvolution.
- Adaptation du pas d'échantillonnage de la DRF pour les besoins des traitements numériques: lors de la mesure SIMS, l'appareil effectue des acquisitions régulièrement espacées d'un intervalle de temps dt . Ce dernier correspond à une profondeur érodée dz . à dt fixé, dz pourra varier de plusieurs fois sa valeur, selon la vitesse d'érosion de l'échantillon (en particulier en fonction de l'intensité ionique primaire). la déconvolution d'un profil quelconque par la DRF nécessite que ce profil et la DRF ait été échantillonnés avec le même pas d'échantillonnage. Cependant, si la mesure de la DRF est effectuée sur un delta-dopage situé sur un autre échantillon, il est possible que le pas d'échantillonnage soit différent de celui du profil à traiter (à cause de la variation de la vitesse d'érosion). La déconvolution

dans ce cas est impossible, à moins d'effectuer un ré-échantillonnage, qui peut être source d'imprécision. Disposer d'une forme analytique de la DRF, dans ce cas, permet d'échantillonner cette dernière avec le pas d'échantillonnage voulue, afin de l'adapter au profil à déconvoluer.

- Amélioration de la dynamique du signal : Il est possible en utilisant la forme analytique de la DRF de simuler une dynamique plus étendue que les données expérimentales de façon à améliorer les performances de la déconvolution.
- Abaques de DRF : disposant de nombreuses mesures de la DRF dans des conditions expérimentales différentes, il est possible de tracer l'évolution des paramètres de fittage en fonction des conditions expérimentales. On peut obtenir donc, des abaques de fonction de résolution permettant de prévoir ses paramètres lorsque les conditions expérimentales se trouvent être différentes de celles pour lesquelles la DRF a été mesurée. Ceci nous permet d'effectuer la déconvolution sans avoir à faire une mesure de delta-dopage.
- Calculs de profils : avec une fonction de fittage bien choisie pour la DRF, il est possible de prévoir analytiquement le profil SIMS d'une structure particulière supposée connue, comme les fonctions gaussiennes.

Choix d'une forme analytique pour la DRF

Le fittage de la DRF par une forme analytique est un sujet de discussion assez débattu par différents auteurs, et plusieurs formes, plus ou moins complexe, sont proposées dans la littérature. Dans le cas pratique, il est très intéressant de caractériser la DRF par une formule simple, avec des paramètres qui ont une relation directe avec les phénomènes physiques.

Parmi les approches développées pour la description analytique de la DRF, deux expressions ont connus une large utilisation dans le SIMS dans ces dernières années, l'une proposée par Hofmann [5] appelée modèle MRI, et l'autre par Dowsett et al. [6].

a) Modèle MRI

Le modèle MRI (Mixing-Roughness-Information depth) de Hofmann donne une description mathématique de la DRF en se basant sur les trois phénomènes physiques fondamentaux: le mixage collisionnel, la rugosité de la surface analysée, et la profondeur d'échappement. Il est destiné non seulement à l'analysé SIMS, mais aussi à l'AES (Auger electron spectroscopy) et le XPS (photoelectron spectroscopy).

La DRF du modèle MRI est constitué par trois différentes fonctions g_w, g_λ, g_σ représentées par trois différents paramètres w, λ, σ :

- Le mixage collisionnel caractérisé par une zone de mixage de longueur w , décrit par une fonction exponentielle g_w . Cette description du mixage collisionnel est basée sur le modèle simple de Liao et al [7] qui supposent que le mixage est instantané, entier et restreint à une zone d'épaisseur w sous la surface bombardée.
- La profondeur d'échappement de la méthode de l'analyse décrite par une autre fonction exponentielle g_λ de paramètre λ (La profondeur d'échappement des ions dans le SIMS, et la profondeur d'échappement des électrons dans le cas du AES et XPS).
- La rugosité décrite par une fonction gaussienne g_σ d'écart type σ . Selon Hofmann le paramètre σ ne se limite pas uniquement à la rugosité causée par le bombardement ionique (σ_s), mais il tient en compte aussi [8] : les rugosités de la surface (σ_0) et de l'interface (où du delta-dopage) (σ_i) dans la structure originale de l'échantillon (ce type de rugosité est négligeable dans le cas des matériaux de référence de haute qualité). La rugosité apparaît à la fin de la zone mixée (σ_w) (Mixing length straggling).

Le paramètre de la rugosité σ est approximativement donné par :

$$\sigma = \sqrt{\sigma_0^2 + \sigma_i^2 + \sigma_s^2 + \sigma_w^2} \quad (2.20)$$

Le modèle MRI est donné par les formules suivantes [5, 8, 9,10]:

$$\text{Mixage collisionnel :} \quad g_w = \frac{1}{w} \exp[-(z - z_0 + w) / w] \quad (2.21a)$$

$$\text{Profondeur d'échappement :} \quad g_\lambda = \frac{1}{\lambda} \exp[-(z - z_0) / \lambda] \quad (2.21b)$$

$$\text{Rugosité :} \quad g_\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp[-(z - z_0)^2 / (2\sigma^2)] \quad (2.21c)$$

z_0 est la position du delta dopage qui engendre la DRF.

L'avantage du modèle MRI est que ces paramètres ont des significations physiques bien définies. Ceci permet de les prédire théoriquement et/ou les mesurer expérimentalement par des méthodes indépendantes [8,10].

b) DRF proposée par Dowsett et al.

Dowsett et al. [6] de leur côté proposent une autre forme analytique pour la DRF, que Hofmman [10] l'appelle 'empirique'. Elle est le résultat de la convolution d'une double exponentielle avec une fonction gaussienne. L'utilisation de la double exponentielle est imposée par les comportements de la partie montante et descendante.

Une double exponentielle est définie comme suit :

$$D \exp(z) = A \begin{cases} \exp\left(\frac{z - z_0}{\lambda_u}\right) & z \leq z_0 \\ \exp\left(\frac{-(z - z_0)}{\lambda_d}\right) & z \geq z_0 \end{cases} \quad (2.22)$$

Cette fonction seule n'est pas suffisante pour être assimilée à la DRF, car elle possède un point anguleux en son sommet (ce qui est n'est pas le cas dans les profils expérimentaux). Pour remédier à ce problème, plusieurs choix sont possibles [11]. Dowsett et al propose pour ceci une fonction gaussienne :

$$Gauss(z) = \frac{B}{\sqrt{2\pi}\sigma_g} \exp\left(\frac{-z^2}{2\sigma_g^2}\right) \quad (2.23)$$

Comme toute réponse impulsionnelle d'un système, la DRF doit être normalisée. Les amplitudes relatives A et B sont donc éliminées. En rappelant que : $\text{erf}(z) = \frac{2}{\pi} \int_0^z e^{-t^2} dt$, le résultat normalisé de la convolution est:

$$h(z) = \frac{1}{2(\lambda_u + \lambda_d)} \left\{ \exp\left(\frac{(z - z_0)}{\lambda_u} + \frac{\sigma_g^2}{2\lambda_u^2}\right) \times \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{-(z - z_0)}{\sqrt{2}\sigma_g} - \frac{\sigma_g}{\sqrt{2}\lambda_u}\right) \right] \right. \\ \left. + \exp\left(\frac{-(z - z_0)}{\lambda_d} + \frac{\sigma_g^2}{2\lambda_d^2}\right) \times \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{(z - z_0)}{\sqrt{2}\sigma_g} - \frac{\sigma_g}{\sqrt{2}\lambda_d}\right) \right] \right\} \quad (2.24)$$

z_0 représente l'abscisse du point anguleux de la double exponentielle. Il faut noter que cette valeur n'a pas de signification physique réelle, contrairement à ce que l'on pourrait croire, et se borne à autoriser le positionnement correct du fittage sur la DRF mesurée.

La convolution de la double exponentielle avec la gaussienne, qui conduit à la DRF, est schématisée sur la figure (2-2).

Comme nous allons le voir, l'expression analytique de la DRF obtenue ici (nommé: *Analytical Resolution Function* (ARF), par Wittmaack [12]), conduit à un très bon fittage des données expérimentales.

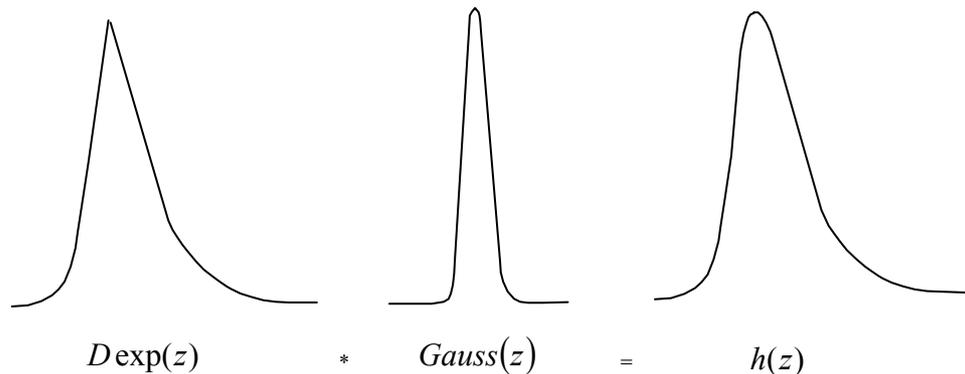


Figure (2-2) : Dessin schématisant l'obtention de la DRF à partir de la convolution d'une double exponentielle avec une fonction gaussienne

Dans le cas du modèle MRI, chaque fonction des trois fonctions convolue le profil réel. La convolution des trois fonctions conduit donc à la fonction de résolution en profondeur $g(z - z_0)$. Cependant, il apparaît que Hofmann, ne fait pas la convolution analytique entre ces trois fonctions, pour ces raisons [13]:

- La convolution des trois fonctions ne constitué pas une étape nécessaire dans le cas d'une procédure de restitution basée sur une opération de convolution, où le modèle MRI est généralement employé [8, 14]. Cette technique consiste à supposer un profil réel, le

convoluer par la DRF, et enfin, faire la comparaison entre le profil calculé (le résultat de la convolution) et le profil mesuré. L'opération est répétée jusqu'à l'obtention d'un fittage optimal du profil mesuré. Le profil de départ qui conduit à ce résultat est alors supposé le profil réel qui est masqué lors de la mesure.

- Ceci permet de manipuler très facilement les paramètres dans le cas d'un régime variant (variation de σ avec la profondeur, par exemple).

L'expression proposée par Dowsett est plus convenable pour l'opération de fittage des données mesurées, et elle est numériquement plus robuste [13]. Nous l'utiliserons donc dans toute la suite de ce travail.

On note de plus, que si on tient en compte que [13]:

- Le paramètre λ_u est considéré souvent très petit, ou encore nul [15, 16].
- La profondeur d'échappement dans le cas de l'analyse SIMS (généralement considérée de 3 à 4 Å [10], de l'ordre de 2 Å dans le cas du Silicium d'après la référence [8] du chapitre 1) est très inférieure à celle de l'analyse Auger, et plusieurs auteurs préfèrent la négliger dans leurs applications [17, 18,19].

On s'aperçoit que les deux expressions (proposées par Dowsett et Hofmann) sont pratiquement identiques dans leur action finale sur un profil réel SIMS.

Pour terminer cette section, on note qu'une autre formule pour la DRF est proposée récemment par Gallardo et al [20]. Ils ont l'appelée modèle RMR (Recoil Implantation-Cascade Mixing-Surface Roughness). Ce modèle prend donc en considération les deux types du mixage collisionnel, et la rugosité. Dans ce modèle, le premier terme (Recoil Implantation) est décrit par une fonction exponentielle décroissante, les deux autres termes sont décrits par des fonctions gaussiennes, et la DRF est obtenue finalement par la convolution de ces trois fonctions.

➤ Moments de la forme analytique choisie :

Comme nous l'avons vu précédemment, on peut caractériser la résolution en profondeur au moyen d'un delta-dopage, en calculant le moment centré d'ordre 2. La relative simplicité de la forme analytique choisie pour fitter la DRF permet le calcul analytique de ses moments.

- moment d'ordre 1 (moyenne)

$$\mu_1 = \bar{z} = \lambda_d - \lambda_u + z_0 \quad (2.25)$$

- moment centré d'ordre2 :

$$\mu_2^c = \sigma_{tot}^2 = \lambda_u^2 + \lambda_d^2 + \sigma_g^2 \quad (2.26)$$

μ_2^c représente la variance de la fonction de résolution autour de sa valeur moyenne \bar{z} . σ_{tot} est donc son écart-type, et on voit que σ_{tot}^2 , qui nous donne une estimation de la résolution en profondeur, est tout simplement la somme des carrés des paramètres de la DRF.

3.4.3 Causalité et positionnement de la DRF

La DRF de l'analyse SIMS se distingue apparemment des cas classiques du traitement du signal par le fait qu'elle n'est pas causale. En effet, lors de l'analyse d'un delta dopage, on s'aperçoit que le signal mesuré apparaît bien avant que le cratère n'ait effectivement atteint la position initiale supposée de la couche atomique. Ce phénomène peut s'expliquer simplement par l'existence de la couche mixée qui brasse les atomes des couches profondes vers la surface. Si l'on donne l'épaisseur w de la couche mixée, et si la redistribution des atomes y est immédiate, comme il est toujours supposé, alors on peut s'attendre à voir apparaître les premiers ions secondaires provenant d'un delta-dopage initialement situé à la profondeur z_δ à partir de la profondeur $z_\delta - w$. Cette non causalité, peut entraîner par la suite quelques complications au niveau des traitements numériques.

Des calculs ont été menés afin d'estimer le décalage de la DRF par rapport à la position réelle du delta-dopage. Littmark et Hofer [21] montrent que si le mixage collisionnel est la principale cause de dégradation du profil, alors le moment d'ordre 1 de la DRF correspond à la position initiale du delta-dopage. Or, bien que le mixage collisionnel soit toujours présent, nous avons vu que d'autres phénomènes peuvent entraîner la dégradation de la mesure (rugosités, ségrégation...). Il est fort possible que la position réelle du delta-dopage soit encore différente de \bar{z} , le moment d'ordre 1.

La figure (2-3) résume les différentes abscisses remarquables de la DRF. Ici \bar{z} a été placé à une position différente de celle du delta dopage initiale (z_δ) afin de se placer dans le cas le plus générale. Le point anguleux de la double exponentielle est représenté à une position z_0 différente du celle du maximum de la DRF z_{max} , puisque la convolution de la double

exponentielle avec la gaussienne, conduit à une position de la DRF ne correspondant pas à z_0 . Ceci est le résultat de l'asymétrie de la double exponentielle. L'expérience montre que $z_0 < z_{\max} < z_\delta$.

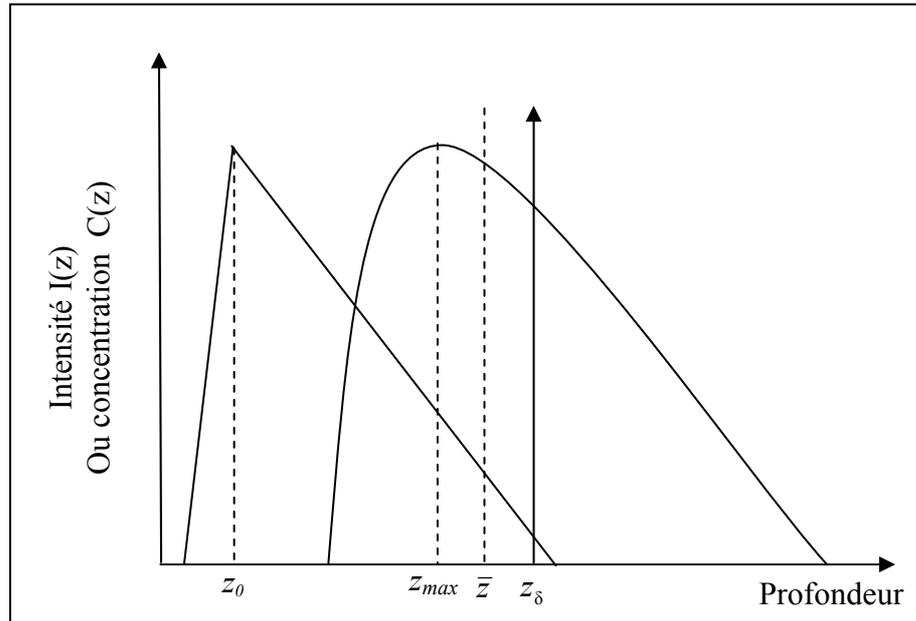


Figure (2-3) : Positions respectives de la DRF et du delta dopage qui lui a donnée naissance. L'échelle est supposée semi-logarithmique.

Les premiers ions secondaires provenant du delta-dopage apparaissent à la profondeur $z_\delta - w$, mais comme le pic de la DRF est plus facilement identifiable, l'anticipation de la DRF par rapport au delta dopage qui lui a donné naissance sera plutôt mesurée par la distance : $\Delta z = z_{\max} - z_\delta$.

Si on considère que z_δ est confondue avec \bar{z} :

$$z_\delta \approx \bar{z} = \lambda_d - \lambda_u + z_0 \quad (2.27)$$

Δz peut être donc mesurée par :

$$\Delta z \approx z_{\max} - (\lambda_d - \lambda_u + z_0) \quad (2.28)$$

3.4.4 Fittage des données expérimentales par la forme analytique choisie

Les figures (2-4) et (2-5) représentent un exemple du fittage des données expérimentales par la forme analytique choisie de la fonction de résolution, dans le cas du bore dans le Silicium. Les mesures expérimentales ont été réalisées à LPM-INSA de Lyon. Le bruit de fond présent en fin de profil a été soustrait. On remarque la bonne qualité de fittage, tant en échelle linéaire qu'en échelle logarithmique. Cette superposition de la forme analytique à la mesure est observée par plusieurs auteurs, en particulier dans le cas du bore dans le silicium, cas qui nous intéresse le plus dans ce travail, et pour différentes conditions expérimentales [3, 4, 22].

Au niveau du fittage, on note cependant que si la mesure de λ_d est généralement facile : La dynamique du signal est souvent suffisante pour faire un fittage localisé de ce paramètre, avec l'utilisation de la partie exponentielle décroissante seulement. Au contraire pour les autres paramètres, il existe d'après Wittmaack [12], une difficulté dans la détermination de λ_u et σ_g : il est très difficile de déterminer λ_u sans risque si $\lambda_u / \sigma_g < 0.3$. Pour une détermination précise de λ_u il est nécessaire de faire la mesure du delta dopage sur quatre décades ou plus. De plus, différentes combinaisons de λ_u et σ_g peuvent être utilisées pour produire essentiellement la même DRF.

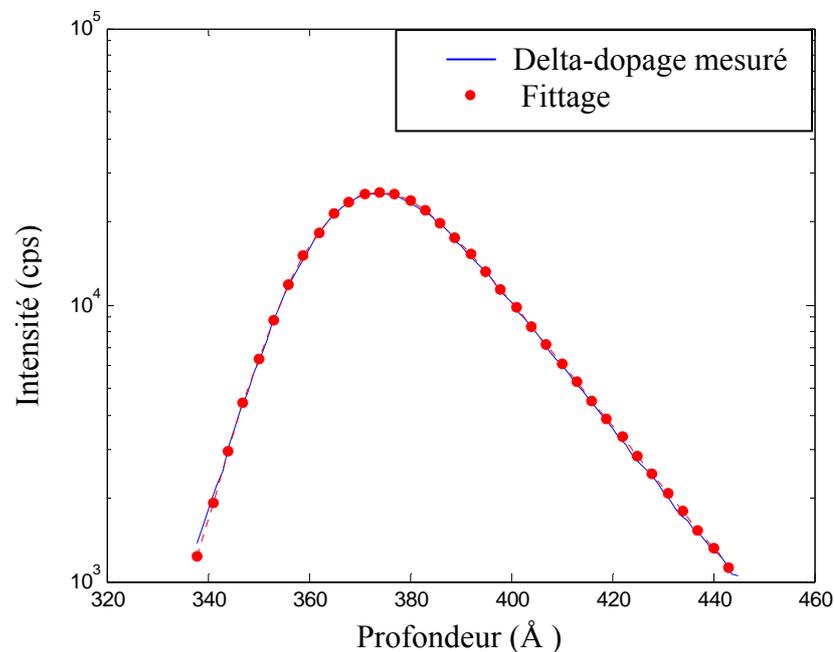


Figure (2-4) : Fittage par la forme analytique choisie pour la DRF d'un delta dopage de bore dans du Silicium analysé à 3 keV/O_2^+ . Echelle semi-logarithmique

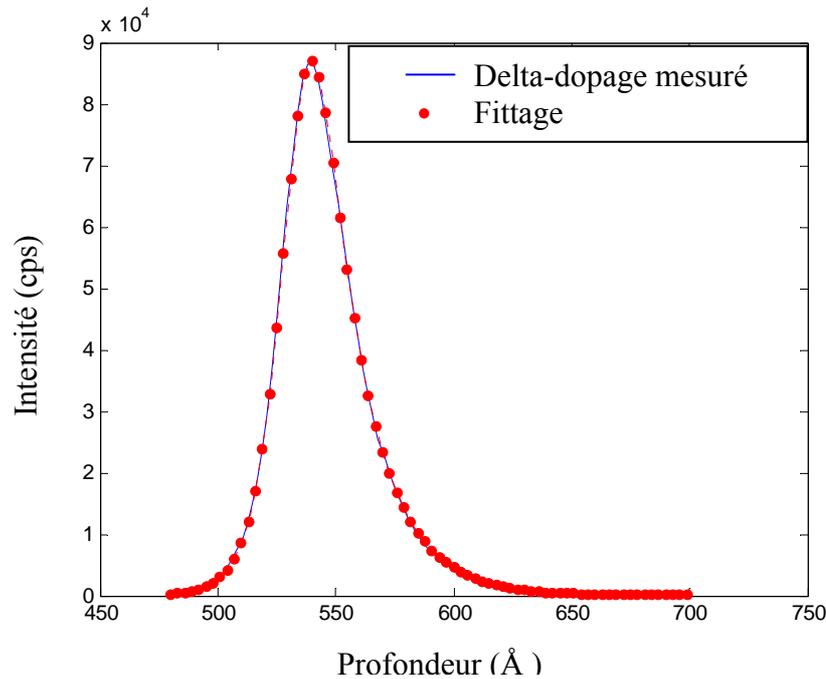


Figure (2-5) : *Fittage par la forme analytique choisie pour la DRF d'un delta-dopage de bore dans du Silicium analysé à 2 keV/O₂⁺. Echelle linéaire*

3.4.5 Évolution des paramètres de la DRF en fonction des conditions expérimentales

Le paramètre le plus souvent étudié dans la littérature est le paramètre λ_d . Ceci peut être dû à deux causes, d'une part puisqu'il est relié au mixage collisionnel, le phénomène le plus prépondérant des phénomènes dégradants la résolution en profondeur, et d'autre part puisqu'il est le paramètre le plus facile à mesurer (son calcul ne nécessite pas de fittage de la DRF). Comme nous avons vu dans le chapitre 1, les études effectuées ont montré que λ_d a un comportement globalement linéaire en fonction de la profondeur de pénétration des ions R_p .

Il existe cependant quelques études menées pour les trois paramètres de la DRF, comme l'étude qui a été conduite par Gautier [3]. Elle a été faite sur un appareil de type CAMECA IMS3/4f. Dans ce type d'appareils l'angle d'incidence varie en même temps que l'énergie primaire. Pour rendre compte de ceci, les variations dans cette étude sont exprimées en fonction non pas de l'énergie primaire, mais de R_p . R_p étant la profondeur de pénétration des ions primaires; elle est calculée par la relation donnée par Dupuy et al. [23], valable pour $R_p > 30 \text{ \AA}$ environ :

$$R_p = 50.46 E_p^{0.665} \cos \theta \quad (2.29)$$

Où θ est l'angle d'incidence, et E_p est dans cette équation l'énergie incidente par ion oxygène, et non par ion O_2^+ .

Le comportement des paramètres a été étudié pour un plage d'énergies allant de 2.5 à 13 keV (soit R_p de 32.1 à 142.7 Å) : avec un échantillon contenant des deltas-dopage de bore dans le silicium. Pour les énergies $E_p > 3500 eV$, l'étude abouti à la conclusion que les paramètres λ_d et σ_g ont un comportement fortement linéaire avec R_p . Les régressions linéaires (en angströms) correspondants sont donnés par :

$$\lambda_d = 15.5 + 0.302R_p \quad (2.30)$$

$$\sigma_g = 12.9 + 0.131R_p \quad (2.31)$$

alors que λ_u montre un comportement un peut chaotique, et sa valeur peu influencée par les conditions expérimentales. La régression linéaire (en angströms) donne :

$$\lambda_u = 10.9 - 3.24 \cdot 10^{-3} R_p \approx 10.9 \pm 5 \quad (2.32)$$

Les valeurs les plus importantes de ce paramètre sont en moyenne situées dans les basses énergies.

Pour $E_p < 3500 eV$ cependant, les valeurs obtenues pour λ_d et σ_{tot} sont très nettement au dessus de la régression linéaire. Cette divergence est principalement attribuée à la difficulté de régler l'appareil à basse énergie, et au bruit de fond important présent dans les profils expérimentaux mesurés à basse énergie, qui rend l'évaluation des pentes exponentielles beaucoup moins précise.

L'étude faite par Mancina [4], avec le même instrument, (faite aussi dans le cas du Bore dans le Silicium) conduit à des valeurs à peu près équivalentes à celles obtenus par Gautier pour λ_d et σ_g , en particulier dans les plus haute énergies. Pour λ_u , les valeurs obtenues sont plus faibles, et allant le plus souvent de 2 à 6 Å.

La comparaison entre les fonctions de résolution du bore dans le silicium avec celles obtenues pour d'autres espèces dans le silicium montre clairement que la résolution en profondeur dépend du type de dopant [3]. En particulier, λ_d prend des valeurs différentes considérablement d'un dopant à l'autre, comme nous avons déjà mentionné dans le chapitre 1.

3.4.6 Relation entre les paramètres de la DRF et les phénomènes physiques

Malgré qu'il soit fondamentalement impossible de relier de manière non ambiguë les trois paramètres de fittage de la forme analytique choisie à la physique des phénomènes, la dépendance énergétique des paramètres de fittage permet de postuler quelques hypothèses sur leur nature physiques [3] :

➤ *Descente exponentielle λ_d :*

Comme nous avons vu. L'évolution de λ_d en fonction de la profondeur de pénétration des ions est compatible avec le modèle du mixage collisionnel, sauf à basse énergie où d'autres phénomènes entrent probablement en jeu.

➤ *L'écart-type σ_g :*

σ_g augmente avec R_p (avec l'énergie des ions primaires). Il semble donc que σ_g est reliée aux cascades de collisions isotropes qui se tiennent à l'intérieur du matériau, et augmente avec R_p . Cette hypothèse est renforcée par les simulations opérées par Littmark et al. [24] qui aboutissent à un sommet de DRF également arrondi, alors que la rugosité est supposée nulle. Ce paramètre semble aussi être relié au phénomène de rugosité [3].

➤ *Montée exponentielle λ_u :*

Le comportement du paramètre λ_u est plus ambigu. En effet, il ne montre qu'une dépendance très faible en fonction des conditions expérimentales. D'après Badheka et al. [25], il serait principalement relié à la rugosité microscopique de la surface pulvérisée, alors que Turner [26] trouve son origine dans la profondeur d'échappement des ions secondaires.

Pour d'autres auteurs λ_u est un paramètre intrinsèque (propre à l'échantillon et non à la réponse du système), qu'il ne faut pas introduire dans la forme de la DRF [15, 27]. Pour les

auteurs de la référence [15] σ_g peut également être partiellement affectée par la structure de l'échantillon utilisé pour mesurer la DRF.

3.5 Bruit SIMS

Comme tout signal expérimental, les profils SIMS contiennent une composante de bruit. En effet, toute mesure physique, quelque soit sa nature (électronique, optique, etc...), est entachée de divers signaux parasites, constitués ensemble le bruit de mesure.

Il faut cependant différencier entre deux types de signaux « parasites » qui viennent s'ajouter au signal utile. Le bruit est considéré comme un signal aléatoire, c'est à dire qu'on ne peut pas prédire sa valeur au temps t_2 à partir de celle relevée au temps t_1 . Les autres signaux parasites, comme par exemple un signal sinusoïdal ou une composante continue, ne seront pas considérés comme faisant partie du bruit, puisqu'on peut parfaitement les distinguer et donc les éliminer du signal mesuré [4].

Le bruit de mesure est à l'origine de la plupart des difficultés de la déconvolution. En effet, la séparation entre le bruit et le signal utile est très difficile, et ces difficultés seraient résolues si cette discrimination pouvait être effectuée de manière certaine.

Avant de parler du cas particulier du bruit SIMS, nous allons tout d'abord exposer les différentes caractéristiques d'un bruit.

3.5.1 Caractéristiques fréquentielles d'un bruit

Le bruit fait certes partie des signaux aléatoires, mais ceci ne signifie pas qu'on ne peut pas distinguer certaines caractéristiques déterministes, notamment dans le domaine des fréquences.

➤ Le bruit blanc

Par souci de simplification, l'hypothèse de bruit blanc est la plus répandue en traitement du signal. Un bruit blanc est un signal aléatoire dont la densité spectrale de puissance DSP (la DSP est la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation) est constante sur un intervalle de fréquence infini. Autrement dit, ce bruit contient toutes les fréquences de $-\infty$ à $+\infty$ avec une proportion égale.

➤ Le bruit rose

Le bruit rose ou « blanc à bande limitée » est défini de la même manière que le bruit

blanc, mais sur un intervalle de fréquences fini. Ce cas est plus réaliste que celui du bruit blanc puisqu'aucun signal physique ne possède un spectre à support infini.

3.5.2 Caractéristiques probabilistes d'un bruit

Le bruit est un signal aléatoire pour lequel il n'existe pas de description temporelle, mais il est possible de le caractériser par sa densité de probabilité $p(P)dP$, qui est toujours normée :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(P)dP = 1 \quad (2.33)$$

➤ Bruit Gaussien

On dit qu'un bruit est Gaussien si sa densité de probabilité prend la forme d'une gaussienne. Si on désigne par P_c le centre de cette gaussienne, et par σ sa dispersion, la loi de p s'écrit :

$$p(P) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(P-P_c)^2}{2\sigma^2}} \quad (2.34)$$

P_c et σ^2 sont respectivement la valeur moyenne et la variance de ce bruit. L'hypothèse de bruit Gaussien est très souvent prise en traitement de signal, et ceci pour les raisons suivantes :

- Tous les moments de la variable aléatoire peuvent être calculés à partir des moments du premier et de second ordre.
- Le théorème central limite, très connu en statistique, affirme que lorsque plusieurs processus aléatoires de types quelconques s'ajoutent, le résultat tend vers un processus gaussien sans que le nombre de processus aléatoires n'ait besoin d'être très important (5 ou 6 processus suffisent [28]).
- lorsque plusieurs processus gaussiens de paramètres différents s'ajoutent, le résultat est encore une gaussienne.

➤ Bruit Poissonien

La densité de probabilité d'un bruit Poissonien est donné par:

$$P(K) = \frac{\lambda^K}{K!} e^{-\lambda} \quad K \in \mathbb{N} \quad (2.35)$$

où λ est la variance.

Dans le cas d'un bruit Poissonien, la probabilité d'avoir n impulsion de bruit pendant une durée T est :

$$P(n, T) = \frac{(KT)^n}{n!} e^{-KT} \quad (2.36)$$

où K est le paramètre de Poisson. $1/K$ est le nombre d'événements moyen par unité de temps. Il faut noter que la loi de Poisson tend vers une loi de Gauss lorsque le paramètre K devient grand.

Les variables aléatoires poissoniennes sont typiquement rencontrés dans tous les phénomènes de comptage.

3.5.3 Nature du bruit SIMS

Allen et al. [29] proposent de modéliser le bruit SIMS, pour un profil de bore dans du silicium, par une distribution de probabilité gaussienne. D'après leurs observations expérimentales, ils ont établi une loi empirique reliant la valeur moyenne M du signal parfait (sans bruit) à l'écart-type du bruit σ :

$$\sigma \approx 1.7\sqrt{M} \quad (2.37)$$

Cette relation n'est bien sûr valable que pour les valeurs du signal non nulles. Elle indique que les variations du bruit sont dépendantes de l'amplitude locale du signal SIMS. L'écart-type du bruit n'est pas donc considéré comme constant.

Cette relation est utilisée par la suite par Gautier [3] et Mancina [4] dans la construction des profils SIMS simulés, où ils ont préféré introduire un bruit de type gaussien pour leurs simulations. De notre côté, nous allons l'utiliser pour simuler nos profils dans le chapitre suivant.

Selon d'autres auteurs comme Makarov [30], le bruit de mesure dans les profils SIMS obéit plutôt à la loi de Poisson.

Il faut noter qu'il existe une différence de vocabulaire entre les spécialistes de l'analyse par SIMS et les spécialistes du traitement du signal. Pour ces derniers, le bruit résulte du système

de mesures des ions secondaires, alors que les physiciens considèrent également une autre source de bruit, intervenant avant l'entrée du système de mesure, et qui liée aux variations du courant primaire [4].

4. DECONVOLUTION DES PROFILS SIMS

4.1 La déconvolution : un problème inverse mal posé

Un problème inverse est un problème qui consiste à déterminer des *causes* connaissant des *effets*. Ainsi, ce problème est l'inverse de celui appelé problème direct, consistant à déduire les effets, les causes étant connues. La déconvolution consiste à déterminer le profil réel (signal d'entrée) à partir des données du profil mesuré (signal de sortie) et de la DRF. Elle est donc un problème inverse.

Dans un livre célèbre, Hadamard [31] a introduit dès 1923 la notion de *problème bien posé*. Il s'agit d'un problème dont:

- i) La solution existe.
- ii) Elle est unique.
- iii) Elle est stable : une petite variation des entrées entraîne une petite variation des sorties.

Les problèmes qui ne satisferont pas à ces exigences sont dits mal posés. Malheureusement, les problèmes inverses ne vérifient souvent pas l'une ou l'autre de ces conditions, voire les trois ensembles.

En utilisant le formalisme matriciel, et en supposant un cas idéal où le bruit n'existe pas, l'équation de convolution s'écrit tout simplement par : $y = \mathbf{H}x$. La division des deux membres de cette équation par \mathbf{H} conduit directement à une solution formelle : $x = \mathbf{H}^{-1}y$. En pratique, il est impensable de vouloir effectuer une mesure physique sans que le résultat ne soit entaché d'une part plus ou moins importante du bruit, et l'équation de convolution devenu donc : $y = \mathbf{H}x + b$. Si on applique la même méthode que précédemment à cette équation, on aura une solution estimée x_{est} qui aura l'expression :

$$x_{est} = \frac{y}{\mathbf{H}} = \frac{\mathbf{H}x}{\mathbf{H}} + \frac{b}{\mathbf{H}} \Leftrightarrow x_{est} = x + \mathbf{H}^{-1}b \quad (2.38)$$

Pour que la solution x_{est} existe, il faut que la matrice \mathbf{H} soit inversible. Cependant, La matrice \mathbf{H} n'est pas une matrice carrée, elle est donc non inversible. L'une des manières de résoudre ce problème est d'utiliser la convolution circulaire, où la matrice de Toeplitz de h est carrée et donc inversible. Dans ce qui suit, seule la convolution circulaire est utilisée. On rappelle, que le résultat obtenu dans les deux cas (convolutions linéaire et circulaire) est identique.

La matrice \mathbf{H} est très mal conditionnée. Cela signifie qu'elle peut avoir des valeurs propres très petites. Soit λ_{\min} et λ_{\max} la plus petite et la plus grande des valeurs propres de \mathbf{H} , le conditionnement est alors défini par $cond(\mathbf{H}) = \sqrt{|\lambda_{\max}|/|\lambda_{\min}|}$. Plus ce nombre est grand devant 1, moins le problème est conditionné.

Même si la solution x_{est} existe, elle n'est pas stable, car lors de l'inversion, les petites valeurs propres de \mathbf{H} donneront des valeurs extrêmement grandes, ce qui a pour effet d'amplifier considérablement le bruit, au point de rendre méconnaissable le résultat obtenu (Ceci est expliqué par la présence du terme $\mathbf{H}^{-1}b$ qui s'ajoute au signal réel x). Dans ces conditions, il est encore possible que l'unicité de la solution du problème de déconvolution soit impossible à garantir.

Une autre façon d'expliquer le problème peut être faite en effectuant les calculs dans l'espace de Fourier. La relation (2.38) s'écrit :

$$X_{est}(f) = X(f) + H^{-1}(f)B(f) \quad (2.39)$$

On voit que $X_{est}(f)$ est composé du profil réel $X(f)$ auquel s'ajoute le terme $H^{-1}(f)B(f)$. La figure (2.6) représente un exemple du spectre de la DRF dans l'espace de Fourier (Module TF), tiré dans le cas de la DRF de la figure (2.5). On constate que le spectre est principalement constitué de basses fréquences. Ses composantes chutent rapidement de plusieurs décades à partir d'une certaine fréquence de coupure. $H(f)$ est donc un filtre passe-bas, son inverse $H^{-1}(f)$ agit comme un amplificateur hautes fréquences, et le bruit sera fortement amplifié par ce terme. Il en résulte une solution $X_{est}(f)$ qui a un spectre « saturé » de bruit dans les hautes fréquences, et dont l'image $x_{est}(t)$ dans le domaine temporel est un signal fortement oscillatoire et inutilisable.

Il est possible de filtrer les hautes fréquences de $X_{est}(f)$ portant plus de bruit que d'informations utiles en utilisant *le filtre de Wiener*. Cependant, les performances de la déconvolution par cette méthode ne sont pas suffisantes pour le problème spécifique d'analyse SIMS [4]. Nous n'utiliserons donc pas cette méthode dans ce travail, et nous allons explorer d'autres voies.

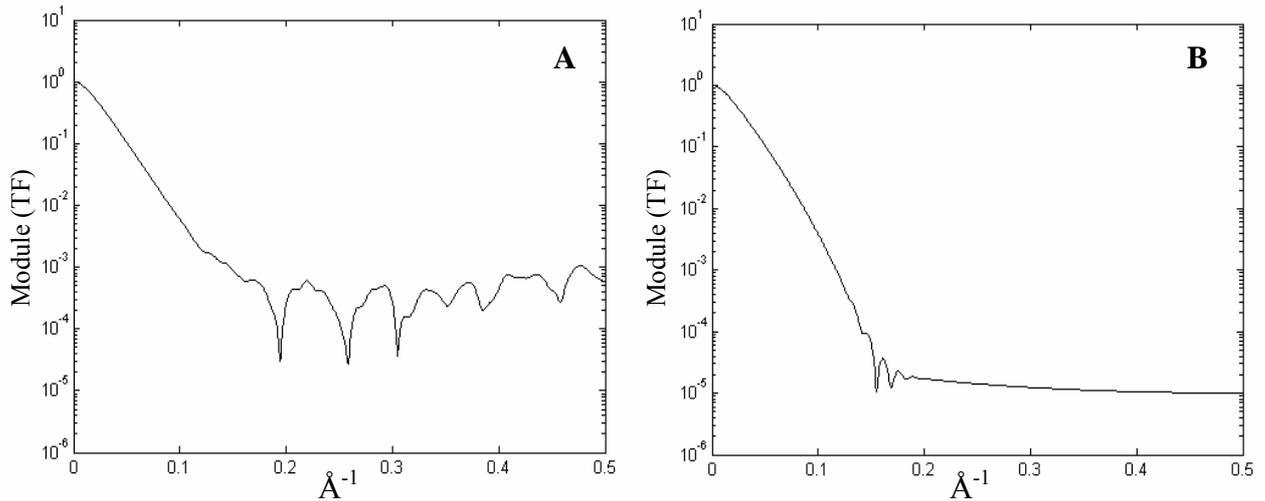


Figure (2-6) : Modules des transformées de Fourier de la fonction de résolution en profondeur obtenue à 2 keV/O_2^+ A) FFT de la DRF expérimental, B) FFT du fittage de la même DRF.

4.2 Solution du problème de déconvolution par la méthode des moindres carrés

Une solution estimée x_{est} du problème de déconvolution peut être obtenue par minimisation d'un critère au sens des moindres carrés. Dans ce cas, on cherche une solution estimée x_{est} telle que $y_{est} = \mathbf{H}x_{est}$ soit le plus proche que possible de y au sens de moindres carrés. On part donc de l'idée que la présence de bruit dans les profils mesurés ne permet pas d'accéder à la solution exacte x , mais il existe une solution estimée x_{est} redonnant le signal mesuré après avoir été convolué par h (au bruit près). Nous devons minimiser le terme :

$$\|y - \mathbf{H}x_{est}\|^2 \quad (2.40)$$

où $\mathbf{H}x_{est}$ représente *le signal reconstruit*. Ce signal va nous permettre de vérifier si la convolution de x_{est} par h donne bien le signal mesuré y . on effectue une minimisation de (2.40) par rapport à x_{est} en utilisant les propriétés des produits scalaires et des dérivées, que nous avons présenté au début de ce chapitre, on obtient:

$$\mathbf{H}^T \mathbf{H} x_{est} = \mathbf{H}^T y \quad (2.41)$$

d'où

$$x_{est} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T y \quad (2.42)$$

L'équation (2.42) est appelée *équation normale* et x_{est} *solution des moindres carrés* [32]. Cette solution assure la plus grande fidélité aux données mesurées. Cependant, elle n'est pas acceptable, et ceci pour les raisons suivantes :

- Elle n'est pas nécessairement unique : La condition de proximité du signal reconstruit et du signal mesuré peut être satisfaite par plusieurs solutions.
- Nous avons vu que la matrice \mathbf{H} est mal conditionnée. Si \mathbf{H} est mal conditionnée, $\mathbf{H}^T \mathbf{H}$ l'est encore plus et cette solution pourra donc n'avoir aucune signification physique.

Nous nous trouvons donc face à un problème de stabilité du système. Les solutions, quand elles existent, sont inutilisables car multiples et/ou physiquement inacceptables. Il est alors nécessaire de *régulariser* le problème en faisant un choix d'une solution physiquement acceptable parmi celles mathématiquement possibles. Ce choix se fait en imposant à la solution de vérifier certaines propriétés selon les connaissances a priori dont on dispose, comme la régularité.

Cette modification du cahier des charges du problème de la déconvolution est très utilisée en traitement du signal, et est désignée sous le nom de *régularisation*.

4.3 Régularisation d'un problème mal posé

4.3.1. Introduction à la régularisation

Comme nous venons de voir, la déconvolution de signaux SIMS fait certes partie des problèmes inverses mal posés. Les seules données, de la mesure et de la réponse impulsionnelle du système, ne permettent de définir qu'une classe de solutions *mathématiquement possibles*, contenant les solutions physiquement acceptables et celle qui ne le sont pas. Pour choisir parmi les solutions possibles celle que nous aurons jugée la plus acceptable, il faut donc inclure une connaissance préalable concernant la solution cherchée dans le processus de résolution du problème, ceci est appelé *régularisation*. Cette information à priori sera par la suite formulée par un autre critère couplé au critère des moindres carrés (équation 2.40).

L'idée principale de la régularisation est donc d'abandonner l'espoir d'obtenir la solution exacte à partir des données bruitées, de définir une classe des solutions admissibles, et de sélectionner à partir de cette classe la solution qui sera considérée comme acceptable, dans le sens qu'elle est compatible avec une certaine information à priori.

On note que l'apport d'information par la régularisation constitue un choix subjectif et dépendra des caractéristiques que l'opérateur souhaite privilégier pour la solution recherchée. La solution obtenue n'est donc pas la seule solution possible, mais une de celles qui sont acceptables.

4.3.2 Formulation générale de la régularisation

La solution régularisée est généralement définie par [33]:

$$x(y, \alpha) = \arg \min \{J_1(y, \mathbf{H}x) + \alpha J_2(x)\} \quad (2.43)$$

où « argmin » signifie l'argument qui minimise l'expression entre crochet. Le terme $J_1(y, Hx)$ est consacré à la minimisation de la distance entre la solution convoluée par \mathbf{H} et le profil mesuré, dans le but d'assurer, à un certain degré, la fidélité de la solution aux données. $\alpha J_2(x)$ est le terme de régularisation désigné pour favoriser certains propriétés désirables qui résument les connaissances a priori sur la solution. $\alpha > 0$ est le paramètre de régularisation.

La sélection de $J_1(y, Hx)$ et $J_2(x)$ est un choix qualitatif qui détermine comment la régularisation est faite. Au contraire, le choix de α est quantitatif et gère l'échange entre ces

deux sources d'informations. Une fidélité parfaite aux données mesurées y est obtenue pour $\alpha = 0$, alors qu'une fidélité parfaite à l'information a priori est obtenue pour $\alpha = \infty$, sans forcément avoir une solution correspondant aux données mesurées. La régularisation consiste à trouver une solution intermédiaire, en ajustant *le paramètre de régularisation* α qui fixe un compromis entre ces deux solutions.

Différentes formes de régularisation sont proposées dans la littérature, chacune étant plus ou moins adaptée selon le domaine d'application. Nous nous sommes intéressé, à la *régularisation de Tikhonov-Miller*, la méthode la plus connue, et la plus utilisée. Le terme $\alpha J_2(x)$ sera appelé *terme de régularisation*.

