

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

## Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de Magister  
en Electronique

*Option*

*Dispositif des circuits intégré*

Par

**Hamdi Farah**

*Titre*

*Déconvolution des profils SIMS obtenus en  
régime variant*

Soutenu le 02 /05 /2006

**Devant le jury :**

<b><u>Président :</u></b>	Mr.	A.BENGHALIA	Prof.	Dpt. Electronique	Univ.Constantine
<b><u>Rapporteur :</u></b>	Mme.	M. BERRABAH	Prof.	Dpt. Electronique	Univ.Constantine
<b><u>Examineurs :</u></b>	Mme.	F. HOBAR	Prof.	Dpt. Electronique	Univ.Constantine
	Mme.	S. LATRECHE	Prof.	Dpt. Electronique	Univ.Constantine



*Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué au sein de l'équipe SIMS du Laboratoire Hyperfréquences et semiconducteurs (L.H.S) de l'Université de Constantine sous la direction du professeur Meriem. BERRABAH- BENOUAKTA, qu'elle trouve ici l'expression de ma profonde reconnaissance pour la confiance qu'elle m'a témoigné en m'accueillant au sein de son équipe et pour m'avoir confié ce sujet, pour ses précieux conseils, ainsi que sa compréhension.*

*Mes vifs remerciements vont à Mr. Abdelmadjid. BENGHALIA, Professeur au département d'Electronique, Université de Constantine, pour l'honneur qu'il me fait d'accepter de présider le jury chargé d'examiner ce mémoire.*

*Je tiens également à remercier sincèrement Mme. Farida. HOBAR, Professeur au département d'Electronique, Université de Constantine, qui m'a fait l'honneur d'accepter de juger mon travail.*

*Je remercie vivement Mme. Saida. LATRECHE, Professeur au département de d'Electronique, Université de Constantine, pour l'intérêt qu'elle a bien voulu porter à ce travail en acceptant de le juger.*

*Merci également à F. Boulsina pour son aide, ainsi que ses conseils et son soutien constant durant ce travail. J'exprime toute ma sympathie envers tous mes amis et mes collègues pour leurs encouragements et soutien dans la réalisation de ce travail.*

*Enfin, j'adresse tout particulièrement un très grand merci à mes parents et à l'ensemble des enseignants ayant contribué de près ou de loin durant ma formation.*

## 1. INTRODUCTION

Les technologies de fabrication des composants de la microélectronique tendant sans cesse vers la miniaturisation. L'analyse SIMS devient insuffisante dans la caractérisation précise de ces structures. Les mécanismes propres à la mesure empêchent l'accès à l'information ultime, à cause de sa destruction partielle.

Plusieurs raisons motivent l'amélioration de l'analyse :

- La demande d'une information de plus en plus précise sur les structures extrêmes (deltas dopage, interfaces abruptes, très faibles concentrations...)
- L'analyse de ces structures n'est pas assez fine pour que les échantillons puissent être considérés comme standards.

Des efforts restent à faire au niveau de l'instrumentation. Mais on peut sensiblement améliorer les résultats au moyen de technique de traitement du signal.

Dans ce premier chapitre, après une brève description du principe de la technique SIMS, nous concéderons à l'analyse en profondeur. Il s'agit de la résolution en profondeur dans le cas constant et variant. En particulièrement les causes qui provoquent la dégradation de la résolution en profondeur sont exposées.

## 2. L'ANALYSE PAR SIMS

L'analyse par Spectrométrie de Masse des Ions Secondaires (SIMS) s'est imposée dans le domaine des semi-conducteurs et trouve des applications dans tous les domaines. En particulier, le SIMS « statique » est au premier plan de la technique d'analyse de surface [1].

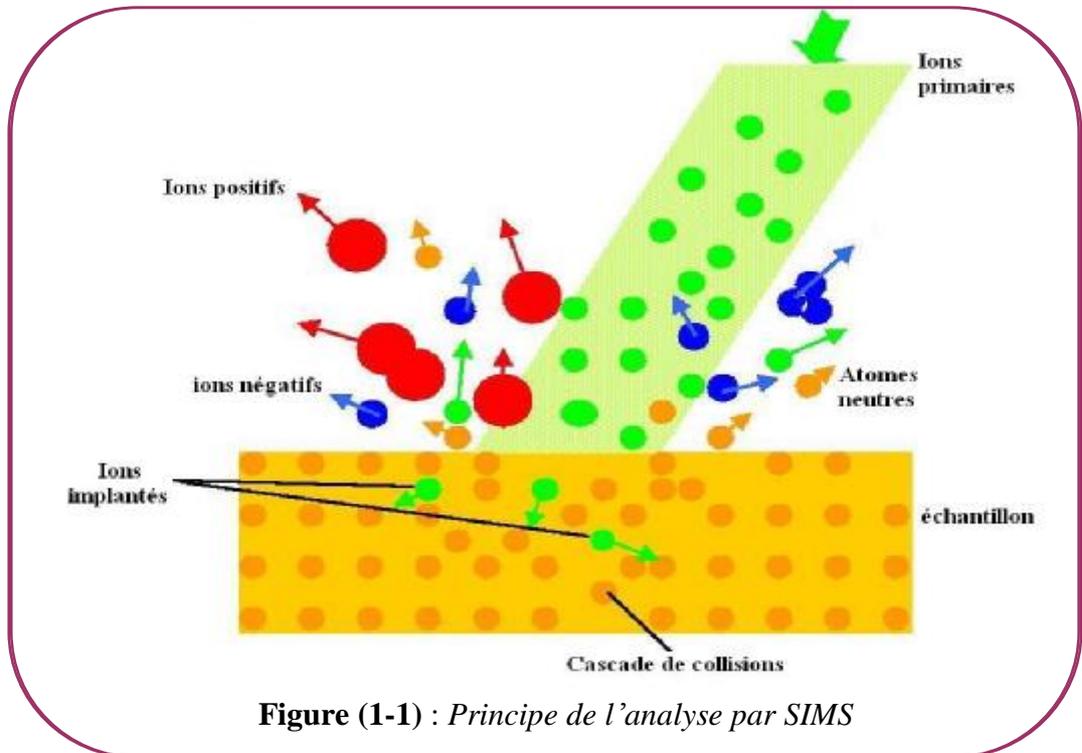
### 2.1. Principe et caractéristiques

#### 2.1.1. Principe

L'analyse SIMS 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 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. Lors du bombardement, les ions primaires provoquent des collisions sur et sous la surface de l'échantillon, ce qui conduit à l'émission de diverses espèces : atomes et molécules neutres, ions mono et polyatomiques, ainsi que photons et électrons [2, 3].

Les ions positifs et négatifs qui caractérisent l'échantillon sont dus au phénomène d'émission ionique secondaire. Ce sont ces derniers qui sont la source de l'information recherchée en SIMS.

La figure 1-1 nous montre le principe de la pulvérisation et de l'émission des ions secondaires.



**Figure (1-1) : Principe de l'analyse par SIMS**

Les ions primaires utilisés habituellement en analyse SIMS peuvent être des ions oxygène ( $O_2^+$ ) ou césium ( $Cs^+$ ), mais aussi il y a d'autre source tel que:  $N_2^+$ ,  $Xe^+$ ,  $Ga^+$ ,  $Ar^+$  .... La nature de ces ions détermine les caractéristiques de l'analyse ; 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. Les ions  $O_2^+$  sont les plus largement utilisés.

### 2.1.2. Le taux de pulvérisation et d'ionisations

Le processus de formation des ions secondaires est légèrement dépendant de deux paramètres importants en SIMS : le rendement de pulvérisation et le rendement d'ionisation.

### a) Taux de pulvérisation

Le taux de pulvérisation pour un élément donné correspond au nombre d'atomes de la cible pulvérisés par ion primaire incident, il dépend principalement de l'énergie et de l'angle d'incidence des ions primaires. Chaque espèce a son propre taux de pulvérisation  $Y_k$ . Le taux total  $Y_t$  est la somme des taux de chacune d'entre elles :

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

On note que les atomes de la cible ne sont pas forcément pulvérisés proportionnellement à leur concentrations dans la matrice, c'est ce qu'on appelle *la pulvérisation préférentielle* [1, 2].

### b) Taux d'ionisation

C'est en fait une probabilité d'ionisation d'une espèce après sa pulvérisation. Il est noté  $a^{n\pm}$  et représente le rapport du nombre de particules ionisées  $n$  fois sur le nombre total d'atomes pulvérisés pour cette espèce. Comme le taux de pulvérisation, il est différent pour chaque espèce de la matrice et sera dépendant des concentrations relatives ainsi que des conditions expérimentales [1, 2, 4].

#### 2.1.3. Le facteur de transmission

Tous les ions secondaires émis par le matériau ne sont pas recueillis par le système de détection. Un certain nombre d'entre eux sont perdus (lentilles électrostatiques, diaphragmes, etc.). Le facteur de transmission  $n_k$  est défini comme le rapport entre le nombre d'ions secondaires émis par l'échantillon et le nombre d'ions détectés. Il est noté avec l'indice  $k$  car il peut également varier selon l'espèce considérée [1, 2,5].

#### 2.1.4. 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 que l'on souhaite étudier avec le nombre d'ions primaires qui bombardent l'échantillon. Si on se place dans l'hypothèse où il n'y a pas de pulvérisation préférentielle, l'équation SIMS de base s'écrit :

$$I_K = I_p a_K^{\pm} Y_t C_k n_k \quad (1.2)$$

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

Cette équation est utilisée dans la quantification de l'analyse SIMS [2].

## 2.2. Les performances de la technique [1, 2, 5]

Les caractéristiques de l'analyse SIMS en font l'une des techniques d'analyse atomique les plus performantes, tous particulièrement en terme de *sensibilité* (La sensibilité est de l'ordre du ppm pour beaucoup d'élément, et même du ppb dans certains cas). Elle est aujourd'hui la technique de prédilection dans le domaine des semiconducteurs pour obtenir des profils de concentration d'atome dopants ou d'impuretés en fonction de la profondeur, qui sont maintenant dopés avec des concentrations très faibles ou très fortes sur des distances toujours plus petites.

La résolution spatiale est de l'ordre du  $\mu\text{m}$  latéralement et du nm en profondeur. On peut ainsi aisément obtenir une *image ionique* d'une surface ou un *profil en profondeur* de la concentration d'une espèce dans la matrice.

Les interfaces de masse entre des espèces ioniques de masses très proches peuvent être levées grâce à l'utilisation de conditions de haute résolution en masse jusqu'à des résolutions voisines de 10000.

L'analyseur ionique constitue donc un outil d'analyse extrêmement puissant qui permet trois modes de fonctionnement : l'analyse des ions secondaires, l'analyse en profondeur, et l'imagerie, avec une très grande sensibilité et une bonne résolution.

Parmi les performances essentielles de la technique, sa grande sensibilité et son *exhaustivité* (presque tous les éléments du tableau de Mendeleïev peuvent être analysés).

## 2.3. Les limites de la technique

Plusieurs limitations découlent du procédé de la mesure. Tout d'abord, l'analyse est destructive. Puisque l'échantillon est érodé pratiquement plan atomique par plan atomique, mais jusqu'à des profondeurs de l'ordre du  $\mu\text{m}$ . La surface endommagée est à chaque nouvelle mesure d'environ  $500 \mu\text{m} \times 500 \mu\text{m}$  ; il faudra donc tenir compte de la surface disponible à la mesure sur l'échantillon.