4.3.3. Régularisation de Tikhonov-Miller

Dans le cas de cette régularisation $J_1(y, Hx)$ et $J_2(x)$ sont les deux quadratiques. On utilise la régularisation de Tikhonov pour résoudre l'équation (2.16) ; les contraintes suivantes sur la solution x sont utilisées [34] :

$$\|y - \mathbf{H}x_{est}\|^2 \leq \|b\|^2 \qquad \|\mathbf{D}x_{est}\|^2 \leq r^2 \qquad (2.44)$$

Le premier terme est tout simplement le critère des moindres carrés sur la solution trouvée. On impose ici à cette grandeur d'être inférieure à l'énergie du bruit $\|b\|^2$. On notera que d'après l'équation de convolution bruitée on a : $b = y - \mathbf{H}x$.

Le coefficient r^2 qui appartient au deuxième terme est le coefficient de régularité. La régularité supposée du signal recherché est utilisée ici comme fonctionnelle de régularisation.

\mathbf{D} est généralement un opérateur de type dérivateur (filtre passe-haut dans le domaine des fréquences). Le but du deuxième terme est donc de limiter l'énergie des hautes fréquences contenues dans la solution recherchée. Ce choix résulte de l'observation des solutions instables trouvées par l'inversion directe du problème non régularisé. Ces dernières contiennent en effet des fortes composantes dans le haut du spectre, dues à l'amplification des hautes fréquences du bruit lors de l'inversion de \mathbf{H} .

Suivant l'approche de Miller [35], les deux contraintes sont quadratiquement combinées. La déconvolution est alors la solution de l'équation :

$$(\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D})x_{est} = \mathbf{H}^T \mathbf{y} \qquad (2.45)$$

avec :

$$\alpha = \frac{\|b\|^2}{r^2} \quad (2.46)$$

Dans le cas des simulations, on peut utiliser cette dernière formule pour déterminer la valeur de α . Pour r^2 on prend tout simplement : $r^2 = \|\mathbf{D}x\|^2$, ce qui est possible puisque le signal réel x est construit par nous-même. Dans le cas d'un signal expérimental, le coefficient de régularité r^2 ainsi que l'énergie de bruit $\|b\|^2$ sont inconnues. Si on veut calculer α avec la relation (2.46) il sera nécessaire d'effectuer une estimation locale du bruit et de donner une valeur approximative de la régularité r^2 à partir des informations *a priori*. Dans ce dernier cas, d'autre méthode sont généralement utilisées pour le calcul de α , en particulier: la *validation croisée* où la *validation croisée généralisée* [36].

Le α obtenu par la relation (2.46) sera noté dans la suite de ce travail α_{Miller} . Si le bruit est très faible, α_{Miller} sera petite et on aura une solution qui sera plus fidèle aux données. Lorsque le bruit est plus important, α_{Miller} augmente, ce qui renforce l'influence de l'information *a priori*.

La validation croisée

L'idée de l'estimation du paramètre de régularisation par validation croisée consiste à considérer la déconvolution comme un processus de prédiction. On considère que la $i^{ième}$ donnée est manquante, et l'on effectue alors la déconvolution sans incorporer cette donnée dans la fonctionnelle de régularisation (équation 2.45), on note $x_{est}^{(i)}$ le résultat. Si le paramètre de régularisation est bien choisi, le signal reconstruit $y_{est}^{(i)} = \mathbf{H}x_{est}^{(i)}$, doit permettre de prédire la donnée manquante avec une erreur faible. Plus précisément, la $i^{ième}$ composante de $y_{est}^{(i)}$, $y_{est_i}^{(i)}$ doit être une bonne estimation de y_i , la donnée manquante. Cette procédure s'effectue sur tous les points i des données mesurées. La fonction de validation croisée est l'erreur de prédiction quadratique moyenne, donnée par la somme des carrés des erreurs sur tous les points du signal mesuré :

$$VC(\alpha) = \frac{1}{N_y} \sum_{i=1}^{N_y} (y_{est_i}^{(i)} - y_i)^2 \quad (2.47)$$

$VC(\alpha)$ est donc calculée pour différentes valeurs de α , et on choisit α qui donne la plus petite valeur de $VC(\alpha)$.

La validation croisée généralisée

L'inconvénient principal de la méthode de la validation croisée est qu'elle n'est pas invariante par rapport à une transformation linéaire du signal (telle que la FFT par exemple). Il est alors nécessaire de définir le critère de validation croisée généralisé [37]. La validation croisée généralisée est un raffinement de la validation simple destiné à réduire l'influence des points marginaux sur le résultat de l'estimation de α . Son expression est donnée par:

$$VCG(\alpha) = \frac{(y - y_{est})^T (y - y_{est})}{(1 - \text{trace}(\mathbf{H}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{H}^T))^2} \quad (2.48)$$

avec $\mathbf{A} = \mathbf{H}^T\mathbf{H} + \alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D}$. Cette expression peut être remplacée par une autre, particulièrement adaptée à la programmation [4]:

$$VCG(\alpha) = \frac{\|(\mathbf{I} - \mathbf{H}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{H}^T)y\|^2}{\text{trace}(\mathbf{I} - \mathbf{H}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{H}^T)^2} \quad (2.49)$$

On peut noter que la validation croisée généralisée requiert nettement moins de calculs que celle de la validation croisée simple.

Il est très important de mentionner ici que quelque soit la méthode employée, méthode de Miller ou validation croisée, ceci conduit souvent à une sous-estimation du paramètre de régularisation [38].

Rôle du terme de régularisation [4]

Le but du terme de régularisation $\alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D}$ est de lever le caractère mal posé du problème en améliorant le conditionnement de l'opérateur \mathbf{H} . Cela est réalisé par la modification des valeurs propres du système. Ici la matrice \mathbf{H} caractérisant le problème de la déconvolution avant régularisation est remplacée par la matrice \mathbf{A} mieux conditionnée. Le conditionnement de \mathbf{A} est donné par :

$$\text{cond}(\mathbf{A}) = \sqrt{\frac{\max(\lambda_{\mathbf{H}}^2 + \alpha\lambda_{\mathbf{D}}^2)}{\min(\lambda_{\mathbf{H}}^2 + \alpha\lambda_{\mathbf{D}}^2)}} \quad (2.50)$$

où $\lambda_{\mathbf{H}}^2$ et $\lambda_{\mathbf{D}}^2$ représentent, respectivement, les valeurs propres de $\mathbf{H}^T\mathbf{H}$ et $\mathbf{D}^T\mathbf{D}$. La matrice \mathbf{A} doit conserver les grandes valeurs propres de $\mathbf{H}^T\mathbf{H}$ et remplacer les petites (source d'instabilité) par celles de $\alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D}$. Ainsi, \mathbf{H} étant un filtre passe-bas, \mathbf{D} doit être un filtre passe-haut.

Selon les caractéristiques de \mathbf{D} et la valeur de α , le système sera ainsi plus ou moins bien régularisé.

4.4 Contraintes dures appliquées à un signal

Nous avons vu que la régularisation est indispensable pour garantir l'unicité et la stabilité de la solution. Cependant, le fait de régulariser le problème ne suffit pas encore à obtenir une solution acceptable physiquement. En particulier, la solution peut contenir des valeurs négatives, ce qui est gênant pour un profil SIMS. En effet, les données mesurées lors de l'acquisition d'un profil SIMS représentent la concentration relative d'une espèce dans un échantillon en fonction de la profondeur, et les profils en profondeurs, sans aucun doute, ne contiennent pas des valeurs négatives. Il est très intéressant donc de pouvoir introduire cette connaissance (la positivité) dans la procédure de déconvolution. On peut penser aussi à introduire d'autres connaissances si on a d'autres informations supplémentaires sur la solution recherchée.

Ces connaissances prenant le nom de contraintes dures, par opposition aux contraintes imposées par les méthodes de régularisation : contraintes douces. Une contrainte dure se définit par une transformation du signal x de manière à ce qu'il vérifie les propriétés demandées par un opérateur \mathbf{C} spécifique.

Exemples de contraintes dures

- Contrainte de positivité

L'opérateur \mathbf{P} qui assure la positivité de la solution peut par exemple être décrit par la forme [4]:

$$\mathbf{P}x = \frac{x + |x|}{2} \quad (2.51)$$

Dans ce cas, on voit que les composantes négatives sont ramenées à 0, alors que les composantes positives restent inchangées.

Si on souhaite plutôt effectuer un repliement des composantes négatives, et conserver donc la norme du signal x , alors l'opérateur de contrainte de positivité sera tout simplement l'opérateur valeur absolue :

$$\mathbf{P}x = |x| \quad (2.52)$$

Dans notre travail la contrainte de positivité est exprimée par la relation (2.51).

- Contrainte de support

Supposons que le signal x soit connu pour demeurer dans un intervalle donné $[s_1, s_2]$, il est possible de lui appliquer une contrainte de support \mathbf{S} , c'est à dire de le forcer à être nul en dehors de ce domaine de définition.

$$\mathbf{S}x = \begin{cases} x & \text{si } s_1 < x < s_2 \\ 0 & \text{Sinon} \end{cases} \quad (2.53)$$

- Contrainte d'amplitude

Si on souhaite qu'un signal ne dépasse pas une certaine amplitude sur tout son intervalle de définition. On désigne alors par l la limite que l'amplitude du signal ne doit pas dépasser, on peut exprimer cette contrainte par l'opérateur \mathbf{L} tel que [4]:

$$\mathbf{L}x = \frac{(x-l) - |x-l|}{2} + l \quad (2.54)$$

Cette contrainte peut par exemple être introduite dans un cas pratique de l'analyse SIMS, si la concentration de telle espèce est connue de ne pas dépasser une certaine limite.

- Application de plusieurs contraintes

Si on dispose de plusieurs informations, il est possible d'appliquer plusieurs contraintes sur le même signal, sans tenir compte leur ordre puisqu'ils sont commutatifs :

$$\mathbf{P} \mathbf{L} x = \mathbf{L} \mathbf{P} x \quad (2.55)$$

La contrainte de positivité est la plus couramment appliquée, car elle est la source d'information la plus sûre et la plus puissante.

Pour introduire les contraintes dures, l'alternative consiste à utiliser des méthodes itératives. Parmi les méthodes itératives existantes nous allons nous intéresser à l'algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures. Il a déjà prouvé sa fiabilité et sa robustesse dans le cas du Bore dans le Silicium [33, 39-42] et d'Arsenic dans le Silicium [43]. En se basant sur cet algorithme nous allons finalement proposer une autre technique de déconvolution pour de signaux SIMS.

4.5 Algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures

Les méthodes itératives permettent de s'approcher de la solution désirée par une série d'itérations. Elles ont généralement les avantages suivants par rapport à une méthode non itérative :

- Elles n'imposent pas le calcul direct d'opérateurs inverses. Les difficultés liées au calcul de l'inversion directe sont donc évitées.
- Adéquates à l'introduction des contraintes dures dans la procédure de restitution.
- Avec l'emploi de ces méthodes, on peut inspecter la solution de façon plus précise que lors d'un calcul en une seule opération.

Ces algorithmes itératifs sont adaptés à une grande variété de signaux [44] : Dégradation linéaire ou non, systèmes variants et invariants, bruit corrélé ou non.

4.5.1 L'algorithme de Van Cittert

C'est l'algorithme qui est à la base de nombreuses méthodes itératives de déconvolution. L'algorithme de Van Cittert est une méthode de point fixe [45, 46]. Il est fondé sur la résolution de l'équation de convolution sans bruit. L'équation de convolution sans bruit est donnée par :

$$y = \mathbf{H}x \quad (2.56)$$

On réarrange cette équation sous la forme :

$$0 = y - \mathbf{H}x \quad (2.57)$$

On ajoute x des deux cotés :

$$x = x + (y - \mathbf{H}x) \quad (2.58)$$

On obtient la forme itérative de Van Cittert :

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + (y - \mathbf{H}x_n) \\ x_0 = y \end{cases} \quad (2.59)$$

Le vecteur x_n est en quelque sorte une solution intermédiaire entre les solutions initiale x_0 et final x_∞ . On peut montrer que l'algorithme de Van Cittert converge vers une solution x_∞ équivalente à celle obtenue par l'inversion directe [47] :

$$x_\infty \rightarrow \mathbf{H}^{-1}y \quad (2.60)$$

4.5.2 Régularisation et introduction des contraintes dures dans de l'algorithme de Van Cittert :

L'algorithme de Van Cittert ne tient pas en compte l'existence de bruit dans la mesure. Il provoque, comme toute méthode non-régularisée, l'amplification du bruit. Il faudra d'une manière ou d'une autre introduire une régularisation si l'on souhaite obtenir une solution acceptable. De plus, la régularisation seule n'étant pas suffisante. Le résultat obtenu peut contenir des valeurs négatives, et il est essentiel, voir obligatoire de rendre la solution positive par l'introduction d'une contrainte de positivité. La contrainte de positivité étant elle-même fortement régularisante [4].

En remplaçant la résolution itérative de $y = \mathbf{H}x$ par celle de $\mathbf{H}^T y = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D})x$. L'algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller s'écrit :

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + [\mathbf{H}^T y - (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D}) x_n] \\ x_0 = \mathbf{H}^T y \end{cases} \quad (2.61)$$

Pour introduire des contraintes dures dans l'algorithme de Van Cittert, il suffit de remplacer x_n par $\mathbf{C}x_n$ avant de calculer x_{n+1} . En combinant les contraintes dures avec la régularisation de Tikhonov-Miller, on obtient l'algorithme suivant, mis au point par B.Gautier et R.Prost [3, 33,47]:

$$\begin{cases} x_{n+1} = \mathbf{C}x_n + \mu_n [\mathbf{H}^T y - (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D}) \mathbf{C}x_n] \\ x_0 = \mathbf{H}^T y \end{cases} \quad (2.62)$$

μ_n est un scalaire ajusté à chaque itération pour optimiser la rapidité de la convergence [44]. Dans ce travail nous avons pris tout simplement : $\mu_n = 1$.

4.6 Proposition d'une nouvelle méthode de déconvolution en SIMS

En utilisant l'algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures, au cours de notre étude, nous avons observé dans des essais de déconvolution des profils constitués par des deltas-dopage qu'il est possible d'obtenir des résultats très satisfaisant en prenant tout simplement $\alpha = 0$. Nous avons au début attribué ce bon résultat aux faibles valeurs généralement obtenues pour α lors de l'utilisation de la régularisation de Tikhonov-Miller. Nous avons ensuite proposé de négliger totalement ce paramètre, et décidé de faire une étude complète du comportement de l'algorithme obtenu dans ce cas.

En prenant $\alpha = 0$, ceci conduit à la suppression du terme de régularisation $\alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D}$ dans l'expression précédente de l'algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures, et l'obtention de l'algorithme suivant :

$$\begin{cases} x_{n+1} = \mathbf{C}x_n + \mathbf{H}^T [y - \mathbf{H}\mathbf{C}x_n] \\ x_0 = \mathbf{H}^T y \end{cases} \quad (2.63)$$

Il est très important de noter que la suppression du terme de régularisation $\alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D}$ dans le cas de l'inversion directe conduit directement à la solution par les moindres carrée qui est inacceptable (équation 2-42). Ce terme garde toute son importance ici, et il ne faut pas perdre de vue qu'il a été ajouté au terme des moindres carrés afin de transformer le problème mal posé en

un problème bien posé. L'algorithme donné par l'équation (2.63) ne constitue finalement qu'une méthode itérative pour la résolution du problème des moindres carrés avec introduction des contraintes dures. Au contraire de l'opération de l'inversion directe, cette procédure permet l'obtention des résultats stables, et constitue une autre manière de régularisation où l'indice d'itération lui-même joue le rôle de paramètre de régularisation. Nous allons voir ceci en détail dans le chapitre 3.

Dans une première vue, il apparaît que cet algorithme possède les avantages suivant par rapport à l'algorithme de base :

- Gain de temps de calcul : le calcul de α et \mathbf{D} est évité.
- Simplicité : La déconvolution d'un profil mesuré est possible par la seule connaissance de la DRF.

Une étude détaillée de performances et de limites de cet algorithme sera présentée dans le chapitre suivant, où une comparaison avec l'expression de base sera faite.

Pour terminer, mentionnons que nous avons abouti à l'expression (2.63) en se basant sur l'expression (2.62). L'expression (2.63) est finalement équivalente à celle de l'algorithme de Landweber projeté (Projected Landweber Algorithm) [48], qui est basé sur l'algorithme de Landweber [49], un algorithme très connu dans le domaine de traitement des images.

Pour des raisons de rapidité, la plupart des calculs dans ce travail sont effectués dans l'espace de Fourier, bien qu'il soit parfaitement possible de les effectuer dans le domaine matriciel. L'introduction des contraintes dures non linéaires comme la contrainte de positivité ou d'amplitude n'étant pas possible dans l'espace de Fourier, il faut l'effectuer dans le domaine temporel. A chaque itération on aura donc besoin de deux FFT, une transformation de Fourier inverse avant la contrainte et une transformation directe après.

4.7 Calcul des erreurs

Pour mesurer la qualité d'une déconvolution, il est très intéressant de calculer l'erreur commise entre les profils réel et déconvolué d'une part, appelée erreur non observable ou erreur vraie, et l'erreur entre les profils mesuré et reconstruit d'autre part, appelée erreur observable ou erreur de reconstruction.

4.7.1 Erreur vraie:

L'idéal dans une opération de déconvolution serait de disposer de l'erreur vraie (l'erreur exacte). Malheureusement, elle n'est accessible qu'en simulation. Dans des conditions réelles, le profil réel est bien sûr inconnu, et c'est lui-même qu'on cherche à estimer par l'opération de déconvolution.

Par contre, sera une donnée précieuse lors des simulations, où elle permet de vérifier les performances théoriques d'une méthode de déconvolution, comme elle permet aussi la comparaison entre différentes méthodes de déconvolution. Nous allons dans ce travail l'exprimer sous deux formes :

- Sous forme d'un vecteur :

La différence point à point entre le profil déconvolué à l'itération n (x_n) et le profil réel (x) :

$$e_{vw} = x_n - x \quad (2.64)$$

- Ecart Euclidien relatif entre x_n et x :

$$e_{ve} = \frac{\|x_n - x\|}{\|x\|} \quad (2.65)$$

4.7.2 Erreur de reconstruction

Cette erreur est accessible dans le cas de la déconvolution des profils simulés et même expérimentaux. Comme dans le cas de l'erreur vraie, nous allons l'exprimer sous deux formes :

- Sous forme d'un vecteur :

La différence point à point entre le profil mesuré (y) et le profil reconstruit ($\mathbf{H}x_n$) :

$$E_{rv} = y - \mathbf{H}x_n \quad (2.66)$$

- Ecart Euclidien relatif entre le profil mesuré et le profil reconstruit :

$$E_{re} = \frac{\|y - \mathbf{H}x_n\|}{\|y\|} \quad (2.67)$$

5. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons essayé de donner une vision claire sur le principe de la restauration des données perdue lors de la mesure en SIMS, et donc l'amélioration de la résolution en profondeur de cette technique, par l'application d'une technique de déconvolution.

Nous avons tout d'abord commencé par une étape préliminaire indispensable à la mise en œuvre de la déconvolution : la définition de la réponse impulsionnelle du système dite DRF (Depth Resolution Function). Parmi les formes analytiques existantes pour celle-ci, nous avons choisi une, qui est le résultat de la convolution d'une double exponentielle par une gaussienne.

Le problème de la déconvolution en SIMS, comme dans la majorité des domaines fait partie des problèmes inverses mal posés. La présence de bruit dans la mesure complique les calculs, et il et faut prendre certaines précautions si on cherche à obtenir un résultat acceptable. Il faut donc transformer le problème mal posé en un problème bien posé, ceci est rendu possible en faisant appel à une régularisation. Cette dernière peut être réalisée soit par l'apport d'informations a priori ou par l'utilisation d'une technique itérative, comme dans le cas de l'algorithme proposé dans ce travail. De plus de la régularisation, l'application des contraintes dures est nécessaire pour forcer le résultat obtenu à satisfaire les propriétés physiques connu auparavant sur les mesures, en particulier la positivité.

Pour l'introduction des contraintes dures, on fait appel généralement aux algorithmes itératifs. En se basant sur l'un de ces algorithmes : l'algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures, qui a déjà prouvé son efficacité en SIMS, nous avons proposé finalement une nouvelle technique de déconvolution en SIMS. Dans le chapitre suivant nous aurons l'occasion de comparer ces deux techniques, et de faire en particulier une étude détaillée sur la technique proposée.

Chapitre 3

**Application des techniques de déconvolution aux profils SIMS
simulés**

1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous allons commencer par comparer les deux techniques de déconvolution dont nous avons parlé dans le chapitre précédent : l'algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures, et la technique de déconvolution proposée dans ce travail. Pour ce faire, nous utiliserons des profils SIMS simulés. Ceci permet de bien vérifier les performances des algorithmes en termes de qualité de restitution du profil réel. Dans ce cas, les profils réels sont construits par nous-mêmes, ce qui permet de vérifier la qualité de restitution par une simple comparaison visuelle entre le profil déconvolué et le profil réel, et /ou par le calcul de l'erreur entre le profil réel et le profil déconvolué (l'erreur vraie). De plus, l'évolution de l'erreur vraie en fonction des itérations permet d'étudier la convergence des algorithmes.

Nous appellerons « Algorithme avec terme de régularisation » l'algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures, et « Algorithme sans terme de régularisation » l'algorithme proposé dans ce travail.

Nous allons ensuite focaliser notre étude sur l'algorithme sans terme de régularisation. Nous essayerons de définir des critères d'arrêt pour cet algorithme, et d'étudier sa capacité en termes de séparabilité (sa capacité à séparer deux couches très fines). Dans ce chapitre, nous allons aussi déconvoluer différents types de structures et donner des explications aux difficultés rencontrées lors de la récupération de chaque structure par déconvolution. L'influence des incertitudes dans la mesure de la DRF sur les résultats de la déconvolution sera aussi étudiée. Ce sera l'occasion pour nous de traiter aussi le problème de la déconvolution avec une DRF variante.

2. PROCEDURE DE SIMULATION

La simulation des profils SIMS est basée sur l'approche suivante : un « profil réel » est construit analytiquement. Ce profil est convolué ensuite avec une DRF également analytique dont les paramètres sont tirés à partir d'une mesure expérimentale, pour aboutir dans un premier temps à un « signal parfait », c'est-à-dire sans bruit ajouté. Enfin, une composante de bruit est ajoutée au résultat de la convolution. Le profil résultant de cette procédure sera appelé « profil mesuré ».

Pour simuler le bruit qui s'ajoute au signal, nous avons construit un bruit gaussien de valeur moyenne nulle par rapport au signal (ce qui veut dire que la variation du signal due au

bruit, par rapport au signal analytique parfait, peut être positive ou négative avec une distribution de probabilité gaussienne autour de la valeur parfaite). L'écart type de ce bruit est assujéti à la relation empirique utilisée par Allen et al. [1] (cf. chapitre 2) : $\sigma \approx 1.7\sqrt{M}$, où M est la valeur moyenne du signal parfait.

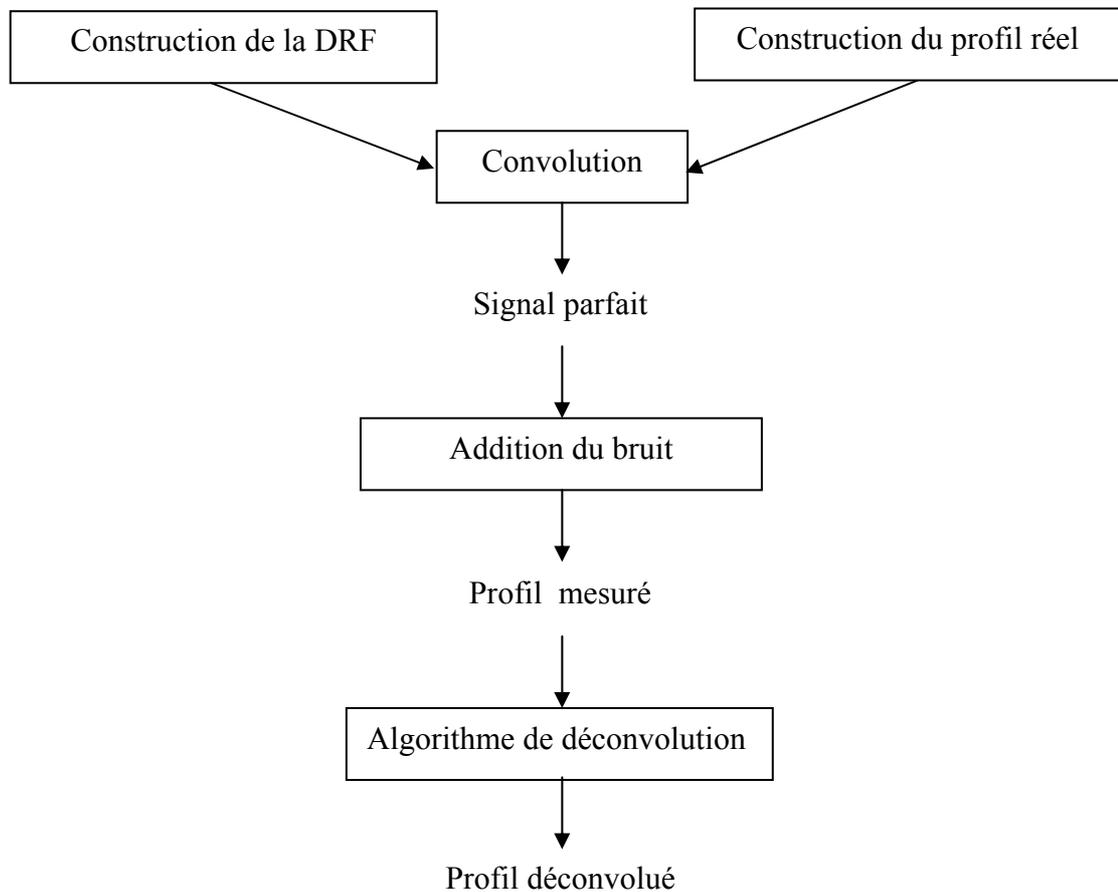
Comme nous avons vu dans le chapitre 2, le modèle Poissonien est également proposé pour le bruit SIMS. Cependant, nous avons préféré introduire un bruit de type gaussien pour nos simulations, et ceci pour les raisons suivantes:

- A partir de l'étude de Makarov [2], on pourrait penser qu'utiliser un bruit Poissonien est plus en conformité avec le mode de comptage de l'acquisition du profil de concentration. Cependant, suivant la référence [3], le bruit de comptage doit être considéré comme Poissonien uniquement dans le cas d'une analyse « parfaite », c'est-à-dire où le bruit de mesure proviendrait exclusivement de la détection des ions secondaires. Dans la réalité, le bruit est le résultat de plusieurs composantes aléatoires : variation de l'intensité des ions primaire, nature statistique de la pulvérisation et de l'ionisation, espèces préexistantes dans l'appareil (effet mémoire), etc... et d'après le théorème central limite, lorsque plusieurs processus aléatoires de types quelconques s'ajoutent le résultat tend vers un processus gaussien.
- Il a été vérifié que le type de bruit (Poissonien ou Gaussien) n'avait aucune influence sur le résultat des déconvolutions [4]. Ceci est confirmé par une autre étude [5]. Cette étude montre que les méthodes basées sur la méthode des moindres carrées (donc comme les méthodes utilisées dans ce travail) sont relativement insensibles à la nature du bruit (Poissonien ou Gaussien), bien qu'elles résultent de l'hypothèse d'un bruit Gaussien.
- Le bruit Poissonien est beaucoup plus long à construire numériquement.

La relation utilisée ici pour construire le bruit n'est valable que pour les valeurs du signal non nulles. Pour simuler le comportement des profils quand le signal devient très faible, nous avons procédé de la même manière que la référence [4]: Lorsque le signal est inférieur à 1 coup par seconde, alors la valeur moyenne de bruit ne suit plus celle de signal mais est conservée à 1 coup par seconde.

Les profils utilisés dans nos simulations seront construits avec un pas d'échantillonnage de 1 Å. Ils seront, dans la plupart des cas, présentés sur quatre décades : le maximum de profils simulés est situé autour de 10^4 coups par secondes. Dans la majorité des cas le rapport signal sur bruit (SNR) a été fixé à 40 dB.

La programmation a été effectuée sous MATLAB selon l'organigramme ci-dessous :



- **Remarque sur le positionnement des profils**

Nous avons choisi de positionner le profil mesuré par rapport au profil réel comme si la couche excitatrice était positionnée au maximum de la DRF. La même procédure sera employée pour les déconvolutions de profils expérimentaux dans le chapitre 4. On note que la définition de la position du profil mesuré par rapport au profil réel passe nécessairement par l'étude du positionnement de la couche excitatrice par rapport à la DRF, ainsi que du shift différentiel (Décalage du profil mesuré vers la surface dû principalement au fait que le taux d'érosion varie pendant le régime transitoire de l'analyse, alors que l'échelle des profondeurs est établie généralement avec l'hypothèse d'une vitesse d'érosion constante). On se limite à mentionner que l'étude de Gautier [4] tend vers la conclusion que le phénomène de shift n'est pas une donnée maîtrisable lors de l'analyse par un faisceau d'oxygène en incidence oblique.

Dans le travail présenté dans cette thèse, nous avons donc concentré nos efforts sur la forme des profils déconvolués plutôt que sur leur position exacte, les deux problèmes sont d'ailleurs totalement indépendants.

3. SIGNAUX-TYPES UTILISES POUR LES SIMULATIONS

3.1 Gaussienne

Les profils gaussiens peuvent être rencontrés dans le cas des implantations de dopants dans une matrice ou des diffusions Fickiennes : Un delta-dopage subit un recuit à une température donnée pendant un temps t diffuse, et aboutit en principe à un profil parfaitement gaussien d'écart-type $\sigma = \sqrt{2Dt}$, où D est le coefficient de diffusion dépendant de la température. Ce comportement suppose cependant que le coefficient de diffusion ne dépend pas de la concentration de l'élément diffusant.

La fonction gaussienne est l'un des cas analytique les plus simples et les plus intéressants. Elle présente l'avantage d'être entièrement caractérisée par son écart-type σ qui définit une largeur à mi-hauteur égale à 2.335σ . La mesure de la FWHM conduit donc immédiatement au moment centré d'ordre deux sans qu'il soit utile de la calculer de manière numérique.

3.2 Créneau

Tout comme les gaussiennes, les créneaux constituent un cas intéressant de déconvolution SIMS. Celui-ci se retrouve fréquemment dans les échantillons à analyser, avec des fronts montant et descendant plus ou moins abrupts. Dans nos simulations les fronts sont supposés parfaitement abrupts, afin de se placer dans les conditions les plus défavorables.

3.3 Delta-Dopage

Les profils en forme de deltas dopage constituent des structures idéales pour évaluer n'importe quelle méthode de déconvolution puisque ce sont les profils les plus affectés par la convolution lors de l'analyse SIMS. Leur déconvolution donne une idée directe de ce qu'on peut attendre de la résolution en profondeur tant sur le plan expérimental que numérique.

4. COMPARAISON ENTRE LES DEUX ALGORITHMES –AVEC ET SANS TERME DE REGULARISATION-

Pour tester le comportement des deux algorithmes dans une large gamme, nous avons d'une part, simulé analytiquement différentes structures, en particulier les trois signaux-types mentionnés ci-dessus: Gaussien, créneau et delta dopage ; et d'autre part, simulé différentes conditions expérimentales en variant les rapports signal sur bruit SNR (Signal-to-Noise Ratio) et en utilisant des DRF mesurés à différentes énergies d'incidences. Les paramètres des fonctions de résolution utilisées ici sont représentés dans le tableau 3-1. On rappelle que le SNR est défini comme le rapport de la puissance du signal y et de la puissance de bruit b exprimé de la manière suivante :

$$\mathbf{SNR}_{(dB)} = 10 \log_{10} \left(\frac{\|y\|^2}{\|b\|^2} \right) \quad (3.1)$$

Comme nous avons mentionné dans le chapitre 2, dans le cas de simulations, la valeur du paramètre de régularisation peut être déterminée en utilisant la relation $\alpha_{Miller} = \|b\|^2 / r^2$ (Méthode de Miller). C'est cette relation donc que nous avons utilisé ici pour calculer les valeurs de ce paramètre. Les valeurs du paramètre de régularisation obtenues correspondant à chaque profil sont mentionnées dans le tableau 3-2.

L'erreur vraie sera évaluée de deux manières :

i) vecteur de l'erreur vraie (e_{vv}) (eq. 2.64).

ii) écart Euclidien relatif (e_{ve}) (eq. 2.65). Cette dernière sera tout simplement appelée *erreur vraie*.

On note également que le nombre optimal des itérations correspondant au minimum de l'erreur vraie sera noté n_{opt} . Les valeurs de n_{opt} dans les cas de déconvolutions des profils gaussien et créneau sont représentées dans le tableau 3-2.

DRF	λ_u (Å)	λ_d (Å)	σ_g (Å)
Profil gaussien	10.9	37.5	22.5
Créneau (300 Å de largeur)	10.9	37.5	22.5
Delta dopage	2	7	4

Tableau (3-1) : Paramètres de la DRF pour chaque profil simulé

	Algorithme avec terme de régularisation			Algorithme sans terme de régularisation		
	α_{Miller}	n_{opt}	e_{vem}	α	n_{opt}	e_{vem}
Profil gaussien	0.0031	48	0.0116	0	47	0.0119
Créneau (300 Å de largeur)	0.0011	3171	0.1152	0	1651	0.1146

Tableau (3-2) : Valeurs de α , valeurs minimales de l'erreur vraie e_{vem} , et n_{opt} correspond à e_{vem} dans le cas des profils gaussien et créneau de 300 Å de largeur, pour les deux algorithmes (avec et sans terme de régularisation).

4.1 Déconvolution d'un profil gaussien

Une fonction gaussienne d'écart-type $\sigma = 50$ Å a été considérée. Elle est convoluée avec une DRF analytique dont les paramètres ont été extraits à partir de la référence [6]. Cette DRF correspond à une mesure expérimentale d'un delta dopage de bore dans du silicium, sous une énergie de 5.5 keV/ O₂⁺. Nous avons ensuite, rajouté un bruit au résultat de cette convolution. Il a été ajusté afin d'obtenir un rapport SNR égal à 30 dB.

La figure 3-1A représente les variations des *erreurs vraies* en fonction du nombre d'itération n , pour les deux algorithmes (sans et avec terme de régularisation). Dans les deux cas, l'erreur présente un minimum : l'erreur diminue avec l'augmentation du nombre des itérations jusqu'à atteindre sa valeur minimale, puis augmente de nouveau. Pour l'algorithme avec terme de régularisation, l'erreur se stabilise finalement à un niveau presque constant. Quand à l'algorithme sans terme de régularisation le système diverge et l'erreur augmente et se stabilise à un niveau supérieur. Le minimum de l'erreur est presque le même pour les deux algorithmes (voir tableau 3-2). Les valeurs de n_{opt} sont respectivement 48 et 47 pour les algorithmes avec et sans terme de régularisation.

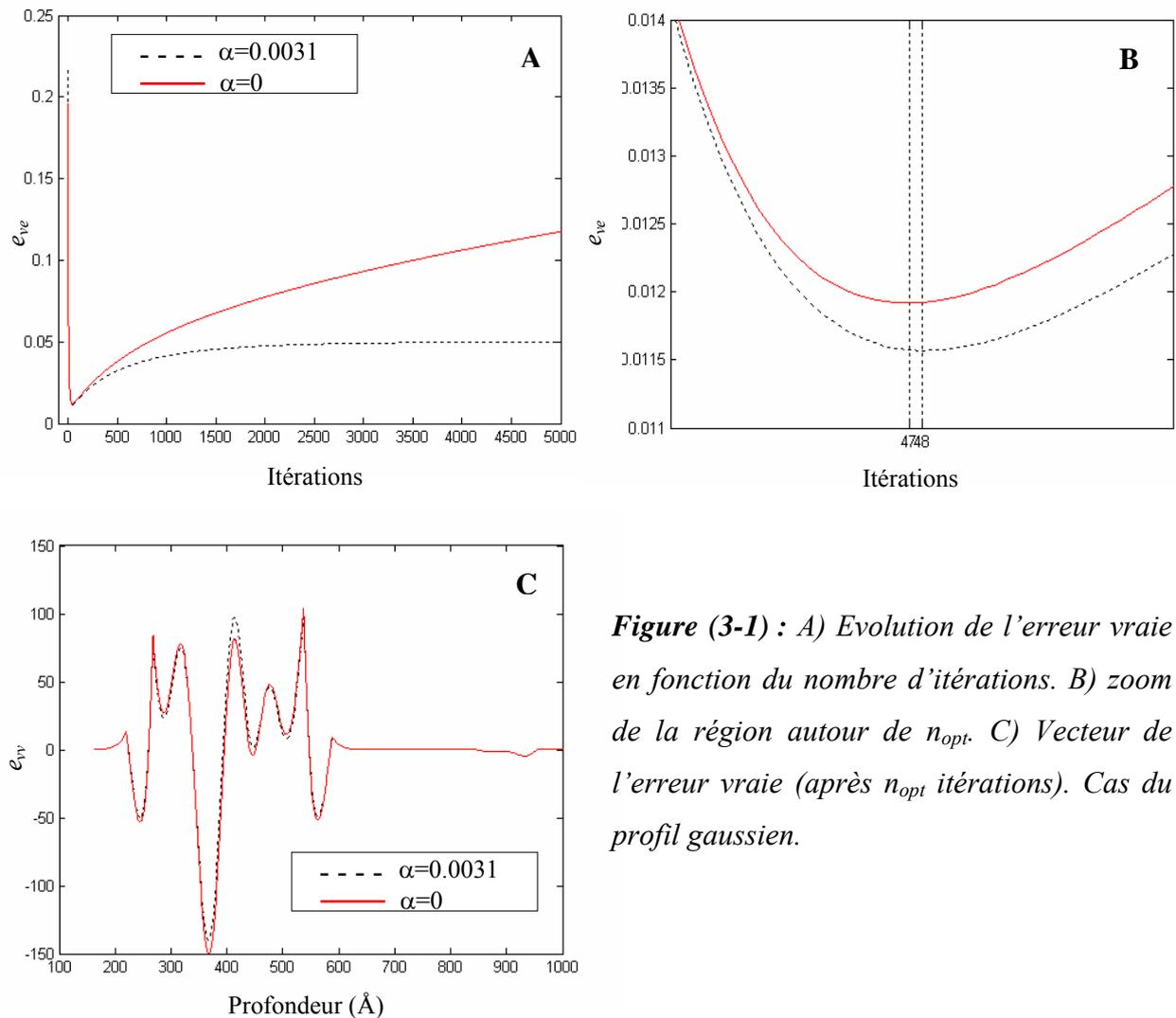


Figure (3-1) : A) Evolution de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itérations. B) zoom de la région autour de n_{opt} . C) Vecteur de l'erreur vraie (après n_{opt} itérations). Cas du profil gaussien.

Le comportement des *erreurs vraies* indique que les deux algorithmes avec et sans terme de régularisation présentent une semiconvergence. Il est clair donc que dans le cas de l'algorithme sans terme de régularisation, l'obtention d'une solution régularisée est conditionnée par un choix approprié du nombre d'itération. Ceci représente un autre type de régularisation où le choix du nombre d'itération est équivalent au choix du paramètre de régularisation dans le cas d'une régularisation du Tikhonov-Miller. Dans le cas de l'algorithme avec terme de régularisation, cette propriété indique que la régularisation est insuffisante. Ceci peut être expliqué par le fait que la méthode de Miller sous-estime souvent la valeur du paramètre de régularisation (comme nous l'avons déjà mentionné dans le chapitre 2).

En effet, en augmentant la valeur du paramètre de régularisation (prenons par exemple $\alpha = 0.1$) on observe qu'après 79 itérations l'erreur atteint sa valeur minimale (0.0417), puis se stabilise à cette valeur (voir figure 3-2). Le résultat obtenu avec α_{miller} est meilleur en termes d'erreur et rapidité de convergence: une erreur inférieure et une convergence plus rapide (48 itérations contre 79 itérations dans le cas du $\alpha = 0.1$ est observée). Cependant, la valeur de $\alpha = 0.1$ est la plus appropriée, puisque dans tous cas il ne faut pas oublier le rôle du paramètre de régularisation.

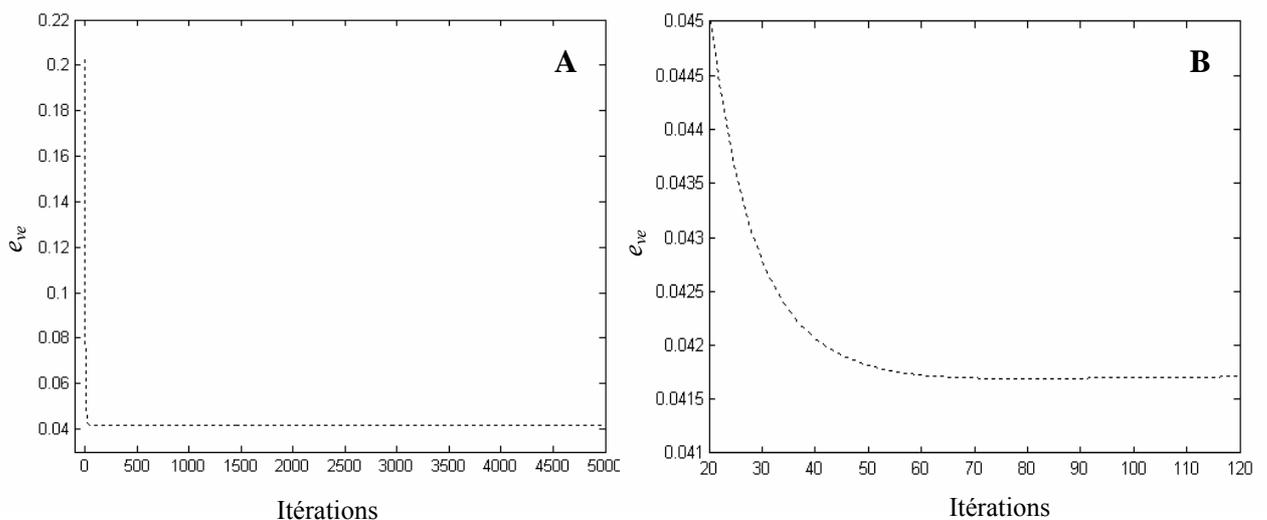


Figure (3-2) : A) Evolution de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itérations. B) zoom du début de la courbe. Cas du profil gaussien: $\alpha=0.1$.

A partir de la figure 3-1C on peut conclure que le vecteur de l'erreur vraie (après n_{opt} itérations) dans le cas de l'algorithme sans terme de régularisation représente presque le même comportement que dans le cas de l'algorithme avec terme de régularisation.

Les meilleurs résultats de déconvolution sont bien sûr obtenus après n_{opt} itérations, lorsque l'erreur vraie atteint sa valeur minimale. Comme il est observé sur la figure 3-3, il est très clair que les résultats obtenus par les deux algorithmes sont similaires. La restauration du profil réel est parfaite sur plus d'une décade du signal. Des oscillations apparaissent cependant au niveau bas du signal. Ces oscillations sont des artefacts générés par le bruit.

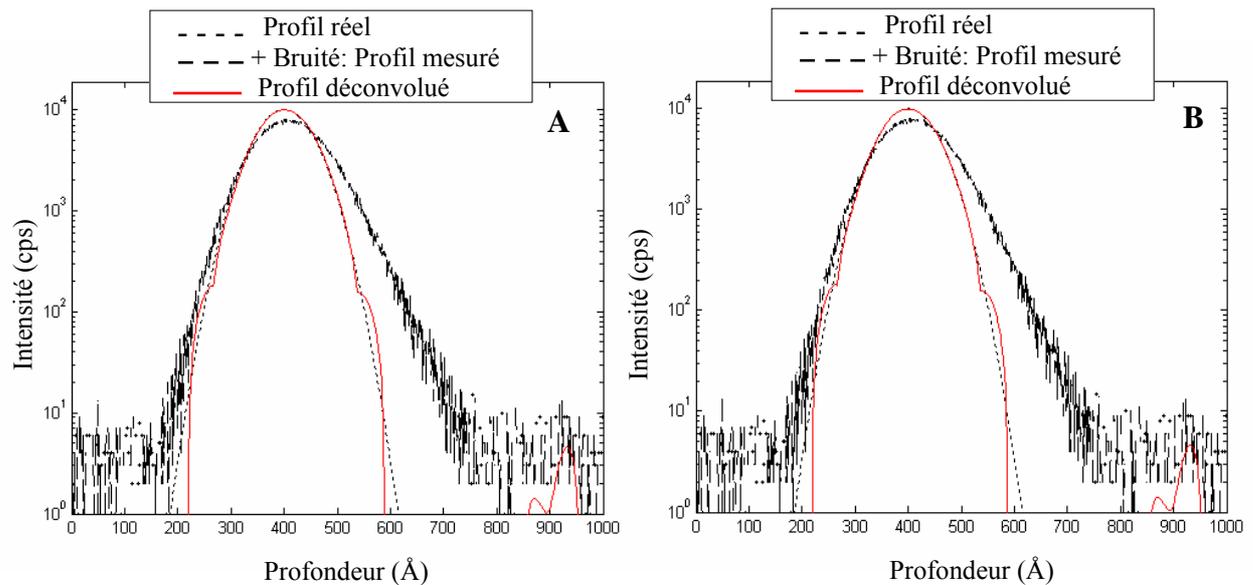


Figure (3-3) : Déconvolution d'une fonction gaussienne de $\sigma = 50 \text{ \AA}$. $SNR = 30 \text{ dB}$.

A) $\alpha = 0.0031$, B) $\alpha = 0$.

4.2 Déconvolution d'un créneau de 300 \AA de largeur

Un créneau de 300 \AA de largeur est construit analytiquement. Ce profil a été convolué avec la même DRF considérée précédemment. Le SNR cette fois-ci est égale à 35 dB .

Les courbes des erreurs vraies représentées sur la figure 3-4A révèlent que les erreurs possèdent un minimum très proche dans les deux cas : algorithme avec et sans terme de régularisation. Cependant, par comparaison avec la déconvolution précédente (du profil gaussien), la propriété de semiconvergence est moins prononcée ici, et apparaît seulement dans le cas de la suppression de α . Dans le cas de l'algorithme avec terme de régularisation l'erreur vraie reste presque constante après n_{opt} itérations.

À partir du tableau 3-2, il est évident que n_{opt} dans le cas de l'utilisation de l'algorithme sans terme de régularisation est considérablement inférieur à n_{opt} lorsqu'on utilise l'algorithme avec terme de régularisation.

On observe sur la figure 3-4B, la superposition des vecteurs de l'erreur vraie correspondant aux deux algorithmes.

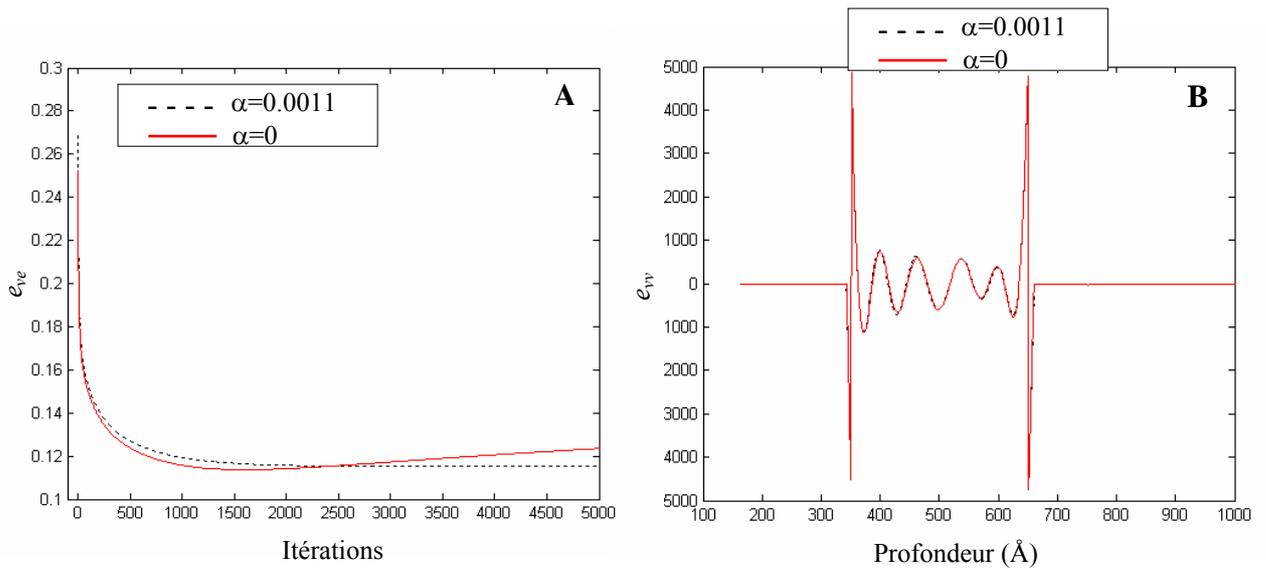


Figure (3-4) : A) Evolution de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itérations. B) Vecteur de l'erreur vraie (après n_{opt} itérations). Cas du créneau de 300 Å de largeur.

Les résultats de la déconvolution après n_{opt} itérations sont présentés sur la figure 3-5. Les profils déconvolués obtenus avec les deux algorithmes sont identiques. Les pentes exponentielles du profil mesuré ont été supprimées après déconvolution. Le profil réel est presque restauré, mais avec des oscillations générées sur le plateau du créneau. Ces oscillations sans d'ailleurs observés dans la plupart des techniques de déconvolution [3, 4].

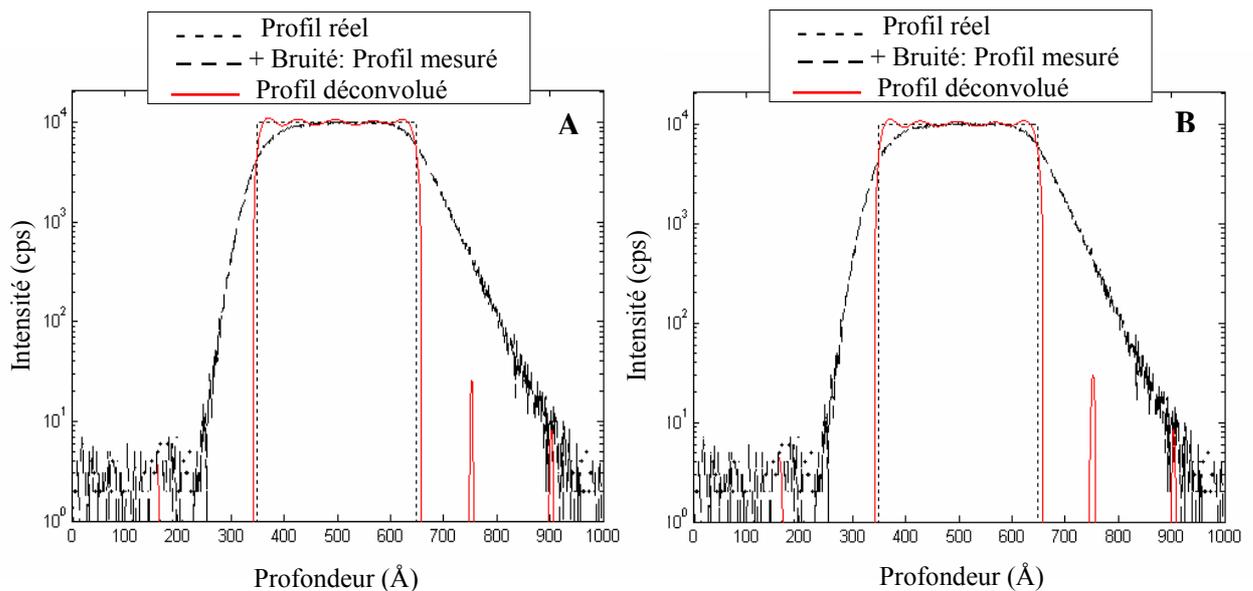


Figure (3-5) : Déconvolution d'un créneau de 300 Å de largeur. SNR= 35 dB.

A) $\alpha=0.0011$, B) $\alpha=0$.

4.3 Déconvolution d'un delta-dopage

Nous allons étudier la déconvolution d'un delta dopage dans son aspect le plus théorique, c'est-à-dire en prenant comme signal de départ un signal constitué par un seul point. Pour construire le profil mesuré ici, une DRF est choisie, puis convoluée avec une valeur constante, qui constitue le profil réel (ceci est équivalent tout simplement à faire le produit de la DRF par cette valeur). Finalement, une composante de bruit est ajoutée.

Conditions de déconvolution

Lors de la déconvolution, nous avons observé que le profil déconvolué obtenu est tronqué sur les bords. Ici l'opération de la déconvolution cherche à restaurer un profil réel composé par un seul point. A chaque itération le profil déconvolué s'approche de plus en plus du profil réel. L'opération de déconvolution doit normalement conduire finalement à un profil déconvolué composé aussi par un seul point. Or on sait que la déconvolution n'est pas supposée restaurer complètement le profil réel. Le profil déconvolué sera, dans tous cas, intermédiaire entre le profil mesuré et le profil réel. Il aura donc une longueur comprise entre 1 et N_y points. Il en résulte une troncature du profil déconvolué. Si on veut éviter d'avoir un profil déconvolué tronqué sur les bords, il est nécessaire de partir d'un profil réel comportant assez de points. La technique consiste tout simplement à ajouter suffisamment de zéros de part et d'autre du profil réel [3].

Les paramètres de la DRF ont été extraits à partir de la référence [7]. Ces paramètres sont obtenus à partir du premier delta-dopage d'un profil expérimental contenant des deltas-dopage de bore dans le silicium, mesuré à 500 eV/ O_2^+ . Dans le chapitre suivant, nous aurons l'occasion de faire la déconvolution de ce profil. Nous avons ajouté un bruit pour obtenir un rapport SNR égal à 25 dB. En utilisant la méthode de Miller on obtient un paramètre de régularisation $\alpha = 1.38 \cdot 10^{-4}$.

La figure 3-6A représente l'erreur vraie. Avec les deux algorithmes, on peut voir clairement que l'erreur vraie décroît toujours avec l'augmentation de n , et ceci quelque soit le nombre d'itérations effectué. On note que l'erreur vraie continue de diminuer même après 100000 itérations (qui est un nombre d'itération très élevé et son utilisation est limitée au cas de simulation). Dans le cas des profils expérimentaux, les conditions de la déconvolution sont plus strictes, l'amplification des artéfacts avec l'augmentation du nombre d'itérations impose

l'utilisation d'un nombre d'itérations plus faible. Nous reviendrons sur ce point dans le chapitre 4).

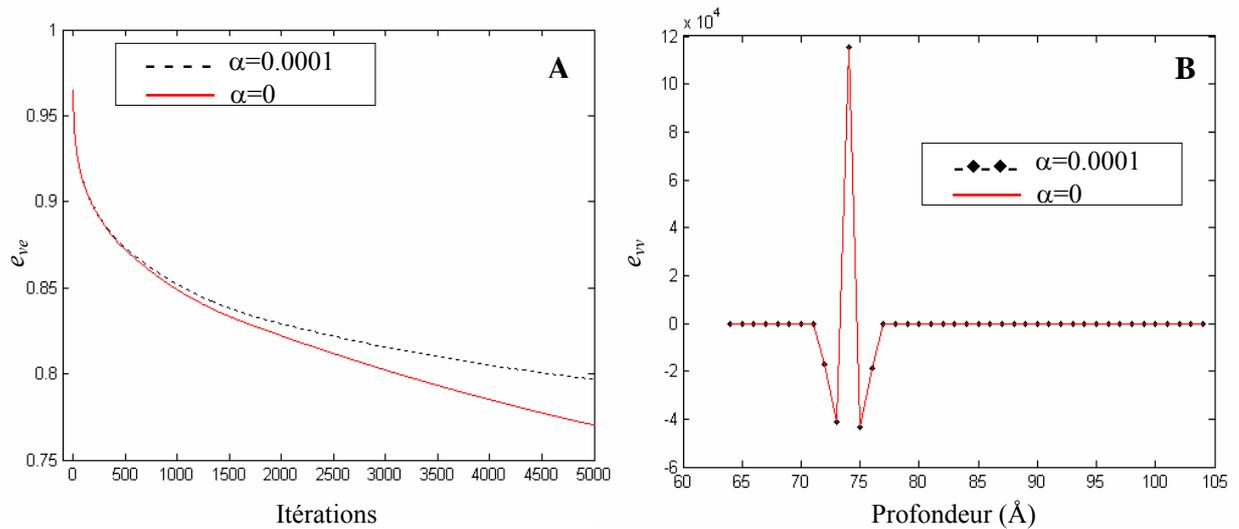


Figure (3-6) : A) Evolution de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itérations. B) Vecteur de l'erreur vraie. Cas du delta dopage.

Cette décroissance de l'erreur vraie est observée donc même dans le cas de l'algorithme sans terme de régularisation. Cet effet peut être expliqué par le grand écart qui existe entre le profil mesuré et le profil original, puisque les deltas-dopage sont des structures très affectées par la convolution. En effet, au cours des itérations, le profil déconvolué s'approche de plus en plus vers le profil original, mais ceci s'accompagne par une amplification du bruit. Il s'en suit qu'à une itération donnée, l'erreur vraie est dominée par l'erreur causée par le bruit ce qui conduit à la divergence de l'algorithme. Ici, l'écart entre le profil mesuré et le profil original est tellement important que l'algorithme n'atteint pas le point où l'erreur vraie sera contrôlée par l'erreur de bruit. n_{opt} tend donc vers l'infini. Les courbes représentant le vecteur de l'erreur vraie (figure 3-6B) montrent clairement que l'erreur entre le profil réel et le profil déconvolué (Après 5000 itérations pour l'algorithme avec terme de régularisation, et 3304 itérations pour l'algorithme sans terme de régularisation) est très importante. On note encore ici que les courbes obtenues en utilisant les des deux algorithmes sont superposées.

Il est évident que pour n'importe quel nombre d'itérations, l'erreur vraie calculée dans le cas de l'algorithme sans terme de régularisation prend des valeurs inférieures à celles obtenues dans le cas de l'algorithme avec terme de régularisation. L'écart entre les valeurs de l'erreur

obtenues dans les deux cas devient de plus en plus important avec l'augmentation du nombre d'itérations.

L'erreur vraie est une fonction décroissante en fonction de n . Pour comparer les résultats de déconvolution obtenus avec les deux algorithmes, nous avons choisis d'arrêter les itérations lorsque l'erreur vraie atteint la valeur de 0.7968 (l'erreur correspond à 5000 itérations en utilisant l'algorithme avec terme de régularisation). Dans le cas de l'algorithme avec terme de régularisation 5000 itérations sont donc nécessaires, tandis que dans le cas de l'algorithme sans terme de régularisation 3304 itérations seulement sont nécessaires. Ceci représente sans doute une énorme réduction dans le nombre d'itérations.

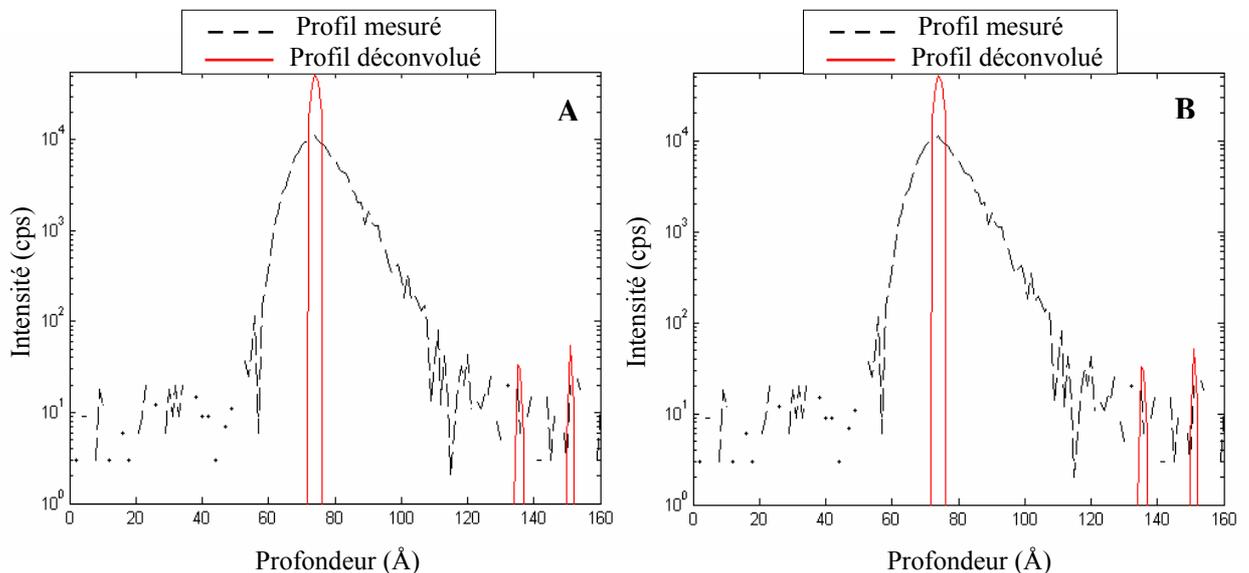


Figure (3-7) : Déconvolution d'un delta dopage. $SNR = 25$ dB. A) $\alpha = 1.38 \cdot 10^{-4}$, B) $\alpha = 0$.

Les résultats de la déconvolution sont représentés sur la figure 3-7. On peut remarquer que les résultats obtenus avec les deux algorithmes sont similaires. Le profil déconvolué nous montre une nette amélioration de la résolution en profondeur : On observe une réduction notable de la largeur de δ -dopage avec une suppression complète des pentes exponentielles de part et d'autre du pic.

Pour les profils en forme de deltas-dopage, l'amélioration de la résolution en profondeur apportée par la déconvolution est généralement mesurée par :

i) le gain en résolution en profondeur, qui est par définition, le rapport de la FWHM (largeur à mi-hauteur) du delta dopage mesuré sur la FWHM du delta dopage déconvolué.

ii) le gain en maximum, qui est par définition, le rapport de l'intensité maximale du delta dopage déconvolué sur l'intensité maximale du delta dopage mesuré.

Les gains en résolution en profondeur et en maximum obtenus (Après 5000 itérations pour l'algorithme avec terme de régularisation, et 3304 itérations pour l'algorithme sans terme de régularisation) sont pratiquement les mêmes pour les deux algorithmes, leurs valeurs sont respectivement 4.77 et 4.6.

Les figures 3-8 et 3-9 représentent respectivement les variations des gains en résolution en profondeur et en maximum, en fonction du nombre d'itérations. On observe que pour un même nombre d'itérations, les gains obtenus en utilisant l'algorithme sans terme de régularisation sont meilleur que ceux obtenus en utilisant l'algorithme avec terme de régularisation. L'écart entre les valeurs obtenues par les deux algorithmes augmente avec l'augmentation du nombre d'itérations.

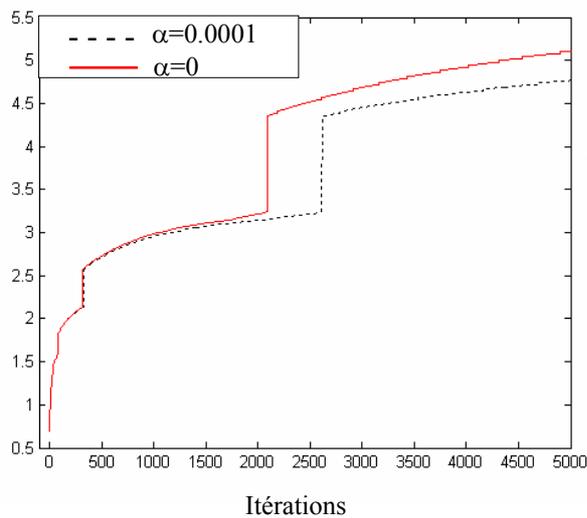


Figure (3-8) : Évolution du gain en FWHM en fonction du nombre d'itérations.

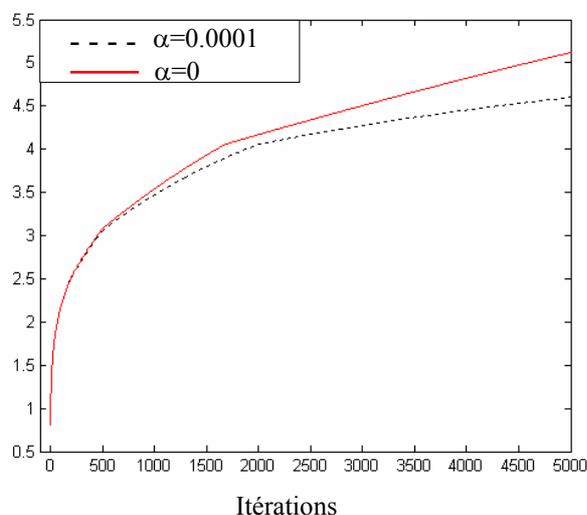


Figure (3-9) : Évolution du gain en maximum en fonction du nombre d'itérations.

4.4 Conclusion

L'algorithme sans terme de régularisation, proposé dans ce travail, est capable de produire des solutions régulières similaires à celles obtenues par l'algorithme avec terme de régularisation, avec une convergence plus rapide. De plus, les gains en résolution en profondeur et en maximum obtenus avec cet algorithme sont meilleurs que ceux obtenus avec l'algorithme avec terme de régularisation. Ces résultats favorisent sa proposition en SIMS.

À partir du comportement des erreurs vraies, Il apparaît clairement que si le problème avec l'algorithme avec terme de régularisation est la détermination de la valeur de α qui permet une bonne régularisation de l'algorithme, le problème avec l'algorithme sans terme de régularisation est de stopper les itérations avant que les instabilités apparaissent. Dans ce dernier cas, l'arrêt de l'algorithme à une itération donnée constitue une autre forme de régularisation, où le nombre optimal des itérations joue le rôle du paramètre de régularisation. Il sera donc très utile de définir des critères pour arrêter l'algorithme au bon moment. Ceci est l'objectif du paragraphe suivant. Le reste de ce travail sera concentré sur l'algorithme sans terme de régularisation.

5. CRITERES D'ARRET DE L'ALGORITHME

5.1. Cas des profils gaussien et en créneau

Dans le cas de la déconvolution des profils gaussien et en créneau nous avons observé que l'algorithme proposé est semiconvergent : il converge premièrement vers une solution régularisée, atteint la meilleure solution après un nombre d'itérations optimal n_{opt} , puis diverge. Pour stopper l'algorithme, l'idéal serait de disposer de ce nombre. Malheureusement, le nombre d'itérations optimal est inconnu dans les conditions normales de la déconvolution (profils expérimentaux), où l'erreur vraie est inaccessible, car dépend directement du profil réel que nous cherchons, il faut donc développer des procédures qui permettent de faire une estimation de n_{opt} .

5.1.1. Contrôle visuel des résultats au cours des itérations

L'une des techniques qu'on peut appliquer est d'étudier visuellement, en ligne, la qualité des résultats obtenus dès qu'ils seront calculés (ceci est possible en effectuant un affichage simultané des résultats avec les itérations), et de stopper l'algorithme tout simplement lorsqu'on aboutit à la qualité souhaité du résultat. D'après la référence [8], ceci peut être le critère d'arrêt le

plus approprié dans beaucoup d'applications, lors de l'emploi d'une méthode itérative semiconvergente, mais il demande une bonne imagination de ce qu'on peut attendre de la déconvolution d'une telle structure. Nous proposons d'ajouter au contrôle visuel quelques règles, tirées à partir du comportement des erreurs vraies, pour améliorer encore les performances de cette technique.

Revenons sur les courbes de l'erreur vraie obtenues dans le cas de l'algorithme sans terme de régularisation représentés sur les figures 3.1A et 3.4A. Nous nous sommes intéressés cette fois-ci à la manière avec laquelle le profil déconvolué évolue au cours de la déconvolution, et plus précisément à la rapidité de cette évolution, puisque ce sont les changements de cette dernière qu'on peut détecter visuellement. Pour étudier quantitativement cette évolution, nous avons tracé les variations de l'écart entre la valeur de l'erreur obtenue dans une itération donnée et la valeur de cette erreur dans l'itération suivante (pris en valeur absolue), la variation de cet écart au cours de la déconvolution dans le cas de la fonction gaussienne et du créneau de 300 Å de largeur est représentée sur les figures 3-10 et 3-11 respectivement. Ces courbes nous ont permis de tirer les observations suivantes :

- Dans le cas de la fonction gaussienne (figure 3-10A), l'écart le plus large est observé entre l'itération 1 et 2 (représenté par le premier point de la courbe). On observe ensuite une diminution continue et rapide de cet écart jusqu'à n_{opt} . Après n_{opt} l'écart commence à augmenter mais d'une manière plus lente qu'avant n_{opt} (figure 3-10B), atteint une valeur donnée (faible par rapport aux valeurs des écarts obtenus dans les premières itérations), puis commence encore à diminuer, mais cette fois-ci très lentement. Autour de n_{opt} on observe donc des écarts très faibles entre les erreurs calculées à chaque itération. Suite à ce comportement, lors de la déconvolution, on peut visuellement observer que le profil déconvolué évolue très rapidement au début de la déconvolution. Les changements observés sur le profil déconvolué deviennent de plus en plus faibles au fur et à mesure que les itérations augmentent jusqu'à ce qu'ils deviennent très faibles autour de n_{opt} , puis augmentent un peu avant qu'ils diminuent encore mais très lentement. En exploitant ce comportement, il faut donc, dans un cas de déconvolution d'un profil expérimental, stopper l'algorithme la première fois qu'on observe une évolution très lente du profil déconvolué après les changements rapides observés au début de la déconvolution. En ce qui concerne les artefacts de déconvolution générés par le bruit aux niveaux bas du signal, ils deviennent très visibles après n_{opt} . L'amplification de ces artefacts peut donc être également considérée comme un repère de la divergence de l'algorithme.

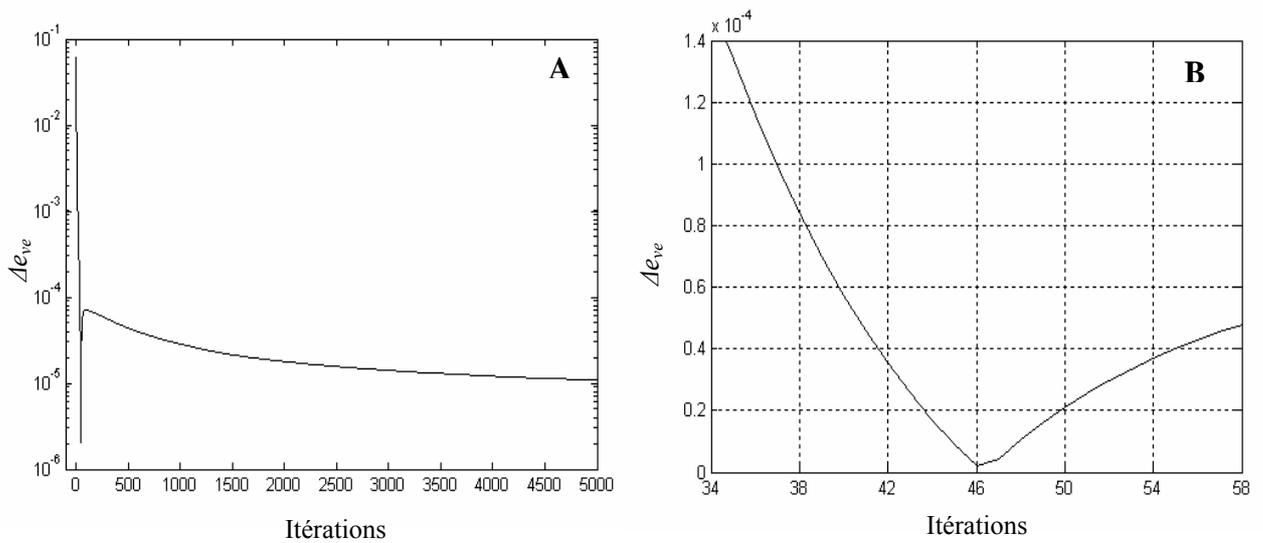


Figure (3-10) : A) Courbe représente les écarts entre les valeurs de l'erreur réelle de l'itération n et $n+1$ (l'écart est pris en valeur absolue). B) Zoome de la région autour de n_{opt} . Cas du profil Gaussien.

- Dans le cas du créneau de 300 Å de largeur (figure 3.11), l'écart a globalement le même comportement que dans le cas du profil gaussien. Cependant ici, on note que la convergence est très lente, et que le minimum de l'erreur vraie se trouve dans une région très plate (flat region). Visuellement, on observe des changements rapides sur le profil déconvolué qu'au début de la déconvolution, puis l'évolution de ce profil devient ensuite très lente. Les variations de l'écart sont très faibles dans une très large région autour de n_{opt} . Il en résulte que le profil déconvolué apparaît visuellement presque invariant au cours des itérations correspondantes à cette région. L'arrêt de l'algorithme pour un nombre itérations dans ce domaine conduit donc à des résultats pratiquement équivalents. Dans le cas d'une déconvolution faite sur un profil expérimental, il suffit donc de :
 - a) laisser l'algorithme tourner au début de la déconvolution, où l'évolution du profil déconvolué est rapide.
 - b) laisser encore l'algorithme effectuer des itérations même si le profil déconvolué évolue lentement.
 - c) stopper l'algorithme lorsque le profil déconvolué apparaît presque invariant.

Il en résulte qu'une détermination précise de n_{opt} dans ce cas n'est pas aussi critique que dans le cas d'une convergence très rapide.

- On note finalement que l'ensemble des observations considérées dans les simulations où n_{opt} est connu peuvent également être exploités lors de la déconvolution des profils expérimentaux.

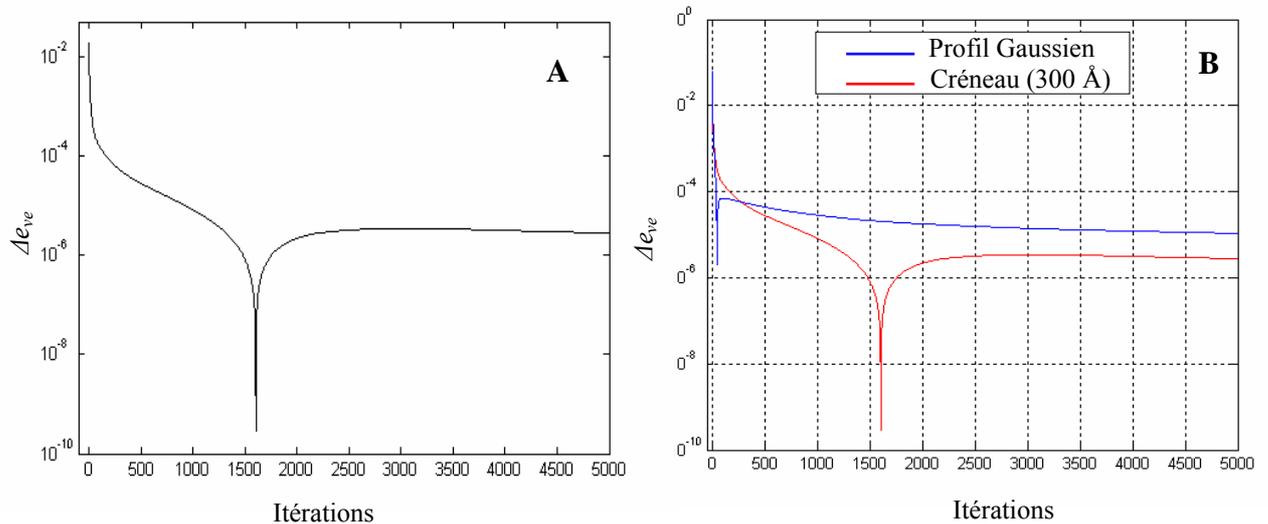


Figure (3-11) : Courbe représente les écarts entre les valeurs de l'erreur réelle de l'itération n et $n+1$ (l'écart est pris en valeur absolue). A) Cas du créneau de 300 Å de largeur. B) Comparaison entre le cas du créneau de 300 Å de largeur et le cas du profil Gaussien.

5.1.2. Utilisation de la courbe de l'erreur de reconstruction

Lors de la déconvolution d'un profil mesuré expérimentalement, l'erreur vraie est bien sûr inaccessible (elle ne l'est qu'en simulation) et nous n'avons que l'erreur de reconstruction. D'où l'idée de faire une comparaison entre les comportements de l'erreur vraie et de l'erreur de reconstruction au niveau *simulation* et de tirer des règles qu'on peut exploiter pour les mesures expérimentales.

La figure 3-12 représente les variations de l'erreur de reconstruction (écart Euclidien relatif E_{re}) dans les deux cas de profils gaussien et en créneau, pour les 100 premières itérations. La figure 3-13 montre une comparaison entre le comportement des erreurs vraies et de reconstructions obtenus lors de la déconvolution de ces deux profils. A partir de ces figures on peut tirer les remarques suivantes:

- L'erreur de reconstruction décroît significativement dans les premières itérations puis atteint très rapidement une région très plate : Dans le cas de la fonction gaussienne, l'erreur de reconstruction chute de 74,53% de sa valeur initiale après 10 itérations, alors qu'elle ne diminue que de 2% de sa valeur initiale entre 10 itérations et 5000 itérations.

Pour le créneau de 300 Å de largeur: l'erreur de reconstruction chute de 74,49% après 34 itérations, et de 3.58% entre 34 itérations et 5000 itérations.

- L'erreur de reconstruction, dans le cas du profil gaussien atteint la région plate après un nombre d'itérations inférieur à ce dans le cas du créneau (figure 3-12). L'importance de cette remarque vient du fait que n_{opt} dans le cas du profil gaussien est inférieur à n_{opt} dans le cas du créneau.
- L'erreur de reconstruction décroît bien plus vite que l'erreur vraie et atteint sa région plate avant que l'erreur vraie atteigne son minimum (figure 3-13).

A partir de ces remarques il apparaît que l'arrêt de l'algorithme, dans le cas de la déconvolution des profils expérimentaux, lorsque l'erreur de reconstruction atteint le début de sa région plate permet d'arrêter les itérations avant que l'algorithme commence à diverger. Cette méthode conduit, bien sûr à une sous-estimation de n_{opt} , mais elle devient de plus en plus utile lorsque la convergence devient de plus en plus rapide, puisque le début de la région plate devient très proche de n_{opt} . Et c'est le cas d'une convergence très rapide qui pose le plus de difficultés.

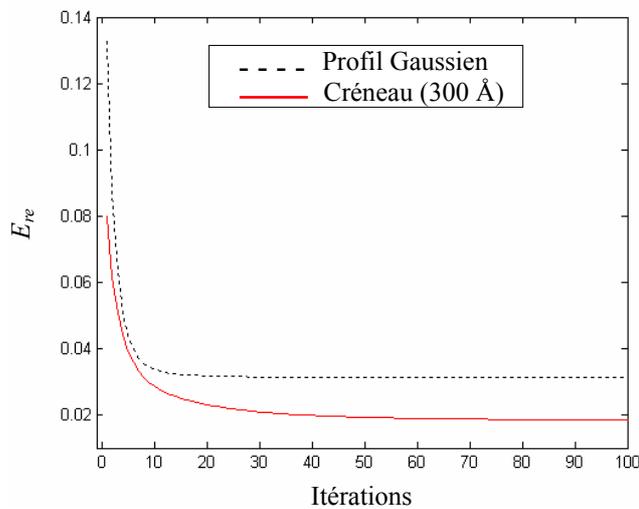


Figure (3-12) : Évolution de l'erreur de reconstruction (E_{re}) en fonction du nombre d'itérations pour les deux profils Gaussien et en Créneau (300 Å).

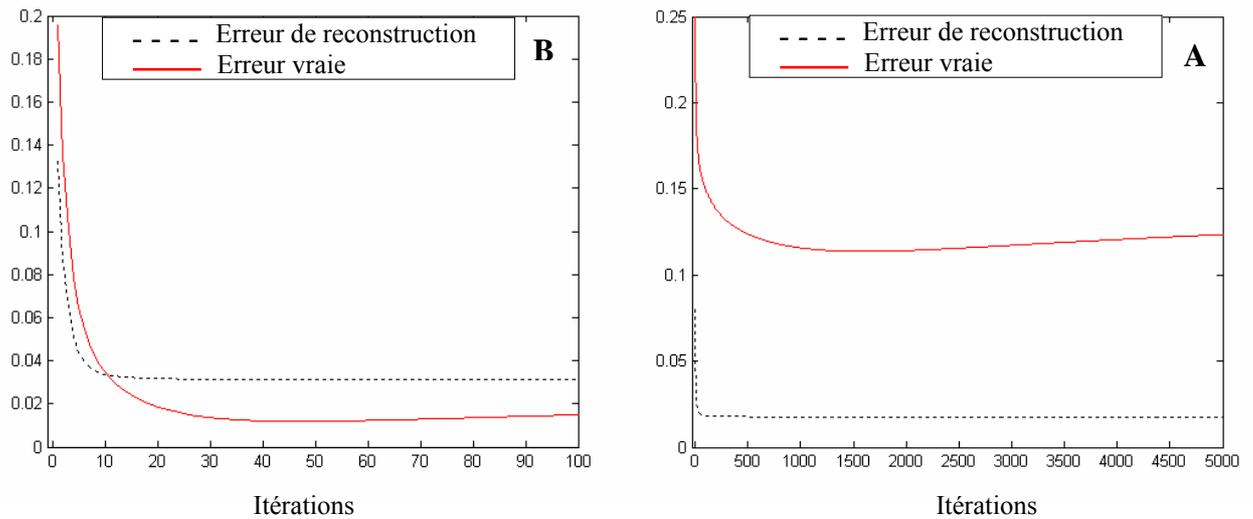


Figure (3-13) : Comparaison entre le comportement des erreurs vraies et de reconstructions. A) Cas du profil Gaussien .B) Cas du Créneau de 300 Å de largeur.

5.1.3. Utilisation du "discrepancy principal"

Nous venons de mettre en évidence les techniques d'estimation du paramètre du paramètre de régularisation propre à la méthode de régularisation de Tikhonov-Miller (cf. chapitre2). Il existe également des procédures permettant d'estimer numériquement n_{opt} pour une technique semiconvergente. Le "discrepancy principal" proposé par Morozov [9] est l'un des critères les plus connus parmi eux. Il consiste à stopper l'algorithme la première fois qu'on observe que :

$$\|y - \mathbf{H}x_n\| \leq \tau \|b\| \quad (3-2)$$

Où y : Le profil mesuré. \mathbf{H} : La DRF. x_n : Le profil déconvolué à l'itération n . b : Le bruit. $\tau > 0$.

Pour appliquer cette procédure lors de la déconvolution des profils expérimentaux, il faut donc tout d'abord faire une estimation de la norme du bruit $\|b\|$ à partir du profil mesuré.

Pour déterminer le paramètre τ le plus adapté aux signaux SIMS, nous avons effectué une série de déconvolution des profils gaussiens et créneaux, où nous avons à chaque fois mesuré la quantité $\tau = \frac{\|y - \mathbf{H}x_n\|}{\|b\|}$ et ceci après n_{opt} itérations. Des gaussiennes avec des écarts

types de 30 Å, 60 Å, 90 Å, et 120 Å, et des créneaux de largeurs de 50 Å, 100 Å, 150 Å, et 200 Å sont considérés. Ils sont convolués avec une DRF mesurée à 5.5 keV/ O₂⁺. Trois valeurs du SNR sont utilisées 30 dB, 40 dB, et 50 dB. Le bruit par définition est un signal aléatoire. Ceci implique que chaque essai de déconvolution sur le même profil défini par le même SNR donnera un résultat unique dépendant de la distribution du bruit sur le profil. Pour tenir en compte de cet effet, nous considérons trois essais de déconvolution pour une même valeur du SNR. Les résultats obtenus sont représentés sur les tableaux 3-3 et 3-4. A partir de ces résultats on peut observer:

- Chaque essai de déconvolution du même profil nécessite un nombre optimal d'itération différent, et parfois avec des écarts très dispersés. La différence est très remarquable dans certains cas (par exemple : le cas du créneau de 150 Å de largeur, SNR= 50dB, essai 1 et 3). Ceci peut être expliqué par le fait que, dans ces cas, le minimum se trouve dans une région très plate.
- D'une manière générale n_{opt} diminue avec la diminution de la valeur du SNR. Ceci est tout a fait logique, puisque le bruit constitue la cause de la divergence de l'algorithme.
- Dans tous les cas, il est observé que τ est très proche de 1 (en étant inférieur à 1). Une valeur de $\tau = 1$ permet donc de satisfaire tous les cas. Ceci est confirmé dans tout les cas de la déconvolution effectués dans ce travail, avec d'autres structures et d'autres conditions. Il suffit donc dans les cas de la déconvolution des profils expérimentaux, de faire une estimation de la norme du bruit à partir du profil mesuré et stopper l'algorithme lorsque $\|y - \mathbf{H}x_n\|$ atteint cette valeur.
- Les valeurs de n_{opt} obtenu dans le cas des créneaux, montre que la convergence est généralement très lente dans ce type de profils. De plus, la valeur minimale de l'erreur vraie se trouve généralement dans une région plate. Suite à ce comportement, et en accord avec le résultat présenté plus haut, on peut conclure que la détermination précise du moment où il faut arrêter l'algorithme n'est pas très critique dans le cas d'un profil constitué par des créneaux très abruptes.
- Par comparaison avec les créneaux, la convergence est rapide dans le cas des gaussiennes, en particulier lorsque la structure analysée devient plus large que la DRF (l'écart type de la DRF est $\sigma_{tot} = 45.07$ Å). Mais dans ce cas, on peut à la limite conclure qu'il faut faire de moins en moins d'itérations chaque fois qu'on observe que la largeur de la DRF est de plus en plus faible devant les structures analysées.

SNR = 30 dB	σ	<i>essai</i>	n_{opt}	e_{vem}	τ
	30 Å	1	343	0.0204	0.9922
		2	727	0.0440	0.9947
		3	566	0.0483	0.9847
	60 Å	1	25	0.0115	0.9853
		2	33	0.0107	0.9877
		3	21	0.0097	0.9928
	90 Å	1	7	0.0064	0.9949
		2	10	0.0072	0.9911
		3	8	0.0042	0.9950
120 Å	1	4	0.0065	0.9899	
	2	5	0.0061	0.9914	
	3	4	0.0038	0.9967	

SNR = 40 dB	σ	<i>essai</i>	n_{opt}	e_{vem}	τ
	30 Å	1	2475	0.0233	0.9772
		2	2413	0.0275	0.9830
		3	885	0.0143	0.9809
	60 Å	1	32	0.0045	0.9948
		2	27	0.0043	0.9922
		3	40	0.0040	0.9951
	90 Å	1	12	0.0029	0.9921
		2	15	0.0025	0.9863
		3	10	0.0020	0.9930
	120 Å	1	8	0.0016	0.9957
		2	5	0.0022	0.9892
3		6	0.0019	0.9945	

SNR = 50 dB	σ	<i>essai</i>	n_{opt}	e_{vem}	τ
	30 Å	1	2869	0.0153	0.9927
		2	4594	0.0168	0.9774
		3	4567	0.0128	0.9903
	60 Å	1	49	0.0029	0.9890
		2	67	0.0025	0.9863
		3	58	0.0029	0.9853
	90 Å	1	16	0.0013	0.9929
		2	13	0.0012	0.9907
		3	11	0.0010	0.9927
	120 Å	1	9	$7.52 \cdot 10^{-4}$	0.9903
		2	8	$5.23 \cdot 10^{-4}$	0.9985
3		10	$6.28 \cdot 10^{-4}$	0.9953	

Tableau (3-3) : Valeurs minimales de l'erreur vraie e_{vem} , de n_{opt} correspond à e_{vem} et de τ dans le cas des déconvolutions de profils gaussiens.

SNR = 30 dB	<i>Largeur</i>	<i>essai</i>	n_{opt}	e_{vem}	τ
	50 Å	1	562	0.2799	0.9981
		2	526	0.2798	0.9921
		3	511	0.2829	0.9926
	100 Å	1	2147	0.1843	0.9921
		2	2001	0.1927	0.9793
		3	1904	0.1977	0.9942
	150 Å	1	1670	0.1639	0.9800
		2	2558	0.1584	0.9907
		3	2390	0.1688	0.9832
200 Å	1	643	0.1591	0.9808	
	2	3376	0.1416	0.9867	
	3	3276	0.1517	0.9844	

SNR = 40 dB	<i>Largeur</i>	<i>essai</i>	n_{opt}	e_{vem}	τ	
	50 Å	1	742	0.2797	0.9846	
		2	777	0.2802	0.9827	
		3	641	0.2807	0.9827	
	100 Å	1	Convergence jusqu'à 100000 itérations			
		2	76765	0.1515	0.9807	
		3	67665	0.1461	0.9720	
	150 Å	1	8038	0.1425	0.9915	
		2	43658	0.1391	0.9895	
		3	31785	0.1214	0.9860	
	200 Å	1	31885	0.1221	0.9756	
		2	8404	0.1288	0.9800	
3		7478	0.1277	0.9909		

SNR = 50 dB	<i>Largeur</i>	<i>essai</i>	n_{opt}	e_{vem}	τ	
	50 Å	1	Convergence jusqu'à 100000 itérations			
		2	Convergence jusqu'à 100000 itérations			
		3	Convergence jusqu'à 100000 itérations			
	100 Å	1	3160	0.1879	0.9526	
		2	Convergence jusqu'à 100000 itérations			
		3	Convergence jusqu'à 100000 itérations			
	150 Å	1	98021	0.1312	0.9379	
		2	11503	0.1469	0.9767	
		3	8604	0.1464	0.9754	
	200 Å	1	87265	0.1070	0.9907	
		2	8726	0.1241	0.9583	
3		84369	0.1070	0.9775		

Tableau (3-4) : Valeurs minimales de l'erreur vraie e_{vem} , de n_{opt} correspond à e_{vem} et de τ dans le cas des déconvolutions de profils en créneau.

5.2. Cas du Delta dopage

Au contraire des profils gaussien et en créneau, nous avons observé dans le cas du delta-dopage que l'erreur vraie est une fonction décroissante en fonction de n (dans la gamme étudiée 100000 itérations). Afin de vérifier ce comportement, un profil formé de 8 deltas-dopage a été construit: les quatre premiers sont espacés de 100 Å, suivis par quatre deltas-dopage espacés de 250 Å. La largeur de chaque delta dopage est de 2 Å. Pour analyser cette structure nous avons simulé des conditions expérimentales différentes du cas précédent : la DRF utilisé ici est celle mesuré à 5.5 keV/ O₂⁺, et le SNR = 40 dB. L'algorithme est stoppé après 100000 itérations. Le comportement de l'erreur vraie est représenté sur la figure 3-14, on observe également que l'erreur vraie est une fonction décroissante de n .