De par les dimensions de l'aire analysée, on ne peut obtenir qu'une étude locale de l'échantillon. On ne peut donc pas étudier un échantillon hétérogène ou de structure latérale complexe avec une mesure unique. On peut cependant accumuler des images à différentes profondeurs.

L'inconvénient majeur de l'analyse SIMS est 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. On a besoin, pour connaître une concentration exacte, d'une mesure étalon faite sur un échantillon de référence et dans les mêmes conditions

expérimentales. C'est une analyse dite « semi-quantitative ». En microélectronique, on fait appel à des échantillons standard implantés pour calibrer les mesures.

### 3. RESOLUTION EN PROFONDEUR

#### 3.1. Définition

La résolution en profondeur est déterminée en mesurant la largeur prise entre deux bornes, fixées au préalable, de l'analyse d'une marche de concentration.

Elle est le paramètre essentiel de toute méthode d'analyse en profondeur [4,6].

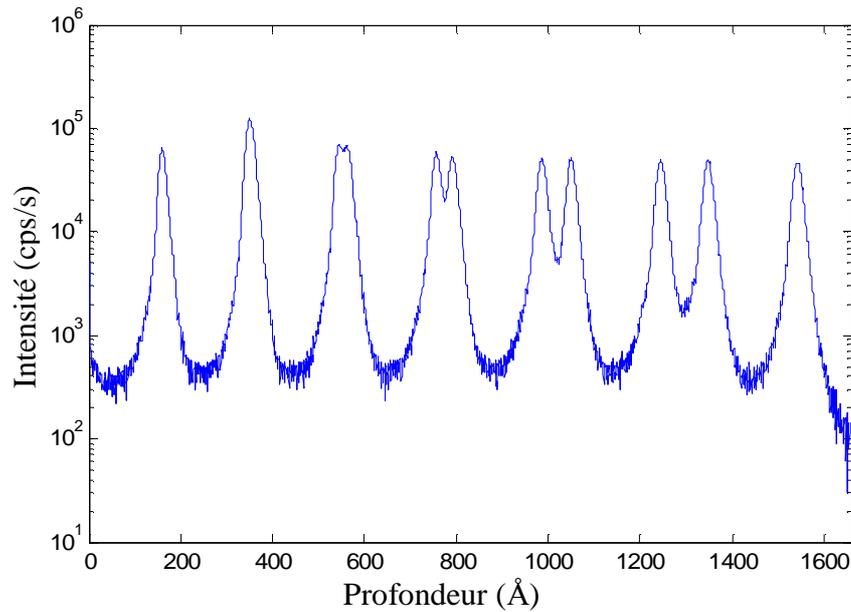
#### 3.2. Profil en profondeur

A travers une quantification on obtient des profils de concentration.

D'une part, il y a le facteur de conversion, qui s'appelle Le facteur de sensibilité relative (RSF) [10] ; une constante qui permet de transformer le signal collecté en concentration. Le signal d'un élément étant comparé à un élément de référence de la matrice et la connaissance du RSF permet de remonter à la valeur de la concentration en élément  $k$  dans l'échantillon à quantifier [5].

D'autre part, la méthode la plus classique pour obtenir la concentration en fonction de la profondeur consiste à mesurer, après l'enregistrement du profil, la profondeur du cratère par un profilomètre. Si la matrice du matériau est homogène depuis la surface de l'échantillon jusqu'au fond du cratère, on considère que la vitesse de pulvérisation à été constante pendant toute la durée de la mesure du profil [1, 5, 7].

Toutefois, il arrive que des phénomènes parasites se développent tel que la rugosité. Dans ce cas l'échelle de profondeurs devient inacceptable et il est nécessaire de la corriger [8, 9]. On obtient ainsi la distribution en profondeur de la concentration d'un élément donné, (figure1-2).



**Figure (1-2) :** Exemple de profil en profondeur de Bore dans le Silicium analysé à 0.5keV, 44°, UHV.

Ce mode d'analyse est très largement utilisé en microélectronique où la distribution en profondeur des dopants ou des éléments majeurs est une information très importante. Néanmoins, comme nous l'avons dit plus haut, la quantification des mesures reste tributaire de l'analyse d'un échantillon étalon pulvérisé dans les mêmes conditions que l'échantillon à analyser.

### 3.3. Position des pics : le shift différentiel

Le *shift différentiel* est caractérisé par le fait qu'une couche située à une profondeur  $z_c$  apparaît lors de l'analyse à des profondeurs de plus en plus faible lorsque l'énergie des ions primaires est plus élevée (par exemple qu'un pic est situé à 1000Å lorsqu'il est analysé à 3.5 keV/O<sup>+2</sup> apparaîtra à 931Å lorsqu'il sera analysé à 8.5 keV/O<sup>+2</sup>). Ce phénomène a été décrit expérimentalement pour la première fois par Wittmack [11] dans le cas d'un faisceau primaire d'oxygène.

A incidence normale, la position exacte des pics mesurés peut être corrigée pour une énergie donnée en ajoutant à la position du pic la valeur du *shift différentiel* mesurée pour l'énergie utilisée.

A incidence oblique par contre, les travaux de Barlow [12] et Brice [1], tendent vers la conclusion que le phénomène de shift n'est pas une donnée maîtrisable lors de l'analyse par un faisceau d'oxygène.

### 3.4. Dynamique du signal

La dynamique de signal est déterminée par le nombre de décade entre le maximum et le minimum du signal pour un profil d'un élément implanté dans une matrice donnée. C'est une caractéristique essentielle de l'analyse en profondeur (en SIMS dynamique), qui est utilisée pour valider les performances de l'analyse [10].

### 3.5. Les mécanismes essentiels gouvernant la résolution en profondeur

#### 3.5.1. Le mixage collisionnel

Le mixage collisionnel est la conséquence directe du transfert de l'énergie cinétique des ions primaires aux atomes de la cible, on divise généralement ce phénomène en deux processus distincts :

- Le mixage par choc direct : 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 : il concerne les choc entre atomes de la cible. Ces chocs sont très nettement moins énergétiques que les précédents mais infiniment plus nombreux. Un seul atome incident provoquera ainsi un nombre considérable de chocs par cascade jusqu'à que l'énergie transférable d'un atome à un autre devienne inférieur à l'énergie de déplacement des atomes de la cible, c'est-à-dire une vingtaine d'électron volt 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 restante après extinction des cascades de collisions se dissipe sous forme de phonons [1].

Notons que le mixage collisionnel est un phénomène totalement indissociable de la mesure elle-même. Il est possible de le minimiser (par utilisation des basses énergies par exemple), mais pas de l'éradiquer totalement.

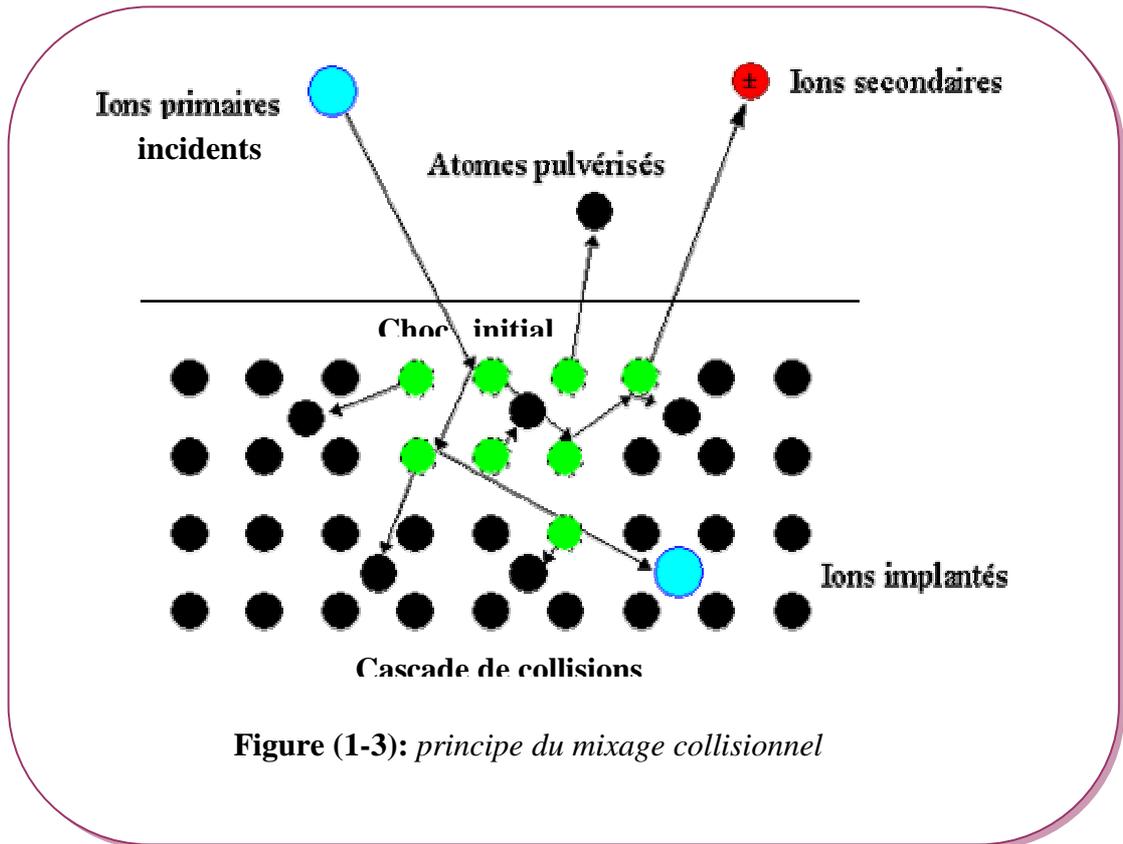


Figure (1-3): principe du mixage collisionnel

### 3.5.2. Les problèmes d'érosion non homogène

Le cratère produit par l'érosion de la surface de l'échantillon n'est pas toujours plat. Ceci entraîne que tous les points du cratère ne sont plus situés à la même profondeur. On conçoit aisément que dans ce cas, les ions secondaires qui arrivent en même temps sur le détecteur ne proviennent pas tous de la même profondeur, ce qui entraîne des difficultés lors de la conversion de l'échelle des temps en échelle des profondeurs [8]. Il est donc important pour obtenir une bonne résolution en profondeur que le fond du cratère soit plat.

### 3.5.3. Les facteurs chimiques

L'interaction entre le faisceau primaire et la matrice de l'échantillon induit le changement de sa structure chimique et donc la mise en jeu de nouveaux facteurs chimiques qui peuvent modifier positivement ou négativement la résolution en profondeur lors de l'analyse. Ce changement chimique peut être dû à l'apparition de nouveaux composés (exemple formation du  $\text{SiO}_2$  dans le cas d'un bombardement par les ions  $\text{O}_2^+$ ), ou à un phénomène de transport de matière (ségrégation, diffusion,...etc.) [1,13].