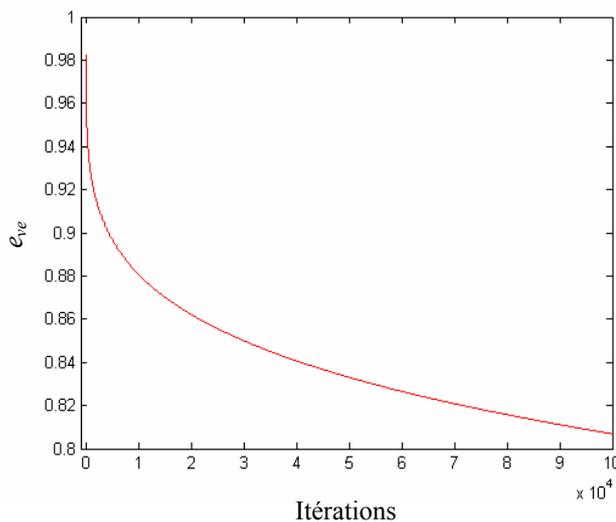


Figure (3-14) : Évolution de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itérations. Cas du profil constitué par huit deltas-dopage.

La forme correcte des deltas-dopage déconvolués observés à partir de la figure 3-15 confirme ce résultat. On observe : Une séparation totale de tous les pics, une réduction notable de la largeur des δ -dopages, et une suppression des pentes exponentielles. L'amélioration de la résolution en profondeur est considérable : le gain en résolution en profondeur est de 7.66, et le gain en maximum est de 9.05.

Durant notre étude, en utilisant différentes conditions expérimentales (DRF et SNR) et en effectuant des nombres d'itération très élevés (de l'ordre de 100000 itérations), nous avons constaté que l'erreur vraie dans le cas de la déconvolution des deltas-dopage est toujours décroissante. Dans ce cas, l'algorithme converge toujours et ne demande pas la détermination d'un nombre d'itérations où il faut le stopper. Lors de la déconvolution des profils expérimentaux de ce type, le moment où il faut arrêter l'algorithme devient donc un choix libre

de l'utilisateur. Il faut cependant tenir compte de l'amplification des artéfacts avec l'augmentation du nombre d'itérations.

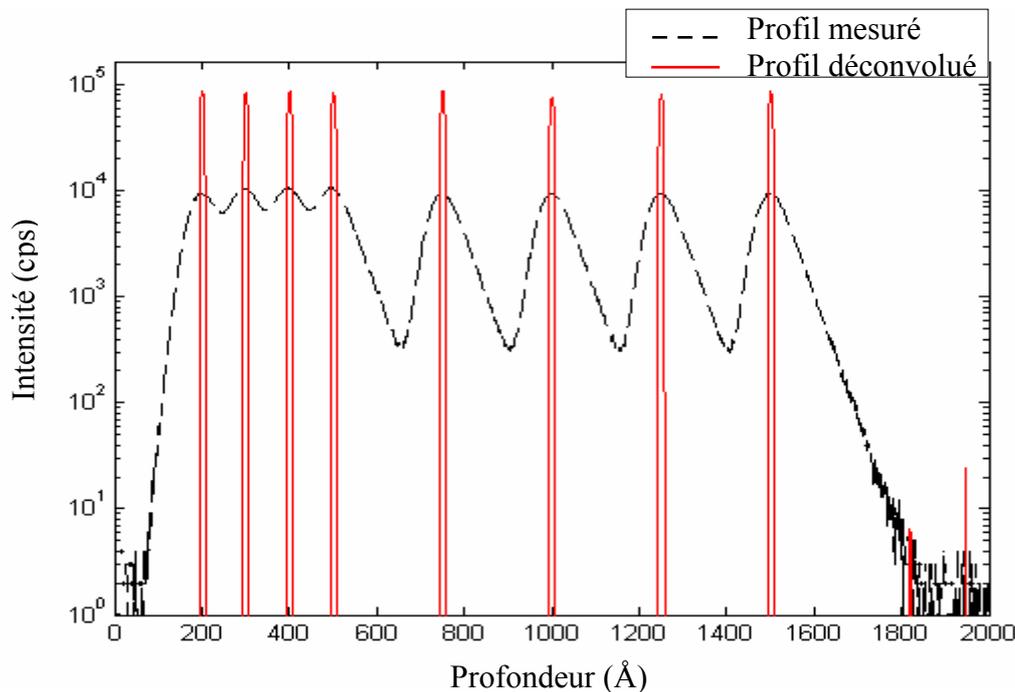


Figure (3-15) : Déconvolution du profil constitué par huit deltas-dopage. SNR= 40 dB. $\alpha=0$, 100000 itérations.

6. LA DECONCOLUTION : PERFORMANCES ET LIMITES

6.1. Déconvolution des gaussiennes

La figure 3-16 représente des résultats de la déconvolution des profils gaussiens. Ils sont obtenus dans les essais de déconvolution du paragraphe précédent, dans le cas du SNR= 40 dB. DRF mesurée à 5.5 keV/ O_2^+ . L'écart type de cette DRF est $\sigma_{tot} = 45.07 \text{ \AA}$. Le spectre de la gaussienne est constitué essentiellement de basses fréquences (figure 3-17), et le fait de convoluer une gaussienne par la DRF ne conduit pas à des pertes d'informations par filtrage des hautes fréquences. Deux cas cependant sont distingués :

- la déconvolution ne pose pas vraiment de problèmes lorsque la largeur de la gaussienne est plus grande que celle de la DRF (voir le cas du profil gaussien de $\sigma = 120 \text{ \AA}$ par exemple). La restauration du profil réel est complète, et ne demande que peu d'itérations. Une explication de ceci peut être faite à partir de la répartition spectrale de la gaussienne et la DRF. Le spectre en fréquence de la DRF est plus large que celui de la gaussienne (figure 3-17B). Ici la

convolution de la gaussienne par la DRF n'a pas une grande influence sur la partie essentielle du spectre de la DRF (on rappelle qu'un produit de déconvolution est équivalent à un produit simple dans l'espace de Fourier). La partie où les composantes du spectre de la DRF sont très faibles correspond bien à la partie où les composantes du spectre de la gaussienne sont très faibles (et qui ont seulement une importance marginale dans la reconstruction du profil réel). Ceci explique aussi le peu de différence observée entre le profil mesuré et le profil réel.

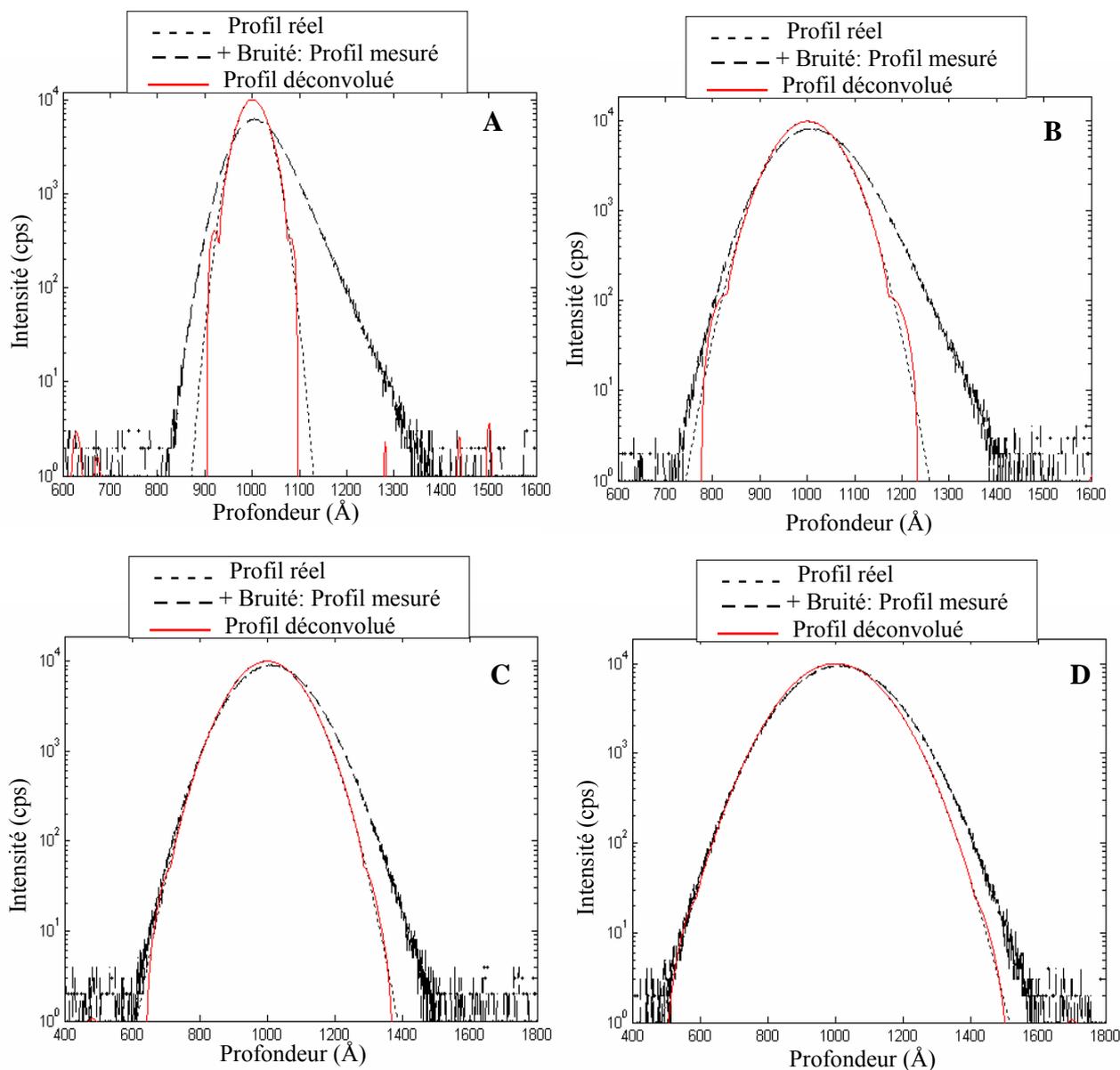


Figure (3-16) : Déconvolution des fonctions gaussiennes. $SNR= 40 \text{ dB}$. Écart type de la DRF : $\sigma_{tot} = 45.07 \text{ \AA}$ A) gaussienne de $\sigma = 30 \text{ \AA}$. B) gaussienne de $\sigma = 60 \text{ \AA}$. C) gaussienne de $\sigma = 90 \text{ \AA}$. D) gaussienne de $\sigma = 120 \text{ \AA}$.

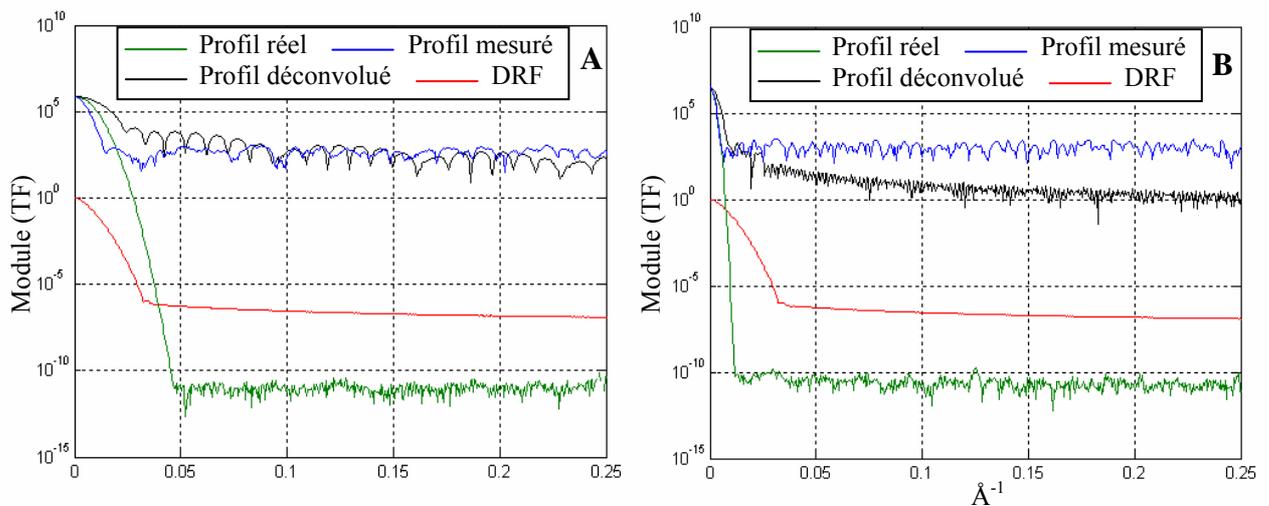


Figure (3-17) : Modules des transformées de Fourier du profil réel, mesuré et déconvolué, et de la DRF correspondante. A) gaussienne de $\sigma = 30 \text{ \AA}$. B) gaussienne de $\sigma = 120 \text{ \AA}$.

- La déconvolution devient plus complexe lorsque la DRF est plus large que la gaussienne. Prenant le cas d'une gaussienne dont l'écart type $\sigma = 30 \text{ \AA}$, on peut voir sur le tracé linéaire (figure 3-18) que la queue du profil gaussien est assez mal reproduite. Deux « lobes » apparaissent au pied du profil déconvolué. Pour connaître l'origine de ces lobes, nous avons simulé le même profil, mais cette fois-ci sans addition de bruit (signal parfait), et refait la déconvolution, le résultat de la déconvolution du signal parfait est observé sur la figure 3-19. Les deux lobes existent toujours dans le profil déconvolué. Ils ne sont donc pas des artefacts de déconvolution générés par le bruit, mais le résultat de la mauvaise récupération de l'information (énormément influencé par la convolution) par l'algorithme de déconvolution. Au dessous de ces lobes on note que le profil déconvolué ne correspond pas au profil réel. Aucune oscillation n'est observée aux niveaux bas du signal déconvolué ce qui confirme que les oscillations observées dans le cas précédent (présence de bruit) sont des artefacts générés par le bruit. Dans le cas de la déconvolution du signal parfait, nous avons constaté que l'algorithme converge toujours et ceci quelque soit le nombre d'itérations effectué. Il s'en suit l'une des définitions des techniques itératives semiconvergentes : *on appelle méthode semiconvergente toute méthode de restauration qui converge en l'absence de bruit et diverge en présence de bruit* [10].

A partir de la figure 3-17A, on observe qu'une quantité des composantes qui constituent la partie essentielle du spectre de la gaussienne se trouve multipliés par de faibles composantes

de la DRF. Ces composantes sont donc filtrées et leur récupération par l'algorithme de déconvolution devient très difficile. Ceci explique la difficulté rencontrée lors de la déconvolution.

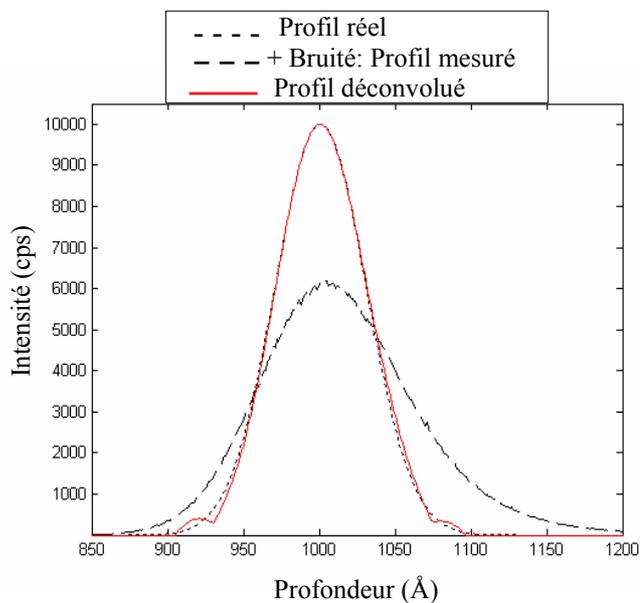


Figure (3-18) : Représentation linéaire de la déconvolution de la gaussienne de $\sigma = 30 \text{ \AA}$ de la figure 3-14.

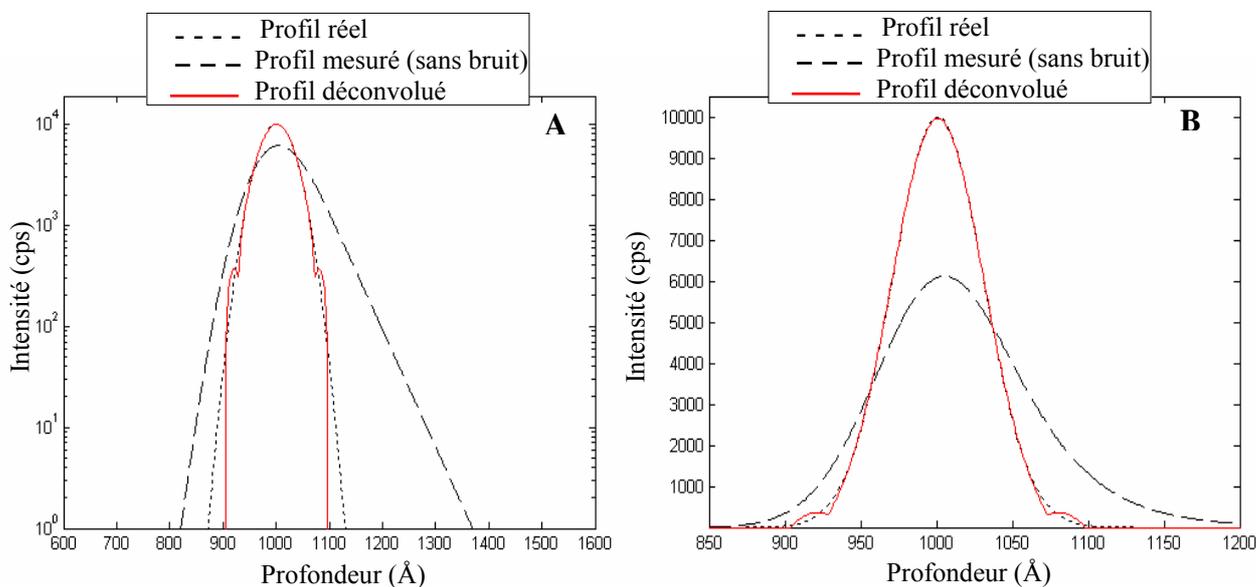


Figure (3-19) : Déconvolution d'une fonction gaussienne de $\sigma = 30 \text{ \AA}$. Ici le signal mesuré est construit sans addition de bruit (signal parfait). 2000 itérations. A) représentation logarithmique. B) représentation linéaire.

6.2. Déconvolution de créneaux

La figure 3-20 représente les résultats de la déconvolution des créneaux. Ils sont également obtenus dans les essais de déconvolution du paragraphe 5, dans le cas du SNR=40 dB.

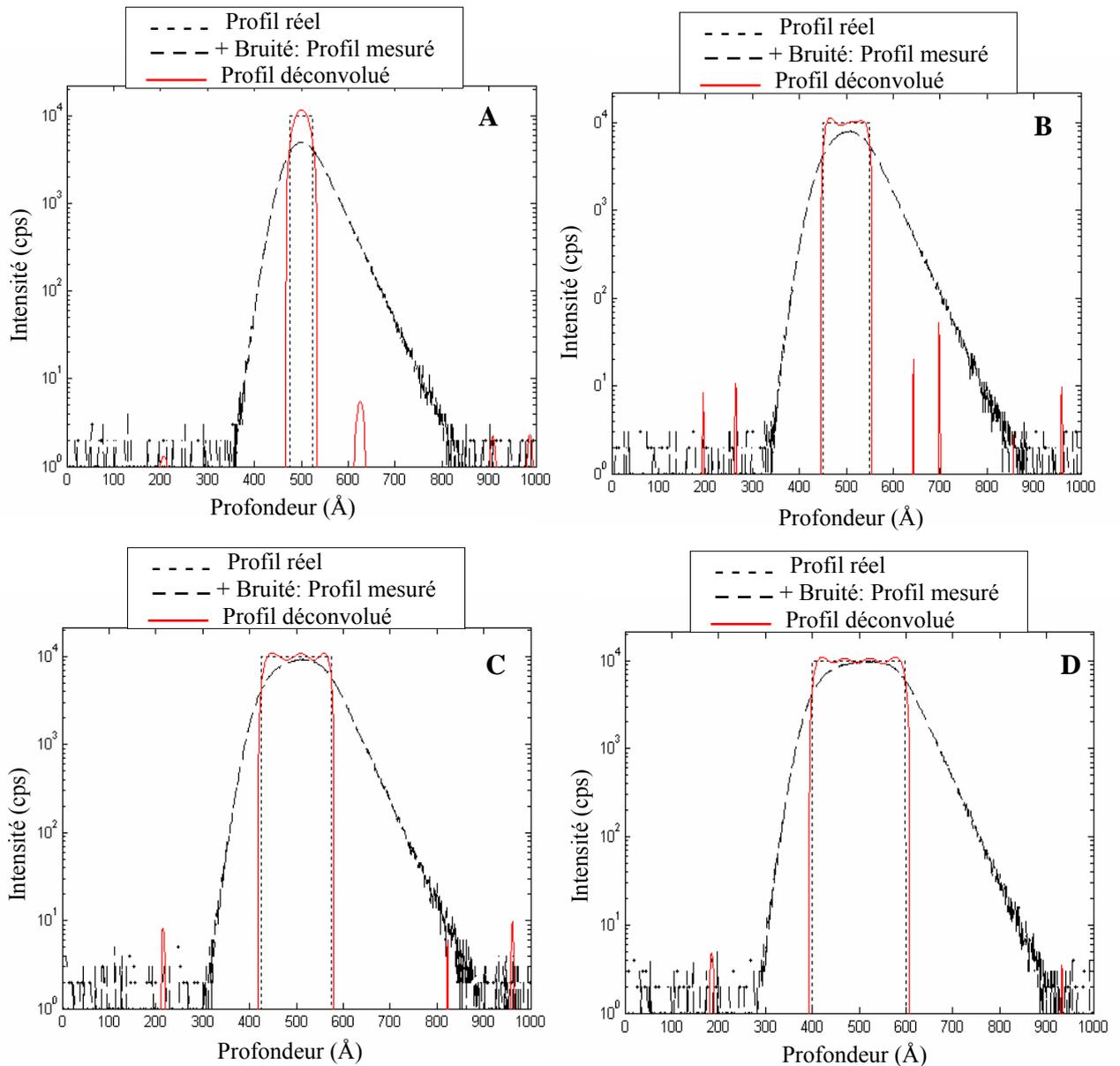


Figure (3-20) : Déconvolution des profils de type créneau. SNR= 40 dB. Ecart type de la DRF : $\sigma_{tot} = 45.07 \text{ \AA}$ A) créneau de 50 \AA de largeur. B) créneau de 100 \AA de largeur. C) créneau de 150 \AA de largeur. D) créneau de 200 \AA de largeur.

On peut remarquer que:

- un créneau de très faible largeur (cas du créneau de 50 \AA de largeur par exemple) aura de fortes chances d'être restitué sous la forme d'une courbe en cloche. Dans ce cas, on peut

espérer de la caractériser par sa FWHM. Le profil déconvolué possède cependant une forme plus étroite dans les hauts niveaux et plus évasée dans les bas niveaux (voir la représentation linéaire (figure 3-21), et l'utilisation de la FWHM peut conduire à une sous-estimation de la largeur du profil réel. La FWHM trouvée après déconvolution est de 44 Å, faible largeur donc en regard de la largeur réelle qui est de 50 Å. On note que le FWHM du profil mesuré est égale à 87 Å. On remarque aussi que le profil déconvolué surestime légèrement la concentration maximale au centre du créneau.

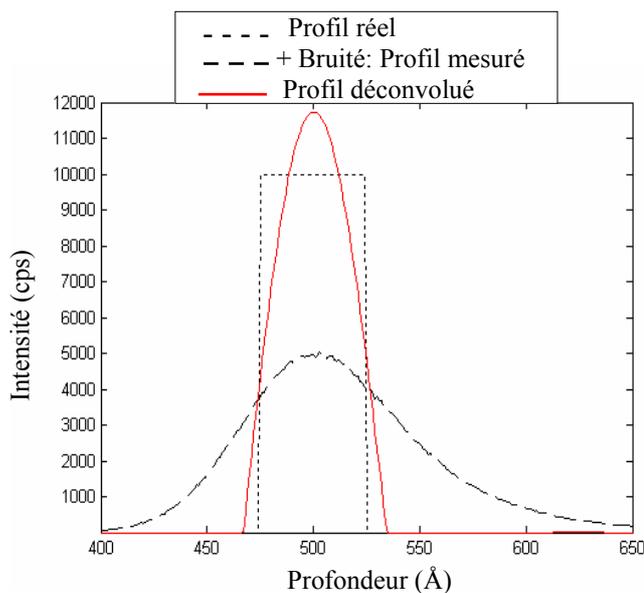


Figure (3-21) : Représentation linéaire de la déconvolution du créneau de 50 Å de largeur de la figure 3-20.

- Après déconvolution d'un créneau de grande largeur, on observe que les fronts de ce créneau sont partiellement restaurés. De plus, les pentes exponentielles, visibles dans le profil mesuré disparaissent, mais en contrepartie on observe l'apparition d'oscillations sur *le plateau* du créneau. Il apparaît ici que l'utilisation d'une contrainte d'amplitude peut aider à l'atténuation de ces oscillations. L'introduction de cette contrainte implique cependant que la concentration maximale de l'espèce dans la matrice est connue, et qu'on est certain que le créneau est parfait (sans variations de concentration sur le plateau). Malheureusement, ces informations sont très difficiles à connaître, et la contrainte d'amplitude est alors très rarement utilisée.

Pour estimer la qualité de la déconvolution, on peut par exemple calculer le gain de la pente exponentielle descendante.

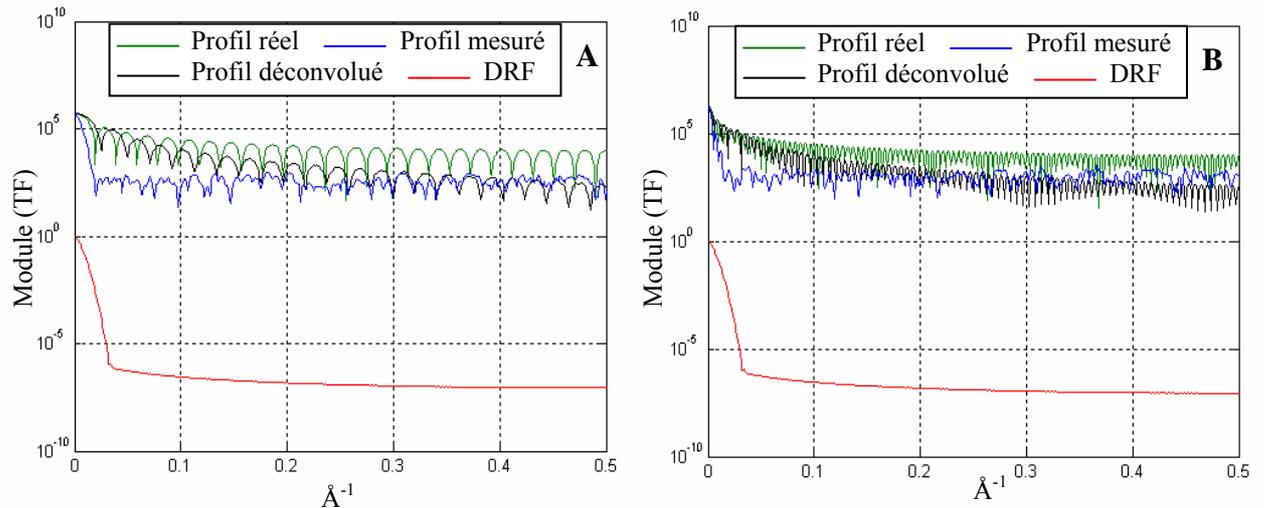


Figure (3-22) : Modules des transformées de Fourier du profil réel, mesuré et déconvolué, et de la DRF correspondante. A) créneau de 50 Å de largeur. B) créneau de 200 Å de largeur.

Au contraire aux fonctions gaussiennes, où leur spectre est constitué principalement par des basses fréquences, les créneaux sont particulièrement riches en hautes fréquences (voir figure 3-22). Les hautes fréquences sont les plus affectés par la convolution (la DRF est un filtre passe-bas), et les plus influencés donc par le bruit. Il est donc normal que l'algorithme de déconvolution ne puisse pas les restituer complètement (voir les spectres du profils réel et déconvolué sur la figure 3.22). Ceci explique l'apparition d'oscillations dans les niveaux hauts des profils. Elles sont donc de plus en plus développées au fur et mesure que les pentes des créneaux devient plus abruptes (proportionnel à la quantité de hautes fréquences contenue dans le profil réel), comme nous allons le voir dans les exemples de la déconvolution suivants. Les oscillations apparaissent même en cas d'absence de bruit (figure 3-23), ce qui signifie que la difficulté à récupérer le profil réel n'est pas seulement due au bruit, mais aussi à la présence d'une grande quantité de hautes fréquences, et qui sont filtrées par la DRF.

L'algorithme reconstruit les composantes basses fréquences (les fréquences les moins influencées par le bruit) dans les premières itérations. Les hautes fréquences (les fréquences les plus influencées par le bruit) sont ensuite restituées avec la progression des itérations [5]. Ainsi, dans le cas où il n'y a pas de bruit, on peut espérer corriger le problème par un très grand nombre d'itérations. Par comparaison avec le cas de la déconvolution effectuée avec 20000 itérations, on observe une atténuation des oscillations générées sur le plateau du créneau après 100000 itérations (figure 3-24).

Dans le cas réel cependant, la présence du bruit conduit à la divergence de l'algorithme, et ne permet pas une exploitation totale de l'information présente aux hautes fréquences. Dans ce dernier cas, l'augmentation du nombre d'itérations conduit au contraire à l'amplification des oscillations.

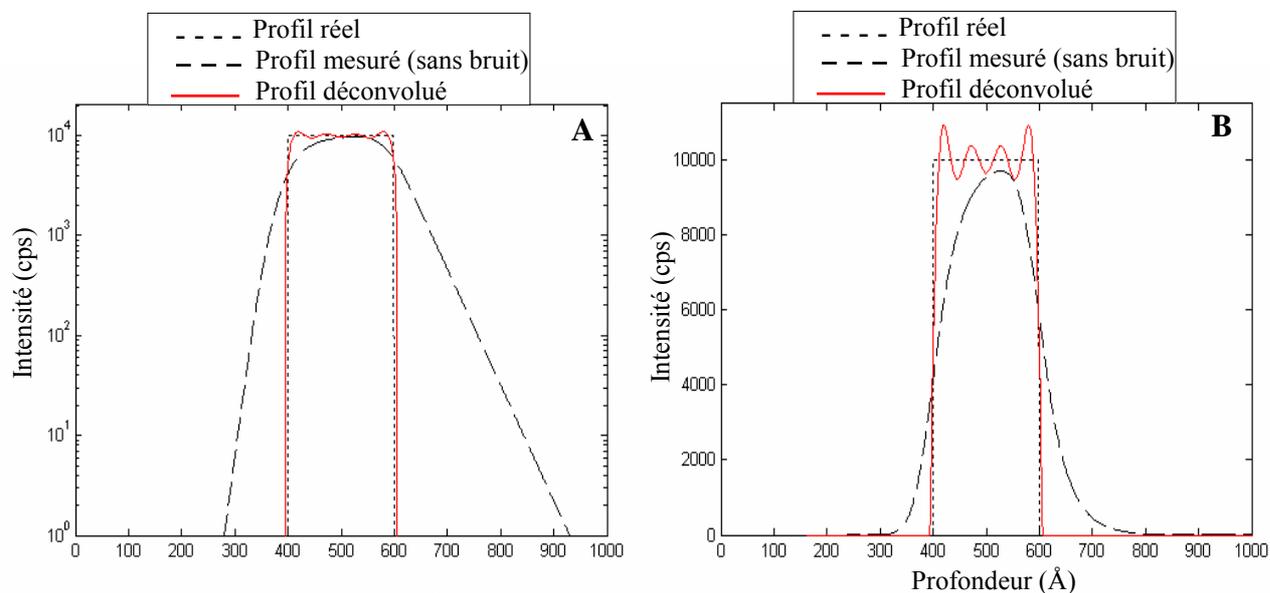


Figure (3-23) : Déconvolution d'un créneau de 200 Å largeur. Ici le signal mesuré est construit sans addition de bruit (signal parfait). 20000 itérations. A) représentation logarithmique. B) représentation linéaire.

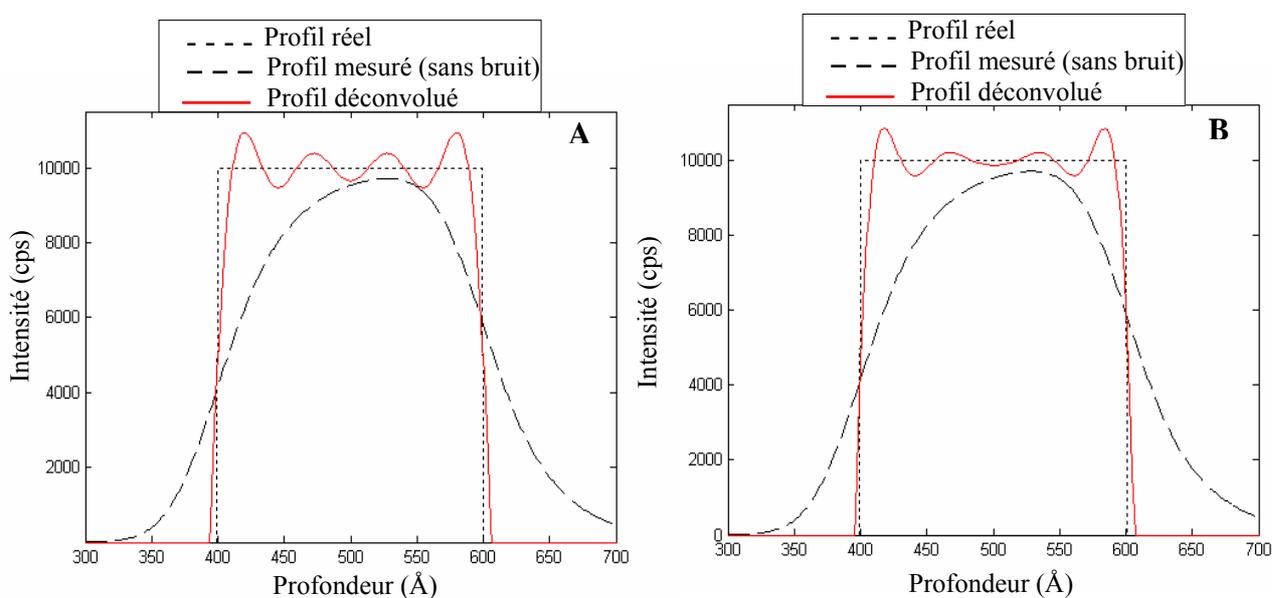


Figure (3-24) : Déconvolution d'un créneau de 200 Å de largeur. Dans ce cas, le signal mesuré est construit sans addition de bruit (signal parfait). A) 20000 itérations. B) 100000 itérations.

Pour avoir une idée sur la relation entre le développement des oscillations et les pentes des profils réels, nous avons simulé dans les mêmes conditions de la simulation précédente, des profils constitués par deux *fonctions erreurs*, l'une montante et l'autre descendante, séparées par une largeur $L = 300\text{\AA}$ qui sépare l'origine de la première fonction erreur de l'origine de la seconde (l'origine de la fonction erreur correspond au point d'inflexion de cette fonction).

On rappelle que l'expression générale d'un profil en forme de *fonction erreur* est :

$$Er(z) = \frac{C_0}{2} (1 \pm \operatorname{erf}(\frac{z}{\sqrt{2}\sigma_0})) \quad (3-3)$$

où C_0 est le coefficient d'amplitude utilisé pour ajuster le niveau du signal, et σ_0 caractérise la raideur de la pente de la fonction.

Nous avons étudié deux cas, l'un où $\sigma_0 = 5\text{\AA}$ pour les deux fonctions erreurs et l'autre où $\sigma_0 = 30\text{\AA}$. On observe à partir des résultats obtenus par la déconvolution (figures 3-25 et 3-26) que la présence des oscillations au niveau du plateau est très marquée dans le cas de $\sigma_0 = 5\text{\AA}$. Dans le cas de $\sigma_0 = 30\text{\AA}$, les oscillations au *niveau haut* du signal sont très faibles. Ainsi, sur l'échelle logarithmique *le plateau* du profil déconvolué apparaît très plat.

Ce résultat confirme les prévisions faites plus haut. En effet, plus il y a de pentes abruptes, plus le profil devient riche en haute fréquence et plus la déconvolution devient difficile, puisque ces fréquences sont les plus affectées par l'opération de convolution. Ceci est clairement mis en évidence sur les spectres des profils représentés sur la figure 3-27. En effet, plus σ_0 diminue (la pente diminue) plus le profil devient étroit, et donc son spectre plus large. Il est alors plus influencé par l'action de la DRF (le filtrage).

Il apparaît d'après les représentations spectrales de ce chapitre que bien que l'ensemble des fréquences les plus influencées par le bruit, pour une structure donnée, est déterminé par deux facteurs : le niveau de bruit et le spectre de la DRF, c'est le dernier facteur qui a le plus d'influence.

Le résultat obtenu ici peut être exploité dans le cas de la déconvolution des profils expérimentaux. En effet, la présence des fortes oscillations dans les hauts niveaux d'un profil de type créneau peut constituer le signe de la présence d'une interface très abrupte.

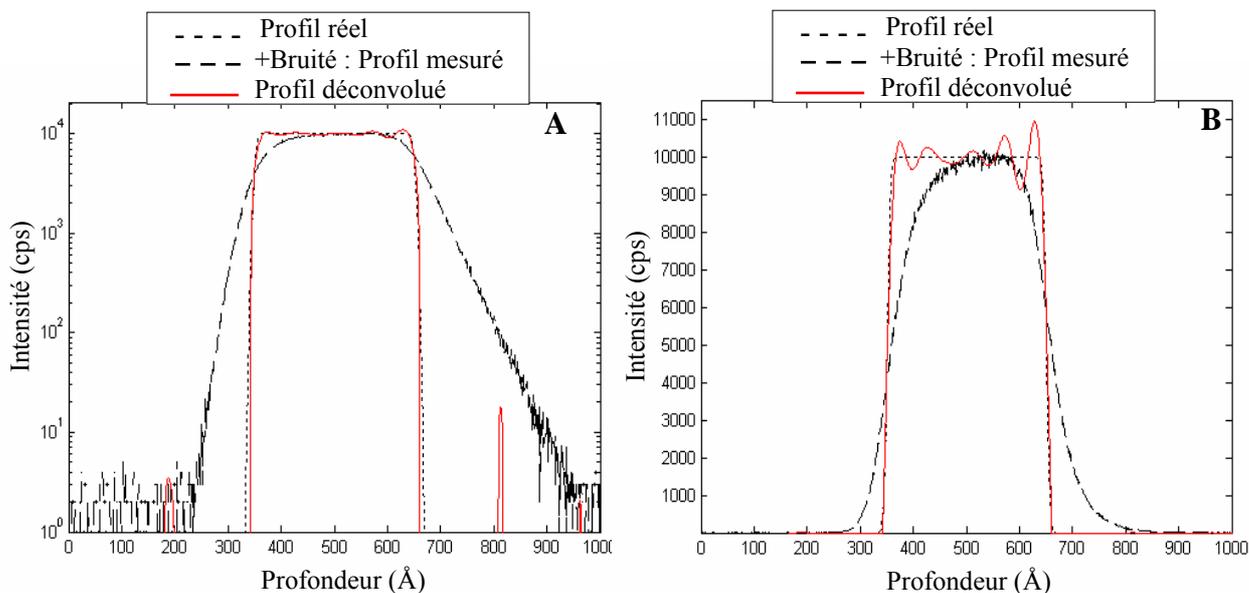


Figure (3-25) : Déconvolution de deux fonctions erreur successives de $\sigma_0 = 5$, $SNR=40$ dB. A) représentation logarithmique. B) représentation linéaire.

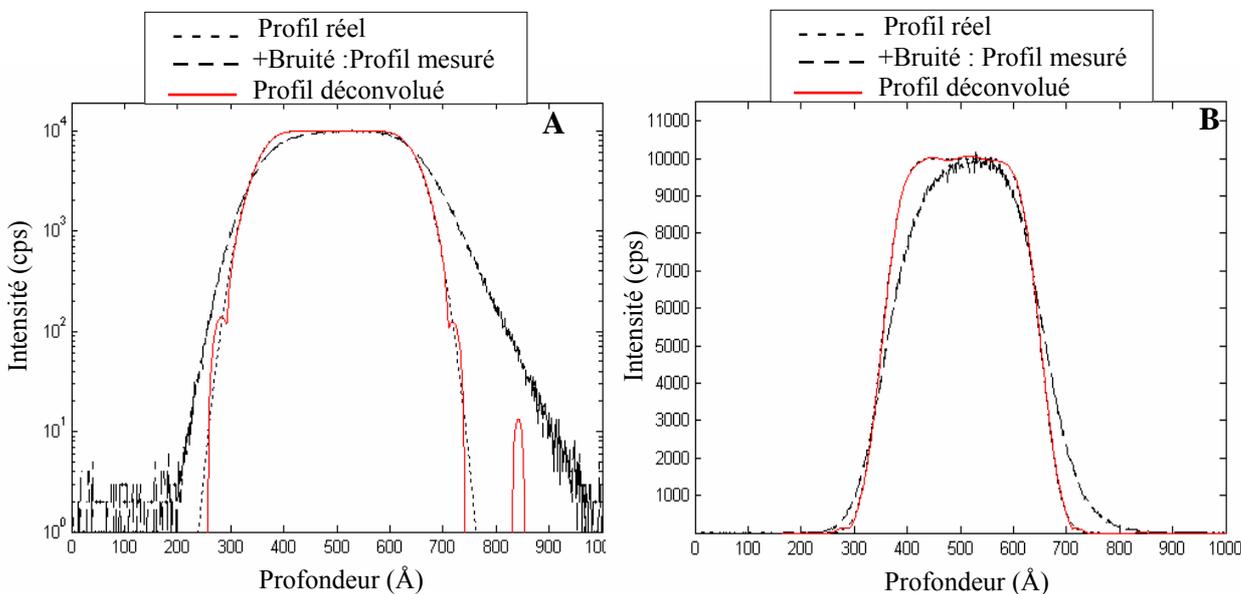


Figure (3-26) : Déconvolution de deux fonctions erreur successives de $\sigma_0 = 30 \text{ \AA}$, $SNR=40$ dB. A) représentation logarithmique. B) représentation linéaire.

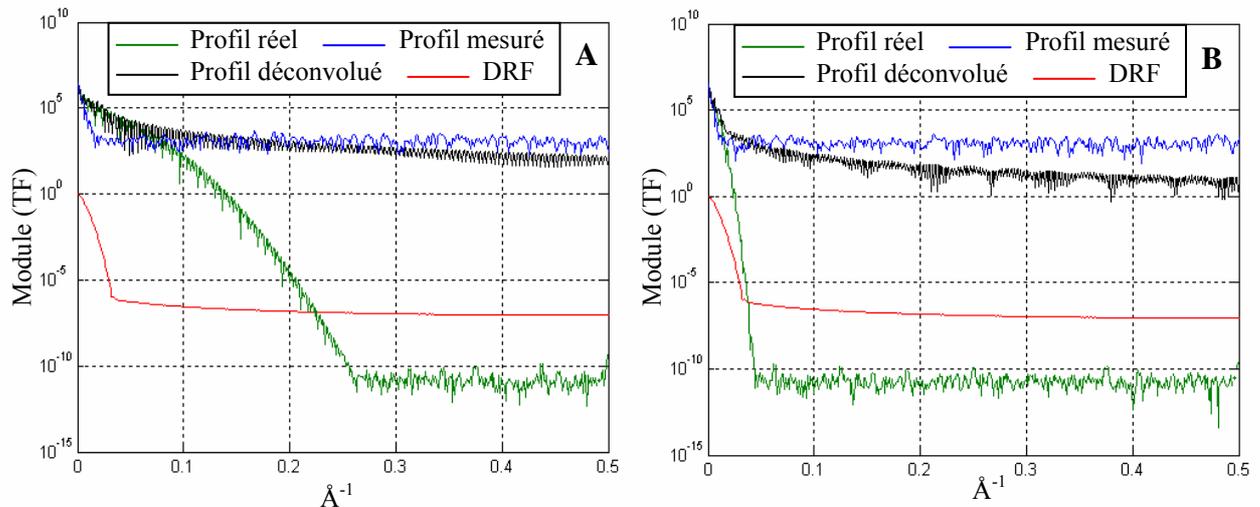


Figure (3-27) : Modules des transformées de Fourier du profil réel, mesuré et déconvolué, et de la DRF correspondante. A) deux fonctions erreur successives de $\sigma_0 = 5 \text{\AA}$. B) deux fonctions erreur successives de $\sigma_0 = 30 \text{\AA}$.

Avant de terminer cette section, signalons un cas particulier observé parfois lors de la déconvolution de deux créneaux successifs correspondants à des paliers de concentrations différents. En effet, comme il est représenté sur la figure 3-28, la déconvolution d'une telle structure, ici deux créneaux de 200\AA de largeur (DRF mesuré à 5.5 keV/ O_2^+ , et $\text{SNR} = 40\text{dB}$), peut conduire à l'apparition d'une zone vide entre les deux créneaux (figure 3-28A), ce qui ne représente bien sûr pas la réalité. Dans un cas de déconvolution d'un profil expérimental, il faut donc être prudent. L'interprétation de ce phénomène doit être mesurée, et il ne faut pas considérer l'apparition de ce *trou* de concentration comme un signe d'absence d'impuretés dans cette zone.

Il semble que ce phénomène a plus de chances d'apparaître lorsque la différence entre la concentration des deux paliers augmente. On note que ce phénomène est observé également dans le cas des déconvolutions effectués par l'algorithme avec terme de régularisation (Algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures) dans le cas de paliers de concentrations simulés par des fonctions erreurs [4].

On note que le but de la déconvolution, dans le cas de paliers de concentrations, est la détection de paliers situés à un niveau de concentration inférieur au palier principal. En effet, ces

niveaux secondaires sont souvent masqués, par les descentes exponentielles, lors de la mesure SIMS.

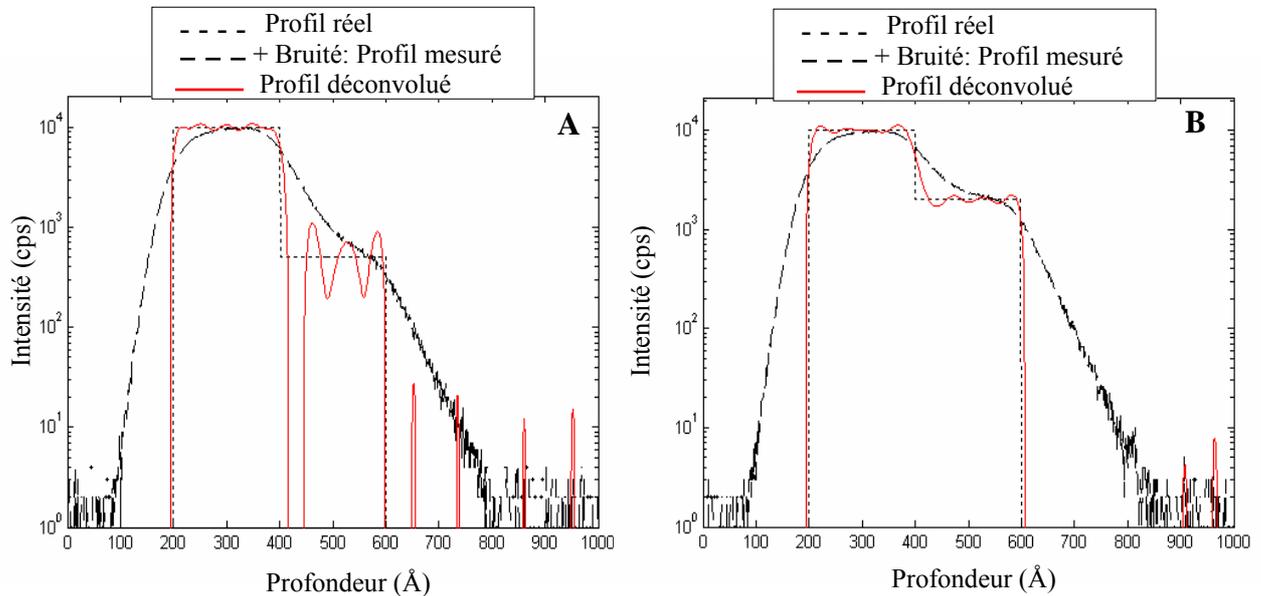


Figure (3-28) : Déconvolution de deux créneaux successifs de 200 Å de largeur. SNR= 40 dB.

A) apparition d'un trou entre les deux créneaux, B) cas normal.

6.3. Déconvolution des deltas-dopage

Nous nous intéressons dans cette partie à l'étude du comportement de la déconvolution lors de l'existence d'une concentration non-nulle (concentration énormément faible) entre les différentes structures d'un profil quelconque (pas nécessairement entre des deltas-dopage). L'existence d'une telle concentration est généralement négligée dans l'interprétation des résultats de la déconvolution.

Dans la simulation précédente du profil constitué par huit deltas-dopage, la concentration en dehors des deltas-dopage est supposée nulle. Or en réalité, la valeur de la concentration entre ces deltas-dopage n'est pas nulle (même si elle est négligeable). Pour en tenir compte, nous simulons le même profil que précédemment et dans les mêmes conditions (DRF mesuré à 5.5 keV/ O₂⁺, et SNR = 40dB). Cependant nous rajoutons, cette fois-ci, une valeur constante de m% de l'intensité maximale à chaque point du profil réel. Pour m=1, le résultat de la déconvolution après 1000 itérations est représenté sur la figure 3-29. On observe la présence d'oscillations entre les deltas-dopage espacés de 250 Å. Ces oscillations n'apparaissent pas dans

le cas précédent (avec la supposition d'une concentration nulle entre les deltas-dopage), ce qui signifie qu'elles sont le résultat de la concentration non nulle qui existe entre les deltas-dopage. Cette concentration n'est donc pas restaurée correctement, mais sous forme d'oscillations. Cependant, on n'observe aucun signal qui révèle l'existence de cette concentration entre les quatre premiers deltas-dopage. Ceci peut être expliqué par le fait que la distance entre ces deltas-dopage est faible, il y a donc une forte interférence entre leurs intensités d'un côté, et leurs intensités et la concentration non nulle qui existe entre eux d'un autre côté. Ceci complique les calculs, l'information est fortement perdue dans cette région, et il est impossible de la récupérer complètement. Il en résulte que la séparation entre les deltas-dopage et la concentration non-nulle est impossible.

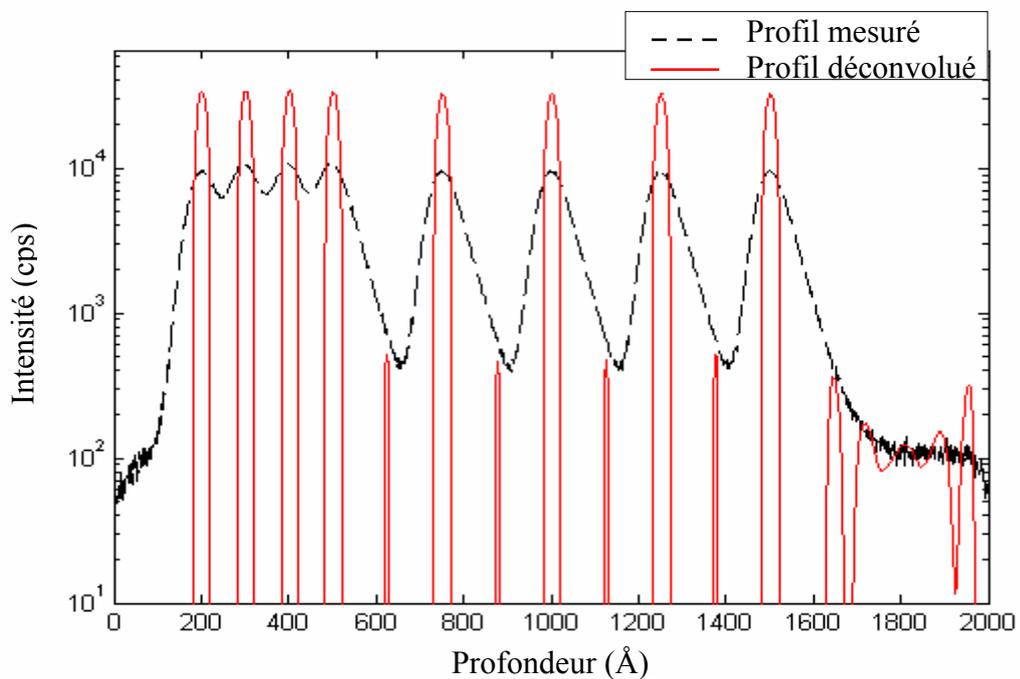


Figure (3-29) : Déconvolution du profil constitué par huit deltas-dopage (ici une constante de 1% de la valeur maximale est additionnée au profil réel). SNR= 40 dB. 1000 itérations.

Pour $m=0.5$ (une valeur plus faible donc que la valeur considéré précédemment), nous avons remarqué qu'après 1000 itérations les oscillations relatives à l'existence de la concentration non-nulle entre les deltas-dopage n'apparaissent plus (figures 3-30). Cependant, on peut les observer après 10000 itérations (figures 3-31).

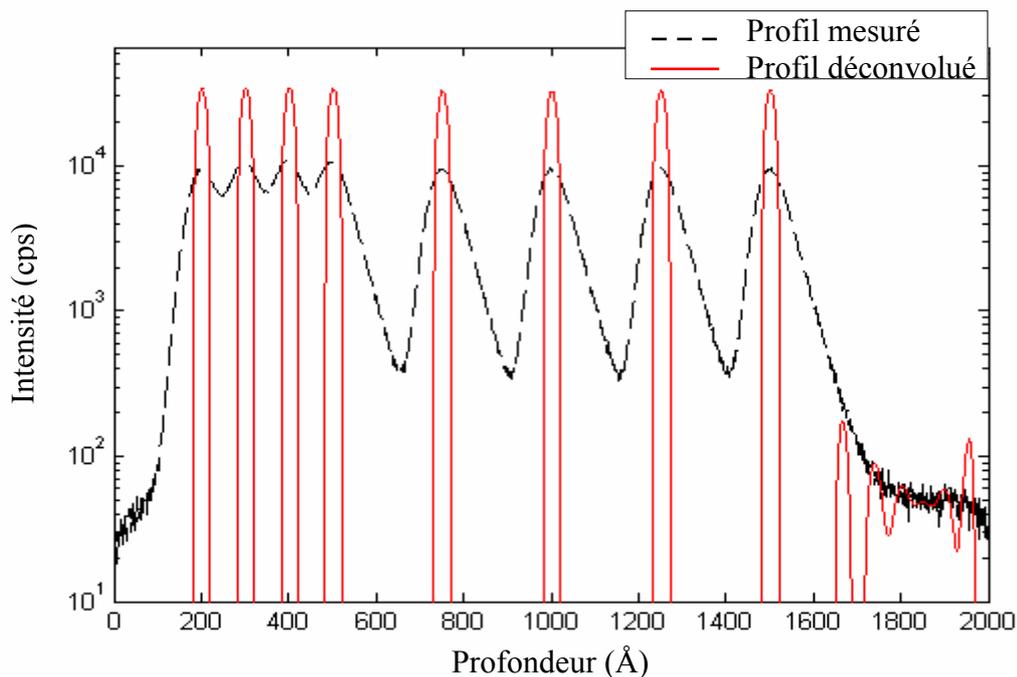


Figure (3-30) : Déconvolution du profil constitué par huit deltas-dopage (ici une constante de 0.5% de la valeur maximale est additionnée au profil réel). SNR= 40 dB. 1000 itérations.

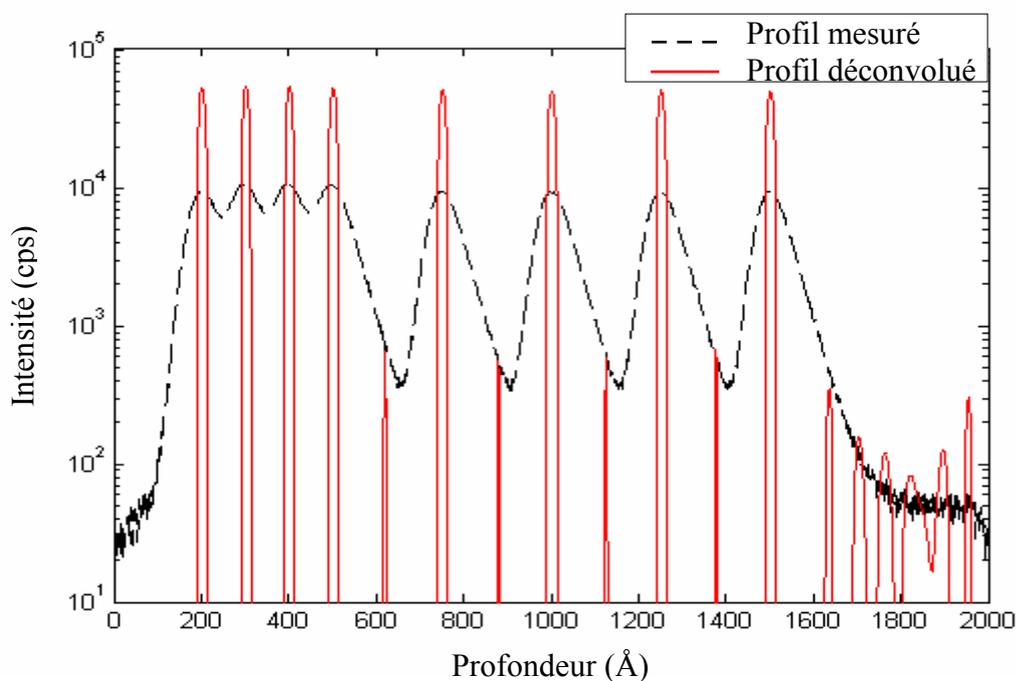


Figure (3-31) : Déconvolution du profil constitué par huit deltas-dopage (ici une constante de 0.5% de la valeur maximale est additionnée au profil réel). SNR= 40 dB. 10000 itérations.

La génération des oscillations aux bas niveaux des signaux déconvolués est expliquée généralement par la présence du bruit dans les profils mesuré. Il ressort de cette étude que ce dernier n'est pas le seul facteur à cet effet. L'existence d'une concentration non-nulle entre les structures principales, qui constituent le profil réel, peut donner également naissance à des oscillations du même ordre de grandeur que les artefacts générés par le bruit. L'apparition de ce type d'oscillation est conditionnée cependant par la distance entre ces structures, la valeur de cette concentration, et le nombre d'itérations effectuées.

On note que lors des déconvolutions effectués dans cette section nous avons aussi remarqué que l'erreur vraie est décroissante tout au long de la déconvolution.

7. DECONVOLUER AVEC UNE FAUSSE DRF

Dans les cas de simulations, la DRF utilisée pour la déconvolution est exactement la même qui convolue le profil réel. Dans le cas réel, la DRF est obtenue en fittant un delta-dopage analysé dans les mêmes conditions de mesure que le profil à déconvoluer. Ni le delta-dopage ni la mesure ne sont parfaits, et les paramètres de la DRF obtenus peuvent donc légèrement être différents des paramètres réels. Une erreur dans la calibration en profondeur pourra également conduire à cette situation.

Pour cela, il serait intéressant d'étudier la façon avec laquelle les profils déconvolués réagissent à une incertitude quelconque dans les paramètres de la DRF. Pour le faire, nous avons simulé ce problème en déconvoluant les profils simulés précédemment (profils du paragraphe 4) par des DRF différentes de celles qui ont réellement convolués les profils réels. Nous allons considérer deux cas : le cas où la DRF utilisée pour la déconvolution est plus *étroite* que la *vraie* DRF (la DRF qui a convolue le profil réel), et le cas où la DRF utilisée pour la déconvolution est plus *large* que la *vraie* DRF.

Les paramètres de la DRF sont supposés donc, selon le cas, supérieurs ou inférieurs aux paramètres réels (variation de 20% de la valeur réelle pour les profils gaussien et en créneau, et 5% pour le delta dopage). Pour des incertitudes inférieures à celles considérées, nous avons remarqué que la différence entre les profils déconvolués par la *fausse* DRF et les profils déconvolués par la *vraie* DRF est moins prononcée.

On note que pour le profil gaussien et le profil en créneau, les itérations sont arrêtées à n_{opt} itérations, à l'exception du cas du créneau déconvolué avec une *large* DRF où nous avons observé que l'erreur vraie est une fonction décroissante avec le nombre d'itérations. Dans ce dernier cas, nous avons choisi de stopper l'algorithme après 1000 itérations. Pour le profil delta

dopage, l'algorithme est stoppé lorsque l'erreur vraie atteinte la même valeur que celle considéré plus haut : 0.7968.

7.1 Cas où la DRF utilisée pour la déconvolution est plus étroite que la vraie DRF

La principale référence, pour comparer les résultats de cette étude, est le travail de Makarov [11], qui est basée sur des considérations analytiques. D'après ce travail, si on considère un profil réel x et le convolue avec une DRF \mathbf{H}_v (*vraie* DRF), nous obtenons donc un profil mesuré y . Supposons que celui-ci soit déconvolué ensuite par une *fausse* DRF \mathbf{H}_f plus *étroite* que \mathbf{H}_v . Supposons enfin que l'on puisse écrire $\mathbf{H}_v = \mathbf{H}_f * r$. La déconvolution conduit à un signal x_{est} qui est la convolution de x par r .

La figure 3-32 représente le résultat d'une déconvolution en utilisant une DRF plus *étroite* que la *vraie* DRF. Les résultats obtenus dans le cas des profils gaussien et en créneau sont tout à fait conforme avec les prévisions de Makarov [11]: les signaux déconvolués sont plus larges que les profils réels est il apparaît qu'ils sont convolués avec des fonctions résiduelles. Dans le cas du delta dopage, on observe la génération d'artéfacts au niveau bas du profil déconvolué. Ceci peut être expliqué par le fait que la DRF utilisée pour la déconvolution est plus *étroite* que la *vraie* DRF. Il en résulte que le profil mesuré devienne plus *large* que la DRF utilisée pour la déconvolution. Le profil réel n'est donc pas supposé constituer seulement par le delta dopage principal par le processus de déconvolution. L'amplification des artéfacts est également observée dans les deux autres cas, en particulier dans le cas du créneau de 300 Å de largeur.

Dans tous les cas, on observe que le profil déconvolué par une DRF plus *étroite* que la *vraie* DRF est plus proche du profil réel que ne l'est le profil mesuré. On observe aussi que la reconstruction des signaux mesurés est excellente, ce qui est logique. En effet, si on pousse le raisonnement à l'extrême en déconvoluant le profil mesuré avec...une fonction de Dirac, la reconstruction sera parfaite puisque le profil déconvolué sera égal au profil mesuré [4].

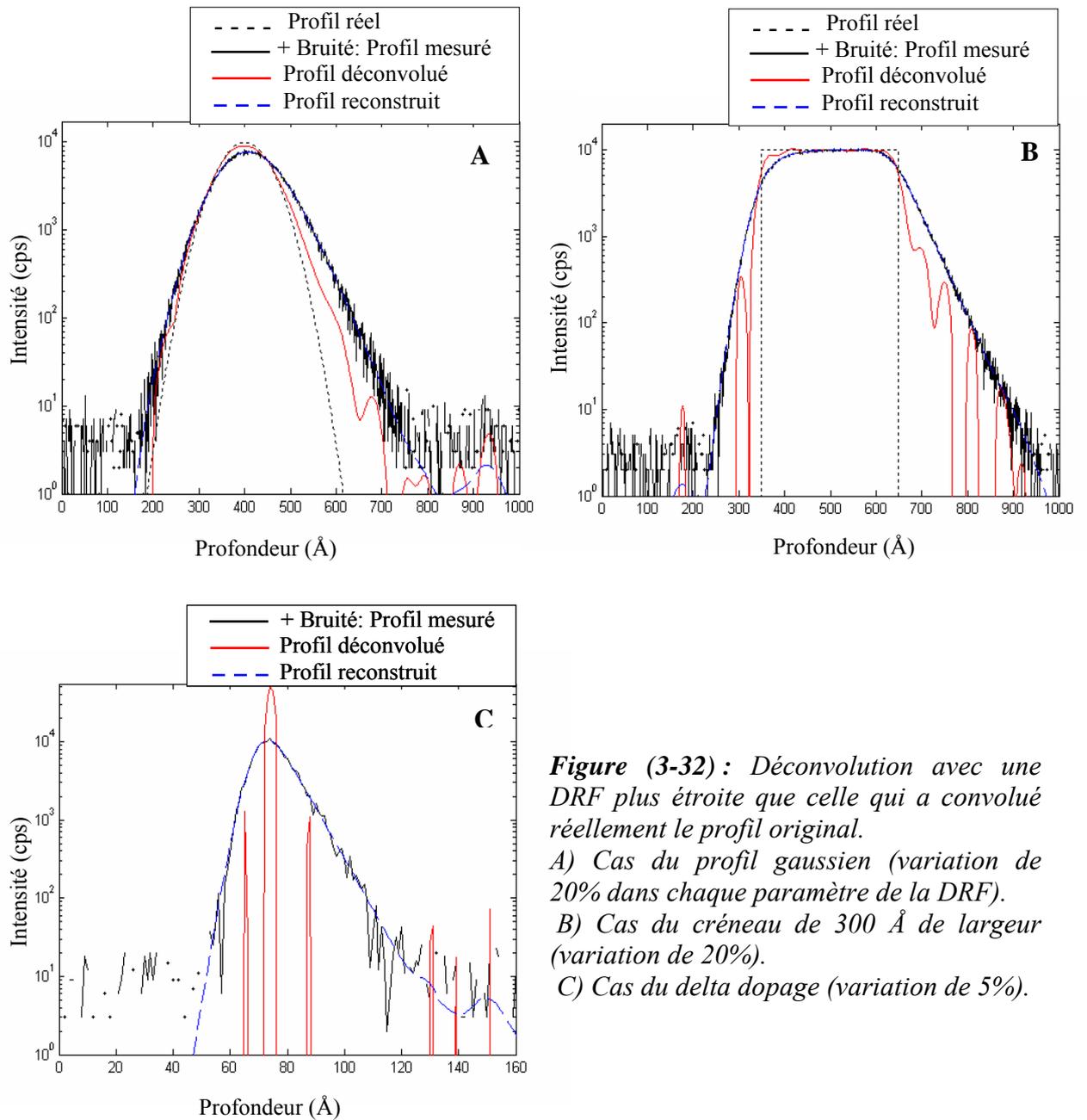


Figure (3-32): Déconvolution avec une DRF plus étroite que celle qui a convolué réellement le profil original.
 A) Cas du profil gaussien (variation de 20% dans chaque paramètre de la DRF).
 B) Cas du créneau de 300 Å de largeur (variation de 20%).
 C) Cas du delta dopage (variation de 5%).

7.2 Cas où la DRF utilisée pour la déconvolution est plus large que la vraie DRF

Les résultats de la déconvolution sont présentés sur la figure 3-33. Dans ce cas, la déconvolution peut conduire à une distorsion des résultats. Elle peut conduire à des profils plus fins que les profils réels, ce qui est très gênant, du point de vue de l'analyse SIMS. En effet, si le

but de la déconvolution est d'améliorer la finesse des couches mesurées, l'invention de couches plus fines qu'elles ne sont en réalité, constitue sans aucun doute, un grand problème. Ceci est clairement observé dans le cas du profil gaussien. Dans ce cas, il faut donc être prudent dans l'interprétation des résultats. Heureusement, l'erreur dans les paramètres de la DRF peut être ici détecté à partir de l'observation du profil reconstruit, ou du vecteur de l'erreur de reconstruction E_{rv} [4, 6]. On rappelle que le profil reconstruit est constitué par la convolution du profil déconvolué avec la DRF.

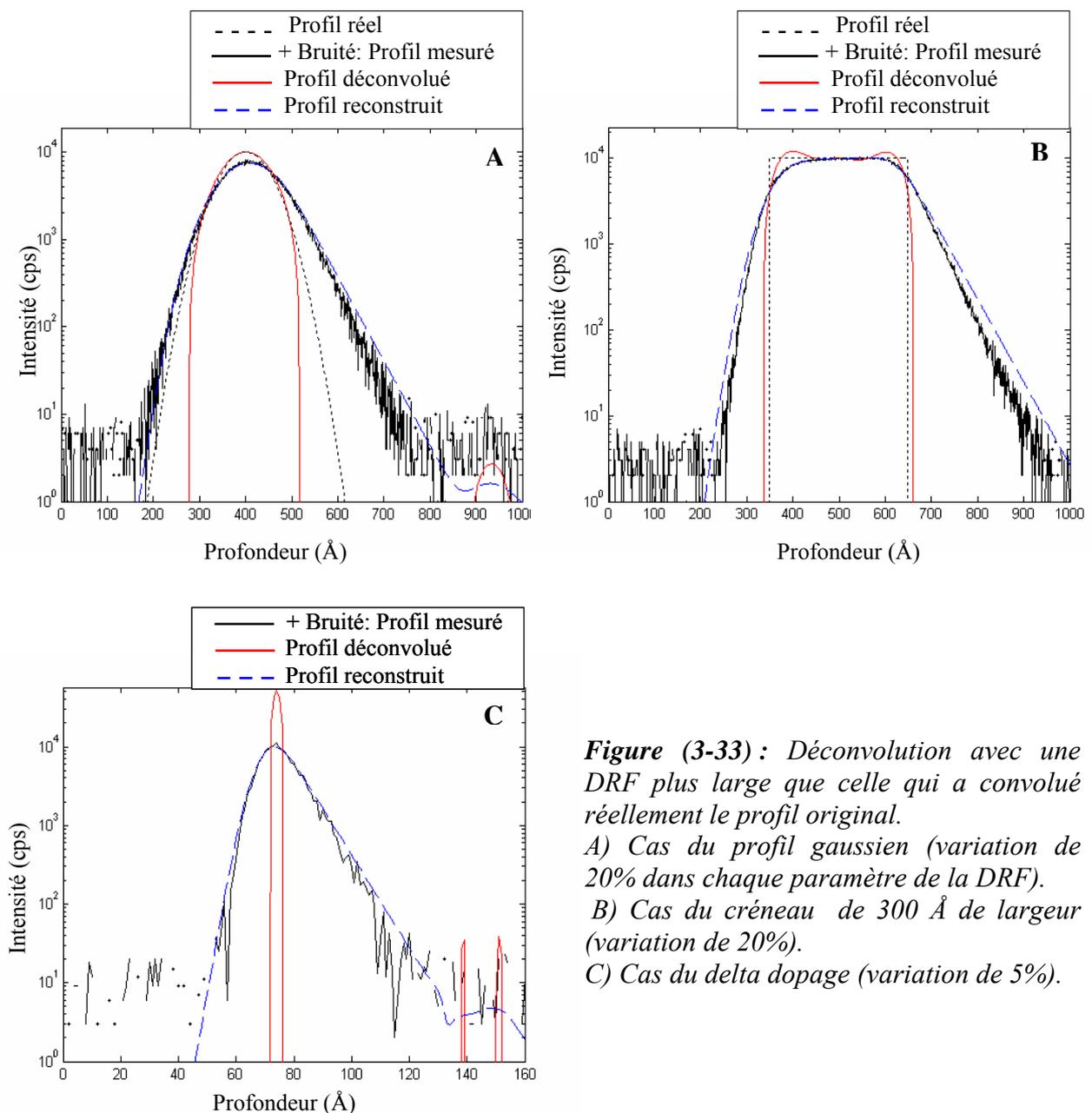


Figure (3-33) : Déconvolution avec une DRF plus large que celle qui a convolué réellement le profil original.

A) Cas du profil gaussien (variation de 20% dans chaque paramètre de la DRF).

B) Cas du créneau de 300 Å de largeur (variation de 20%).

C) Cas du delta dopage (variation de 5%).

Sur la figure 3-33, on observe clairement que la reconstruction du signal mesuré n'est pas satisfaisante, et ceci dans les trois cas étudiés.

La figure 3-34 représente le vecteur de l'erreur de reconstruction dans le cas du profil gaussien. Nous observons les variations de celui-ci dans le cas de déconvolution avec une *fausse* DRF (cas étudié ici), et avec une *vraie* DRF (cf. § 4). On peut remarquer immédiatement que E_{rv} est totalement différent dans les deux situations. Une explication de cet effet est donnée sur la référence [6], où le problème de la déconvolution avec une *fausse* DRF dans le cas de l'algorithme avec terme de régularisation est étudié. Lorsque la DRF utilisée pour la déconvolution est correcte, et avec la supposition que le bruit suit une loi de probabilité symétrique (Gaussienne dans notre cas), la répartition des composantes du vecteur de reconstruction doit être symétrique par rapport à l'axe des profondeurs (les composants du vecteur E_{rv} doivent représenter une variable aléatoire avec une fonction de distribution de probabilité symétrique). Ceci vient du fait que E_{rv} doit représenter le même comportement que le bruit, et donc suivre une loi de probabilité symétrique.

Ceci s'explique en considérant l'équation de convolution $y = \mathbf{H}x + b$. En effet, si x constitue une estimation parfaite du profil réel, $(y - \mathbf{H}x)$ doit être égale à b .

Le vecteur de l'erreur de reconstruction, dans le cas où la DRF est fautive, montre que la loi de probabilité des composants de ce vecteur n'est pas symétrique comme il le faut et permet de mettre en doute la validité de la DRF.

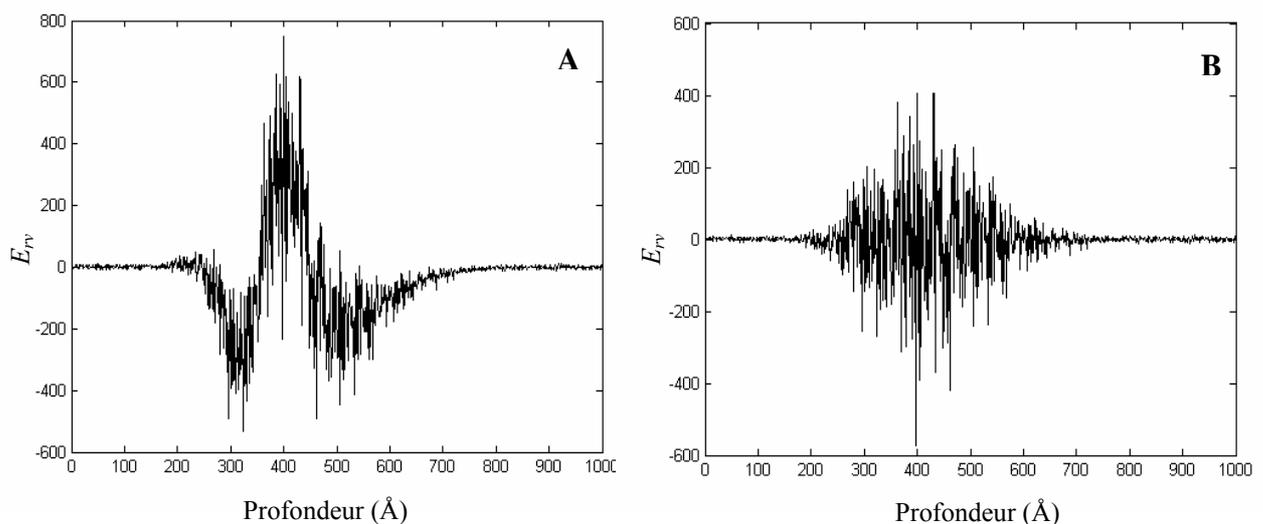


Figure (3-34) : Vecteur de l'erreur de reconstruction. A) Cas du profil Gaussien de la figure (3-33), B) Cas de la figure (3-3) où la déconvolution est effectuée avec la vraie DRF ($\alpha=0$).

Dans le cas du créneau et de delta dopage on observe que les profils déconvolués sont moins influencés par les erreurs des paramètres de la DRF supposées ici.

Par comparaison avec l'étude faite par *Gautier et al.* [4, 6] avec l'algorithme avec terme de régularisation en utilisant un profil gaussien, il apparaît que les profils déconvolués obtenus avec les deux algorithmes, sans et avec terme de régularisation, répondent de la même façon aux incertitudes dans les paramètres de la DRF.

8. PERFORMANCES DE L'ALGORITHME EN TERMES DE SEPARABILITE

L'amélioration de la résolution en profondeur obtenue par déconvolution pouvait également être exprimée en termes de capacité de l'algorithme à séparer deux couches très fines distantes d'une certaine valeur d . Pour étudier la séparabilité de l'algorithme sans terme de régularisation, nous avons simulé des profils contenant deux deltas-dopage séparés d'une distance d variable.

Nous avons supposé deux cas :

- i) Les deux deltas-dopage sont convolués par une DRF mesurée à haute énergie (5.5 keV/ O₂⁺).
- ii) La DRF utilisée pour la convolution est mesurée à basse énergie (500 eV/ O₂⁺).

Les profils ont été bruités avec un bruit gaussien de 40 dB. La concentration en dehors des deltas-dopage n'est pas ici supposée nulle ; une valeur constante est additionnée au profil réel dans tout les cas étudiés.

Le gain en séparation obtenu par la méthode de déconvolution sera déterminé par l'intermédiaire du contraste : $C_{(\%) } = 100 * (I_{\max} - I_{\min}) / I_{\max}$. On note que I_{\max} sera compté sur le pic le plus fort des deux.

8.1. Séparation de deux deltas-dopage analysés à haute énergie (5.5 keV/ O₂⁺)

La figure 3-35 donne les résultats de la déconvolution de deux deltas-dopage séparés d'une distance d égale à 20, 40, 60 et 80 Å, convolués par la DRF mesurée à (5.5 keV/ O₂⁺). Les déconvolutions ont été réalisés avec 10000 itérations.

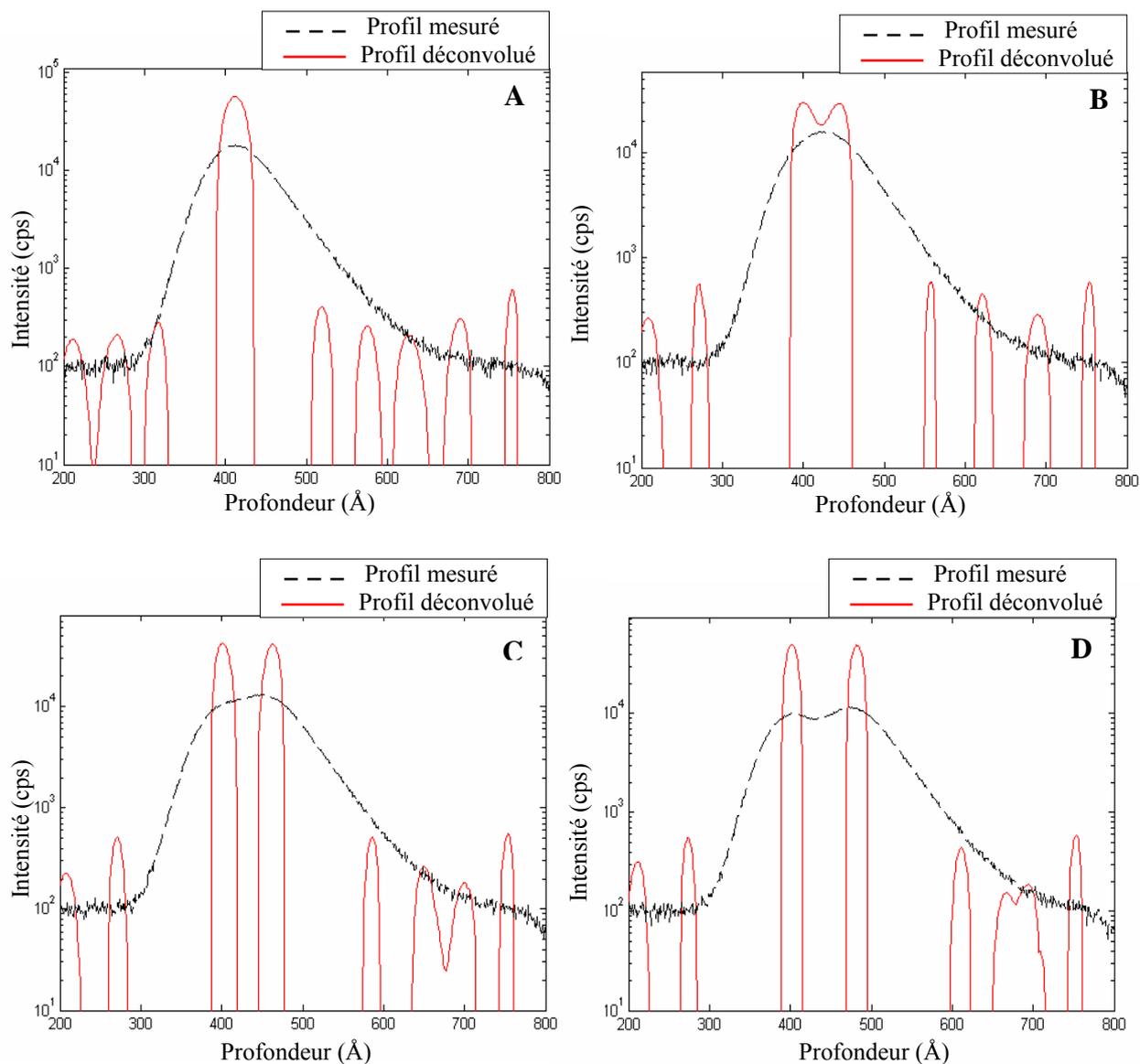


Figure (3-35) : Déconvolution de deux deltas-dopage séparés d'une distance d , convolués par une DRF mesurée à $5.5 \text{ keV}/\text{O}_2^+$. A) $d=20 \text{ \AA}$. B) $d=40 \text{ \AA}$. C) $d=60 \text{ \AA}$. D) $d=80 \text{ \AA}$.

Nous pouvons alors apporter les conclusions suivantes:

- Il existe une distance limite au dessous de laquelle la distinction des deux pics après déconvolution n'est plus possible : Les deux deltas-dopage séparés de 20 \AA restent indiscernables tout au long de la déconvolution, et l'erreur vraie varie très peu après 3000 itérations. Ceci indique que la séparabilité des pics est impossible et que l'on ne pourra pas obtenir de meilleur résultat même si le nombre d'itérations augmente encore.

- Deux pics séparés de 40 Å, complètement indistincts avant déconvolution (contraste 0%) peuvent être distingués par un contraste de 39.6% après déconvolution.
- Les deux pics séparés de 60 Å ne sont pas discernables dans le profil mesuré. Après déconvolution ils sont totalement découplés (contraste 100%). Le découplage apparaît à 2200 itérations. Cependant, on observe une petite différence entre les amplitudes des pics déconvolués (figure 3-36), malgré que leurs amplitudes soient supposées identiques dans le profil réel. On observe de plus, une petite dissymétrie des pics déconvolués. Le front descendant du premier pic et le front montant du deuxième pic sont moins abrupts que les fronts extérieurs. Ceci peut être le résultat de la perte de l'information à l'endroit où la superposition a eu lieu.
- On constate que deux pics séparés de 80 Å et présentant un contraste de 24.3% avant déconvolution sont parfaitement séparés après déconvolution. On peut aboutir ici à une séparation totale de ces deux pics juste après 198 itérations.

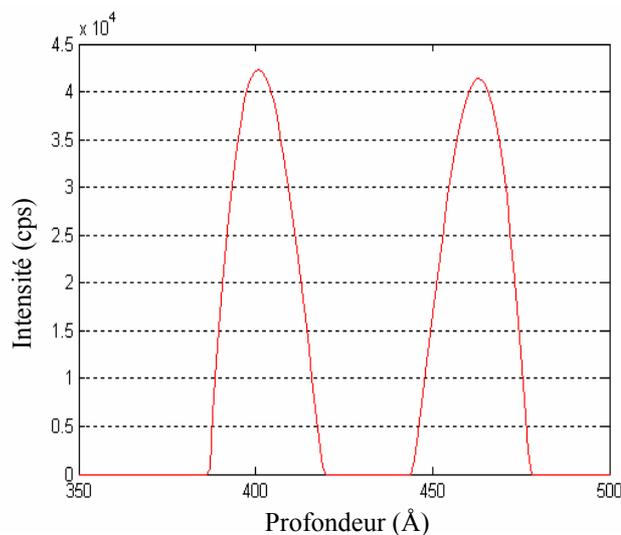


Figure (3-36) : Déconvolution de deux deltas-dopage séparés d'une distance d , convolués par une DRF mesurée à 5.5 keV/ O_2^+ . Cas de $d=60$ Å. Représentation linéaire

8.2. Séparation de deux deltas-dopage analysés à basse énergie (500 eV/ O_2^+)

La figure (3-37) représente les résultats de la déconvolution de deux deltas-dopage séparés d'une distance d égale à 3, 5, 10 et 15 Å, convolués par une DRF mesurée à (500 eV/ O_2^+). Les déconvolutions ont été effectuées avec 10000 itérations.

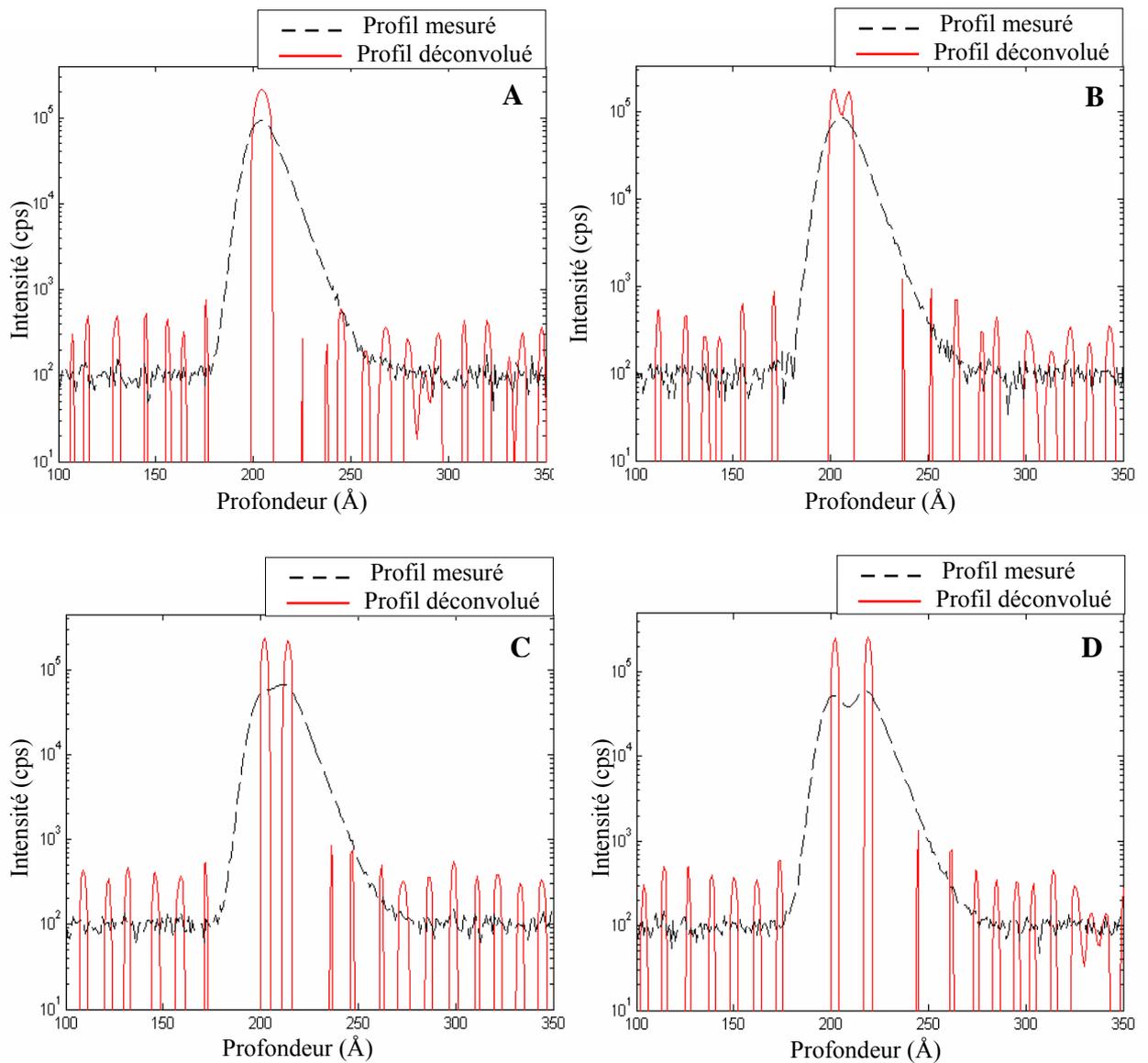


Figure (3-37) : Déconvolution de deux deltas-dopage séparés d'une distance d , convolués par une DRF mesurée à 500 eV/ O_2^+ . A) $d=3 \text{ \AA}$. B) $d=5 \text{ \AA}$. C) $d=10 \text{ \AA}$. D) $d=15 \text{ \AA}$.

On peut tirer les remarques suivantes:

- Les deux deltas-dopage séparés de 3 Å restent indiscernables après déconvolution.
- Les deux pics séparés de 5 Å, complètement indistincts avant déconvolution (contraste 0%) peuvent être distingués par un contraste de 49.1%.
- Les deux pics séparés de 10 Å ne sont pas discernables dans le profil mesuré. Après déconvolution ils sont totalement séparés (contraste 100%). La séparation est totale après 990 itérations.

- Les deux pics séparés de 15 Å et présentant un contraste de 33.6% avant déconvolution sont parfaitement séparés après déconvolution. La séparation totale des deux pics est obtenue juste après 70 itérations.

A partir de cet exemple et l'exemple précédent, du profil analysé à haute énergie, on peut aboutir aux remarques et conclusions suivantes:

- Dans tous les exemples, on observe de part et d'autre des deux pics déconvolués des oscillations aux bas niveaux des signaux. Deux causes sont l'origine de ce phénomène :
 - i) La concentration non nulle existante en dehors des pics.
 - ii) le bruit.

En accord avec les résultats obtenus plus haut, les oscillations n'apparaissent pas dans la région entre les deux pics, où il y a une grande interférence entre les concentrations des deux deltas-dopage.