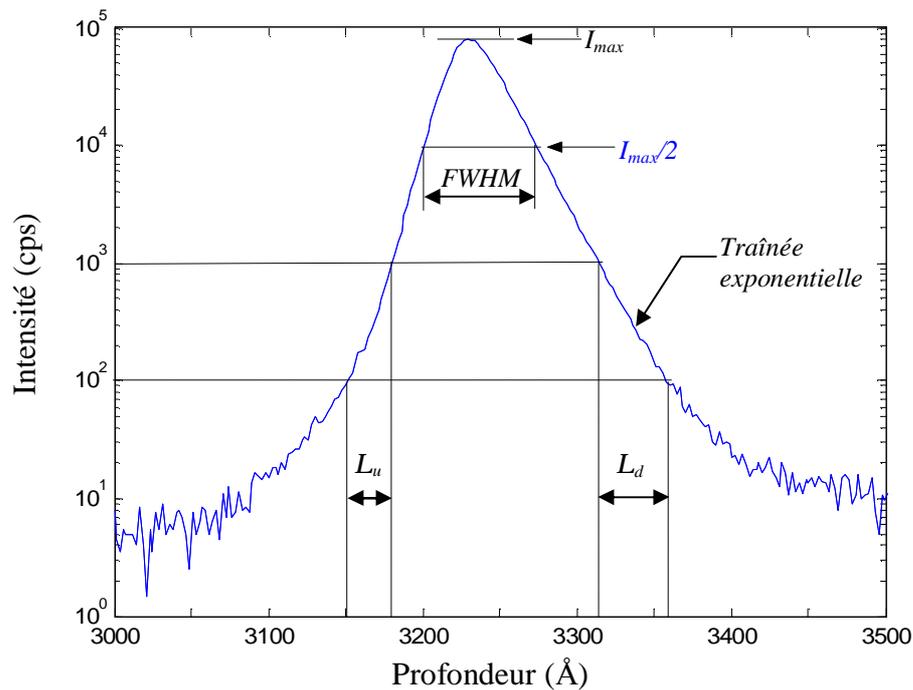
### 3.6. Evaluation de la résolution en profondeur

L'évaluation peut être faite de plusieurs façons, selon le processus de dégradation dont on veut rendre compte, ou bien selon le type d'échantillon analysé : des résolutions adaptées à l'analyse d'interfaces, de couches minces rapprochées, ou de delta-dopages sont soumises dans les références [1, 14, 15, 16].

Dans ce travail, nous nous intéressons à l'évaluation de la résolution à partir de delta-dopages.

*L'estimation de la résolution en profondeur à partir d'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. 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.



**Figure (1-4) :** *Evaluation de la résolution en profondeur à partir du profil mesuré d'un delta-dopage [6].*

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. 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. La figure (1-4) représente une telle mesure, dans le cas d'un échantillon constitué du bore implanté dans le silicium, analysé à 2 keV d'énergie d'impact, sous ions  $O_2^+$ .

On utilise souvent comme critère de mesure dans ce type de courbe, la largeur à mi-hauteur, abrégée par FWHM (Full Width at Half Maximum). Même si ce paramètre est simple à obtenir et assez intuitif, il faut l'utiliser avec précaution, étant donné la nature asymétrique de la réponse impulsionnelle [17].

Nous avons vu que la mesure d'un delta-dopage donne également des pentes exponentielles de part et d'autre du profil mesuré. On se focalise généralement sur la pente exponentielle décroissante, puisque c'est elle qui reflète l'importance du mixage collisionnel par son paramètre  $I_d$  (distance nécessaire pour que le signal décroisse d'un facteur  $e$  :  $\Lambda_d = 2.3 \lambda_d$ ).

Le paramètre  $I_d$  reflète en grande partie la perte de résolution en profondeur due au mixage collisionnel, de plus  $I_d$  augmente avec  $R_p$  (profondeur de pénétration des ions primaires dans la cible). Lorsque ce dernier n'est pas prépondérant, par exemple lors d'une analyse à basse énergie, la mesure de  $I_d$  devient insuffisante pour caractériser la résolution.

Une autre manière d'évaluer la résolution en profondeur est d'utiliser les moments. En particulier, le *moment centré d'ordre 2* d'une fonction mesure la dispersion autour de la valeur moyenne. L'avantage du moment centré d'ordre deux est son objectivité, c'est-à-dire le fait qu'il prend en compte la totalité de la courbe, ce qui n'est pas le cas ni pour la FWHM, ni pour les paramètres exponentiels.

### 3.7. La fonction de résolution en profondeur

La réponse impulsionnelle d'un système est la réponse de ce dernier à un signal d'entrée égal à un Dirac. Le Dirac est une fonction théorique d'épaisseur nulle, d'amplitude infinie et dont l'intégrale sur  $R$  est égale à 1. Il va de soit que dans le domaine de la physique, un tel signal n'existe pas, et il est remplacé par un signal fini d'épaisseur non nulle ("pseudo-Dirac").

Dans notre cas, il ne s'agit pas de signal électrique ou optique, mais de successions de plans atomique. La plus petite structure existante sera alors une couche atomique, et c'est elle qui peut nous donner la réponse impulsionnelle par sa mesure. On appellera cette réponse "fonction de résolution en profondeur", ou DRF, pour "depth resolution function"

Cette DRF n'est pas simplement fonction de l'appareil, et on ne peut pas la fixer une fois pour toutes pour différentes mesures. Elle est très dépendante de l'échantillon d'une part, et de

toutes les conditions et les paramètres expérimentaux d'autre part.

### 3.8. Modélisation de la DRF

Il y a plusieurs avantages à modéliser la DRF et à la remplacer par son fittage:

- i) comparaison de diverses mesures : faites ou non dans les mêmes conditions expérimentales (suppression du bruit).
- ii) possibilité d'adapter le pas d'échantillonnage si la DRF est mesurée sur un delta-dopage situé sur un autre échantillon ; obtention des abaques de DRF.
- iii) prévoir de manière analytique le profil SIMS d'une structure particulière supposée connue.

Le choix de la fonction analytique fittant au mieux la DRF peut être assez différent selon les auteurs, même si quelques-unes de ces fonctions reviennent le plus souvent. D'un point de vue pratique, il est important que la forme analytique puisse fitter correctement la fonction de résolution dans des conditions expérimentales assez différentes, c'est-à-dire sur une plage d'énergie primaires et d'angle d'incidence assez grande, sans qu'il n'y est besoin d'apporter de corrections artificielles [6].

Dans notre travail nous utilisons la DRF proposée par Dowsett et al [24], qui a déjà démontrée son efficacité [1,2].

Nous avons vu que la courbe de la DRF est caractérisée par trois parties remarquables : une pente exponentielle montante, un sommet arrondi, et enfin une pente exponentielle descendante. Mis à part la position globale (en profondeur) de la courbe, on peut espérer caractériser la DRF par trois paramètres indépendants.

Les parties exponentielles de la DRF peuvent aisément être fittées par une famille de fonctions appelées *double exponentielle*. Une double exponentielle est définie comme suit :

$$D \exp(z) = A \begin{cases} \exp\left(\frac{z - z_0}{I_u}\right) & z < z_0 \\ \exp\left(\frac{-(z - z_0)}{I_d}\right) & z > z_0 \end{cases} \quad (1.3)$$

$z_0$  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 mesuré.

Cette fonction seule n'est pas suffisante pour être assimilée à la DRF, car la zone autour de  $z_0$  n'est pas arrondie (par rapport aux profils expérimentaux), et de plus il y a un point

anguleux en  $z_0$ . Pour corriger ce problème, on utilise l'astuce de convoluer cette 1ère fonction avec une *gaussienne* de paramètre  $s$ .

$$Gauss(z) = \frac{B}{\sqrt{2ps_{gauss}}} \exp\left(\frac{-z^2}{2s_{gauss}^2}\right) \quad (1.4)$$

$$h(z) = D \exp(z) \otimes Gauss(z) \quad (1.5)$$

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

$$h(z) = \frac{1}{2(I_u + I_d)} \left\{ \exp\left(\frac{z - z_0}{I_u} + \frac{s^2}{2I_u^2}\right) \times \left[ 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{-(z - z_0)}{s} - \frac{s}{I_u} \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \right] + \exp\left(\frac{-(z - z_0)}{I_d} - \frac{s^2}{2I_d^2}\right) \times \left[ 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{z - z_0}{s} - \frac{s}{I_d} \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \right] \right\} \quad (1.6)$$

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 forme analytique de la DRF étant mathématiquement assez simple, on peut facilement calculer les moments associés :

- moment d'ordre 1 (moyenne)

$$m_1 = \bar{z} = I_d - I_u + z_0 \quad (1.7)$$

- moment centré d'ordre 2 :

$$m_2^c = s_{tot}^2 = I_u^2 + I_d^2 + s^2 \quad (1.8)$$

$m_2^c$  représente la variance de la fonction de résolution autour de sa valeur moyenne  $\bar{z}$ .

$s_{tot}$  est son écart-type, et on voit que  $s_{tot}^2$ , qui nous donne une estimation de la résolution en profondeur, est tout simplement la somme des carrés des paramètres de la DRF.

### 3.9. Limitation de la résolution en profondeur à basse énergie

À basse énergie, il faut prendre en compte d'autres phénomènes parasites qui peuvent limiter la résolution en profondeur tels que l'apparition de la rugosité au fond de cratère où certains paramètres varient. Dans cette partie nous nous concentrons sur l'étude de ces variations.

## 4. LA RESOLUTION EN PROFONDEUR VARIANTE

### 4.1. Sources de variation de la DRF

On peut envisager deux causes de dégradation de la résolution en profondeur lors d'une acquisition :

- i) la variation du courant ionique primaire.
- ii) l'érosion non uniforme du cratère.

Nous allons brièvement étudier ces deux phénomènes.

#### 4.1.1. Variation du courant ionique primaire

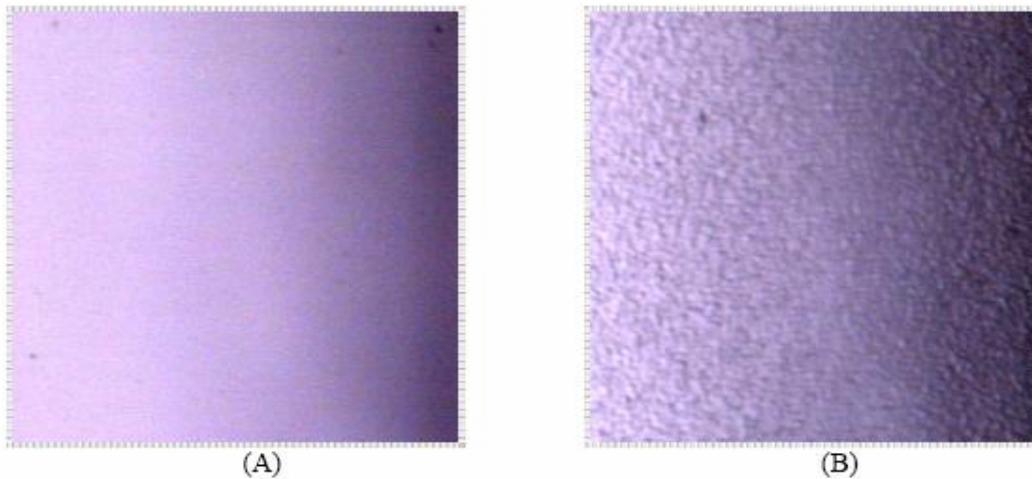
La stabilité du spectromètre n'est pas toujours garantie, en particulier lors d'une analyse longue en temps (plusieurs heures selon la vitesse d'érosion et la profondeur à analyser). Il arrive que le courant primaire dérive et influence la vitesse d'érosion de l'échantillon. Sur un multi delta-dopage, cela se traduit par un élargissement ou au contraire un affinement des pics avec la profondeur.