- On constate clairement qu'en plus de la distance initiale existante entre les couches, le taux de séparation dépend également de l'énergie d'analyse. Plus l'énergie d'analyse augmente, plus la longueur de la DRF augmente aussi. La superposition entre les deux couches devient donc de plus en plus forte avec l'augmentation de l'énergie d'analyse, et la séparation des couches devient de plus en plus difficile.
- Selon les conditions de mesure, et la distance initiale existante entre les deux couches, on peut constater que:
 - Lorsque la présence des deux couches est détectée dans le profil mesuré, grâce aux maxima qui sont bien visibles, la déconvolution conduit à la séparation complète de ces couches, ou au moins conduit à l'amélioration du taux de séparation de départ.
 - Lorsque la mesure ne fait apparaître qu'un seul pic, la déconvolution aboutit à une séparation partielle ou complète des deux couches. Il existe cependant une distance limite au dessous de laquelle la distinction des deux pics après déconvolution n'est plus possible.

L'étude effectuée ici permet de se faire une idée sur la séparabilité de l'algorithme. Il sera également intéressant de la refaire pour toutes les conditions expérimentales accessibles par l'appareil de mesure, et déterminer pour toutes ces conditions, les conditions pour que deux couches très proches et superposées lors de la mesure soient découplées après déconvolution.

9. DECONVOLUTION DANS LE CAS OU LA DRF EST VARIANTE

Dans des conditions expérimentales particulières l'analyse n'est pas stable à cause de: développement d'une rugosité, variation du courant ionique primaire...etc. Ces phénomènes engendrent une dégradation de la résolution en profondeur. Cette dégradation augmente avec la profondeur érodée, et conduit par conséquence aux variations de la DRF avec la profondeur.

Le sujet de la déconvolution avec une réponse impulsionnelle variante est très rarement abordé dans la littérature relative à la déconvolution en SIMS. A notre connaissance, très peu de références, comme les références [3, 12, 13], discutent ce problème. Ceci revient peut être à la difficulté concernant la détermination précise des variations de la DRF avec la profondeur.

Dans le cas d'une DRF variante, les paramètres de la DRF varient d'un point à l'autre du profil mesuré. Il faut donc modifier la matrice de Toeplitz classique pour tenir en compte de ces variations. Ceci est possible avec l'utilisation d'une réponse impulsionnelle h_n dont les paramètres varient avec la profondeur z (où l'indice n). Il en résulte une matrice \mathbf{H} légèrement différente de la matrice de Toeplitz, où la ligne n contient les éléments de h_n ordonnés de la même manière que la matrice de Toeplitz classique [3] :

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} h_0[0] & 0 & 0 & \dots & 0 \\ h_1[1] & h_1[0] & 0 & \dots & 0 \\ \dots & h_2[1] & h_2[0] & 0 & \dots \\ h_{N_h-1}[N_h-1] & \dots & h_{N_h-1}[1] & h_{N_h-1}[0] & 0 \\ 0 & h_{N_h}[N_h-1] & \dots & h_{N_h}[1] & h_{N_h}[0] \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & h_{N_y-2}[N_h-1] & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N_y-1}[N_h-1] \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

(N_y lignes, N_x colonnes)

La mise on œuvre de la déconvolution variante n'est pas possible dans l'espace de Fourier, nous allons donc utiliser l'espace matriciel pour ce type de déconvolution.

Pour simuler le problème, nous avons essayé de simuler un profil expérimental utilisé dans la référence [3] afin d'étudier le problème de la déconvolution avec une DRF variante. On note que les auteurs de cette référence préfèrent appliquer la déconvolution seulement aux quatre premiers pics puisque le reste de ce profil est trop dégradé.

Ce profil a été analysé à une énergie d'impact de 1750 eV, et un angle d'incidence de 49° . Le cratère a été érodé de manière non uniforme, ce qui conduit aux variations de la DRF avec la profondeur. Les paramètres de la DRF mesurés sur le premier et le dernier pic sont respectivement:

$$\text{Pic1} : \lambda_u = 6.8 \text{ \AA}, \lambda_d = 29 \text{ \AA}, \sigma_g = 12.8 \text{ \AA}.$$

$$\text{Pic4} : \lambda_u = 8.7 \text{ \AA}, \lambda_d = 70 \text{ \AA}, \sigma_g = 18.3 \text{ \AA}.$$

Dans la procédure de simulation, nous avons suivi la même supposition effectuée dans la référence [3] : les variations des paramètres de la DRF suivent une loi affine. Enfin, un bruit est ajouté pour obtenir un SNR égal à 40 dB.

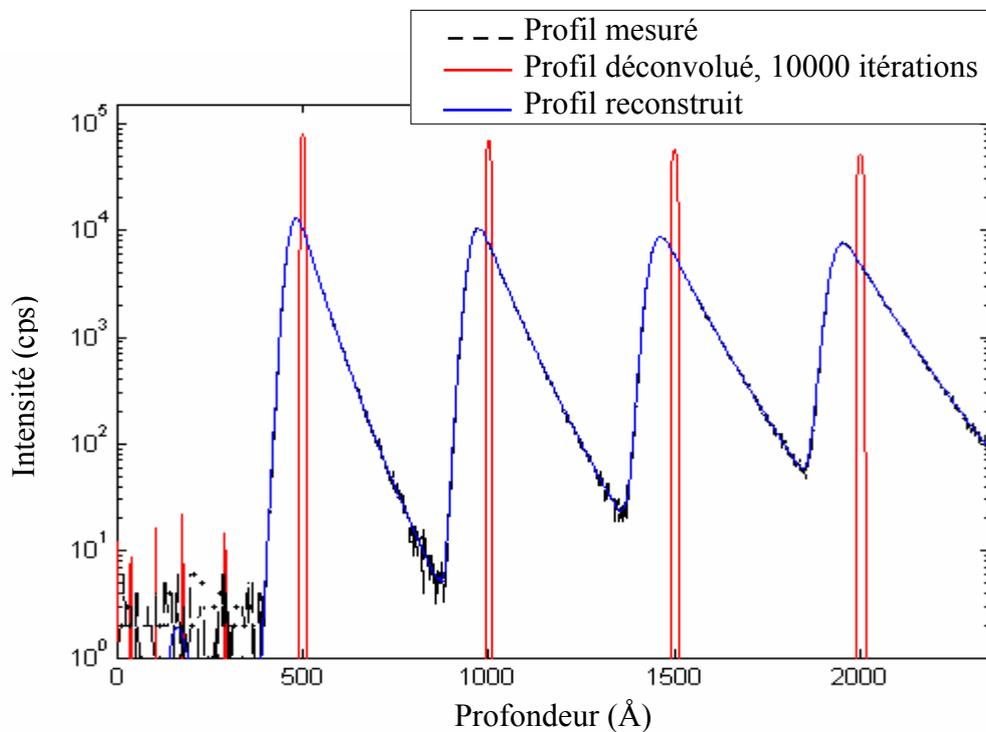


Figure (3-38) : Simulation et déconvolution d'un profil analysé dans des conditions où la DRF est variée.

Le résultat de la déconvolution est représenté sur la figure 3-38. Dans une première vue, il apparaît que le résultat obtenu est très satisfaisant, et comparable avec les résultats obtenus dans le cas d'une déconvolution par une DRF classique. On observe, une suppression des pentes exponentielles, une séparation totale des deltas-dopage, et une diminution de ces largeurs. De plus, la reconstruction est également très bonne. On constate cependant qu'il y a une

augmentation de la largeur à mi-hauteur et une diminution du maximum des pics déconvolués avec la profondeur (tableau 3-5). Ceci peut constituer une limitation de la procédure de la déconvolution variante par comparaison avec une déconvolution classique. Ce phénomène peut être expliqué par le fait que la déconvolution traite ici toutes les zones du profil presque de la même manière (la légère différence observée en particulier entre les gains en FWHM des quatre pics conforte cette explication), alors que les zones les plus dégradées nécessitent une déconvolution plus poussée.

	Pic1	Pic2	Pic3	Pic4
FWHM (y)	58,28	71,16	86,40	98,40
FWHM (x_{dec})	11.30	14,44	15,60	18,72
Gain en FWHM	5.16	4.93	5.54	5.26
max (y)	13220	10696	8863	7653
Max (x_{dec})	80041	67655	58154	51675
Gain en max	6.05	6.33	6.56	6.75

Tableau (3-5) Gains en FWHM et gains en maximum calculés sur chaque pic du profil.

10. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons comparé dans un premier temps les performances de l'algorithme de Van Cittert régularisé et contraint et l'algorithme en l'absence du terme de régularisation proposé dans ce travail. Cette comparaison est effectuée sur des profils simulés, en particulier les trois signaux-types : Gaussien, créneau et delta dopage. Nous avons observé que l'algorithme sans terme de régularisation, est capable de produire des solutions régulières similaires à celles obtenues par l'algorithme avec terme de régularisation, avec une convergence plus rapide. De plus, les gains en résolution en profondeur et en maximum obtenus avec cet algorithme sont meilleurs que ceux obtenus avec l'algorithme classique utilisant un terme de régularisation.

Nous nous sommes attachés ensuite à la technique de déconvolution proposée dans ce travail.

- La déconvolution des profils gaussiens et en créneaux nous a montré que l'algorithme proposé est semiconvergent. Il s'agit donc d'une méthode de régularisation par critère d'arrêt.

Ceci nous a conduit à présenter quelques techniques pour stopper les itérations au bon moment. Il a été remarqué cependant que cette propriété (la semiconvergence) ne pose pas un vrai problème dans le cas des créneaux puisque la convergence est très lente, et le minimum de l'erreur se trouve généralement dans une région plate. Ce résultat peut être généralisé à tout le type de structures très abruptes riches en hautes fréquences. Ceci représente le cas de la plupart des composants de microélectronique moderne qui voient leurs interfaces de plus en plus abruptes.

Il a été observé également, que dans le cas de deltas-dopage l'algorithme converge toujours, au moins dans la gamme étudiée.

- Nous avons essayé ensuite, d'étudier les performances et les limites de la déconvolution dans le cas de différent type de structures :

- La déconvolution de la fonction gaussienne ne pose pas un vrai problème lorsque la largeur de la gaussienne est plus élevée que celle de la DRF. Par contre, des difficultés apparaissent lorsque la DRF devient plus large que la gaussienne.
- Un créneau de très faible largeur aura de fortes chances d'être restitué sous la forme d'une courbe en cloche. Les fronts d'un créneau de grande largeur sont partiellement restaurés et les pentes exponentielles visibles dans le profil mesuré disparaissent. En contrepartie, on observe l'apparition d'oscillations sur le plateau du créneau. Elles sont de plus en plus importantes au fur et mesure que les pentes des créneaux deviennent plus abruptes.
- La répartition fréquentielle de la DRF et les autres profils (réel, mesuré) peut nous donner une bonne indication sur l'origine des limitations et des performances observées lors de la déconvolution.
- Le bruit ne peut pas être considéré comme le seul responsable à la génération des oscillations aux bas niveaux des signaux déconvolués. L'existence d'une concentration non-nulle entre les structures principales, qui constituent le profil réel, peut engendrer également des petites oscillations du même ordre de grandeur que les artefacts générés par le bruit. Ceci est conditionné cependant par la distance entre les structures, la valeur de cette concentration et le nombre d'itérations effectuées.

- Nous avons ensuite effectué une étude sur l'influence des incertitudes dans les paramètres de la DRF sur les résultats de la déconvolution.

Il est généralement observé que : si la DRF est plus étroite par rapport à la vraie DRF, les profils réels sont partiellement restaurés, et si la DRF est plus large que la vraie DRF, la

déconvolution peut conduire à une distorsion des résultats. Dans ce dernier cas, l'erreur peut être détectée à partir du profil reconstruit ou du vecteur de l'erreur de reconstruction.

- L'étude faite sur la capacité de l'algorithme proposé à séparer deux deltas-dopage proches et superposés lors de la mesure montre que :

- i) L'algorithme conduit à une nette amélioration du taux de séparation des couches mesurés.

- ii) Cette amélioration diffère cependant selon les conditions de la mesure et la distance initiale entre les couches.

- Enfin, nous avons abordé le cas de la déconvolution où la DRF est variée avec la profondeur. Ce cas particulier peut être rencontré par exemple lors de l'apparition d'une rugosité pendant la mesure. La déconvolution avec une DRF variée est théoriquement possible, et conduit à des bons résultats. Cette déconvolution cependant ne conduit pas à une élimination complète de l'effet de l'élargissement des pics et la diminution de leurs hauteurs avec la profondeur, qui est observé généralement dans le cas d'une DRF variée.

Chapitre 4

Etude des profils en profondeur SIMS expérimentaux

1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre nous allons appliquer l'algorithme de déconvolution proposé dans ce travail à des profils expérimentaux. Le problème de la déconvolution dans des conditions de routine de l'analyse (DRF constante sur toute la profondeur de l'échantillon) sera étudié. Le problème de la déconvolution dans des conditions expérimentales, où la DRF est variante sera également abordé. Une attention particulière sera donnée à l'interprétation des résultats obtenus.

Enfin, nous nous intéresserons également à une autre méthode de déconvolution dite partielle. Elle a pour but la correction de l'élargissement des profils expérimentaux observé sur la partie descendante (décroissance exponentielle).

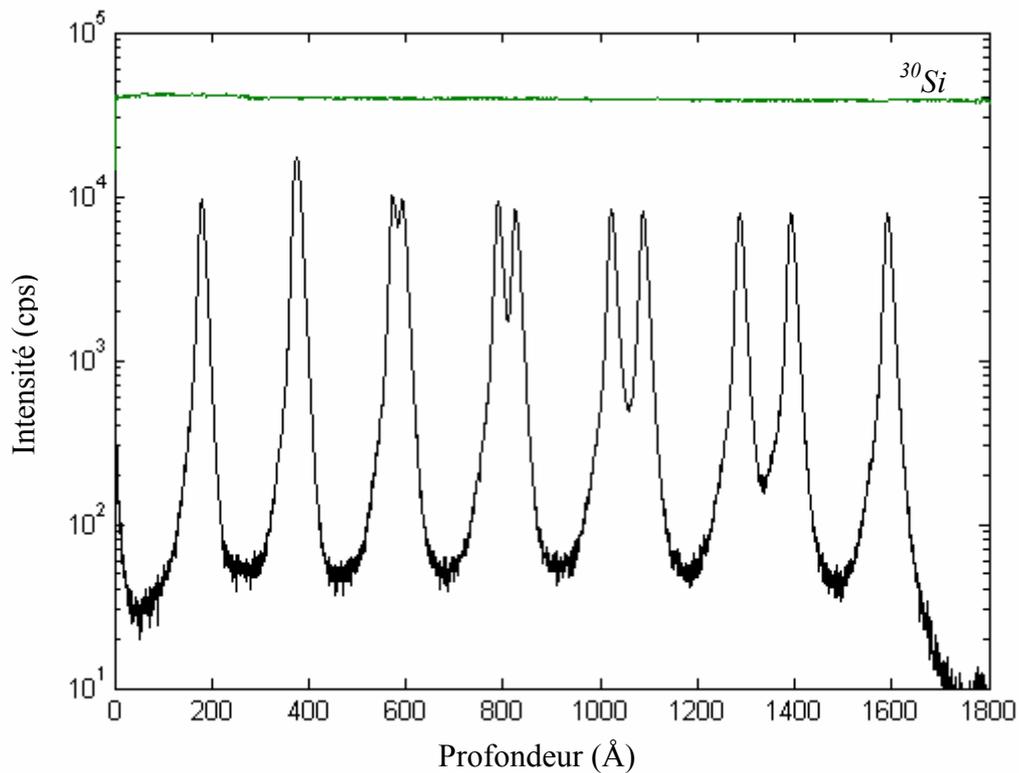
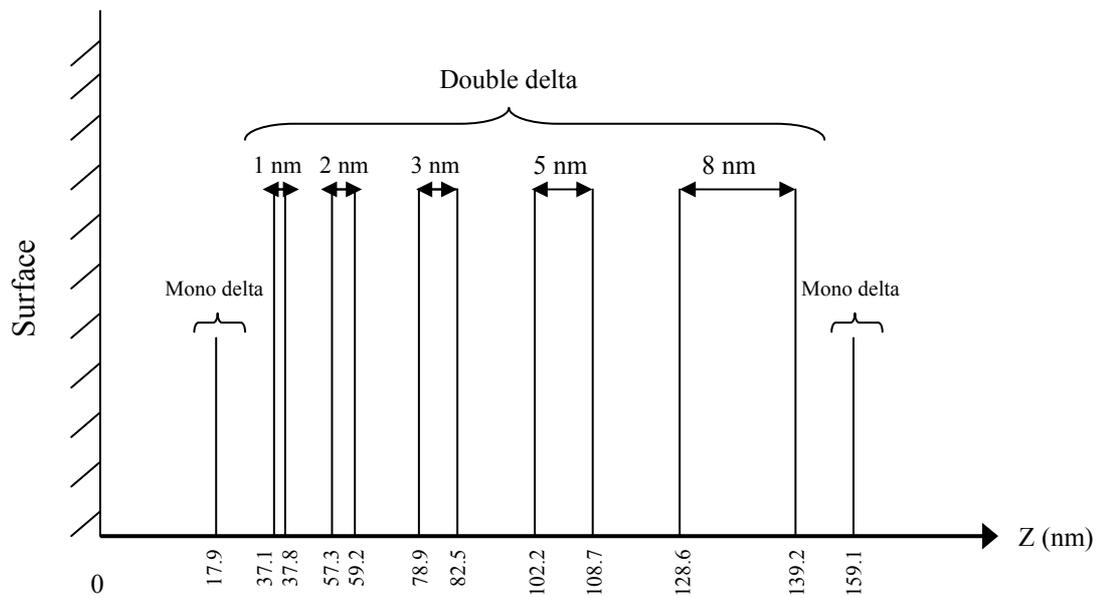
Tous les profils en profondeur de ce chapitre nous ont été fournis par LPM-INSA de Lyon.

2. DECONVOLUTION D'UN ECHANTILLON *MULTI DELTAS-DOPAGE*

2.1 Composition de l'échantillon et conditions expérimentales de l'analyse

Cet échantillon est réalisé au LETI par RP-CVD (Reduced pressure-chemical vapor deposition). Sa structure supposée réelle est représentée sur la figure 4-1. C'est un multi deltas-dopage de Bore dans le Silicium. Il comporte 5 double-delta dopages (2 couches séparées de 10, 20, 30, 50 et 80 Å) encadrés par 2 mono deltas-dopage, l'espace entre chaque couche étant de 200 Å.

L'échantillon a été analysé avec différentes énergies d'impact et angles d'incidences. Les profils ont été réalisés à l'aide de l'instrument Cameca IMS 5f en utilisant les ions O_2^+ comme source d'ions primaires. Le courant primaire est compris entre 18.4 et 19 nA. La profondeur du cratère est mesurée à l'aide d'un profilomètre mécanique (Tencor P10). Les échelles des profondeurs sont établies à l'aide de la mesure de la profondeur finale en supposant que la vitesse d'érosion est constante. Nous aurons l'occasion de déconvoluer deux profils en profondeur SIMS résultants de l'analyse de cet échantillon. L'un dans cette partie et l'autre dans la partie concernant la déconvolution par une DRF variante.



Le profil utilisé ici est obtenu après une analyse effectuée sous soufflage d'oxygène (la pression d'oxygène utilisée est de l'ordre de 2×10^{-6} Torr) et à une énergie d'impact de 0.5 KeV: 1.1 KV pour la tension primaire et 0.6 KV pour la tension secondaire. L'angle d'incidence est de 44° . Ce profil est représenté sur la figure 4-2. Cet échantillon est analysé donc à très faible énergie là où il y a beaucoup de chance que la rugosité apparaisse et conduit à une dégradation de la résolution en profondeur (ceci s'accompagne par une variation de la DRF avec la profondeur). Le signal de matrice ^{30}Si est représenté également sur la figure 4-2 ; on observe que ce signal atteint l'équilibre très rapidement juste après le début de l'analyse (on rappelle que la variation des signaux de matrice est corrélée au changement de la topographie). De plus, le profil en profondeur ne montre aucune dégradation de la résolution en fonction de la profondeur. Il n'y a pas donc apparition de la rugosité, et l'analyse est stable. Ceci est confirmé par l'analyse AFM (microscope à force atomique) de l'état de la surface de l'échantillon après sa mesure par SIMS, la surface est relativement lisse et ne présente aucune rugosité supplémentaire par rapport à la surface initiale, la rugosité RMS est très faible de 1.4 \AA [1]. En effet, l'étude faite par Boubker [1] sur la rugosité à basse énergie dans Silicium en incidence oblique sans et avec soufflage d'oxygène conduit à la conclusion que les meilleurs résultats en termes de résolution en profondeur sont obtenus dans le cas étudié ici : 0.5 KeV, 44° avec soufflage.

2.2 Résultats de la déconvolution

Nous avons choisi de stopper l'algorithme lorsque l'erreur de reconstruction atteint une valeur de 0.02. Le nombre d'itérations correspondant est de 892 itérations. En utilisant l'algorithme de Van-Cittert régularisé et contraint pour la déconvolution du même profil, nous avons observé que la même valeur de l'erreur de reconstruction est atteinte après 966 itérations [2]. Si on choisit d'arrêter les itérations lorsque l'erreur de reconstruction atteint des valeurs plus faibles, la différence entre le nombre d'itérations effectuées par les deux algorithmes devient plus appréciable.

Le résultat de la déconvolution est représenté sur la figure 4-3. Il est clair que la déconvolution conduit à une nette amélioration de la résolution en profondeur : l'épaisseur des pics diminue notablement, et les parties exponentielles sont supprimées. De plus, la séparation des pics chevauchent entre eux est considérablement améliorée. Le résultat est tout aussi parlant lorsqu'il est représenté en échelle linéaire (figure 4-4). Nous avons choisi de représenter juste la moitié du profil afin de mieux apprécier le résultat.

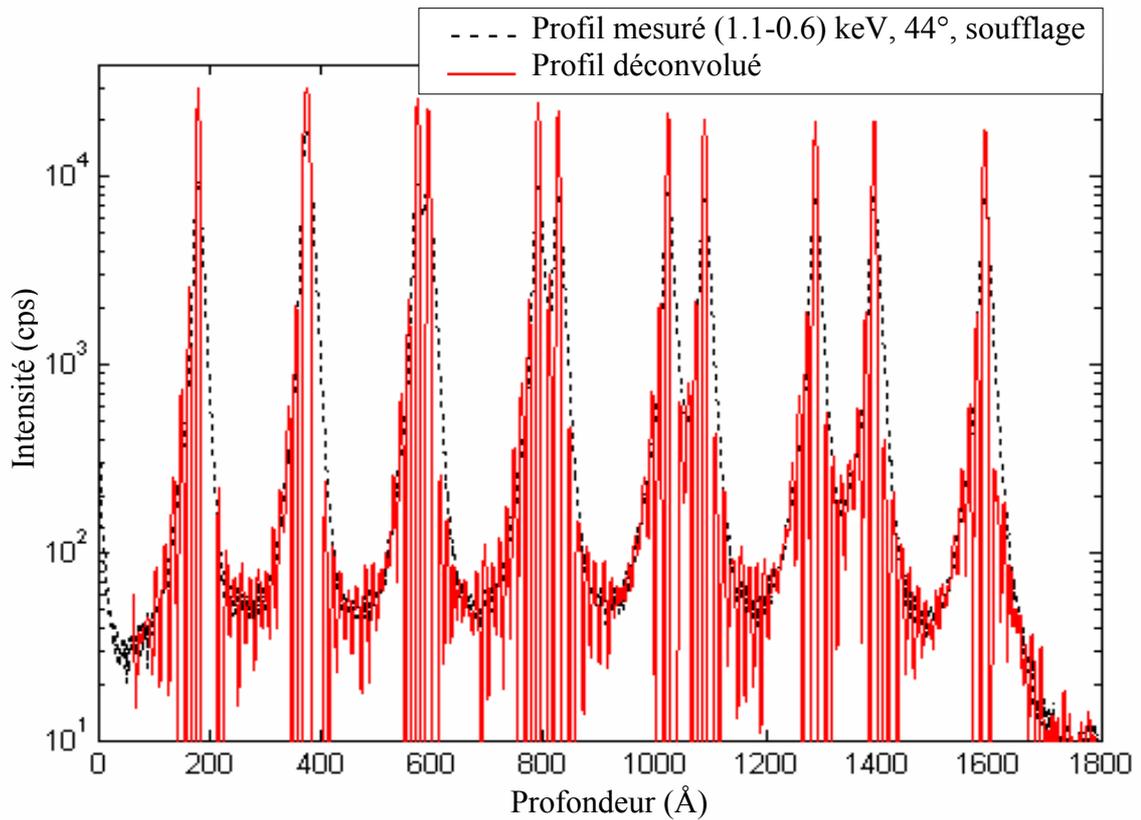


Figure (4-3) : Déconvolution de l'échantillon composé de deltas-dopage, analysé à (1.1-0.6) keV, 44°, sous soufflage.

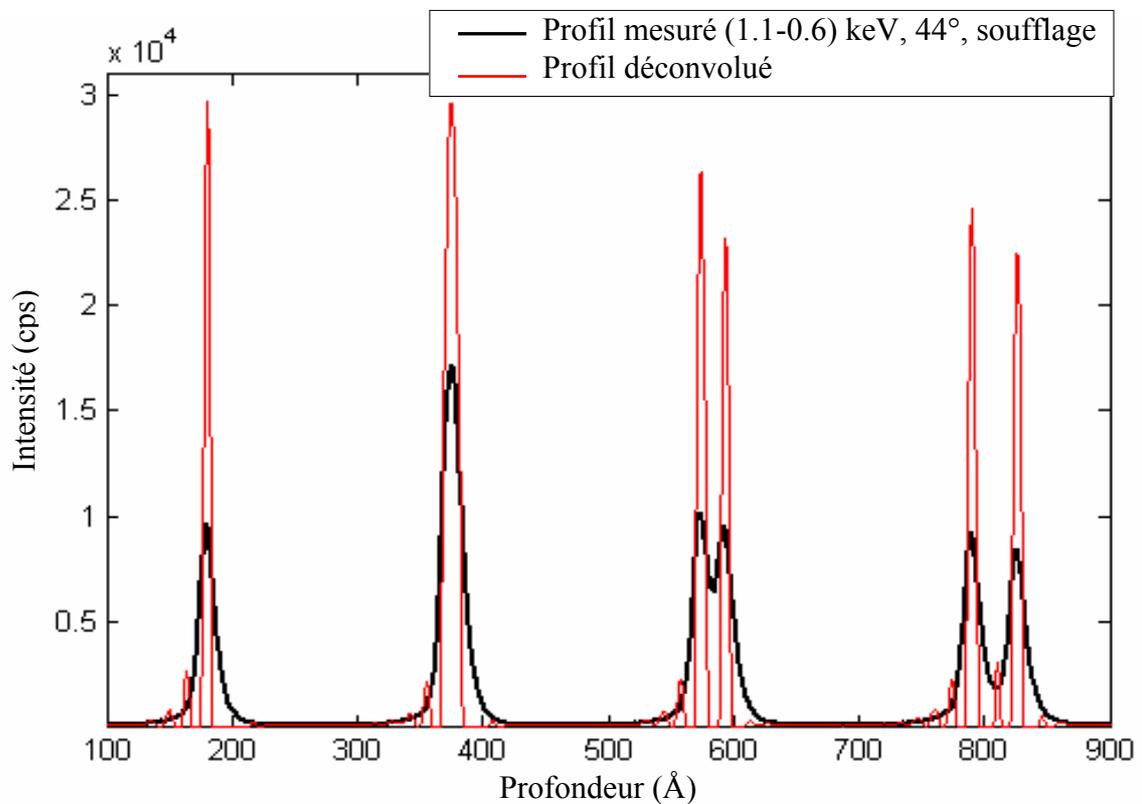


Figure (4-4) : Déconvolution de l'échantillon composé de deltas-dopage, analysé à (1.1-0.6) keV, 44°, sous soufflage. Représentation en échelle linéaire

En mesurant l'intensité maximale et la FWHM du premier pic mesuré et déconvolué, on observe que l'intensité maximale du pic déconvolué est augmentée d'un facteur de 3 par rapport au pic mesuré, et la valeur de la FWHM est diminuée d'un facteur de 2.74. Bien que le profil mesuré soit clairement fin, ce qui correspond à une bonne résolution en profondeur : la valeur de la FWHM mesurée sur le premier pic est seulement de 14.5 Å, la déconvolution pousse encore les limites de la mesure SIMS vers une résolution ultime. Il en ressort que l'application de la déconvolution aux profils mesurés à très basse énergie, dans le cas d'une résolution stable (pas de rugosité), est possible et conduit encore à une amélioration de la résolution en profondeur en plus de l'amélioration obtenue lorsque l'analyse est effectuée avec ces mêmes énergie. Nous allons par la suite nous intéresser à l'étude d'un cas où la rugosité apparaît.

Au contraire des autres double-delta dopages, le premier double-delta dopage, dont les deux deltas-dopage sont supposés séparés seulement par 10 Å, n'est pas résolu. Si nous augmentons le nombre d'itérations, on observe que les deux deltas commencent à se séparer. Ceci est illustré sur la figure 4-5, où le résultat de la déconvolution après 10000 itérations est représenté en échelle linéaire. Cette amélioration de la résolution en profondeur est malheureusement accompagnée par une amplification inacceptable des oscillations dans les niveaux bas du profil déconvolué.

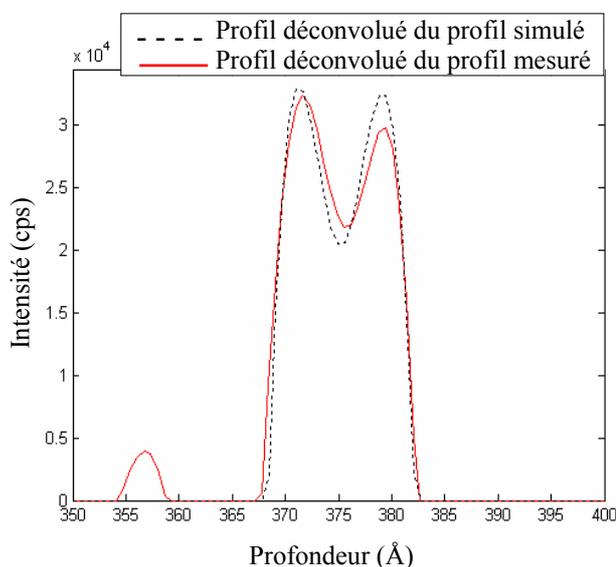


Figure (4-5) : Représentation en échelle linéaire des profils déconvolués de l'échantillon analysé à (1.1-0.6) keV, 44°, sous soufflage d'oxygène et de son profil simulé. (Exhibition du premier double-delta dopage), 10000 itérations.

En cherchant les causes qui conduisent à la création de ces oscillations, nous avons essayé de simuler le profil expérimental en utilisant la même DRF utilisée dans la déconvolution, et un SNR de 40 dB. Nous avons constaté que le rapprochement du profil simulé au profil mesuré au niveaux bas n'est pas possible avec la simple supposition d'une concentration nulle en dehors des pics. Pour faire ce rapprochement, nous étions obligés d'ajouter à tous les points du profil réel (de la simulation) une valeur constante. Il apparaît alors que la concentration entre les deltas-dopage de l'échantillon n'est pas nulle. Les profils simulé et expérimental sont représentés sur la figure 4-6, une simple comparaison entre les deux profils révèle que les fronts montants des deltas-dopage composants le profil expérimental ne représentent pas exactement un comportement exponentiel : un épaulement ou *shoulder* de concentration est clairement visible. Il est logique de suspecter une diffusion ou une ségrégation durant la croissance de cet échantillon qui conduit à cette caractéristique dans le profil mesuré.

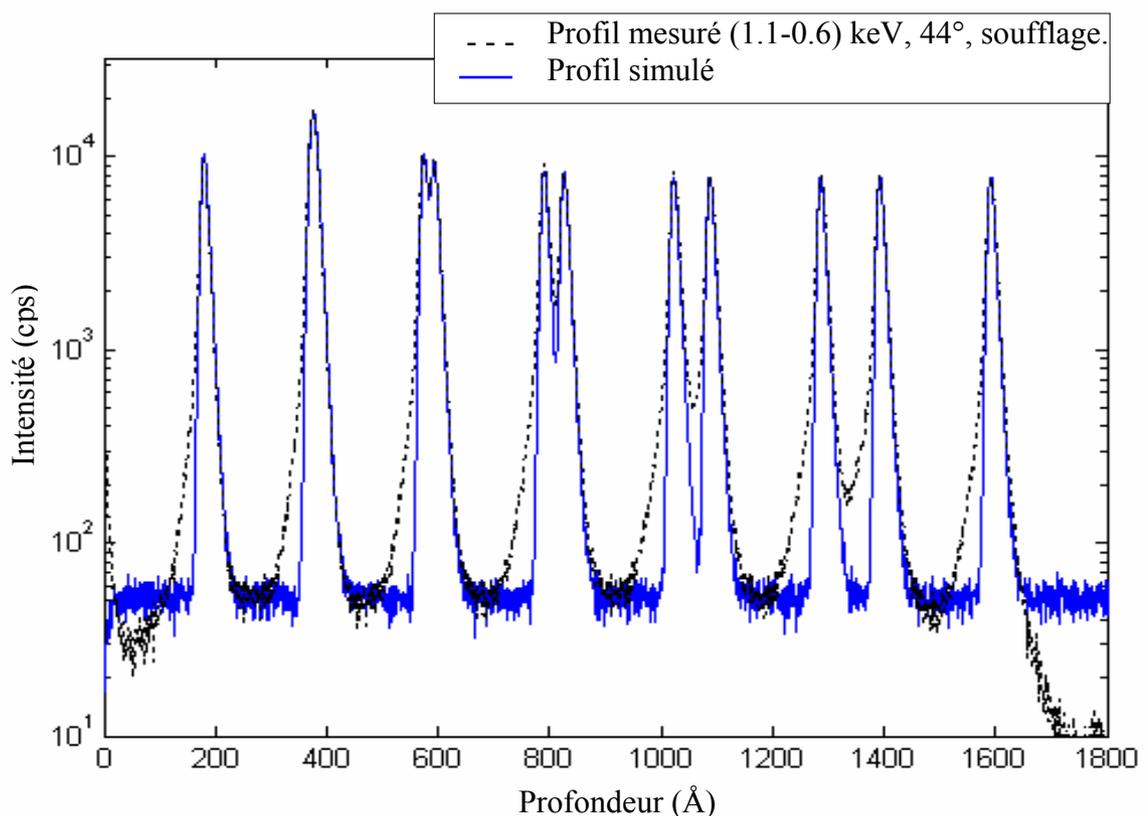


Figure (4-6) : Simulation du profil de l'échantillon analysé à (1.1-0.6) keV, 44°, sous soufflage, avec la même DRF utilisée pour la déconvolution et un SNR=40 dB.

Le résultat de la déconvolution du profil simulé est donné sur la figure 4-7. Les larges oscillations observées dans le cas de la déconvolution du profil expérimental ne sont pas observées ici, (même après un nombre d'itérations très élevé). Donc, les larges oscillations apparaissant particulièrement sur les fronts montants des deltas-dopage peuvent être reliées à ce *shoulder* de concentration. Les oscillations qui apparaissent aux niveaux bas du profil déconvolué peuvent être attribuées à la présence d'une concentration non-nulle entre les delta-dopages et au bruit.

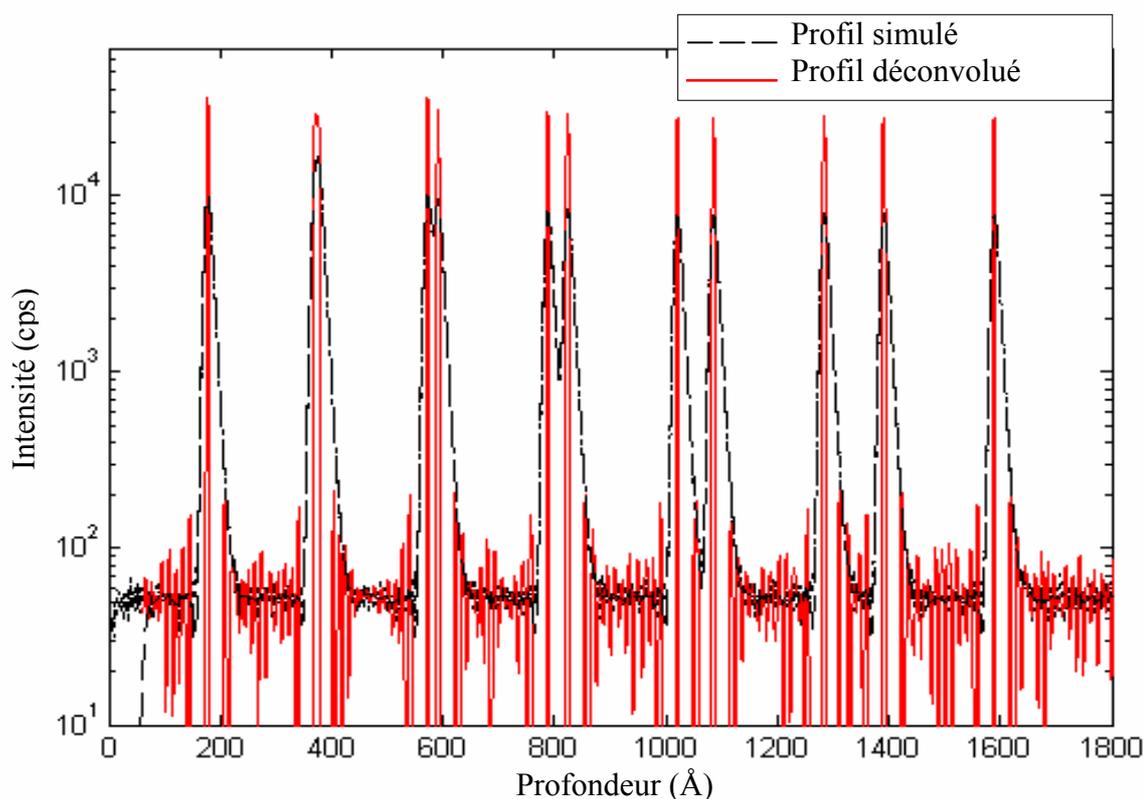


Figure (4-7) : Déconvolution du profil simulé de la figure (4.6). 1000 itérations.

En utilisant 10000 itérations, la déconvolution du profil simulé conduit donc à une séparation partielle des deux deltas-dopage qui constituent le premier double-delta dopage (figure 4-5). En tenant compte de ce résultat et en plus du fait qu'une probable erreur dans les paramètres de la DRF dans le cas d'un delta dopage ne conduit pas à la créations des artefacts dans les niveaux haut du signal déconvolué (voir chapitre 3), il apparaît que ces deux deltas-dopage existent réellement dans le profil original. Cependant, en tenant compte de la présence du *shoulder* de concentration et de la limite de séparation de l'algorithme (les deux deltas-dopage dans la déconvolution du profil simulé, où ils sont considérés complètement séparés dans le

profil réel, sont seulement partiellement séparé après déconvolution) il est très difficile de connaître si les deux deltas-dopage sont complètement séparés ou non dans la réalité.

On remarque une petite différence entre la forme du double-delta dopage obtenue dans le cas de la déconvolution du profil expérimental et dans le cas de la déconvolution du profil simulé. Cet effet peut être attribué, au moins dans une partie au *shoulder* de concentration.

Pour résumer, les oscillations qui apparaissent aux niveaux bas du profil expérimental peuvent être attribuées à deux principales causes:

- oscillations créées par le *shoulder* de concentration (en particulier les oscillations larges) et la concentration non-nulle existant entre les deltas-dopage.
- artéfacts résultant du bruit, et probablement des erreurs d'estimation de la DRF.

En effet, les paramètres de la DRF sont mesurés sur le premier delta dopage qui est étendu seulement sur deux décades. Il a été montré par Wittmaack [3] que pour une détermination précise de λ_u une mesure d'un profil d'un delta dopage sur quatre décades ou plus est nécessaire (cf. chapitre 2). A partir de la figure 4-8, il apparaît que le vecteur de l'erreur de reconstruction E_{rv} se comporte de la même manière que dans le cas des simulations où la DRF est correcte à l'exception du début du profil (régime transitoire). Ceci peut exclure la possibilité d'une DRF plus large que la vraie DRF au moins dans la région où la déconvolution est valide (régime permanent). Mais il est très difficile ici de vérifier si la DRF utilisée pour la déconvolution est plus étroite que la vraie DRF ou non. La possibilité des erreurs dans les paramètres de la DRF n'est donc pas totalement exclue. Nous avons vu que dans le cas d'un delta dopage la déconvolution par une DRF plus étroite que la vraie DRF conduit à la génération d'artéfacts aux bas niveaux du signal déconvolué.

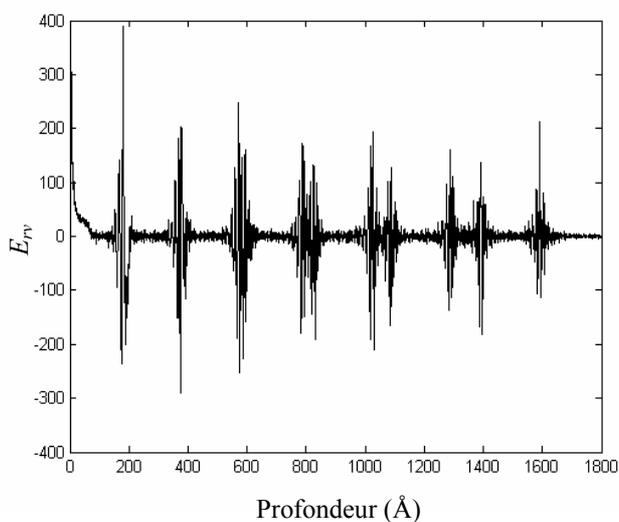


Figure (4-8) : Vecteur de l'erreur de reconstruction.

2.3 Reconstruction du profil

La figure 4-9 représente la reconstruction du profil mesuré. On rappelle que le profil reconstruit est le résultat de la convolution du profil déconvolué par la DRF. La reconstruction est très satisfaisante, en particulier aux niveaux hauts du signal. Les écarts entre le profil mesuré et reconstruit se situent principalement dans la zone du régime transitoire, et aux jonctions des pics de concentration où le profil est dominé par le bruit.

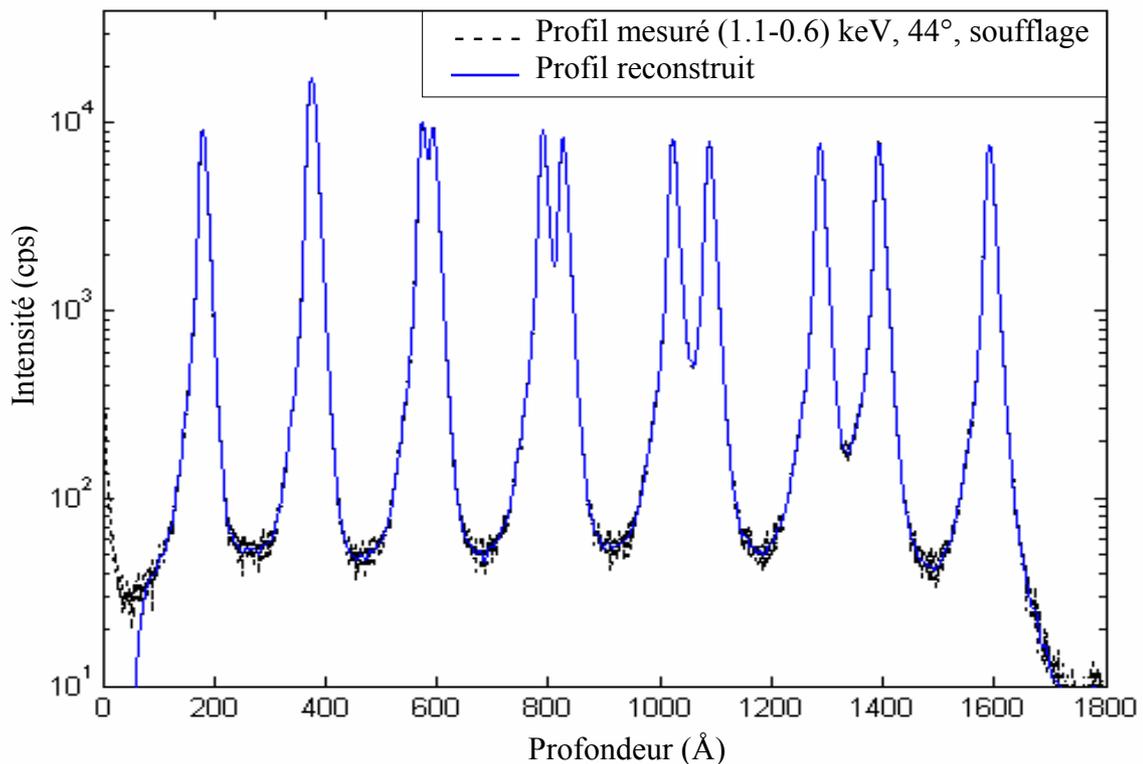


Figure (4-9) : Reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué et de la DRF.

3. DECONVOLUTION DE DEUX CRENEAUX DE 100 Å

3.1 Echantillon considéré

Cet échantillon a été fabriqué par SIEMENS AG (Munich). Il a été élaboré par CVD. Il est composé de deux créneaux supposés très abrupts de 100 Å de bore dans le silicium, séparés l'un de l'autre par 100 Å de silicium non dopé. Le premier de ces deux créneaux se trouve à environ 100 Å sous la surface. Les deux créneaux ont des concentrations différentes : les

concentrations respectives du 1^{er} et 2^{ème} créneau sont supposées de 10^{19} et 3.10^{18} at/cm³. Sa structure schématique est représentée sur la figure 4-10.

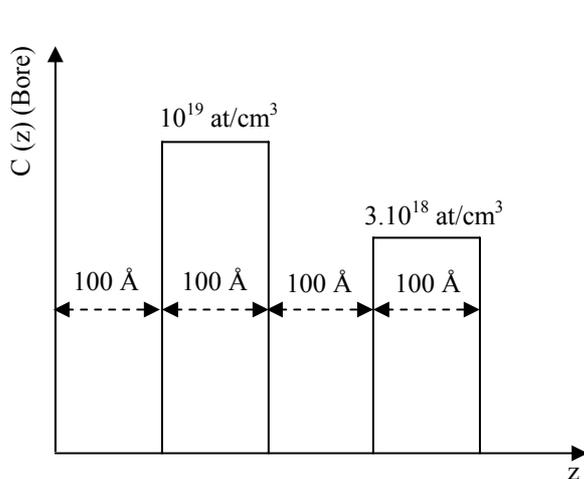


Figure (4-10) : structure schématique de l'échantillon SIEMENS. Les concentrations indiquées sont des concentrations approximatives, que l'expérience montrera plus importantes [4].

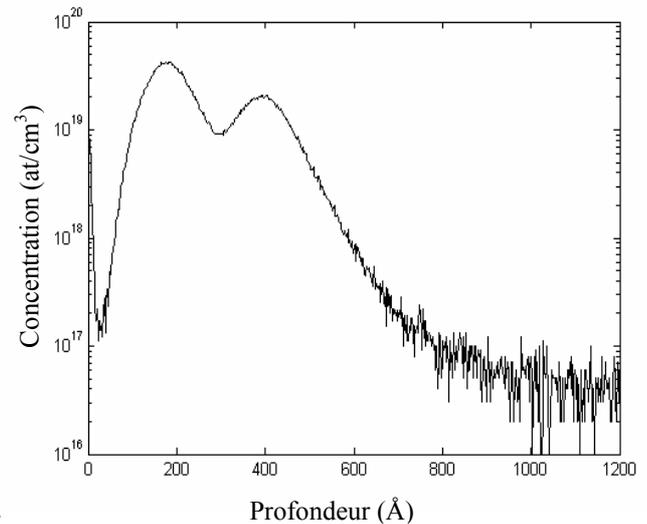


Figure (4-11) : Profil SIMS des ions secondaires de l'échantillon SIEMENS pour une analyse effectuée à 5.5 keV 42.4°.

3.2 Résultats de la déconvolution

Nous disposons du profil en profondeur résultant de l'analyse de cet échantillon à 5.5 keV/ O_2^+ (figure 4-11). Ceci correspond à une profondeur de pénétration de 73 Å. La zone de régime transitoire avec une telle profondeur de pénétration, s'étend sur environ 140 Å [4]. Etant donné que la première couche de bore est nominale située à 100 Å sous la surface, certaines réserves peuvent être gardées sur le résultat de la déconvolution, sur tout le début de cette couche (la déconvolution n'est pas valide dans la région du transitoire à cause des problèmes de non linéarité et de la variation de la DRF). La déconvolution de ce profil a été effectuée avec les paramètres de la DRF mesurée à 5.5 keV/ O_2^+ . Les paramètres de cette DRF sont déjà cités dans le chapitre 3. L'évolution du profil déconvolué a été suivie visuellement au cours de la déconvolution, et l'algorithme a été arrêté lorsqu'il atteint une zone où l'évolution du profil déconvolué avec les itérations devient négligeable (lorsque le profil déconvolué devient presque invariant). Le résultat de la déconvolution est représenté sur la figure 4-12. Les deux crênes

sont totalement séparés. De plus, la figure 4-12B, qui représente une vue détaillée du haut du deuxième créneau, montre que la partie supérieure du profil déconvolué de ce créneau oscille autour d'une droite de pente >0 . Reliant ce résultat avec les résultats de la simulation, où on observe dans le cas du créneau que la partie supérieure du profil déconvolué est également oscillante, mais autour d'un niveau plan (même dans le cas de la déconvolution avec une fausse DRF), on peut douter de la qualité de ces créneaux. La partie supérieure n'est donc pas plane et présente une pente de concentration. L'existence de ce gradient de concentration a été confirmée par l'analyse de cet échantillon à des faibles énergies : 2.5 keV/ O_2^+ [4] et 1 keV avec des ions primaires Xénon et sous soufflage d'oxygène [5]. La mise en évidence de cette caractéristique (gradient de concentration sur le plateau) par la méthode de déconvolution peut être considérée ici comme un résultat très intéressant tenant en compte qu'elle est totalement invisible à partir du profil mesuré à 5.5 keV/ O_2^+ .

Cependant, les pentes descendantes des créneaux sont accidentées. La reconstruction est bonne à l'exception de la région du transitoire. Ce cas rappelle le cas de la simulation, où la DRF est plus étroite que la vraie DRF. On peut supposer donc que la DRF utilisée ici pour la déconvolution est légèrement différente de la vraie DRF qui a convolué le profil réel.

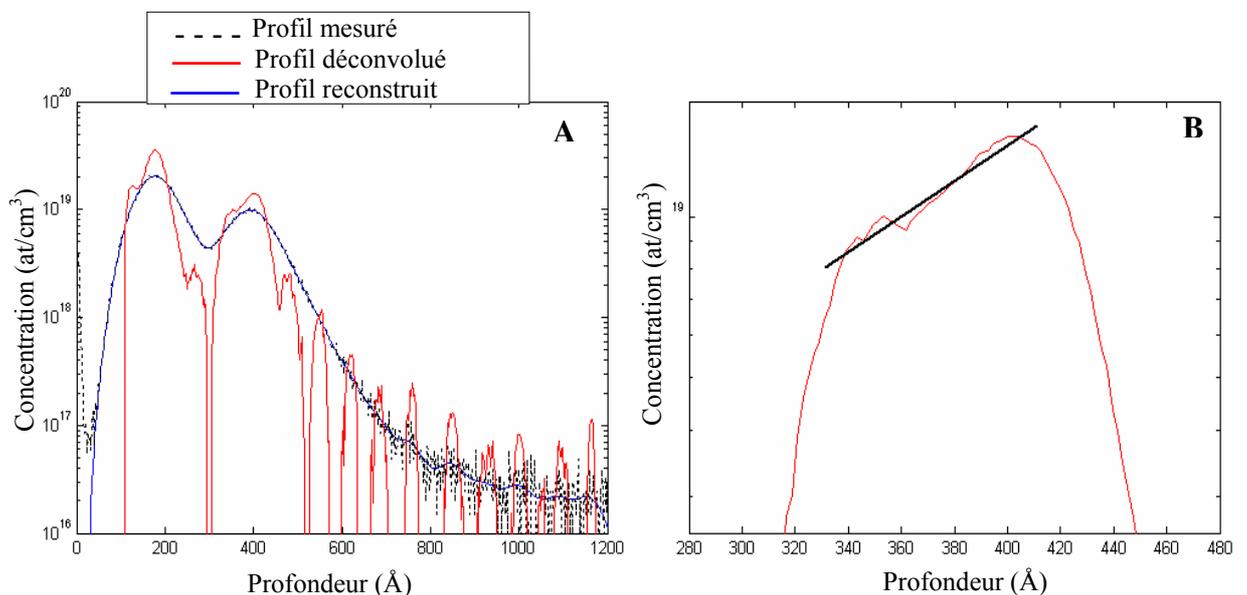


Figure (4-12) : A) Déconvolution de l'échantillon SIEMENS. B) Vue détaillée du niveau haut du deuxième créneau. 2000 itérations.

On observe dans la partie finale du profil déconvolué, après les deux créneaux, des oscillations. La génération de ces oscillations peut être reliée à trois causes : les erreurs dans les paramètres de la DRF, le bruit, et l'existence d'une concentration non nulle en dehors des créneaux.

Si on cherche à atténuer les artefacts de la déconvolution y compris ceux dus aux erreurs dans les paramètres de la DRF, on peut penser à stopper l'algorithme aux premières itérations (avant la convergence complète), ce qui signifie l'application d'une forte régularisation. Le résultat de la déconvolution obtenu avec cette manière est représenté sur la figure (4-13). Les pentes apparaissent maintenant plus abruptes. Cependant, cette déconvolution ne nous permet pas de révéler l'existence du gradient de la concentration comme dans le cas de la déconvolution précédente.

On note finalement que le résultat représenté sur la figure (4-13), apparaît similaire à un résultat de déconvolution effectuée sur le même profil par une méthode de déconvolution dite : *Méthode avec modèle*, où un fort paramètre de régularisation pour cette méthode $\alpha = 5$ et 60 itérations sont utilisés pour réaliser la déconvolution [5].

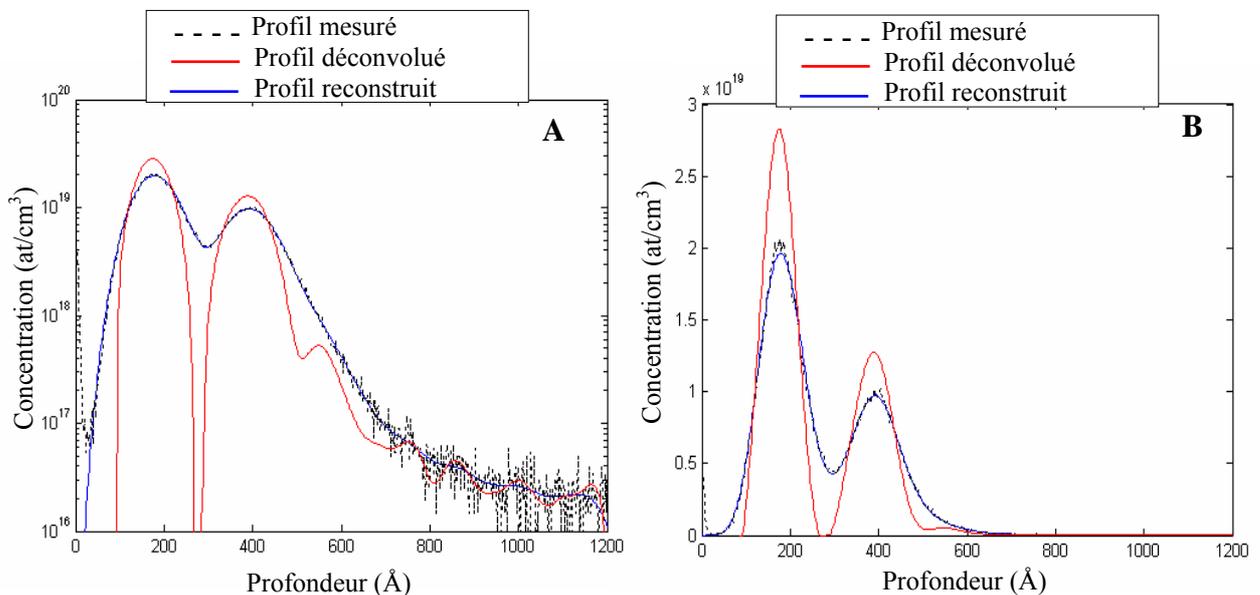


Figure (4-13) : Déconvolution de l'échantillon SIEMENS. A) représentation logarithmique. B) représentation linéaire. 15 itérations.

4. DECONVOLUTION DANS UN CAS OU LA DRF EST VARIANTE

Dans l'étude concernant la déconvolution *variante* faite au chapitre précédent, nous avons simulé un cas où la DRF commence à varier dès le début de l'analyse. La rugosité cependant commence à apparaître généralement à partir d'une profondeur critique dc , comme dans le cas de l'échantillon que nous allons étudier ici. Il en résulte que la DRF est constante avant dc et commence à varier à partir de dc . Pour tenir compte de cet effet, un petit changement sur la matrice utilisée dans le chapitre 3 pour représenter la DRF est nécessaire:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} h_0[0] & 0 & 0 & \dots & 0 \\ h_0[1] & h_0[0] & 0 & \dots & 0 \\ \dots & h_{dc}[1] & h_{dc}[0] & 0 & \dots \\ h_{N_h-1}[N_h-1] & \dots & h_{N_h-1}[1] & h_{N_h-1}[0] & 0 \\ 0 & h_{N_h}[N_h-1] & \dots & h_{N_h}[1] & h_{N_h}[0] \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & h_{N_y-2}[N_h-1] & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N_y-1}[N_h-1] \end{bmatrix} \quad (4-1)$$

(N_y lignes, N_x colonnes)

4.1 Conditions expérimentales de l'analyse

L'échantillon *multi deltas-dopage* du paragraphe 2 a également été analysé sans soufflage d'oxygène à une énergie de 1 keV (2.5kV-1.5kV) et un angle d'incidence de 48°. Le profil en profondeur résultant de cette analyse et les signaux de la matrice Si sont représentés sur la figure 4-14. La profondeur apparente est établie à l'aide de la mesure de la profondeur du cratère final (qui est ici 2100 Å) avec la supposition que la vitesse d'érosion est constante. La variation des signaux de matrices (croissance pour $^{28}Si^{16}O$, ^{30}Si , et décroissance pour $^{30}Si_2^{16}O$) à partir d'une certaine profondeur et la dégradation de la résolution en profondeur (diminution de la dynamique du signal avec la profondeur, les 4 derniers doublés ne sont pas résolus) indique clairement l'apparition de la rugosité. Ceci a été confirmé par l'analyse topographique de la surface de l'échantillon après son analyse par SIMS. L'image AFM a montré la présence d'une rugosité, qui se manifeste sous forme d'ondulations régulières dans la direction perpendiculaire au faisceau d'ions incidents, la rugosité RMS est de 39 Å [1].

Les signaux de la matrice présentent donc une variation à partir d'une certaine profondeur puis se stabilisent après une phase de transition. Cette variation indique le début du développement de la rugosité. La profondeur à partir de laquelle cette variation commence à apparaître est la profondeur critique d'apparition de la rugosité (dc): elle est ici d'environ 500 Å.

Le FWHM du premier pic (qui est situé dans la région où la DRF est constante) est de 23.87 alors qu'il n'est plus que 14.5 Å dans le cas de l'analyse précédente (effectuée à 0.5 keV 44°, sous soufflage). Ceci donne une idée sur l'amélioration de la résolution en profondeur obtenue avec la diminution de l'énergie d'impact. On note aussi que dans le cas de l'analyse présentée ici la détection du *shoulder* de concentration révélé dans l'analyse précédente, est très difficile.

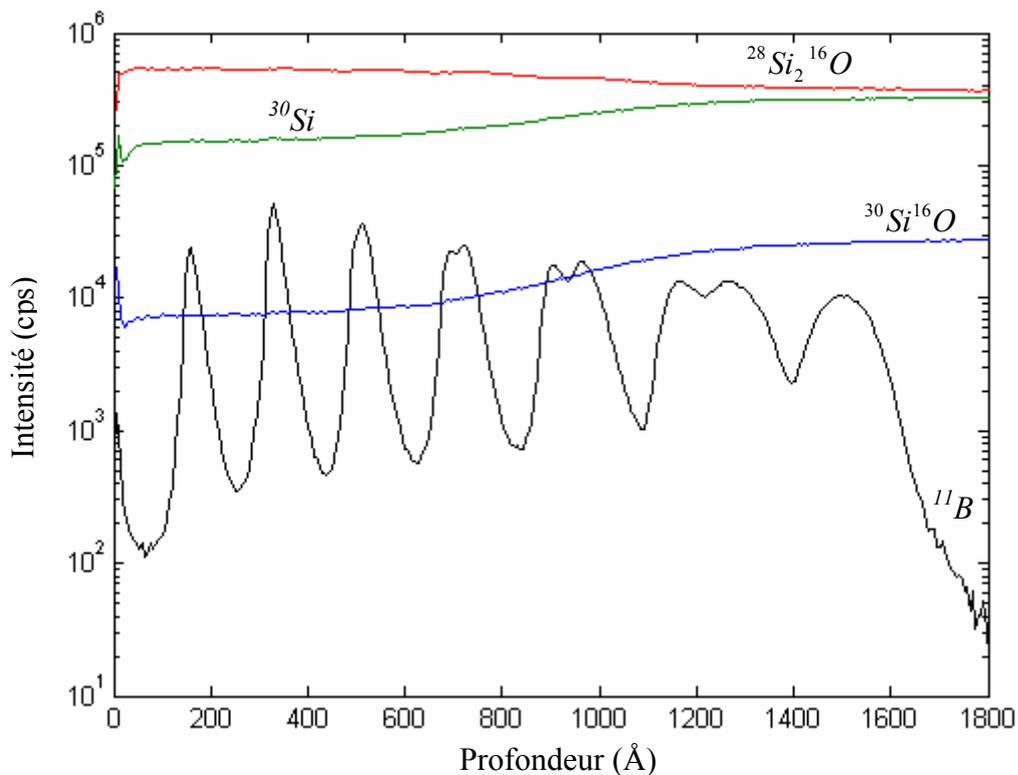


Figure (4-14) : Profil en profondeur de l'échantillon composé de deltas-dopage du Bore dans le Silicium pour une analyse effectuée à (2.5-1.5) keV 48° sans soufflage d'oxygène.

4.2 Déconvolution avec une DRF constante

Nous avons dans un premier temps effectué la déconvolution du profil avec la DRF mesurée sur le premier pic. Nous n'avons donc pas tenu compte des variations de la DRF qui se manifeste dès le début de l'apparition de la rugosité (à partir de dc). Nous avons donc procédé,

comme dans le cas habituel, où la DRF est supposée constante sur toute la profondeur d'érosion (hormis dans la zone du transitoire). Le résultat de la déconvolution est représenté sur la figure 4-15. On peut diviser le profil, selon la qualité du résultat obtenu, en deux régions :

- avant dc (où la DRF est constante): la déconvolution conduit à une amélioration de la résolution en profondeur.
- après dc (où la DRF est variante): on observe peu de différence entre le profil déconvolué et le profil mesuré. De plus le profil déconvolué oscille beaucoup dans cette région. On observe quand même une petite amélioration du taux de séparation des double-delta dopages. Ceci n'est pas surprenant puisque nous avons déjà vu que si la DRF utilisée pour la déconvolution est plus étroite que la vraie DRF (comme dans ce cas), les profils réels sont partiellement restaurés.

Donc, bien que la déconvolution ne conduise pas à une amélioration remarquable de la résolution en profondeur dans la région où la DRF est variante, la déconvolution, à la limite, ne conduit pas à un résultat quelconque. L'étude faite dans la référence [6] a abouti à ce même résultat.

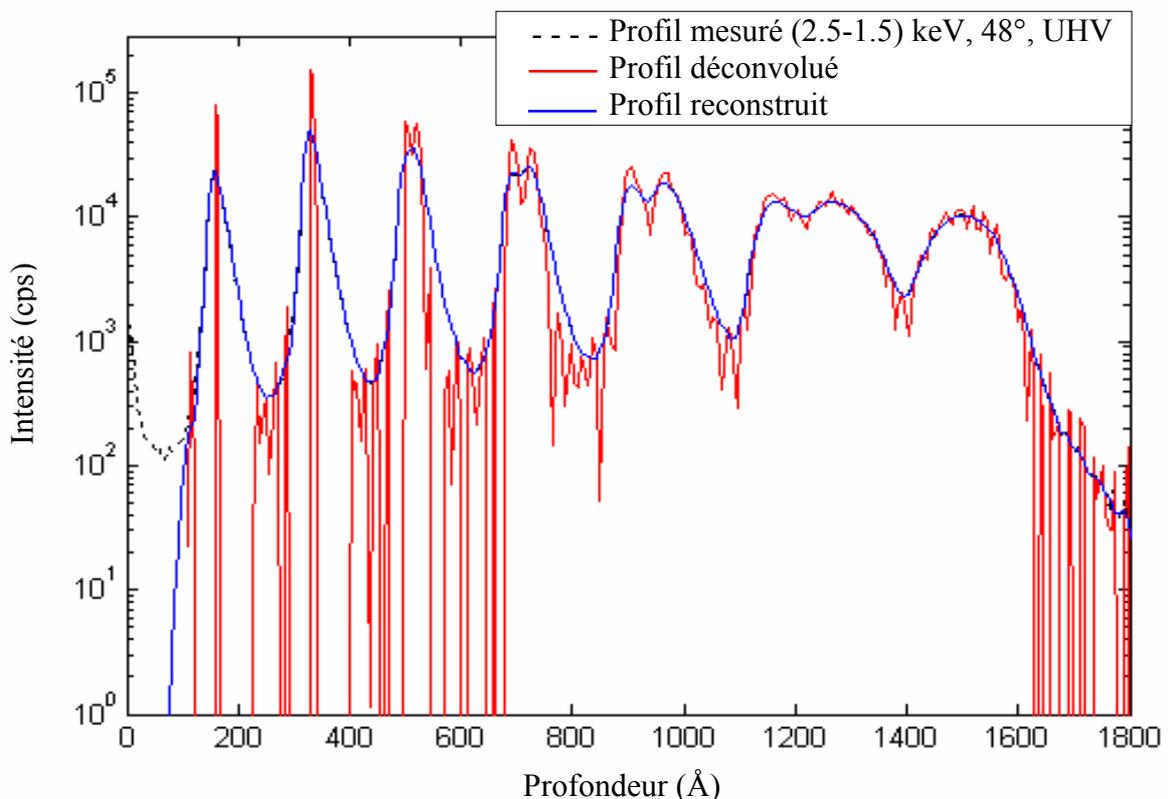


Figure (4-15) : Déconvolution de l'échantillon composé de deltas-dopage, analysé à (2.5-1.5) keV, 48°, UHV. La DRF est mesurée sur le premier pic. 1000 itérations.

La reconstruction est bonne et la répartition des composants du vecteur de l'erreur de reconstruction E_{rv} est symétrique par rapport à l'axe des profondeurs (figure 4-16) même dans la région où la DRF est variante. Ceci n'est pas surprenant tenant en compte que dans cette région la DRF utilisée pour la déconvolution est plus étroite que la vraie DRF qui convolué le profil réel. Nous avons déjà vu (cf. chapitre 3) que la déconvolution par une DRF plus étroite que la vraie DRF n'influe pas sur la qualité de la reconstruction.

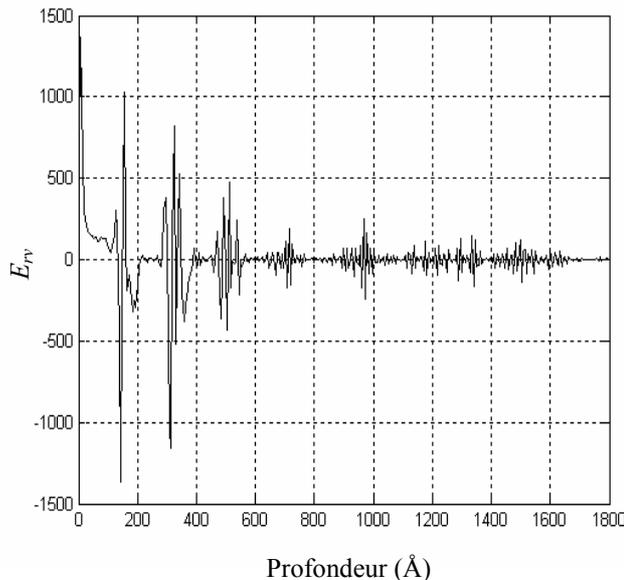


Figure (4-16) : Vecteur de l'erreur de reconstruction. Cas de l'utilisation d'une DRF constante pour la déconvolution

4.3 Déconvolution avec une DRF variante

Cette fois-ci la déconvolution est effectuée en tenant en compte les variations de la DRF. Nous avons utilisé la procédure de la déconvolution *variante*. Les calculs sont effectués donc dans l'espace matriciel. Nous utiliserons l'algorithme proposé dans ce travail, où nous introduirons la DRF définie par la matrice (4-1). Les paramètres de la DRF sont mesurés sur le premier pic (avant l'apparition de la rugosité) et le dernier pic. Avant dc, la DRF est donc constante. Après dc, la DRF varie d'un point à l'autre de la profondeur d'érosion; nous supposons que la variation des paramètres de la DRF dans cette région suit une loi affine.

Le résultat de la déconvolution en appliquant cette procédure est représenté sur la figure 4-17. Bien que ce profil soit trop dégradé à cause de la rugosité, on constate que la déconvolution conduit à une amélioration de la résolution en profondeur: Les épaisseurs des pics ont diminué, et les parties exponentielles sont supprimées. La séparation des pics qui chevauchaient auparavant est considérablement améliorée à l'exception du premier double-delta

de dopage où les deltas-dopage chevauchent encore, et le deuxième double-delta dopage où la séparation est partielle.

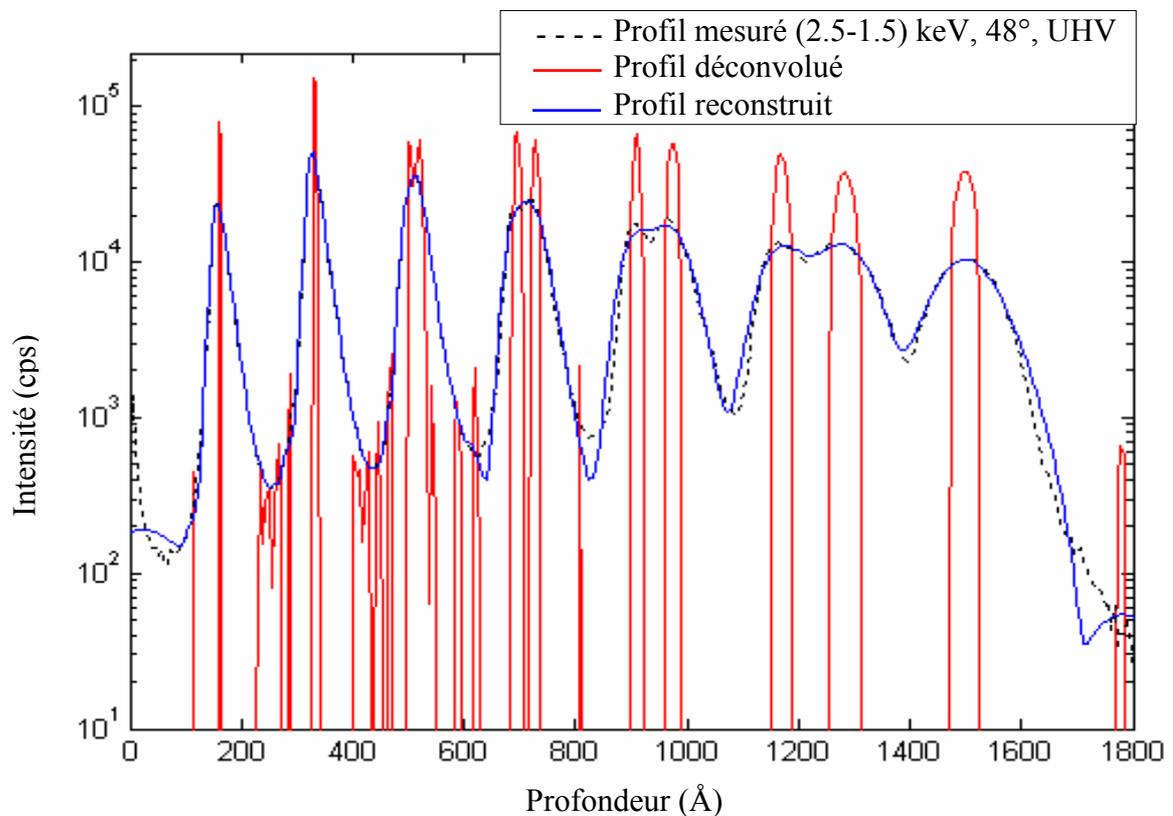


Figure (4-17) : Déconvolution de l'échantillon composé de deltas-dopage, analysé à (2.5-1.5) keV, 48°, UHV. Utilisation d'une DRF variante. 1000 itérations.

On observe cependant un élargissement des pics déconvolués et une diminution de leur maximum avec la profondeur. Cette dernière limitation de la déconvolution variante est déjà observée dans le cas des simulations. Les FWHM respectives du premier pic mesuré et déconvolué sont 23.87 Å et 8.46 Å, ce qui nous donne un gain de résolution en profondeur de 2.82 sur ce pic. Les FWHM respectives du dernier pic mesuré et déconvolué sont 132.11 Å et 35.81 Å, ce qui conduit à un gain de 3.69 sur ce pic.

Au niveau reconstruction du profil mesuré, on observe que la reconstruction est très satisfaisante dans la région où la DRF est constante (avant dc) à l'exception du début du profil (régime transitoire). La reconstruction cependant n'est pas aussi bonne dans la région où la DRF est variante (après dc). Comme nous avons déjà vu, une mauvaise reconstruction peut constituer un signe de l'existence d'une erreur dans la DRF. Sur la figure 4-18 on observe que la répartition

des composantes du vecteur de l'erreur de reconstruction E_{rv} dans la région où la DRF est variante n'est pas tout à fait symétrique par rapport à l'axe des profondeurs. Ceci rappelle le cas où la DRF utilisée pour la déconvolution est plus large que la vraie DRF. Dans le cas d'une DRF variante, la DRF peut facilement être entachée par des erreurs parce qu'il est très difficile de déterminer les variations de la DRF avec précision et ceci pour les raisons suivantes: il est très difficile de déterminer dc à partir des signaux de la matrice avec une grande précision. L'existence d'un régime transitoire de la rugosité, où les variations de la DRF sont encore mal connues. Les erreurs dans le fittage des pics, en particulier les derniers pic puisque la dynamique du signal devient très faible lors de l'apparition de la rugosité...

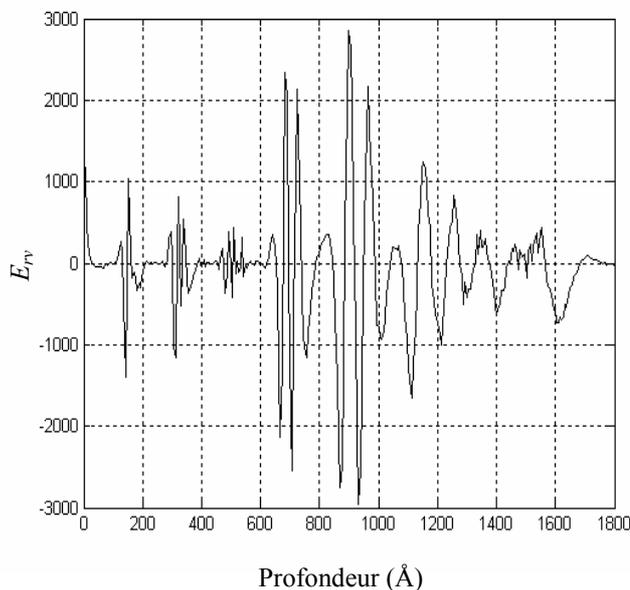


Figure (4-18) : Vecteur de l'erreur de reconstruction. Cas de l'utilisation d'une DRF variante pour la déconvolution

Dans le cas étudié ici le profil présente un delta dopage mesuré avant l'apparition de la rugosité et un autre après celle-ci. De plus, l'échantillon est composé par des deltas-dopage; ce qui permet de mesurer la DRF directement sur l'échantillon lui-même. Dans une situation quelconque, le fittage de la DRF avant et après l'apparition de la rugosité peut, pour une raison ou une autre, devenir impossible. De plus, si on veut traiter un cas d'échantillon constitué par d'autres types de structures la situation se complique davantage.

Malgré que la déconvolution variante apporte une amélioration de la résolution en profondeur, les difficultés rencontrés lors de l'application de cette procédure nous a amené, à l'état actuel, à préférer la voie qui cherche les conditions expérimentales optimales qui ne conduisent pas à l'apparition de la rugosité, et d'appliquer ensuite, s'il est nécessaire, une déconvolution classique pour améliorer encore la résolution en profondeur.

L'échelle en profondeur est établie ici avec l'hypothèse d'une vitesse d'érosion constante, ceci n'est pas le cas, puisque l'apparition de la rugosité conduit à une variation de la vitesse d'érosion. Il apparaît plus judicieux de corriger l'échelle des profondeurs avant de faire le traitement numérique, ceci complique encore la situation. On se limite à citer le décalage d'échelle résultant de la supposition d'une vitesse constante.

4.4 Variation de la vitesse d'érosion et calibration en profondeur

L'apparition de la rugosité entraîne une variation de la vitesse d'érosion. L'établissement de l'échelle des profondeurs avec la supposition d'une vitesse d'érosion constante conduit ici à un *décalage d'échelle*. Ce décalage sera additionné au décalage habituel résultant de la variation de la vitesse d'érosion en régime transitoire de l'analyse (*le shift*). Une étude quantitative de ces deux décalages peut être trouvée sur la référence [7]. On se limite ici à résumer les principaux résultats qu'elle donne:

Dans les conditions habituelles de l'analyse, et pour $\phi \ll \phi_{inc}$, où ϕ_{inc} est la dose des ions primaires nécessaire pour atteindre le régime permanent, l'incorporation des ions primaires conduit à une variation de la vitesse d'érosion. La vitesse d'érosion prend dans un premier temps une valeur v_{tr} qui correspond au début du régime transitoire, et elle diminue ensuite au fur et à mesure que l'érosion progresse pour se stabiliser finalement à une valeur v_{plan} qui correspond au régime permanent plan.

Dans le cas où la rugosité apparaît, la vitesse d'érosion varie encore dans un second temps quand la dose ϕ atteint une valeur ϕ_{rug} qui correspond au début du développement de la rugosité (régime transitoire de la rugosité), puis se stabilise à une valeur v_{rug} quand la rugosité devient stationnaire. A l'intérieur des deux régimes permanents, la profondeur d'érosion varie de façon affine avec la dose primaire :

$$\begin{aligned} z &= \Delta z_{inc} + v_{plan} \phi && \text{pour } \phi_{inc} \ll \phi \ll \phi_{rug} \\ \text{et} \quad z &= \Delta z_{tot} + v_{rug} \phi && \text{pour } \phi_{rug} \ll \phi \end{aligned} \quad (4-2)$$

Le décalage totale de l'échelle sera donc donné par:

$$\Delta z_{tot} = \Delta z_{inc} + \Delta z_{rug} \quad (4-3)$$

où Δz_{inc} est le *décalage d'échelle* induit par l'incorporation des ions primaires et Δz_{rug} est le décalage induit seulement par la rugosité.

La procédure de calibration conventionnelle suppose que la vitesse d'érosion est constante durant toute l'analyse. Elle ne donne qu'une *profondeur apparente* telle que :

$$z_{app} = v_{app} \phi \quad (4-4)$$

où v_{app} , la vitesse d'érosion apparente, et comme la vitesse n'est en réalité pas constante, cela conduit à un *décalage d'échelle*, z_{dec} , défini par:

$$z_{dec} = z_{app} - z \quad (4-5)$$

L'évolution de décalage dépendra de la vitesse apparente v_{app} utilisée. En effet, plusieurs valeurs de v_{app} peuvent être utilisées : $v_{app} = v_{plan}$, $v_{app} = v_{rug}$, $v_{app} = v_{ref}$ (v_{app} est déterminée à partir de la position connue d'un motif particulier du profil)...

D'une manière générale (quelle que soit la valeur donnée à v_{app}), on aura :

$$\begin{aligned} z_{dec} &= -\Delta z_{inc} + (v_{app} - v_{plan})\phi && \text{pour } \phi_{inc} \langle \phi \langle \phi_{rug} \\ \text{et } z_{dec} &= -\Delta z_{tot} + (v_{app} - v_{rug})\phi && \text{pour } \phi_{rug} \langle \langle \phi \end{aligned} \quad (4-6)$$

5. DECONVOLUTION PARTIELLE

5.1 Principe et position du problème

5.1.1. Principe

Yang et al proposent [8] une méthode de déconvolution très simple, elle a pour but de corriger seulement l'élargissement des profils mesurés observé sur la partie descendante (décroissance exponentielle) et qui est responsable de la très grande partie de l'erreur dans la mesure des profondeurs des jonctions p-n par SIMS. Cette méthode permet donc une amélioration de la précision de la caractérisation des jonctions p-n. De plus, elle ne nécessite pas

une connaissance entière de la DRF, il suffit de déterminer λ_d pour faire la déconvolution. Elle est donc particulièrement très utile dans le cas des matériaux où l'élaboration d'un delta dopage est impossible. Nous avons déjà signalé dans le chapitre 1 que l'élaboration de telles couches n'est pas toujours possible dans les semiconducteurs. Due à son effet partiel sur les profils, cette technique est appelée *déconvolution partielle* [7].

Nous allons suivre la même démonstration effectuée dans la référence [7]. Supposons que la fonction de résolution en profondeur soit une simple demi-exponentielle décroissante:

$$h(z) = \frac{1}{\lambda_d} \exp[-z/\lambda_d] \quad (4-7)$$

Soit également x le profil réel et y le profil mesuré, résultant de la convolution de x par la fonction h . On note F la transformée de Fourier. L'inversion du problème est alors très simple. On a :

$$y = h * x \Leftrightarrow F(y) = F(x) \times F(h) \quad (4-8)$$

$$\text{où} \quad F(h) = \frac{1}{1 + 2\pi f \lambda_d} \quad (4-9)$$

$$\text{donc} \quad F(x) = F(y) + 2\pi f \lambda_d \times F(y) \quad (4-10)$$

$$\text{or} \quad F(y') = 2\pi f \times F(y) \quad (4-11)$$

où y' est la dérivée de y .

$$\text{D'où} \quad F(x) = F(y) + \lambda_d \times F(y') = F(x + \lambda_d \times y') \quad (4-12)$$

$$x = y + \lambda_d \times y' \quad (4-13)$$

On se trouve donc devant un traitement numérique très simple qui consiste seulement à ajouter au profil mesuré sa dérivée multipliée par λ_d , et qui permet un gain en temps très

appréciable. Comme la plupart des techniques numériques, cette technique présente également quelques limitations que nous allons par la suite les présenter et proposer des procédures pour les surmonter. Mais avant tout, nous allons tout d'abord présenter l'échantillon sur lequel cette étude sera effectuée.

5.1.2 Description de l'échantillon et conditions expérimentales de l'analyse

Nous disposons d'un échantillon comportant cinq deltas-dopage de bore implantés dans le silicium, les quatre premiers distants nominalement de 500 Å, alors que la distance nominale entre le quatrième et le cinquième pic est de 1000 Å. Cet échantillon a été fourni à l'INSA de Lyon par l'université de Warwick.

L'analyse de cet échantillon a été effectuée à 2 keV d'impact sous ions O_2^+ . Le profil en profondeur est représenté sur la figure 4-19. On remarque que le profil mesuré de cet échantillon est fortement bruité, en particulier aux niveaux bas du signal. Il convient donc au problème que nous allons étudier ici.

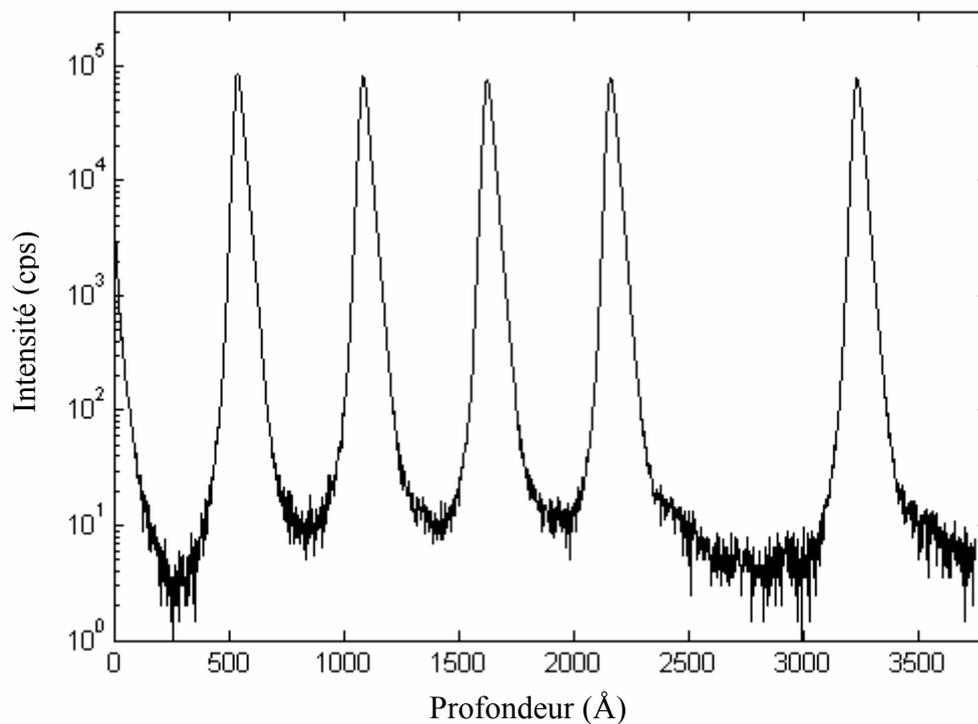


Figure (4-19) : Profil en profondeur de l'échantillon analysé à 2 keV.

5.1.3 Déconvolution par la procédure de Yang et al. et position du problème

La déconvolution de cet échantillon par la technique proposée par Yang (relation 4-13) est représenté sur la figure 4-20. On observe une suppression de la pente descendante. Cette amélioration de la résolution en profondeur s'accompagne cependant par une amplification notable du bruit contenu dans les niveaux bas du signal. De plus, le profil déconvolué contient des valeurs négatives (les coupures du profil déconvolué observés sur l'échelle logarithmique sont dus à ces valeurs négatives). Ceci n'est pas surprenant, du fait que cette procédure n'est pas régularisée et donc est très sensible au bruit. Dans ce qui suit, nous allons proposer quelques procédures pour régler ces problèmes.

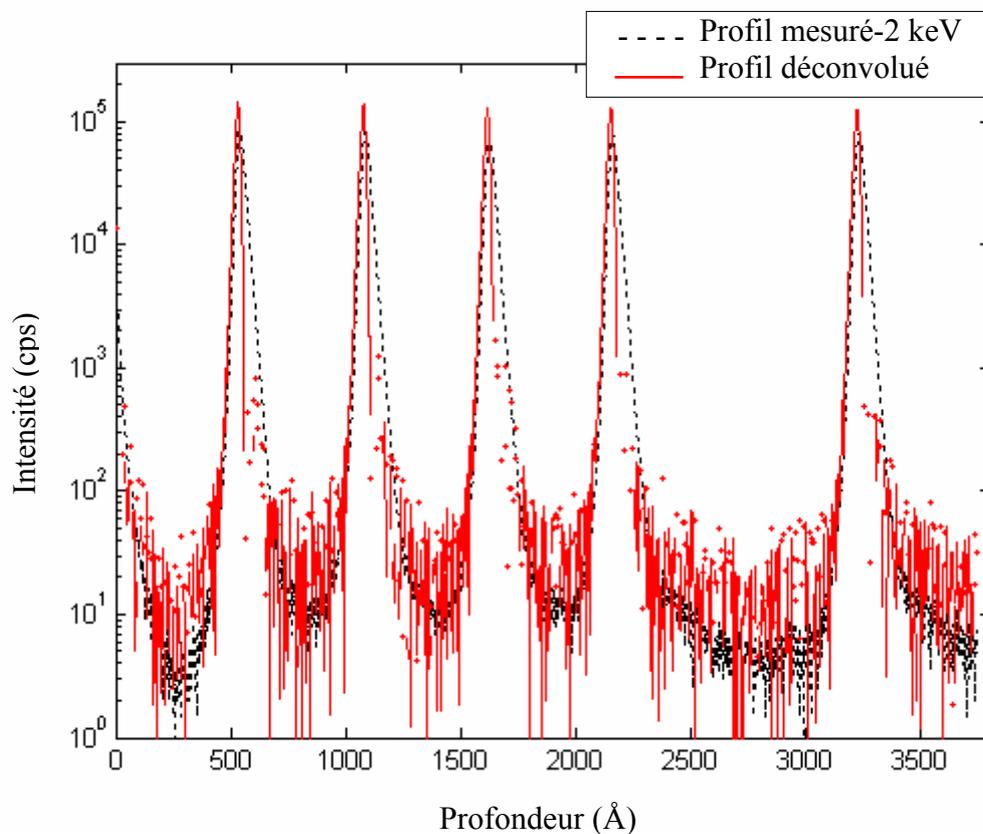


Figure (4-20) : Déconvolution partielle de l'échantillon analysé à 2 keV d'impact en utilisant la technique de Yang et al.

5.2 Proposition des procédures pour améliorer les performances de la déconvolution partielle

5.2.1 Préfiltrage du profil mesuré

Avant de faire la déconvolution, nous avons cette fois-ci tout d'abord filtré le profil mesuré en utilisant tout simplement un filtre passe-bas. Le résultat de ce filtrage est représenté sur la figure (4-21). Après filtrage, on observe clairement une diminution de la quantité du bruit dans le profil mesuré. La déconvolution (par la relation 4-13) est effectuée donc sur le profil filtré (figure 4-22). On observe une amélioration du résultat de la déconvolution par comparaison avec la déconvolution précédente (méthode de Yang et al), l'amplification du bruit ayant diminué. Le problème des valeurs négatives cependant n'est pas encore réglé.