Rappelons que lorsque ces phénomènes existent, la correction de l'échelle des profondeurs (ou des temps) est indispensable.

#### 4.1.2. Erosion non uniforme du cratère

##### *Description de rugosité*

La rugosité est un phénomène mal maîtrisé mais on peut penser que son origine est physico-chimique. Elle peut être de l'ordre du nanomètre ou du micromètre. La figure 1-5 montre la différence entre deux images optiques de la surface de silicium, la première (A) présente l'état de la surface de silicium initiale (une surface relativement plane et lisse) et la deuxième (B) représente l'état de la surface en fond de cratère (une surface complètement rugueuse).

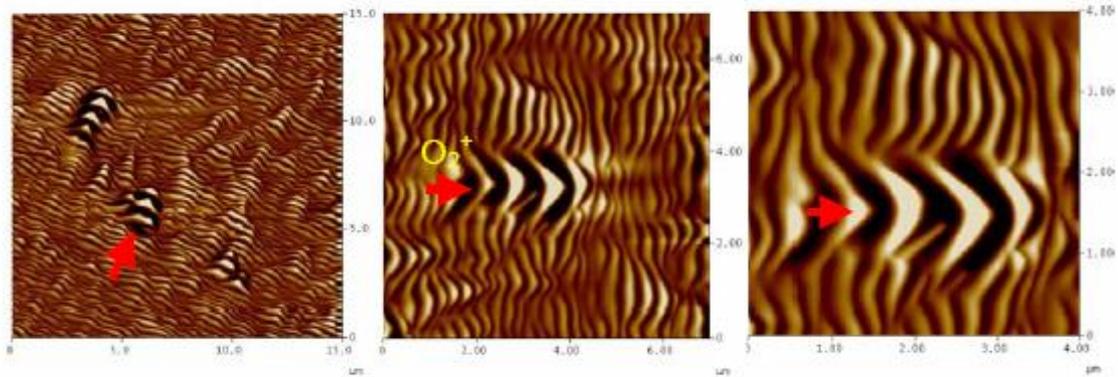


**Figure 1-5 :** Image optiques, (A) représente la surface initiale Si vierge et (B) représente le fond du cratère après analyse SIMS [18].

Cette rugosité peut être plus importante avec la vitesse d'érosion. La sonde ionique « voit » alors non pas une couche atomique parallèle à la surface de l'échantillon, mais plusieurs couches en même temps. Elle est induite sous deux formes :

- a) *une rugosité induite par le faisceau primaire*, où la focalisation et le balayage de ce dernier sur la surface de l'échantillon peuvent dans certains cas influencer la forme finale du cratère (mauvaise focalisation sur les bords du cratère, effets de l'inclinaison du faisceau, défaut de balayage, et la variation de l'angle d'incidence lors du balayage) [18, 13]. comme dans le cas des rugosités, il en résulte une fonction parasite que l'on doit convoluer à la DRF initiale. On peut cependant prévoir un élargissement de la DRF, croissant avec la profondeur et résultant de la convolution de cette fonction parasite avec la DRF initiale.
- b) *Une rugosité induite à la surface de l'échantillon*, où il apparaît un relief sous la forme d'ondulations ou des vagues perpendiculaires à un vecteur d'onde, aligné avec la direction du bombardement pour les incidences faibles et perpendiculaire à cette direction pour les incidences importantes, ainsi que sous la forme de cônes et pyramides [19]. Cette rugosité apparaît lorsque le taux de pulvérisation connaît une variation locale pendant l'analyse même lorsque le faisceau primaire est focalisé correctement (y compris sur des échantillons dont la surface initiale est plane) [20].

La figure 1-6 montre que la rugosité peut naître à la surface de l'échantillon à partir de défauts ou d'impuretés qui se développent dans la direction du faisceau primaire.



**Figure1-6** : image AFM (atomique force microscopy), Développement de la rugosité à la surface de l'échantillon, la flèche montre la direction du faisceau d'ions primaires [18].

c) l'occurrence des rugosités [21] [22]

Dans la littérature on retient que la rugosité dépend :

- @ Des propriétés du matériau (silicium, germanium, éléments III/V...);
- @ De la nature du faisceau primaire (Oxygène, Argon, Césium...);
- @ De l'énergie d'impact (haute énergie  $E \geq 3 \text{ keV}$  ou basse énergie  $E \leq 2 \text{ keV}$ );
- @ De l'angle d'incidence (incidence normale ou oblique);
- @ De la présence d'un soufflage d'oxygène.

## 4.2. Variation des signaux de la matrice avec la topographie

Stevie [23] est le premier qui a observé la corrélation entre le changement des signaux de matrice et le développement de la topographie au fond du cratère SIMS.

Dans le cas d'un delta dopages de bore, on peut détecter l'apparition de la rugosité grâce à deux symptômes : variation des signaux de matrice, perte de la résolution en profondeur sur le profil de bore.

En définit une profondeur de transition qui est la profondeur d'érosion critique, **dc**, à partir de laquelle les rugosités commencent à se développer. A cette même profondeur apparaît la variation des signaux de la matrice.

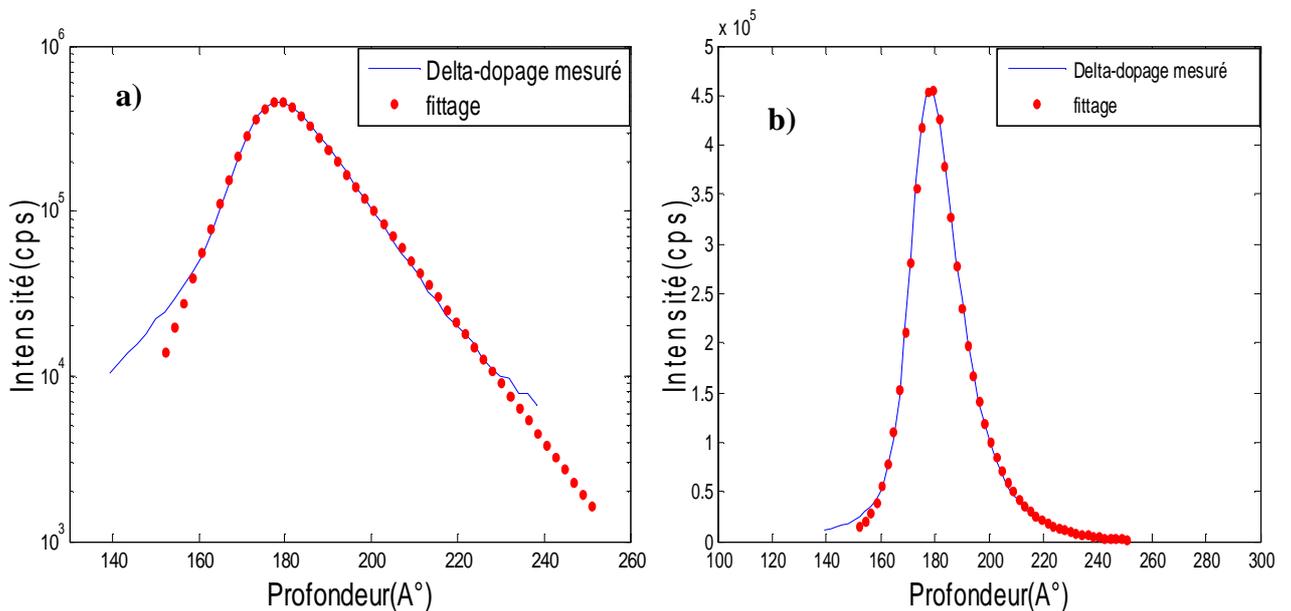
## 5. CAUSALITE ET POSITIONNEMENT DE LA DRF

La DRF de l'analyse SIMS se distingue 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 voit apparaître un signal bien avant la position initiale supposée de la couche. Cette non causalité, qui peut paraître problématique lorsqu'il est question de signaux temporels, n'est qu'apparente, et on peut la rétablir, en considérant que la réponse à un Dirac enterré *commence au début de l'érosion ionique* [1].

En pratique, il est possible d'estimer l'avance de la fonction de résolution par rapport au Dirac excitateur dans le cas où elle est principalement gouvernée par le mixage collisionnel. En effet, les travaux de Littmark et Hofer [25] montrent qu'un delta-dopage donne lieu à une DRF dont le moment d'ordre 1  $\bar{z}$  est situé à la position initiale du delta-dopage.

### 5.1. Fittage des données expérimentales

Les figures (1-7) montrent le fittage d'un delta-dopage simple dans le cas du Bore dans le silicium. On remarque la qualité du fittage sur la quasi-totalité de la dynamique, excepté sur la partie où le rapport signal/bruit est mauvais.



**Figure (1-7) :** Fittage par la forme analytique de la DRF(1.6) d'un delta-dopage de bore dans du Silicium analysé à 1 keV  $O_2^+$  48°. **a)** Représentation logarithmique. **b)** Représentation linéaire.

A ce jour pour chaque mesure il a été effectué un fittage d'un seul delta-dopage. Néanmoins, toutes les mesures ne sont pas parfaites. On peut alors ne pas tenir compte des deltas-dopage concernés.

La majeure partie des causes conduisant à une DRF faussée étant dans notre cas connues (développement de rugosités, cratère non homogène). Dans notre travail les paramètres de la DRF ont été tirés du fittage de tous les deltas-dopage mesurés.

## 5.2. Relation entre les paramètres de la DRF et les phénomènes physiques [26]

La dépendance énergétique des paramètres de fittage permet de postuler quelques hypothèses sur leur nature physiques :

### Ø *Descente exponentielle* $l_d$ :

L'évolution de ce paramètre en fonction de la profondeur de pénétration des ions est compatible avec le modèle du mixage collisionnel [1], sauf à basse énergie où d'autres phénomènes entrent probablement en jeu.

### Ø *Montée exponentielle* $l_u$ :

Le paramètre  $\lambda_u$  insensible à l'énergie des ions primaires semble principalement relié à la rugosité microscopique de la surface pulvérisée [27]. Il est possible qu'il soit également lié à la profondeur d'échappement des ions secondaires. Dans tous les cas, la contribution du mixage semble négligeable.

### Ø *L'écart-type* $S_g$ :

Le fait que  $\sigma_g$  augmente avec l'énergie des ions primaires, indique que  $\sigma_g$  est relié aux cascades de collisions isotropes qui se tiennent à l'intérieur du matériau, et augmenté avec l'étendue de celle-ci. Cette hypothèse est renforcée par les simulations opérée par Littmark [28] qui aboutissent à un sommet de DRF également arrondi, alors que la rugosité est supposée nulle. Ce paramètre semble aussi être relié aux phénomènes de rugosité.

## 6. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons brièvement exposé les principes et les caractéristiques de l'analyse SIMS, ses possibilités et ses limites. Parmi ses nombreuses applications, nous nous sommes intéressés à la résolution en profondeur, l'une des utilisations les plus importantes dans le domaine de la micro-électronique.

Nous avons dans un premier temps défini les mécanismes essentiels qui gouvernent la résolution en profondeur et son évaluation à partir d'un delta dopage. La particularité d'un delta

dopage est de donner directement, par sa mesure, la réponse impulsionnelle du système de mesure, notée fonction de résolution en profondeur ou DRF.