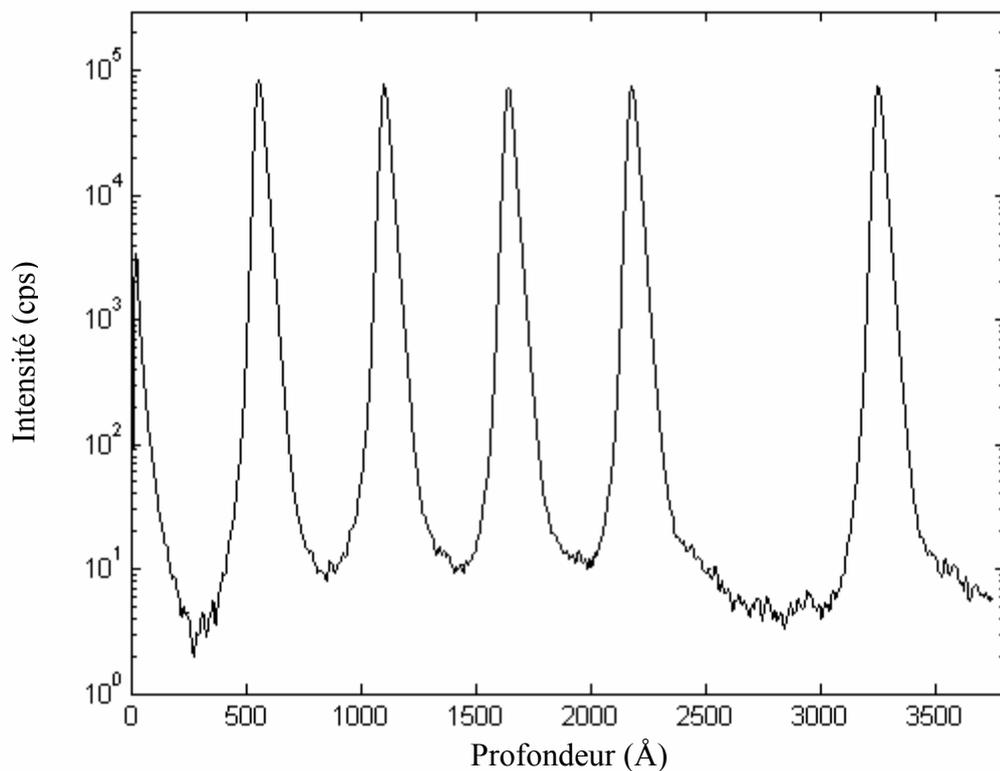


Figure (4-21) : filtrage du profil en profondeur de l'échantillon analysé à 2 keV par un filtre passe-bas.

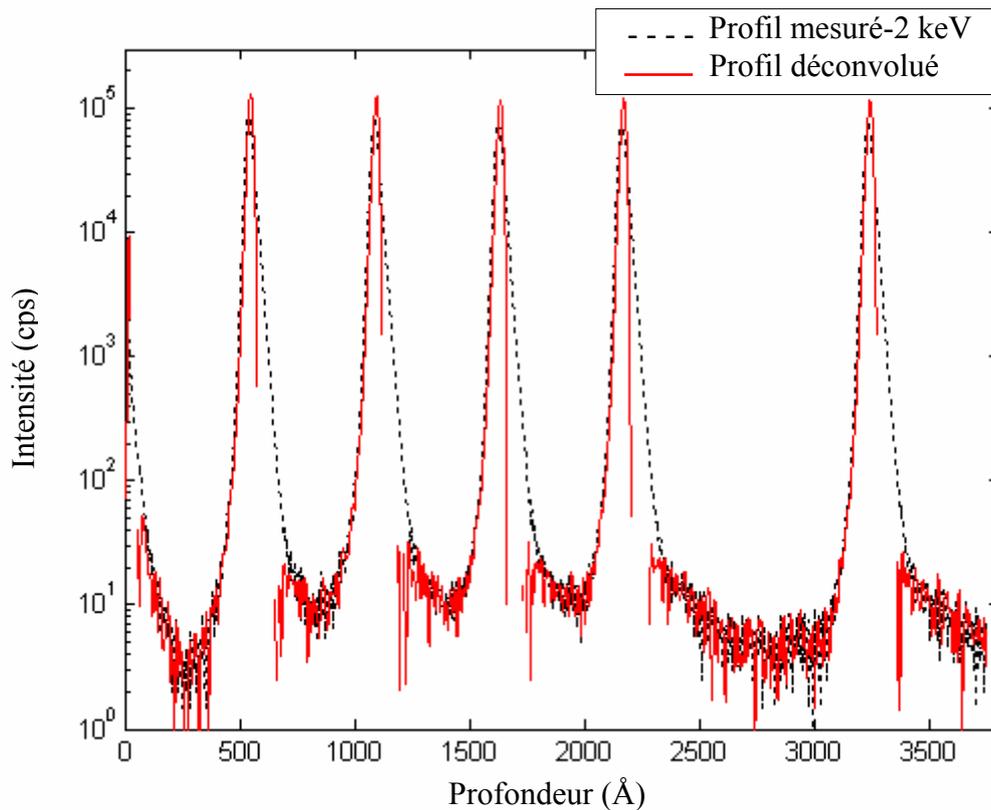


Figure (4-22) : Déconvolution partielle de l'échantillon analysé à 2 keV d'impact. Ici le profil mesuré est filtré en utilisant un filtre passe-bas avant de faire la déconvolution par la technique de Yang et al.

5.2.2 Utilisations de la régularisation de Tikhonov-Miller

Nous rappelons qu'en utilisant la régularisation de Tikhonov-Miller la solution de l'équation de convolution est donné par :

$$x_{est} = \frac{\mathbf{H}^T y}{\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D}} \quad (4-14)$$

La matrice \mathbf{H} est constituée ici à partir de l'expression (4-7).

Nous avons constaté que pour une bonne régularisation (un bon contrôle de l'amplification du bruit), il faut utiliser un paramètre de régularisation très élevé. La déconvolution est effectuée ici avec $\alpha = 1$. On note sur la figure 4-23 que l'utilisation de la régularisation de Tikhonov-

Miller conduit également à la diminution de l'amplification du bruit dans le profil déconvolué, mais il existe toujours des valeurs négatives dans ce profil.

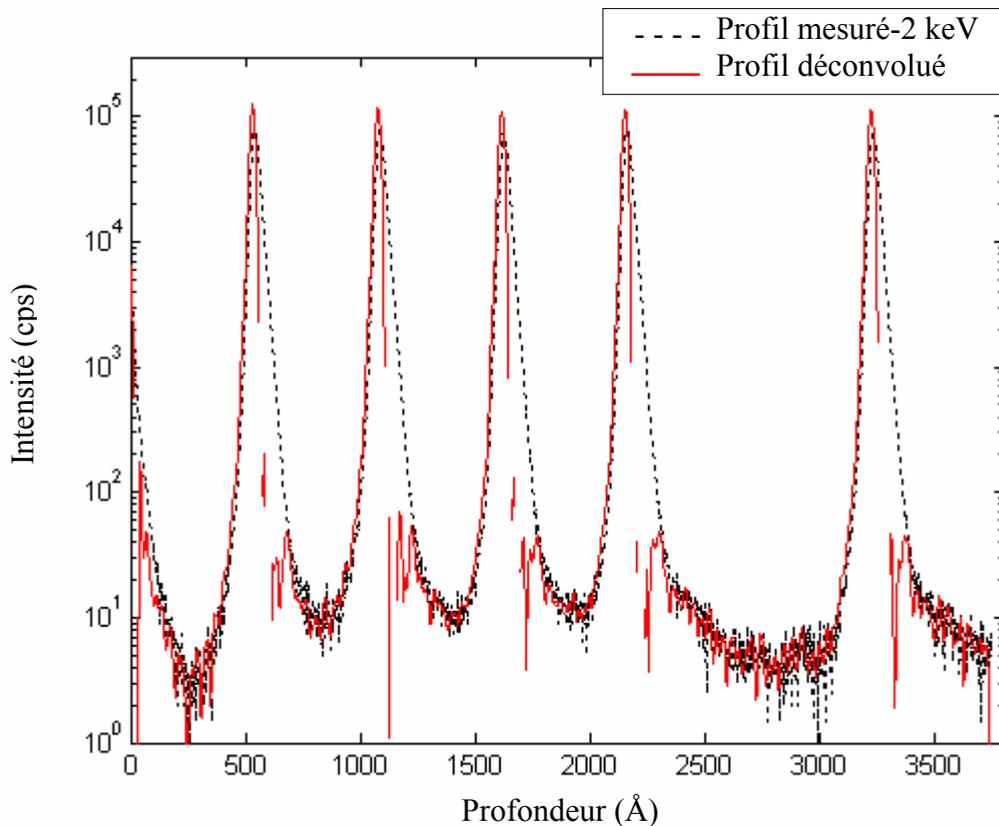


Figure (4-23) : Déconvolution partielle de l'échantillon analysé à 2 keV d'impact en utilisant la régularisation de Tikhonov-Miller.

Dans ce cas et le cas précédent (Préfiltrage du profil mesuré), on peut par exemple penser à appliquer une contrainte de positivité pour régler le problème des composantes négatives. La contrainte de positivité ne peut être cependant appliquée dans le cas d'une méthode non itérative sans conséquences inacceptables pour l'interprétation physique [5]: la dose mesurée (nombre d'ions comptés sur toute la mesure) doit être identique pour les signaux mesuré et déconvolué au bruit près. Cette dose sera normalement conservée après déconvolution, mais il ne faut pas oublier qu'elle tient compte des composantes négatives générées. L'application d'une contrainte de positivité dans ces conditions implique la suppression de la dose représentée par les valeurs négatives. Il en résulte que la dose du signal déconvolué et contraint sera supérieure à celle du profil mesuré. Un écart de plusieurs pour-cent ne peut être toléré lors de la quantification d'un

profil SIMS. L'une des solutions de ce problème consiste à multiplier tout le profil déconvolué par un facteur de telle sorte que sa dose et celle du profil mesuré soit égaux. Ce procédé est simple mais quelque peu arbitraire dans le sens où la redistribution de la dose ne privilégie aucune partie du profil [5].

L'utilisation d'une méthode itérative pour introduire la contrainte de positivité permet d'éviter ce problème, où la dose du profil déconvolué et contraint se rapproche de celle du profil mesuré avec les itérations.

5.2.3 Utilisation d'un algorithme itératif

Comme nous avons vu, l'utilisation des algorithmes itératifs nous offre la possibilité d'appliquer une contrainte de positivité sans qu'il y ait des conséquences négatives sur les résultats. Elle nous permet donc l'obtention d'un résultat régulier et positif, ce qui est tout à fait en accord avec la réalité physique. Il faut noter malheureusement que l'application d'un tel algorithme nécessite plus de temps que la méthode de déconvolution partielle dans sa formule initiale.

La procédure consiste à appliquer un algorithme itératif, où l'expression de la DRF est celle donnée par la formule (4-7) [9, 10]. Nous avons ici effectué la déconvolution par l'algorithme proposé au cours de ce travail. Le résultat de la déconvolution après 10 itérations est montré sur la figure 4-24. Le résultat obtenu est très satisfaisant, l'amplification du bruit est contrôlée, et la présence des valeurs négatives a été évitée. Nous avons observé cependant que l'augmentation du nombre d'itération dans le cas représenté ici conduit à l'amplification du bruit.

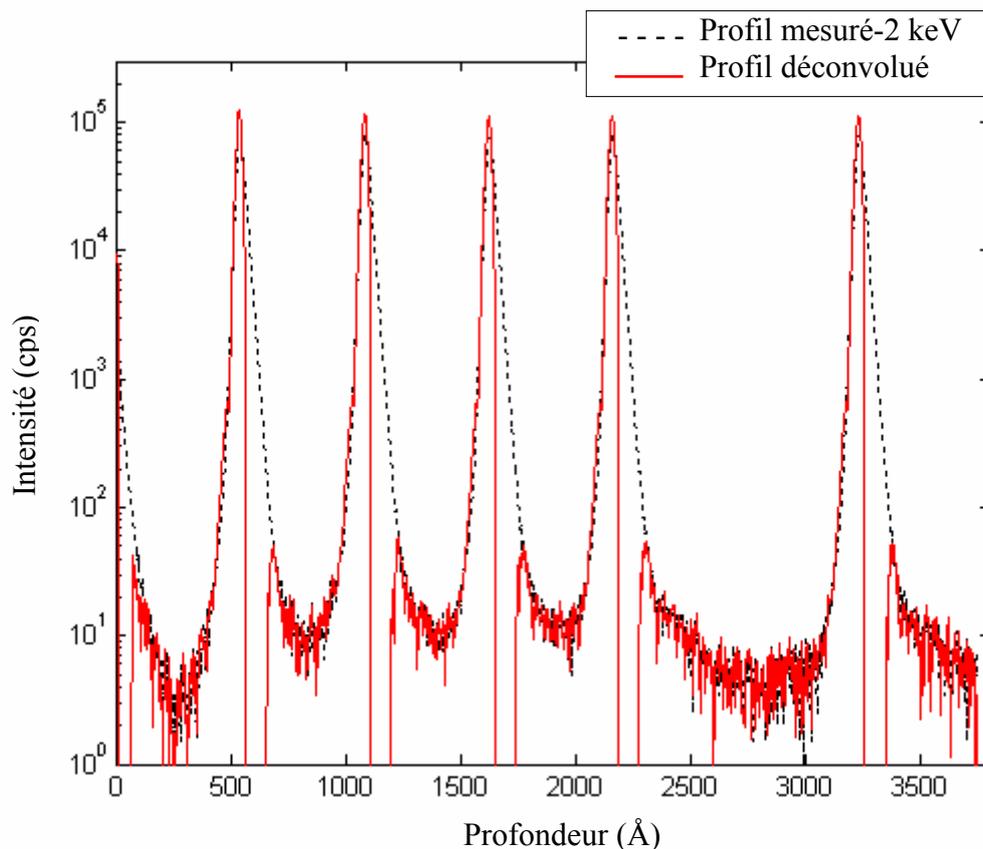


Figure (4-24) : Déconvolution partielle de l'échantillon analysé à 2 keV d'impact en utilisant un algorithme itératif. 10 itérations.

6. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons appliqué la méthode de déconvolution proposée au cours de ce travail à des profils expérimentaux correspondant à une implantation du Bore dans le Silicium. La méthode est appliquée dans un premier temps à des échantillons analysés dans des conditions stables (DRF constante). Elle est ensuite appliquée à un cas où la DRF est variante. Dans une seconde partie, nous avons fait une étude d'une méthode de déconvolution partielle dont le but est l'amélioration des performances de cette technique.

Les principaux résultats que nous avons obtenus se résument à :

- La procédure de déconvolution est capable d'apporter une amélioration non négligeable à la résolution en profondeur de l'analyse SIMS.
- L'interprétation des oscillations qui apparaissent aux niveaux bas des signaux déconvolués doit être faite avec précaution. Il ne faut pas attribuer leur présence toujours au bruit. La

présence d'une concentration non-nulle entre les pics de concentration ou une erreur dans la DRF peuvent entraîner la naissance des petites oscillations du même ordre de grandeur que les artefacts créés par le bruit. De plus, les oscillations au niveau bas qui ont une amplitude appréciable peuvent révéler une caractéristique réelle, tel que l'existence d'un *shoulder* de concentration dans le profil réel.

- La déconvolution permet la mise en évidence des caractéristiques entièrement masquées par la convolution, comme dans le cas de deux créneaux de 100 Å d'épaisseur, où un gradient de concentration a été mis en évidence.
- Malgré qu'il soit possible d'appliquer une procédure de déconvolution au cas des profils acquis dans des conditions où la DRF est variée, les difficultés rencontrées lors de l'application de cette procédure, nous amènent à penser qu'il vaut peut-être mieux régler ce problème au niveau expérimental.
- L'amplification du bruit après déconvolution partielle des profils SIMS peut être contrôlée par un préfiltrage du profil mesuré ou l'application de cette déconvolution à travers la régularisation de Tikhonov-Miller. Les deux problèmes amplification du bruit et apparition de valeurs négatives dans les profils déconvolués peuvent être réglés par l'utilisation des méthodes itératives.

Conclusion Générale

CONCLUSION GENERALE

Le travail présenté dans cette thèse avait comme objectif l'amélioration la résolution en profondeur en analyse SIMS en adjoignant aux résultats expérimentaux bruts un traitement numérique. La restauration d'informations à partir des profils de concentration en profondeur au moyen des techniques de traitement du signal, en particulier la déconvolution, a été donc notre principal souci. Nous nous sommes limités au cas du Bore dans le Silicium.

Notre approche du problème a débuté par une brève description de la technique d'analyse SIMS, ainsi que les mécanismes essentiels gouvernant la résolution en profondeur. Par la suite, nous avons exposé les bases de la déconvolution, et en particulier son application en SIMS. Nous avons tout d'abord choisi une forme analytique parmi celle existantes pour la fonction de résolution en profondeur (réponse impulsionnelle du système de mesure). Nous avons ensuite présenté plusieurs méthodes de déconvolution, et terminé par proposer un nouvel algorithme en SIMS.

Notre étude s'est poursuivie par une évaluation détaillée de la technique de déconvolution proposée au cours de ce travail. La comparaison de cette technique avec l'algorithme de *Van Cittert régularisé par la régularisation de Tikhonov-Miller et constraint*, une technique qui a déjà prouvé sa fiabilité et sa robustesse dans le domaine de la déconvolution des profils SIMS, nous a permis de mettre en évidence ses performances.

Nous avons effectué cette comparaison sur des profils SIMS simulés par nous-mêmes. Par la déconvolution de structures simulées nous avons également essayé de donner des explications aux difficultés rencontrées par la déconvolution lors de la récupération de chaque structure. L'algorithme proposé est appliqué finalement à des profils SIMS expérimentaux.

Durant ce travail, nous avons également abordé le problème de la déconvolution avec une DRF variante, et étudié l'influence des incertitudes dans la mesure de la DRF sur les résultats de la déconvolution. De plus, nous avons étudié une autre méthode de déconvolution dite partielle, et proposé quelques techniques pour surmonter ses limitations.

Les principaux éléments auxquels ce travail a aboutit sont:

- La procédure de déconvolution peut conduire à une nette amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS.
- L'algorithme proposé dans ce travail est capable de produire des solutions régulières similaires à celles obtenus par l'algorithme de *Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et constraint dures*, avec une convergence plus rapide. De plus, les gains en résolution

en profondeur et en maximum obtenus avec cet algorithme sont meilleurs que ceux obtenus avec l'algorithme de *Van Cittert régularisé et contraint*.

- L'algorithme proposé constitue finalement une méthode de régularisation par critère d'arrêt, ce qui nous a conduit à présenter quelques techniques pour stopper les itérations avant l'apparition de la divergence. Il a été remarqué cependant que la convergence est très lente dans le cas des structures très abruptes (qui constitue le cas de la plupart des composants de microélectronique moderne). Dans ce cas, l'arrêt de l'algorithme lors de la déconvolution ne constitue donc pas un vrai problème.
- L'algorithme conduit à une amélioration notable du taux de séparation des couches mesurées. Cette amélioration diffère cependant selon les conditions de la mesure et la distance initiale entre les couches considérées.
- L'étude concernant l'influence des incertitudes dans les paramètres de la DRF sur les résultats de la déconvolution a abouti à:
 - i) si la DRF est plus étroite que la vraie DRF, la déconvolution conduit à une restauration partielle des profils réels.
 - ii) si la DRF est plus large que la vraie DRF, les résultats de déconvolution peuvent être distordus, mais dans ce dernier cas l'erreur est détectable à travers le profil reconstruit ou du tracé du vecteur de l'erreur de reconstruction.
- La déconvolution de la fonction gaussienne ne pose pas un vrai problème lorsque la largeur de la gaussienne est plus élevée que celle de la DRF. Elle devient plus complexe lorsque la gaussienne est plus étroite que la DRF.
- Un créneau de très faible largeur aura de fortes chances d'être restitué sous la forme d'une courbe en cloche. Les fronts d'un créneau de grande largeur sont partiellement restaurés, et les pentes exponentielles disparaissent. Ceci s'accompagne cependant d'apparition d'oscillations sur le plateau du créneau. Elles sont de plus en plus développées au fur et mesure que les pentes des créneaux deviennent plus abruptes.
- La déconvolution avec une DRF variante avec la profondeur est théoriquement possible, et conduit à des bons résultats, même s'il apparaît que ses performances sont moins bonnes qu'une déconvolution classique (élargissement des pics déconvolués avec la profondeur, diminution de leurs maximums). Cependant, cette procédure s'accompagne par des difficultés, en particulier la difficulté de déterminer la DRF avec précision. Cela nous amène à préférer, au moins à l'état actuel, la correction de ce problème au niveau expérimental par la recherche des conditions optimales adéquates qui ne conduit pas à des variations de la

DRF. Il est possible par la suite de déconvoluer les profils obtenus dans ces conditions en utilisant tout simplement une déconvolution classique (la DRF devient ici constante).

- L'interprétation des oscillations qui apparaissent aux niveaux bas des signaux doit être faite avec précaution, et il ne faut pas les attribuer tout simplement au bruit. Nous avons vu que la présence d'une concentration non-nulle entre les pics de concentration ou une erreur dans la DRF peuvent provoquer également des petites oscillations du même ordre de grandeur que les artefacts créés par le bruit. De plus, les oscillations qui ont une amplitude appréciable peuvent révéler une caractéristique existante réellement dans le profil, telle que l'existence d'un *shoulder* de concentration.
- La déconvolution peut conduire à la mise en évidence des caractéristiques entièrement masquées par la convolution. La déconvolution de deux crêneaux de 100 Å d'épaisseur par exemple montre l'existence d'un gradient de concentration qui n'est pas détecté sur le profil mesuré avant son déconvolution.
- L'amplification du bruit après déconvolution partielle des profils SIMS peut être contrôlée par un préfiltage du profil mesuré ou l'application de cette déconvolution à travers la régularisation de Tikhonov-Miller. L'utilisation des méthodes itératives pour effectuer ce type de déconvolution peut régler les deux problèmes d'amplification du bruit et d'apparition de valeurs négatives (physiquement inacceptable) dans les profils déconvolués en même temps.

Nous avons donc aboutit au fait possible d'utiliser une méthode de déconvolution numérique pour améliorer de manière très satisfaisante la résolution en profondeur dans le cas des profils de Bore dans le Silicium. Cette étude mérite d'être approfondie, à d'autres dopants dans le Silicium, puis à d'autres matrices. En particulier aux éléments majeurs, où il faut trouver des solutions pour le problème de la linéarité de la mesure qui peut être perdue, à cause des effets de matrice.

D'autre part, d'autres perspectives se présentent à ce travail, nous citons essentiellement :

- A cause du rôle très important joué par la DRF dans l'opération de déconvolution, il serait très intéressant de développer de nouvelles techniques et de nouveaux modèles qui permettent une détermination plus précise de la DRF. Il faut en particulier chercher à déterminer avec précision la part de l'échantillon (avec laquelle la DRF est mesurée) dans la DRF et essayer de l'éliminer.

- Avec une modélisation précise de la rugosité on peut prévoir une amélioration des résultats de la déconvolution dans ce cas particulier, où la DRF est variante.
- Les profils en profondeur sont devenus de plus en plus superficiels. Ceci peut nous amener à penser à appliquer la technique de déconvolution à la zone du transitoire. Cependant, ceci nécessite tout d'abord de faire une étude approfondie sur les variations de la DRF dans cette zone. Cette étude passe nécessairement par l'étude des mécanismes de l'analyse SIMS dans cette région, qui sont à nos jours mal connus.
- Au niveau algorithme, il est possible d'introduire un paramètre de relaxation dans la formule de l'algorithme proposé dans ce travail afin d'améliorer encore plus sa vitesse de convergence. Il est également possible de chercher d'autres types de critère d'arrêt pour cet algorithme.

Références

Références

Références du chapitre 1

- [1] Prudon G., *Etude de la sensibilité et de la résolution en profondeur lors de l'analyse par SIMS. Application à la silice et au silicium*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (1990).
- [2] Gautier B., *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par SIMS. Détermination de la fonction de résolution pour le bore dans le silicium, mis au point d'une procédure de déconvolution et applications*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (1997).
- [3] Mancina G., *Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS par déconvolution, algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la microélectronique silicium*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (2001).
- [4] Gnazer H., Oechsner H., *SIMS depth profile analysis using MCs^+ molecular ions*, Journal of Analytical Chemistry: 341(1999) 54.
- [5] Marie Y., Bieck W., Migeon H. N., *MCs^+ and MCs_2^+ relative ion yields of 16 elements implanted in Si, SiG and SiO₂*, In: Benninghoven et al (1997) 685.
- [6] Holliger P., Laugier F., Dupuy J.C., *SIMS depth profiling of ultrashallow P,Ge, and As implants in Si using MCs_2^+ ions*, Surface and Interface Analysis: 34 (2002) 472.
- [7] Baboux N., *Analyse ultime par Spectrométrie de Masses des Ions Secondaires des matériaux de la microélectronique avancée : Contribution à l'interprétation des profils de bore dans le silicium*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon (2001).
- [8] Wittmaack K., *Energy- and angle-resolved depth of origin of isotopes sputtered from an elemental target*, Physical Review: B 56(10) (1997) 5701.
- [9] Badheka R., Van den Berg J.A., Armour D.G., Wadsworth M., *Theoretical calculations of the broadening of dilute S, Al and Be doped delta layers in GaAs during SIMS depth profiling*, Vacuum: 44 n°3-4 (1993) 331.
- [10] Liao Z. L., Tsaur B. Y., Mayer J. W., *Influence of atomic mixing and preferential sputtering on depth profiles and interfaces*, Journal of Vacuum Science and Technology: 16 n°2 (1979) 121.
- [11] Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U., *The stopping and range of ions in solids*, Vol 1 In: *The stopping and range of ions in matter*, New York : Pergamon Press (1985).
- [12] Petravic M., Elliman R.G., Williams J.S., *Recoil mixing in SIMS profiling of thin buried layers*, In: International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry (1991): Amsterdam, The Netherlands (SIMS VIII), A. Benninghoven ed. New York: Wiley (1992) 367.
- [13] Meuris M., Vandervorst W., *On the effect of an oxygen beam in sputter depth profiling*, Journal of Vacuum Science and Technology: A9 n°3 (1991) 1482.

- [14] Smirnov V.K., Simakin S.G., Potapov E.V., Makarov V.V., *SIMS depth profiling of delta doped layers in silicon*, Surface and Interface Analysis: 24 (1996) 469.
- [15] Petravic M., Svensson B.G., Williams J.S., *On the estimation of depth resolution during sputter profiling*, Journal of Applied Physics: 62 n°3 (1993) 278.
- [16] Benninghoven A., Rüdenauer F.G., Werner H.W., *Secondary Ion Mass Spectrometry (Basic concepts, Instrumental Aspects and Trends)*, New York: Wiley and Sons (1987).
- [17] Zalm P.C., *Ultra shallow doping profiling with SIMS*, Reports of Progress in Physics: 58 (1995) 1321.
- [18] Alkemade P.F.A., Jiang Z.X., *Complex roughening of Si under oblique bombardment by low-energy oxygen ions*, Journal of Vacuum Science and Technology: B 19 n°5 (2001) 1699.
- [19] Fares B., *Caractérisation par spectrométrie de masse des ions secondaires des zones actives du CMOS ultime : étude de la rugosité en fond du cratère et ses conséquences sur la vitesse d'érosion et sur la résolution en profondeur*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (2004).
- [20] Stevie F.A., Kahora P.M., Simons D.S., Chi P., *Secondary ion yield changes in Si and GaAs due to topography changes during O_2^+ or Cs^+ ion bombardment*, Journal of Vacuum Science and Technology: A 6 n°1 (1988) 76.
- [21] Carter G., *Sample rotation and reduced surface roughening in oblique incidence ion sputtering erosion*, Vacuum: 49 (1997) 285.
- [22] Schuhmacher M., Rasser B., Desse F., *New developments for shallow depth profiling with the Cameca IMS 6f*, Journal of Vacuum Science and Technology: B18 n°1 (2000) 529.
- [23] Van Berkum J.G.M., *Improving SIMS depth profiling by sample rotation*, in: Benninghoven et al. (1999) 55.
- [24] Homma Y. Maruo T., *Comparison of beam induced profile broadening effects of gallium and copper in oxygen bombarded silicon*, Surface and Interface Analysis: 14 (1989) 725.
- [25] Vandervorst W. Shepherd F.R., Swanson M.L., Plattner H.H., Westcott O.M., Mitchell I.V., *Oxygen induced broadening effects studied by RBS and SIMS*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research: B15 (1986) 201.
- [26] Wittmaack K. *Ion-induced electron emission as a means of studying energy- and angle-dependant compositional changes of solids bombarded with reactive ions: I. oxygen bombardment of silicon*, Surface Science: 419 (1999) 249.
- [27] Dowsett M.G., James D.M., Drummond I.W., El Gomati M.M., Bakush T.A., Street F.J., Barlow R.D., *Redistribution of Ge in the SIMS altered layer during normal incidence O_2^+ bombardment of SiGe alloy material*, In: International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry 1991: Amsterdam, the Netherlands (SIMS VIII), A. Benninghoven ed. New York: Wiley (1992) 359.

- [28] Gauneau M., Chaplain R., Rupert A., Toudic Y., Callec R., André E., *SIMS generates swelling of GaSb : depth resolution and secondary ion yields*, Journal of Applied Physics: 73(5) (1993) 2051.
- [29] Zalm P.C., Vriezema C.J., *Oxygen bleed-in during SIMS depth profiling: curse or blessing?*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research: B 64 (1992) 626.
- [30] Vandervorst W. Sheperd F.R., *Secondary ion mass spectrometry profiling of shallow implanted layers using quadruple and magnetic sector instruments*, Journal of Vacuum Science and Technology: A 5 n°3 (1987) 313.
- [31] Magee C.W., Honig R.E., *Depth profiling by SIMS: depth resolution, dynamic range and sensitivity*, Surface and Interface Analysis: 4 n°2 (1982) 35.
- [32] Benninghoven A., Rudenauer F.G., Werner H.W. *Secondary ion mass spectrometry, basic concepts, instrumental aspects, applications and trends*. New York: John Wiley & Sons (1987).
- [33] Wittmaack K., Poker D.B., *Interface broadening in a sputter depth profiling through alternating layers of isotopically purified silicon*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research: B 47 (1990) 224.

Références du chapitre 2

- [1] Cooley J.W., Tukey J.W., *An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series*, Mathematics of Computation: 19 (1965) 297.
- [2] Prudon G., *Etude de la sensibilité et de la résolution en profondeur lors de l'analyse par SIMS. Application à la silice et au silicium*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (1990).
- [3] Gautier B., *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par SIMS. Détermination de la fonction de résolution pour le bore dans le silicium, mis au point d'une procédure de déconvolution et applications*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (1997).
- [4] Mancina G., *Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS par déconvolution, algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la microélectronique silicium*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (2001).
- [5] Hofmann S., *Atomic mixing, surface roughness and information depth in high-resolution AES depth profiling of a GaAs/AlAs superlattice structure*, Surface and Interface Analysis: 21 (1994) 673.
- [6] Dowsett M.G., Rowlands G., Allen P.N., Barlow R.D., *An analytic form for the SIMS response fonction measured from ultra-thin impurty layres*, Surface and Interface Analysis: 21 (1994) 310.
- [7] Liao Z. L., Tsaur B. Y., Mayer J. W., *Influence of atomic mixing and preferential sputtering on depth profiles and interfaces*, Journal of Vacuum Science and Technology: 16 n°2 (1979) 121.

- [8] Hofmann S., *Profile reconstruction in sputter depth profiling*, Thin Solid Films:398-399 (2001) 336.
- [9] Hofmann S., *From depth resolution to depth resolution function: refinement of the concept for delta layers, single layers and multilayers*, Surface and Interface Analysis: 27 (1999) 825.
- [10] Hofmann S., *Ultimate depth resolution and profile reconstruction in sputter profiling with AES and SIMS*, Surface and Interface Analysis: 30 (2000) 228.
- [11] Zalm P.C., *Ultra shallow doping profiling with SIMS*, Reports on Progress in Physics: 58 (1995) 1321.
- [12] Wittmaack K., *Detailed evaluation of the analytical resolution function*, Applied Surface Science: 203-204 (2003) 268.
- [13] Dupuy J.C., Baboux N., Gautier B., Prudon G., *Properties and use of the depth resolution function in SIMS analysis*, International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry (SIMS XV) Manchester, UK (2005).
- [14] Hofmann S., Kesler V., *Quantitative AES depth profiling of a Ge/Si multilayer structure*, Surface and Interface Analysis: 33 (2002) 461. Paper presented at ECASIA 01, 1-5 October 2001, Avignon, France.
- [15] Chu D.P., Dowsett M.G., *Dopant spatial distributions: Sample-independent response function and maximum-entropy reconstruction*, Physical Review B: 56 (1997) 15167.
- [16] Hongo C., Tomita M., Takenada M., *Accurate depth profiling ultra-shallow implants using backside-SIMS*, Applied Surface Science: 231-232 (2004) 673.
- [17] Takano A., Homma Y., Higashi Y., Takenaka H., Hayashi. S., Goto K., Inoue A., Shimizu R., *Evaluation of SIMS depth resolution using delta-doped multilayers and mixing-roughness-information depth model*, Applied Surface Science: 203-204 (2003) 294.
- [18] Hayashi S., Takano A., Takenaka H., Homma Y., *SIMS study of depth profiles of delta-doped boron/silicon alternating layers by low-energy ion beams*, Applied Surface Science: 203-204 (2003) 298.
- [19] Lau G. S., Tok E. S., Liu R., Wee A.T.S., Zhang J., *Roughening behavior in Si/SiGe heterostructures under O_2^+ bombardment*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research: B 215 (2004) 76.
- [20] Gallardo S., Kudriatsev Y., Villegas A., Ramírez G., Asomoza R., Cruz-Hernández E., Rojas-Ramirez J.S., López-López M., *SIMS characterization of segregation in InAs/GaAs heterostructures*, Applied Surface Science : 255 (2008) 1341.
- [21] Littmark U., Hofer W.O., *Recoil mixing in solids by energetic ion beams*, Nuclear Instruments and Methods: 168 (1980) 329.

- [22] Fares B., *Caractérisation par spectrométrie de masse des ions secondaires des zones actives du CMOS ultime : étude de la rugosité en fond du cratère et ses conséquences sur la vitesse d'érosion et sur la résolution en profondeur*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (2004).
- [23] Dupuy J.C., Prudon G., Dubois C., Warren P., Dutartre D., *Depth resolution in SIMS study of boron delta-doping in epitaxial silicon*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research: B 85 (1994) 379.
- [24] Littmark U., Hofer W.O., *The theory of recoil mixing in solids*, In: Thin Film and Depth Profile Analysis, edited by H. Oechsner. Topics in Current Physics: 37, Berlin : Springer-Verlag (1984) 159.
- [25] Badheka R., Wadsworth M., Armour D.G., Van den Berg J.A., Clegg J.B., *Theoretical and experimental studies of the broadening of dilute delta-doped Si spikes in GaAs during SIMS depth profiling*, Surface and Interface Analysis: 15 (1990) 550.
- [26] Turner J.E., Keller H., Mars D.E., *High depth resolution SIMS by deconvolution of the instrumental function*, In: International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry 1989: Monterey, California, USA (SIMS VII), A. Benninghoven ed. New York: Wiley (1990) 95.
- [27] Baboux N., *Analyse ultime par Spectrométrie de Masses des Ions Secondaires des matériaux de la microélectronique avancée : Contribution à l'interprétation des profils de bore dans le silicium*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon (2001).
- [28] Max J. et col., *Méthodes et techniques de traitement du signal et applications aux mesures physiques*, Paris : Masson (1972).
- [29] Allen P.N., Dowsett M.G., Collins R., *SIMS profile quantification by maximum entropy deconvolution*. Surface and Interface Analysis: 20 (1993) 696.
- [30] Makarov V.V., *Nature of noise in SIMS depth profiling data*, Surface and Interface Analysis: 27 (1999) 801.
- [31] Hadamard J., *Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations*. Yale University Press, New Haven (1923).
- [32] Demoment G., *Image reconstruction and restoration: overview of common estimation structures and problems*, IEEE Transactions on Acoustics, Speech and Signal Processing: 37 n°12 (1989) 2024.
- [33] Gautier B., Prost R., Prudon G., Dupuy J.C., *Deconvolution of SIMS depth profiles of Boron in Silicon*, Surface and Interface Analysis: 24 (1996) 733.
- [34] Tikhonov A.N., Arsenin V.Y., *Solutions of ill-posed problems*, Washington: Halsted Press (1977).
- [35] Miller K., *Least squares methods for ill-posed problems with a prescribed bound*, SIAM Journal on Mathematical Analysis:1 (1970) 52.

- [36] Galatsanos N.P., Katsagellos A.K., *Methods for choosing the regularization parameter and estimating the noise variance in image restoration and their relation*, IEEE Transactions on Image Processing: 1 n° 3 (1992) 322.
- [37] Wahba. G., *Applications of statistics, chapter A survey of some smoothing problems and the method of generalized cross-validation for solving them*, P. Krishnaiah (1977).
- [38] Jalobeanu A., *Modèles, estimation bayésienne et algorithmes pour la déconvolution d'images satellitaires et aériennes*, Thèse de Doctorat, Université de Nice-Sophia Antipolis, (2001).
- [39] Gautier B., Dupuy J.C., Prost R., Prudon G., *Effectiveness and limits of the deconvolution of SIMS depth profiles of boron in silicon*, Surface and Interface Analysis : 25 (1997) 464.
- [40] Gautier B., Prudon G., Dupuy J.C., *Toward a better reliability in the deconvolution of SIMS depth profiles*, Surface and Interface Analysis: 26 (1998) 974.
- [41] Gautier B., Dupuy J.C., Semmache B., Prudon G., *SIMS depth profile correction for the study of the first step of diffusion of boron in silicon*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research: B 142 (1998) 361.
- [42] Fares B., Gautier B., Dupuy J.C., Prudon G., Holliger P., *Deconvolution of very low primary energy SIMS depth profiles*, Applied Surface Science: 252 (2006) 6478.
- [43] Lee J.W., Kim K.J., Kim H.K., Moon D.W., *Deconvolution of SIMS depth profiles of As multiple delta layers in silicon*, Surface and Interface Analysis : 37 (2005) 176.
- [44] Prost R., Goutte R., *Discrete constrained iterative deconvolution algorithms with optimized rate of convergence*, Signal Processing: 7 n°3 (1984) 209.
- [45] Van Cittert P.H., *Zum einfluss der spaltbreite auf die intensitätsverteilung in Spektrallinien II*, Zeitschrift für Physik: 69 (1931) 298.
- [46] Thomas G., *A modified version of Van Cittert iterative deconvolution procedure*, IEEE Transactions on acoustics, speech and signal processing: 29 n°4 (1981) 938.
- [47] Prost R., *Contribution à l'élaboration d'algorithmes itératifs discrets super-résolvants de déconvolution avec contraintes. Applications*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon (1984).
- [48] Eicke B., *Iterations methods for convexly constrained ill-posed problems in Hilbert space*, Numerical Functional Analysis and Optimization: 13 (1992) 413.
- [49] Landweber L., *An iteration formula for Fredholm integral equations of the first kind*, American Journal of Mathematics: 73 (1951) 615.

Références du chapitre 3

- [1] Allen P.N., Dowsett M.G., Collins R., *SIMS profile quantification by maximum entropy deconvolution*. Surface and Interface Analysis: 20 (1993) 696.
- [2] Makarov V.V., *Nature of noise in SIMS depth profiling data*, Surface and Interface Analysis: 27 (1999) 801.
- [3] Mancina G., *Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS par déconvolution, algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la microélectronique silicium*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (2001).
- [4] Gautier B., *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par SIMS. Détermination de la fonction de résolution pour le bore dans le silicium, mis au point d'une procédure de déconvolution et applications*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (1997).
- [5] Vio R., Bardsley J., Wamsteker W., *Least-Squares methods with Poissonian noise: Analysis and comparison with the Richardson-Lucy algorithm*. Astronomy and Astrophysics: 436 (2005) 741.
- [6] Gautier B., Prudon G., Dupuy J.C., *Toward a better reliability in the deconvolution of SIMS depth profiles*, Surface and Interface Analysis: 26 (1998) 974.
- [7] Fares B., Gautier B., Dupuy J.C., Prudon G., Holliger P., *Deconvolution of very low primary energy SIMS depth profiles*, Applied Surface Science: 252 (2006) 6478.
- [8] Touraj Nikazad., *Algebraic Reconstruction Methods*. PhD thesis, Linköping University, Sweden (2008).
- [9] Morozov V.A., *On the Solution of Functional Equations by the Method of Regularization*. Soviet Mathematics Doklady: 7 (1966) 414.
- [10] Jalobeanu A., *Modèles, estimation bayésienne et algorithmes pour la déconvolution d'images satellitaires et aériennes*, Thèse de Doctorat, Université de Nice-Sophia Antipolis, (2001).
- [11] Makarov V.V., *Use of model depth resolution function for the deconvolution of depth profiling data*. Surface and Interface Analysis: 20 (1993) 821.
- [12] Hamdi F., *Déconvolution des profils SIMS obtenus en régime variant*. Mémoire de Magistère, Université de Constantine, (2006).
- [13] Hamdi F., Berrabah M., Boulsina F., Dupuy J. C., *Simulation and reduction of roughness effect on SIMS profiles by a variant resolution function*. Information and Communication Technologies International symposium: Fez-Morocco (2007).

Références du chapitre 4

- [1] Fares B., *Caractérisation par spectrométrie de masse des ions secondaires des zones actives du CMOS ultime : étude de la rugosité en fond du cratère et ses conséquences sur la vitesse d'érosion et sur la résolution en profondeur*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (2004).
- [2] Boulsina F, Berrabah M., Dupuy J. C., *Deconvolution of SIMS depth profiles: Towards simple and faster techniques*, Applied Surface Science: 255 (2008) 1946.
- [3] Wittmaack K., *Detailed evaluation of the analytical resolution function*, Applied Surface Science: 203-204 (2003) 268.
- [4] Gautier B., *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par SIMS. Détermination de la fonction de résolution pour le bore dans le silicium, mis au point d'une procédure de déconvolution et applications*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (1997).
- [5] Mancina G., *Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS par déconvolution, algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la microélectronique silicium*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, (2001).
- [6] Fares B., Gautier B., Dupuy J.C., Prudon G., Holliger P., *Deconvolution of very low primary energy SIMS depth profiles*, Applied Surface Science: 252 (2006) 6478.
- [7] Baboux N., *Analyse ultime par Spectrométrie de Masses des Ions Secondaires des matériaux de la microélectronique avancée : Contribution à l'interprétation des profils de bore dans le silicium*. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon (2001).
- [8] Yang M.H., Odom R., *Accurate modelling of residual recoil-mixing during SIMS measurements*, edited by: M.A. Foad, J. Mastuo, P. Stolk, M.D. Giles, K. S. Jones, Si Front-End Processing, Physics and Technology of Dopant-Defect Interactions III, tome 669 of: Materials Research Society proceedings (2001).
- [9] Bendjama H., *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires. Mise au point d'une procédure de déconvolution partielle et applications*. Mémoire de Magistère, Université de Constantine, (2003).
- [10] Berrabah M., Bendjama H., Boulsina F., Dupuy J.C. *Mise au point d'une procédure de déconvolution adaptée au cas des multi-deltas-dopage analysé en SIMS*, International congress of photovoltaic and wind energy (ICPWE). Tlemcen, Algérie (2003).

Titre de la thèse

Contribution à l'amélioration de la résolution en profondeur lors de l'analyse SIMS par des techniques de traitement du signal

Résumé

L'amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse par Spectrométrie de Masse des Ions Secondaires (SIMS) pour les besoins actuels de la microélectronique est une nécessité. Dans ce travail, nous avons opté pour une amélioration de la résolution en profondeur par des techniques numériques de traitement du signal, en particulier la déconvolution. Une technique de déconvolution est proposée. Elle est capable de produire des solutions régulières similaires à celles obtenues par l'algorithme de *Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures* (algorithme qui a déjà prouvé son efficacité en SIMS) avec une convergence plus rapide. De plus, en utilisant l'algorithme proposé les gains en résolution en profondeur et en maximum sont meilleurs que ceux obtenus avec l'algorithme de *Van Cittert régularisé et contraint*. Des techniques pour surmonter les limites de la procédure de déconvolution partielle sont également proposées. Il a été montré que l'amplification du bruit peut être contrôlée en effectuant un préfiltrage du profil mesuré ou en appliquant cette déconvolution à travers *la régularisation de Tikhonov-Miller*. Les deux problèmes amplification du bruit et apparition de valeurs négatives dans les profils déconvolués peuvent être traités par l'utilisation des méthodes itératives.

Mots-clés : SIMS, résolution en profondeur, déconvolution, régularisation, filtrage, microélectronique.

Title of thesis

Contribution to the improvement of the depth resolution during SIMS analysis by signal processing techniques

Abstract

The improvement of the depth resolution of Secondary Ions Mass Spectrometry (SIMS) analysis for the actual needs of microelectronics is necessary. In this work, we chose to improve the depth resolution by signal processing techniques, in particular the deconvolution. A deconvolution technique is proposed. It is able to produce regular solutions similar to those obtained by *Van Cittert with Tikhonov-Miller regularization and hard constraints* algorithm (algorithm already proved its effectiveness in SIMS) with a faster convergence. Moreover, by using the proposed algorithm the gains in depth resolution and in maximum are better than those achieved using the algorithm of *Van Cittert regularized and constrained*. Techniques to overcome the limits of the partial deconvolution procedure are also proposed. It was shown that the amplification of the noise can be controlled by filtering the measured profile before the application of the deconvolution or by applying the partial deconvolution procedure through *Tikhonov-Miller regularization*. The two problems amplification of the noise and appearance of negative values in the deconvolved profiles can be treated by using iterative methods.

Keywords: SIMS, depth resolution, deconvolution, regularization, filtering, microelectronic.