Ensuite, selon les conditions d'analyse, en particulier à basse énergie, les rugosités et inclinaisons de cratère sont très courantes. Dans ce cas relativement complexe, la réponse impulsionnelle du système est légèrement différente à chaque profondeur. Nous avons défini les sources de ces variations.

Enfin, la DRF peut être modélisée par une fonction analytique construite à partir de la convolution d'une double exponentielle avec une gaussienne. Lorsque il y a des variations le fittage complet de la DRF à partir de la mesure devient alors indispensable.

## 1. INTRODUCTION

Les limites physiques atteintes par l'analyse SIMS rendent difficilement envisageables d'autres améliorations techniques de l'appareillage sans que le coût devienne exorbitant.

Les techniques de traitement numériques comme *la déconvolution* reste un moyen efficace pour obtenir la meilleure résolution en profondeur. C'est une opération délicate, qu'il ne faut pas mettre en œuvre sans précaution. Il est nécessaire de bien contrôler le processus de restitution et d'en comprendre les mécanismes, sous peine d'obtenir des résultats aberrants.

Dans notre cas, l'obtention d'un profil plus proche de la réalité que le profil SIMS mesuré permet ainsi d'améliorer la résolution en profondeur.

Nous allons, dans ce chapitre, exposer les principes de la déconvolution, afin de dégager les méthodes de calcul qui nous permettront de traiter le signal SIMS. Enfin nous allons choisir parmi les algorithmes celui qui sera mieux adapté à notre cas.

## 2. LA DECONVOLUTION

De nombreux domaines d'application ont recours à la déconvolution, et par suite différentes méthodes de déconvolution ont vu le jour. Elles peuvent s'appliquer à tout signal ayant été dégradé par un dispositif linéaire et invariant, comme l'analyse SIMS bien sûr, mais aussi d'autre type de mesures : électroniques, optiques, acoustiques.... En particulier, la déconvolution est très utilisée dans le domaine des images numériques.

Il est important de bien comprendre ce qui nous amène à mettre en œuvre une déconvolution. Une telle opération implique qu'il y ait d'abord un signal ayant subi une convolution. Ce signal est inconnu, et en général on ne dispose que du résultat de la convolution de ce signal, mais aussi, partiellement ou complètement, du signal convoluant. Cela nous amène à faire tout d'abord quelques rappels sur la convolution, afin d'utiliser par la suite au mieux ses propriétés.

### 2.1. La convolution

#### 2.1.1. Définition

Un signal dégradé par altération, peut être considéré comme résultant de la composition du signal original (celui que l'on recherche), et d'un signal parasite, par exemple inhérent à la mesure. Nous représenterons dans toute la suite de ce travail, le signal d'entrée recherché par  $x$

(t), et le signal de sortie observable par  $y(t)$ .

Désignons par  $H$  l'opérateur qui transforme le signal d'entrée  $x(t)$  en  $y(t)$  :

$$y = H x \quad (2.1)$$

$H$  est un opérateur de convolution si  $x$  et  $y$  sont fonction d'une même variable indépendante  $t$ , et si  $H$  est linéaire et invariant au cours du temps.

Le système qui dégrade le signal  $x$  peut être caractérisé par sa réponse impulsionnelle (réponse à une impulsion de Dirac  $\delta(t)$ ), notée  $h(t)$ . Le signal de sortie  $y(t)$  dépend à chaque instant  $t$  de toutes les valeurs d'entrée  $x$  aux instants  $(t - \tau)$ , et ceci de manière pondérée par  $h(\tau)$ .

L'équation (2.1) devient alors l'équation de convolution suivante:

$$y(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(\tau) x(t-\tau) d\tau \quad (2.2)$$

La convolution est noté par le signe  $*$ , ce qui simplifie la notation :

$$y(t) = h(t) * x(t), \text{ ou } y = h * x \quad (2.3)$$

Le terme  $h*x$  est appelé produit de convolution de  $x$  par  $h$ .

### 2.1.2. Propriétés du produit de convolution

Comme le produit simple, le produit de convolution de fonctions est commutatif, Associatif, et distributif par rapport à l'addition.

La propriété la plus intéressante du produit de convolution est :

dans l'espace de Fourier son image est un produit simple. Ainsi, si  $X(f)$ ,  $Y(f)$  et  $H(f)$  désignent respectivement les transformées de Fourier de  $x(t)$ ,  $y(t)$  et  $h(t)$ , nous avons :

$$y(t) = h(t) * x(t) \Leftrightarrow Y(f) = H(f)X(f) \quad (2.4)$$

Le produit simple étant d'expression moins complexe que le produit de convolution, cette propriété nous permettra d'obtenir des simplifications en passant dans l'espace de Fourier. Ainsi, on peut distinguer des techniques de déconvolution dans l'espace direct, et d'autre dans l'espace de Fourier.

## 2.2. La déconvolution : existence d'un inverse de convolution

La déconvolution consiste à retrouver le signal original  $x(t)$  connaissant le signal de sortie du système de mesure  $y(t)$  et sa réponse impulsionnelle  $h(t)$ . Le but est donc de résoudre l'équation de convolution (2.2). Dans l'espace direct, la présence de l'intégrale rend cette équation difficile à résoudre. Par contre, d'après la propriété (2.4), nous pouvons écrire cette équation dans l'espace de Fourier :

$$Y(f) = H(f)X(f) \quad (2.5)$$

Nous avons alors  $X(f) = \frac{Y(f)}{H(f)}$ , et en utilisant la transformée de Fourier inverse :

$$x(t) = \text{TF}^{-1} \left\{ \frac{Y(f)}{H(f)} \right\} \quad (2.6)$$

C'est donc la manière la plus simple et la plus directe de déconvoluer un signal. En effet  $H(f)$  doit être différente de zéro pour toutes les valeurs de la fréquence  $f$ . D'autre part,  $H(f)$  ne doit pas être à décroissance trop rapide en fonction de  $f$ . On notera que  $H(f)$  décroît en fonction de la fréquence (la dégradation est de type « filtre passe-bas ») et donc  $H(f)$  tend vers zéro assez rapidement.

L'existence de l'inverse de convolution est subordonnée à la condition que  $H(f)$  ne s'annule pas. En fait, on peut montrer que deux conditions permettent l'existence de l'inverse [29] ; il faut d'une part que le module de  $H^{*-1}(f)$  soit borné, et d'autre part que  $H(f)$  soit à *décroissance lente*.

## 2.3. Déconvolution en présence de bruit

Toute mesure physique est entachée de divers signaux parasites, considérés ensemble comme le bruit de mesure. On considère généralement que le bruit est de nature aléatoire, c'est à dire qu'on ne peut pas prédire sa valeur au temps  $t_2$  à partir de celle au temps  $t_1$ .

Le bruit de mesure est à l'origine de la plupart des difficultés de la déconvolution. En effet la principale caractéristique du bruit est d'être indissociable du signal utile. Sa présence a presque toujours comme conséquence de masquer plus ou moins de détails dans le signal original. Cela implique qu'on ne sait pas distinguer le signal utile du bruit, ce qui est considéré comme une perte d'information.

### **Equation de convolution avec bruit**

Le système linéaire et invariant à l'origine de la dégradation du signal est un filtre passe-bas. De ce fait, en hautes fréquences, le signal de sortie du système (celui qu'on observe ou mesure), n'est en fait que le bruit provenant des capteurs et amplificateurs électronique. Un modèle réaliste, dans un contexte linéaire, consiste à appliquer le théorème de superposition : le signal de sortie du système est égal à la somme du signal non bruité et d'un bruit large bande :

$$y_b(t) = y(t) + b(t) = x(t) * h(t) + b(t) \quad (2.7)$$

Maintenant la relation (2.7) s'écrit dans l'espace de Fourier :

$$Y_b(f) = H(f) X(f) + B(f) \quad (2.8)$$

## **3. PASSAGE DU DOMAINE CONTINUE AU DOMAINE DISCRET**

### **3.1 Nature des signaux SIMS mesurés**

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. L'utilisateur a donc le choix de régler le pas d'échantillonnage dans le temps pour chaque profil et même pour chaque masse analysée. Selon la vitesse d'érosion de l'échantillon, on obtient un pas d'échantillonnage spatial de l'ordre de quelques angströms. Les signaux SIMS à notre disposition sont donc des signaux discrets et de durée finie, ainsi l'équation de convolution peut être décrite par la manière suivante :

$$y_n = \sum_{i=0}^{N_x-1} h_i x_{n-i} = \sum_{i=0}^{N_x-1} x_i h_{n-i} \quad (2.9)$$

Où :  $N_x$  représente le nombre de points du vecteur  $x$ .

$N_h$  le nombre de points de la réponse impulsionnelle.

*Note importante* : le produit de convolution  $y_n$  a une durée plus longue que les deux signaux qui le composent : sa longueur est :

$$N_y = N_x + N_h - 1 \quad (2.10)$$

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.

La convolution circulaire nécessite que les deux vecteurs de départ soient de même longueur  $N$ , et le résultat de la convolution sera lui aussi de longueur  $N$ . Nous savons néanmoins que le vecteur final devra satisfaire  $N \geq N_y$ . Le résultat doit être strictement identique à celui obtenu par convolution linéaire. Il suffit donc de compléter les vecteurs  $x$  et  $h$  par des zéros afin que leur longueur atteigne  $N$ .

Le produit de convolution circulaire présente l'avantage de garder les mêmes longueurs de vecteurs lors de calculs de convolution, mais l'inconvénient est de rallonger le nombre de calculs.

### 3.2 Notation matricielle

Généralement un signal discret, peut être exprimée par un vecteur. Si  $x$  et  $y$  sont des signaux discrets, alors ils peuvent être représentés par les vecteurs  $x$  et  $y$ . La convolution peut être décrite par une opération matricielle.

On définit une matrice  $\mathbf{H}$  de taille  $N_y \times N_x$  telle que :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H} \mathbf{x} \quad (2.11)$$

Où  $\mathbf{H}$  est un *opérateur* linéaire. Cet opérateur, parce qu'il est linéaire, peut être représenté par une matrice de *Toeplitz*.

#### 3.2.1. Les matrices de Toeplitz

L'équation (2.9) nous montre que  $\mathbf{H}$  doit être construite à partir de la réponse impulsionnelle  $h$ . le produit de la ligne  $i$  de la matrice  $\mathbf{H}$  par le vecteur  $x$  doit conduire à  $y_i$ . Il s'ensuit que les éléments  $h_{i,j}$  de  $\mathbf{H}$  sont de la forme  $h_{i-j}$ . On notera que si  $j$  est plus grand que  $i$ , alors  $h_{i,j} = 0$ . La réponse impulsionnelle  $h$  étant définie sur  $Nh$  points.

Dans le cas de la *convolution linéaire*, la matrice de toeplitz de  $h$  s'écrit :

$$H = \begin{bmatrix} h_0 & 0 & 0 & \mathbf{K} & 0 \\ h_1 & h_0 & 0 & \mathbf{K} & 0 \\ \mathbf{K} & h_1 & h_0 & 0 & \mathbf{K} \\ h_{N_h-1} & \mathbf{K} & h_1 & h_0 & 0 \\ 0 & h_{N_h-1} & \mathbf{K} & h_1 & h_0 \\ 0 & 0 & h_{N_h-1} & \mathbf{K} & h_1 \\ 0 & 0 & 0 & h_{N_h-1} & \mathbf{K} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N_h-1} \end{bmatrix} \left| \begin{array}{l} N_y \text{ lignes} \end{array} \right. \quad (2.12)$$

$N_x$  colonnes : matrice rectangulaire

Dans le cas de la *convolution circulaire*, la matrice de Toeplitz s'écrira:

$$H_c = \begin{bmatrix} h_0 & 0 & 0 & \mathbf{K} & 0 & h_{N_h-1} & \mathbf{K} & h_1 \\ h_1 & h_0 & 0 & \mathbf{K} & 0 & 0 & h_{N_h-1} & \mathbf{K} \\ \mathbf{K} & h_1 & h_0 & 0 & \mathbf{K} & 0 & 0 & h_{N_h-1} \\ h_{N_h-1} & \mathbf{K} & h_1 & h_0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{N_h-1} & \mathbf{K} & h_1 & h_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_{N_h-1} & \mathbf{K} & h_1 & h_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_{N_h-1} & \mathbf{K} & h_1 & h_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N_h-1} & \mathbf{K} & h_1 & h_0 \end{bmatrix} \left| \begin{array}{l} N_y \text{ lignes} \end{array} \right. \quad (2.13)$$

$N_y$  colonnes : matrice carrée

Lorsque la réponse impulsionnelle  $hn$  est variante, il en résulte une matrice  $\mathbf{H}$  légèrement différente de la matrice de toeplitz classique, ou n lignes contient les éléments de  $h_n$  ordonnées de la même manier que la matrice de toeplitz:

$$H_V = \begin{bmatrix} h_{0,0} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ h_{1,1} & h_{1,0} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & h_{2,1} & h_{2,1} & 0 & \dots \\ h_{N_h-1, N_h-1} & \dots & h_{N_h-1,1} & h_{N_h-1,0} & 0 \\ 0 & h_{N_h, N_h-1} & \dots & h_{N_h,1} & h_{N_h,0} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & h_{N_x-1, N_h-1} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N_x, N_h-1} \end{bmatrix} \left| \begin{array}{l} N_y \text{ lignes} \end{array} \right. \quad (2.14)$$

$N_x$  colonnes

L'indice  $\nu$  signifie variante.

Généralement, avant la profondeur de transition  $dc$  on a un régime permanent (paramètres de la DRF sont constants) où la matrice  $H$  est une matrice de Toeplitz. Au delà de  $dc$  on rentre dans le régime de rugosité, synonyme de variation des paramètres de la DRF (où la matrice  $H$  résultante est une pseudo matrice de Toeplitz). Ceci nous suggère une combinaison des deux matrices précédentes. On appelle le résultat une matrice « semi-variante ».

D'où la matrice  $H$  sera alors :

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c}
 \mathbf{dc} \\
 \cdots \\
 H\nu \equiv
 \end{array}
 \left[ \begin{array}{ccccc}
 h_{0,0} & 0 & 0 & \mathbf{K} & 0 \\
 h_{1,1} & h_{0,0} & 0 & \mathbf{K} & 0 \\
 h_{2,2} & h_{1,1} & h_{0,0} & \mathbf{K} & 0 \\
 \hline
 h_{3,3} & h_{3,2} & h_{3,1} & h_{3,1} & 0 \\
 \mathbf{K} & \mathbf{K} & \mathbf{K} & h_{N_h-1,1} & h_{N_h,0} \\
 h_{N_h-1,N_h-1} & \mathbf{K} & \mathbf{K} & \mathbf{K} & h_{N_h,1} \\
 0 & h_{N_h,N_h-1} & \mathbf{K} & \mathbf{K} & \mathbf{K} \\
 0 & 0 & \mathbf{K} & \mathbf{K} & \mathbf{K}
 \end{array} \right]
 \begin{array}{c}
 \\
 \\
 \\
 \text{Ny lignes} \\
 \\
 \\
 \\
 \\
 \end{array}
 \end{array}
 \quad (2.15)$$

$N \times$  colonnes

### 3.2.2. Inversion de matrice et conditionnement

À la condition que  $H^{-1}$  existe. On définit le *conditionnement d'une matrice* par le *nombre de conditionnement*, noté  $\text{cond}(H)$  et s'exprimant ainsi :

$$\text{cond}(\mathbf{H}) = \sqrt{\frac{|\lambda_{\max}|}{|\lambda_{\min}|}} \quad (2.15)$$

Où  $\lambda_{\max}$  et  $\lambda_{\min}$  sont respectivement les valeurs propres maximale et minimale de  $H$ . Plus ce nombre est grand devant 1, plus le système est instable. Une petite variation des données entraîne une grande erreur sur la solution.

## 4. PROBLEMES MAL POSES

On dit qu'un problème est bien posé :

- i) la solution existe.
- ii) elle est unique.

iii) elle dépend continûment des données.

On dit que le problème est *mal posé* si l'une des trois conditions n'est pas résolu. Ceci revient à un mauvais conditionnement de la matrice  $\mathbf{H}$ .

#### 4.1. Résolution de l'équation de convolution

Avec le formalisme matriciel que nous venons de voir, on peut écrire l'équation de convolution très simplement :

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

Une solution formelle de cette équation serait :

$$\mathbf{x} = \mathbf{H}^{-1} \mathbf{y} \quad (2.17)$$

On notera alors que  $\mathbf{H}$  n'est pas une matrice carrée, elle est donc non inversible, donc la manière de résoudre l'équation est d'utiliser la convolution circulaire (la matrice de toeplitz de  $h$  est carrée et donc inversible).

En pratique, nous avons à résoudre l'équation de convolution bruitée :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H} \mathbf{x} + \mathbf{b} \quad (2.18)$$

Si on applique la même méthode que précédemment à cette équation, on aura une estimation de  $\mathbf{x}$  qui aura l'expression :

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{H}^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{H}^{-1} \mathbf{b} \quad (2.19)$$

et de la même façon que la solution de l'équation (2.9),  $\hat{\mathbf{x}}$  est une solution non unique, car elle dépend fortement du bruit, et le mauvais conditionnement de  $\mathbf{H}$  amplifie dramatiquement le bruit [30].

L'équation (2.18) peut être résolue par les moindres carrés [1, 2, 31], qui se base sur la minimisation de la quantité suivante :

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{H} \hat{\mathbf{x}}\|^2 \quad (2.20)$$

Où  $\mathbf{H} \hat{\mathbf{x}}$  représente le signal reconstruit.

On obtient donc la solution suivante :

$$\hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{y} \quad (2.21)$$

Cette méthode nous donne aussi une solution dépendant fortement du bruit, 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.

Il nous faut donc définir des critères sur la solution recherchée afin de limiter le nombre de solutions à celles physiquement acceptables, ce qui s'appelle « stabiliser le problème », tout en assurant la cohérence des résultats. Il s'agit de garantir la proximité de la solution choisie avec la solution idéale.

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*.

## 4.2. Régularisation d'un problème mal posé

Régulariser un problème revient à faire l'hypothèse qu'on peut pas obtenir la vraie solution uniquement à partir des données, et que la connaissance de la réponse impulsionnelle, qui a dégradé le signal d'origine, ne permet de définir qu'une classe de solutions *mathématiquement possibles*. Cette classe contient les solutions physiquement acceptables.

L'apport d'information par la régularisation constitue un choix assez libre selon les caractéristiques que l'opérateur souhaite privilégier pour la solution recherchée. Cette notion de « choix de la solution » indique donc que la solution trouvée n'est pas la seule possible, mais une de celles qui sont acceptables.

### 4.2.1 Formulation de la régularisation

La formulation générale de la régularisation s'exprime par le critère suivant à optimiser

$$\Delta = \Delta_1(x, \hat{x}_0) + \alpha \Delta_2(x, \hat{x}_\infty) \quad (2.22)$$

Où :  $\Delta_1$  représente le critère des moindres carrés (2.20).

$\alpha$  : paramètre de régularisation.

$\Delta_2(x, \hat{x}_\infty)$  : terme de régularisation et  $\Delta_2$  limite l'espace de solutions mathématiquement à une espace particulier.

$\hat{x}_0$  la solution obtenue lorsque  $\alpha = 0$ , et  $\hat{x}_\infty$  correspondant à  $\alpha$  tend vers l'infini.

La régularisation consiste à trouver une solution intermédiaire entre les deux solutions extrêmes  $\hat{x}_0$  et  $\hat{x}_\infty$ . On doit donc chercher le paramètre de régularisation  $\alpha$  tel que le critère  $\Delta$  soit minimal.

La principale difficulté dans l'application d'une méthode de régularisation à un problème particulier et la détermination du paramètre de régularisation lui-même.

Le terme  $\alpha \Delta_2(x, \hat{x}_\infty)$  sera appelé *terme de régularisation* et sa valeur *régularité du signal*. Nous nous intéressons dans le cadre de ce travail, à la *régularisation de Miller* [32,33] (voir annexe 1).

#### 4.2.2. Choix du paramètre de régularisation

Le rôle du paramètre de régularisation  $\alpha$  est fondamental puisque la qualité de la restauration dépendra fortement de son influence par rapport à celle du bruit, de l'opérateur  $\mathbf{D}$  choisi (voir annexe 1) et de la réponse impulsionnelle [34].

Nous allons présenter la méthode de *validation croisée généralisée*, qui découle de la *validation croisée* simple [2, 35,36] (voir annexe 2).

Une régularisation entraîne une analyse d'un problème mal posé par le biais d'un problème bien posé. La solution sera stable mais elle n'est qu'une approximation du problème initial (mal posé). en fait, pour éviter les difficultés liées au calcul de l'inversion direct, nous nous tournons vers des solutions itératives.

## 5. LES METHODES ITERATIVES DE DECONVOLUTION

Elles ont généralement l'avantage de ne pas imposer le calcul direct d'opérateurs inverses, et de permettre le choix de l'information *a priori* que l'on apporte. Les paramètres et les contraintes sont facilement ajustables au cours du traitement [37]. Ces algorithmes itératifs sont adaptés à une grande variété de signaux [38] caractérisés par :

- Dégradation linéaire ou non.
- Système variants et invariants.
- Bruit corrélé ou non.

### 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 [39,40]. Pris dans sa forme originale, il s'exprime ainsi :

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + (y - \mathbf{H} x_n) \\ x_0 = y \end{cases} \quad (2.23)$$

Le vecteur  $x_n$  est en quelque sorte une solution intermédiaire entre les solutions initiale  $x_0$  et final  $x_\infty$ . On peut montrer que l'algorithme de Van Cittert converge vers une solution  $x_\infty$  équivalente à celle obtenue par l'inversion directe [29] :

$$x_\infty = \mathbf{H}^{-1}y \quad (2.24)$$

### 5.1.1 Régularisation de l'algorithme de Van Cittert

Comme dans les méthode non-itératives, l'algorithme de Van Cittert original conduit à une solution instable si le problème est mal conditionné. Il faudra d'une manière ou d'une autre introduire une régularisation si l'on souhaite obtenir une solution bornée.

La première étape consiste à remplacer 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 Miller s'écrit alors :

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + [\mathbf{H}^T y - (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D}) x_n] \\ x_0 = \mathbf{H}^T y \end{cases} \quad (2.25)$$

Le fait de régulariser l'algorithme de base ne suffit pas pour obtenir une solution acceptable physiquement. En particulier la solution n'est pas toujours positive, ce qui est gênant pour un profil de concentration ou une image numérique.

### 5.1.2 Contraintes dures appliquées à un signal

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*

Les contraintes les plus communément utilisées sont le suivant :

- Contrainte de positivité

Lorsqu'on veut imposer à un signal d'être positif, on peut par exemple le tronquer de telle sorte que les composantes négatives soient ramenées à 0. L'opérateur de positivité  $\mathbf{P}$  est alors tel que :

$$\mathbf{P}x = \frac{x + |x|}{2} \quad (2.26)$$

Si on souhaite plutôt effectuer un repliement des composantes négatives, alors l'opérateur de contrainte de positivité sera l'opérateur valeur absolue :

$$\mathbf{P}x = |x| \quad (2.27)$$

- *Contrainte de support*

Supposons que le signal  $x$  soit connu pour être nul en dehors d'un certain domaine  $[s_1, s_2]$ , 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.

$$\mathbf{S}x = \begin{cases} x & \text{si } s_1 \leq x \leq s_2 \\ 0 & \text{Sinon} \end{cases} \quad (2.28)$$

*Composition des plusieurs contraintes*

Si on dispose de plusieurs informations distinctes sous forme de contraintes, on peut appliquer les différents opérateurs quelque soit leur ordre puisqu'ils sont commutatifs :

$$\mathbf{P} \mathbf{S} x = \mathbf{S} \mathbf{P} x = \mathbf{C} x \quad (2.29)$$

## 5.2. Introduction de la régularisation de Miller et contraintes dures dans l'algorithme de Van Cittert

Les contraintes que nous venons de voir peuvent être appliquées aussi bien aux signaux résultant de la déconvolution par inversion directe que sur les solutions « intermédiaires » des algorithmes itératifs. Dans l'algorithme de Van Cittert, il suffit de remplacer  $x_n$  par  $\mathbf{C} x_n$  avant de calculer  $x_{n+1}$  :

$$\begin{cases} x_{n+1} = \mathbf{C} x_n + (y - \mathbf{H} \mathbf{C} x_n) \\ x_0 = y \end{cases} \quad (2.30)$$

En combinant les contraintes dures avec la régularisation de Miller, mis au point par B.Gautier et R.Prost [1, 29, 41], et que nous avons utilisé dans nos déconvolutions, l'algorithme de Van Cittert régularisé deviendra donc:

$$\begin{cases} x_{n+1} = \mathbf{C} x_n + \mu_n [\mathbf{H}^T y - (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D}) \mathbf{C} x_n] \\ x_0 = \mathbf{H}^T y \end{cases} \quad (2.31)$$

$\mu_n$  est un scalaire ajusté à chaque itération de façon à optimiser la rapidité de la convergence [38]. Cet algorithme a prouvé sa fiabilité et sa robustesse pour un large éventail de signaux [36, 41, 42,43].

## 6. LES DIFFERENTS SIGNAUX-TYPE UTILISES :

Afin de donner l'organigramme de la procédure de déconvolution, nous avons besoin de connaître les signaux typiques rencontrés en traitement de signal et notamment en SIMS.

Ces signaux imitent du mieux possible un éventuel signal mesuré expérimentalement.

### 6.1. Gaussiennes

La fonction gaussienne est l'un des cas analytiques le plus simple et le plus intéressants. On peut rencontrer des profils gaussiens dans le cas de diffusion Fickienne : la diffusion d'un  $\delta$ -dopage pendant un temps  $t$  à une température donnée aboutit en principe à un profil parfaitement gaussien d'écart type :

$$\sigma = \sqrt{2Dt}$$

Où  $D$  est le coefficient de diffusion ne dépendent pas de la concentration de l'élément diffusants [1].

La fonction gaussienne présente l'avantage d'être entièrement caractérisée par son écart- type  $\sigma$  qui définit une largeur à mi-hauteur

$$FWHM = 2.336 \cdot \sigma$$

### 6.2. Créneaux

Le créneau est une autre forme caractéristique qui constitue un cas intéressant de déconvolution SIMS, puisqu'il représente les couches de dopant dans une matrice avec interfaces abruptes. La dégradation résultant de la mesure d'un créneau de concentration porte essentiellement sur les fronts montant et descendant, qui apparaissent exponentiels sur le profil mesuré.

### 6.3. Deltas-Dopage

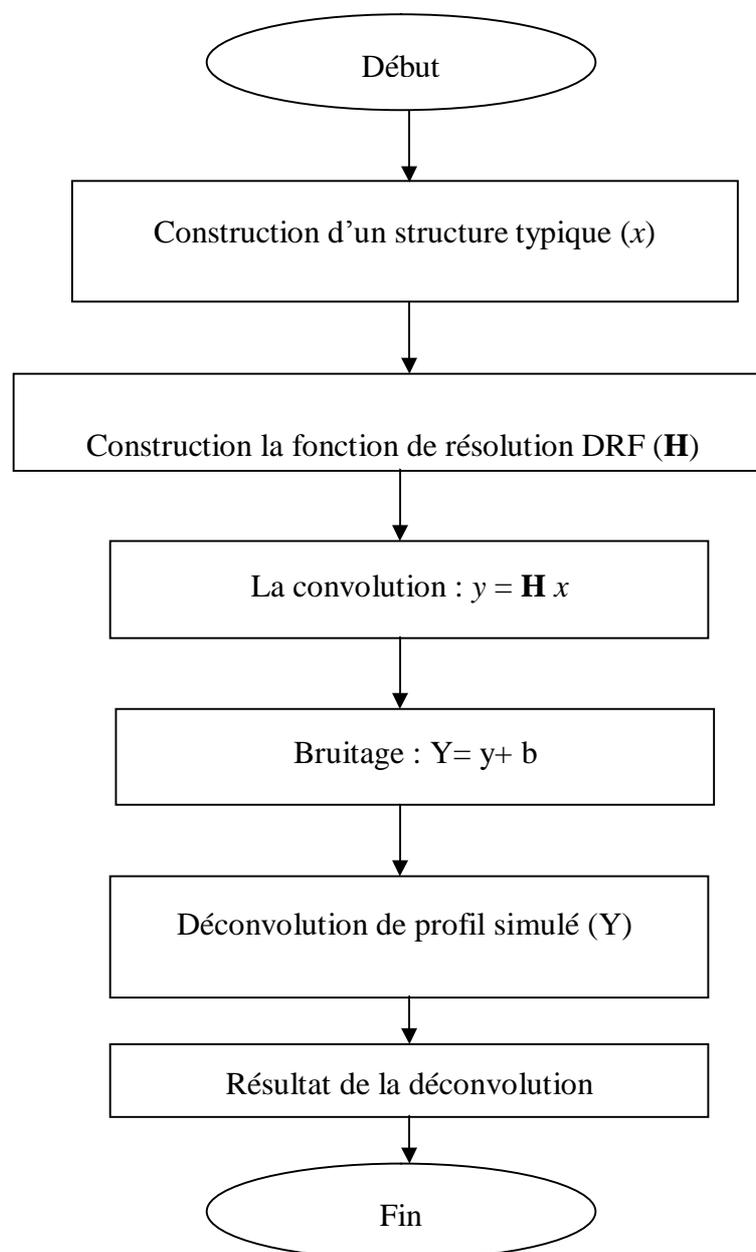
Un delta-dopage représente la plus petite structure que l'on puisse simuler ou mesurer. C'est aussi la structure la plus difficile à restaurer. Nous allons tout d'abord étudier la déconvolution des deltas-dopage dans son aspect le plus théorique, c'est-à-dire en prenant

comme signal de départ un Dirac numérique. Nous appellerons cette technique *l'auto-déconvolution*.

## 7. L'AUTO-DECONVOLUTION [2]

Le principe de la simulation de ce problème de déconvolution consiste à choisir une réponse impulsionnelle  $h$  et à lui rajouter une composante de bruit. En fait, le profil simulé est équivalent à celui que l'on aurait fabriqué en convoluant un Dirac numérique avec la réponse impulsionnelle, puis en rajoutant du bruit (voir annexe3).

La procédure de convolution/ déconvolution est défini par l'organigramme ci-dessous :



**Figure 2 :** organigramme de convolution / déconvolution

## 8. CONCLUSION

Nous avons essayé dans ce chapitre de donner une vision claire de la technique de déconvolution afin que l'algorithme que nous avons utilisé par la suite puisse être replacé dans son contexte. Nous avons vu que la réponse impulsionnelle (noyau de la convolution) peut être constante où variante suivant les profils en profondeurs provenant des analyses SIMS.

Nous avons apporté différents types d'informations : régularisation, contraintes dures.

Les profils SIMS constituent donc un cas de convolution sévère et le bruit de mesure implique de prendre certaines précautions. Nous accordons une attention particulière lors de l'apparition de la rugosité.

## 1. INTRODUCTION

Dans cette partie de travail, nous disposons d'une technique de déconvolution (l'algorithme de *Van Cittert avec régularisation de Miller est contrainte dure*), et le deux formes de la résolution en profondeur. Elles seront appliquées selon l'influence des phénomènes parasites.

Dans un premier temps, nous allons appliquer la méthode de déconvolution à des profils SIMS simulés. Nous montrerons, en particulier pourquoi il est nécessaire d'effectuer une déconvolution variante.

Nous appellerons le « profil réel » le profil initial (construit analytiquement). Le « profil simulé » est le profil tel qu'il résulterait de l'analyse SIMS (convolué et bruité) et le « profil déconvolué » est le résultat de la déconvolution.

Dans un second temps, Nous traiterons également de résultats expérimentaux (deltas-dopage). Nous abordons finalement les performances ultimes de la déconvolution.

## 2. DECONVOLUTION DE PROFILS SIMULES

Dans cette section, nous allons examiner les performances de l'algorithme de déconvolution appliqué aux signaux typiques rencontrés en SIMS où la réponse impulsionnelle est constante (cas classique) ou bien variante.

Les profils utilisés dans nos simulations seront construits avec un pas d'échantillonnage  $T_e=1\text{Å}$ , ce qui nous permet théoriquement, en l'absence de bruit, de restaurer des structures de l'ordre de  $2\text{Å}$  d'épaisseur [2].

Nos simulations sont effectuées avec un rapport signal/bruit (SNR) de 40dB. En effet ce niveau de bruit correspond à une situation expérimentale plausible où 4 décades de signal sont disponibles [1].

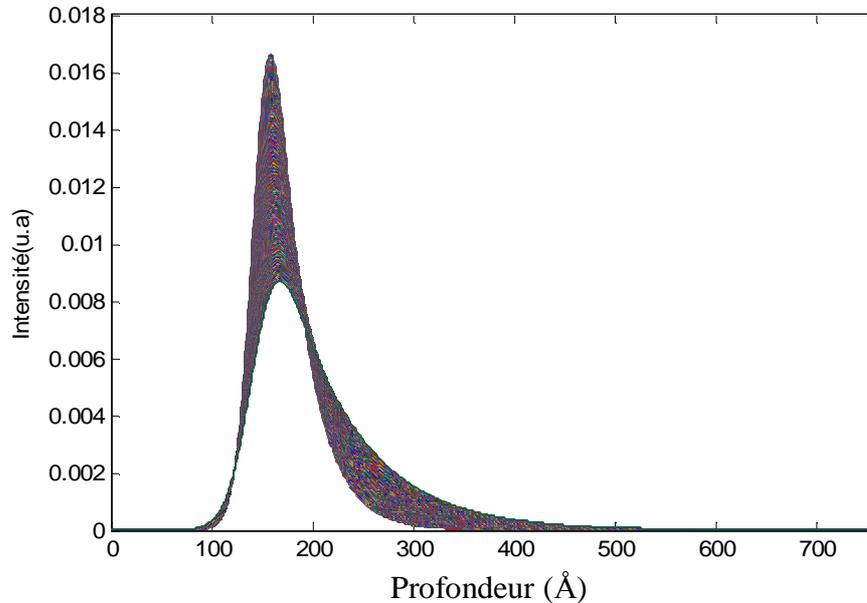
### 2.1. Paramètres de la DRF variante :

Les paramètres de la DRF variante que nous avons utilisé ont été prélevés des mesures de G. Mancina [2] ; où il a disposé de profils en profondeur d'un échantillon dont le cratère a été érodé de manière non uniforme et dont les conditions expérimentales étaient les suivantes : énergie d'impact  $E_p=1750\text{ eV}$ , angle incidence  $\theta=49^\circ$  [2].

De plus ces paramètres ont été tirés du fittage du premier et du dernier pic. Il a été supposé que leur variation suit une loi affine :

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{u\text{ in}} = 6.8\text{\AA}, \lambda_{d\text{ in}} = 29.0\text{\AA}, \sigma_{\text{in}} = 12.8\text{\AA} \text{ (1}^{\text{er}} \text{ pic)} \\ \lambda_{u\text{ f}} = 8.7\text{\AA}, \lambda_{d\text{ f}} = 70.0\text{\AA}, \sigma_{\text{f}} = 18.3\text{\AA} \text{ (4}^{\text{eme}} \text{ pic)} \end{array} \right.$$

La DRF variante est représentée sur la figure (3.1) :



**Figure (3.1) :** la forme analytique de la DRF variante

Dans notre cas, notre système est variant. Donc H dépend à l'origine de la profondeur (la forme de la DRF varie en fonction de la profondeur). Il s'agit de diviser les paramètres de la DRF selon la profondeur, chaque point de la profondeur a sa propre DRF. Ces DRF ont la même position (figure3.1).

## 2.2. Gaussiennes

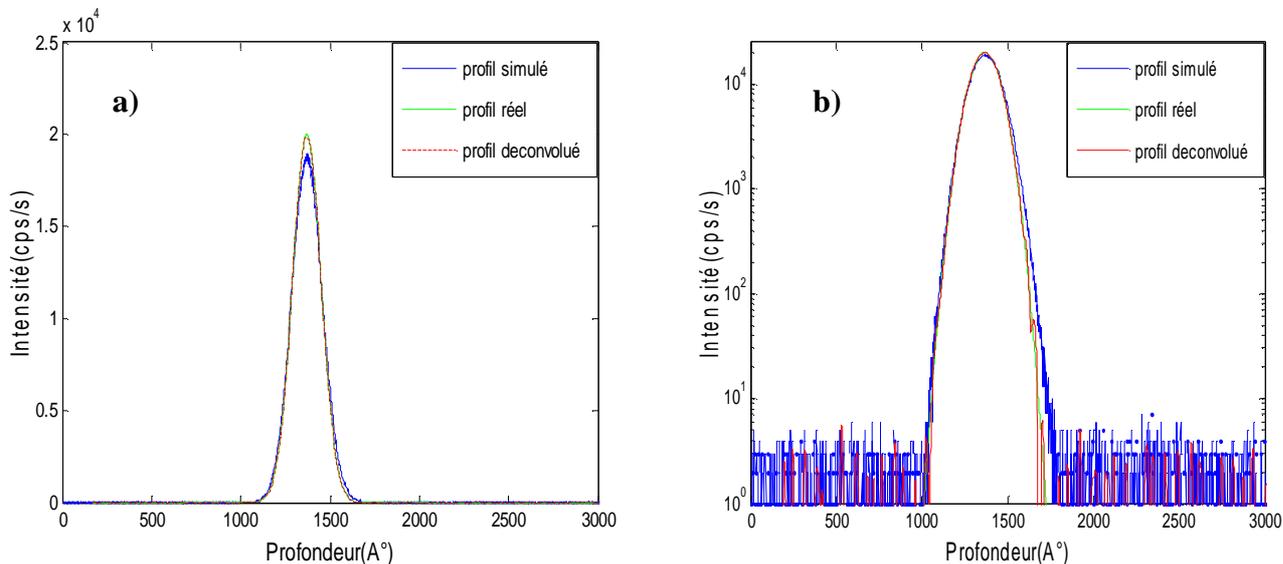
Nous avons conduit toute une série de déconvolutions dans lesquelles les gaussiennes originales ont été convoluées avec des DRF dont les valeurs des paramètres mentionnés au paravent. Nous allons présenter trois exemples de déconvolution, l'un où la DRF est constante, le deuxième où la DRF est semi-variante et le dernier cas où on a une DRF variante

### 2.2.1. Le cas d'une DRF constante

Nous allons présenter deux exemples de déconvolution, l'un où l'écart-type de la gaussienne est plus grand que celui de la DRF, et l'autre où il est plus petit.

• **Gaussiennes d'écart-type  $s=80\text{\AA}$  avec DRF de ( $l_u=6.8\text{\AA}$ ,  $l_d=29\text{\AA}$ ,  $s=12.8\text{\AA}$ ,  $s_{\text{Tot}}=32.42\text{\AA}$ ).**

La figure 3-2 montre le résultat de cette déconvolution avec un paramètre de régularisation de 0.01, la restauration est totalement achevée à 200 itérations. On distingue de part et d'autre de la gaussienne, dans les parties où le bruit est dominant, des petites oscillations du même ordre de grandeur que le bruit.

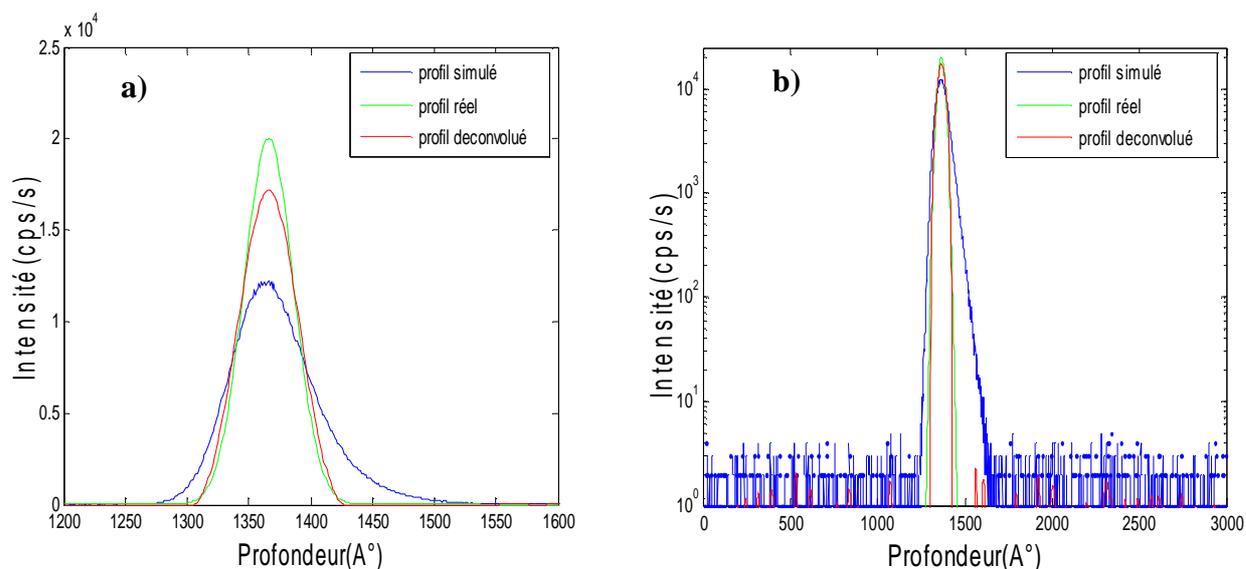


**Figure 3.2:** Déconvolution d'une gaussienne d'écart type plus important que celui de la DRF (profil simulé peu différent du profil réel). Résultats pour  $\alpha=0.01$ ,  $n=200$  itérations.

**a)** Représentation linéaire de la déconvolution de la gaussienne. **b)** Représentation logarithmique.

De même, la représentation logarithmique nous montre une bonne restauration sur toute la dynamique du signal.

• **Gaussienne d'écart-type  $s=20$  Å avec DRF de  $s_{Tot}=32.42$  Å**



**Figure 3.3 :** Déconvolution d'une gaussienne d'écart-type plus faible que celui de la DRF.

Paramètre de régularisation  $\alpha=0.1$ , résultat pour 200 itérations.

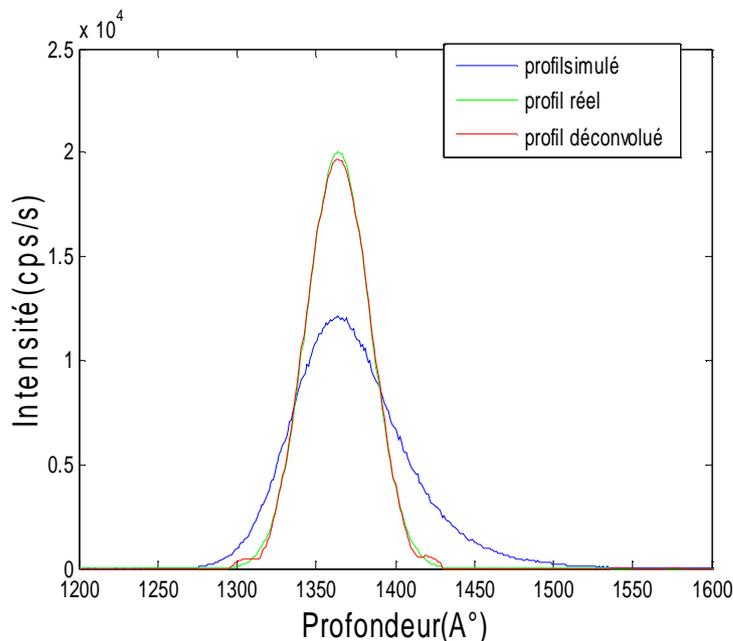
**a)** Représentation linéaire. **b)** Représentation logarithmique

La figure 3.3 représente cette déconvolution. Les meilleurs résultats sont obtenus pour un paramètre de régularisation de 0.1 à 1.

On voit que le profil déconvolué n'est pas complètement restauré, contrairement à celui du cas précédent.

Plusieurs remarques peuvent être faites sur cette déconvolution :

- la restauration n'est pas complète, même après 500 itérations (figure 3.4).
- les « pieds » de la gaussiennes ne sont pas correctement restaurés. Sur le profil déconvolué, on observe sur le tracé linéaire un point anguleux lorsque le signal tombe à zéro.
- A 500 itérations, apparition des artéfacts de part et d'autre du profil déconvolué. Ces artéfacts sont typiques des profils gaussiens (figure 3.4).



**Figure 3.4 :** déconvolution d'une gaussienne d'écart-type plus faible que celui de la DRF. Paramètre de régularisation  $\alpha=0.001$ .  $n=500$  itérations.

Plus le nombre d'itération augmente plus le point anguleux se transforme en « lobes » parasites non négligeables au pied du profil déconvolué.

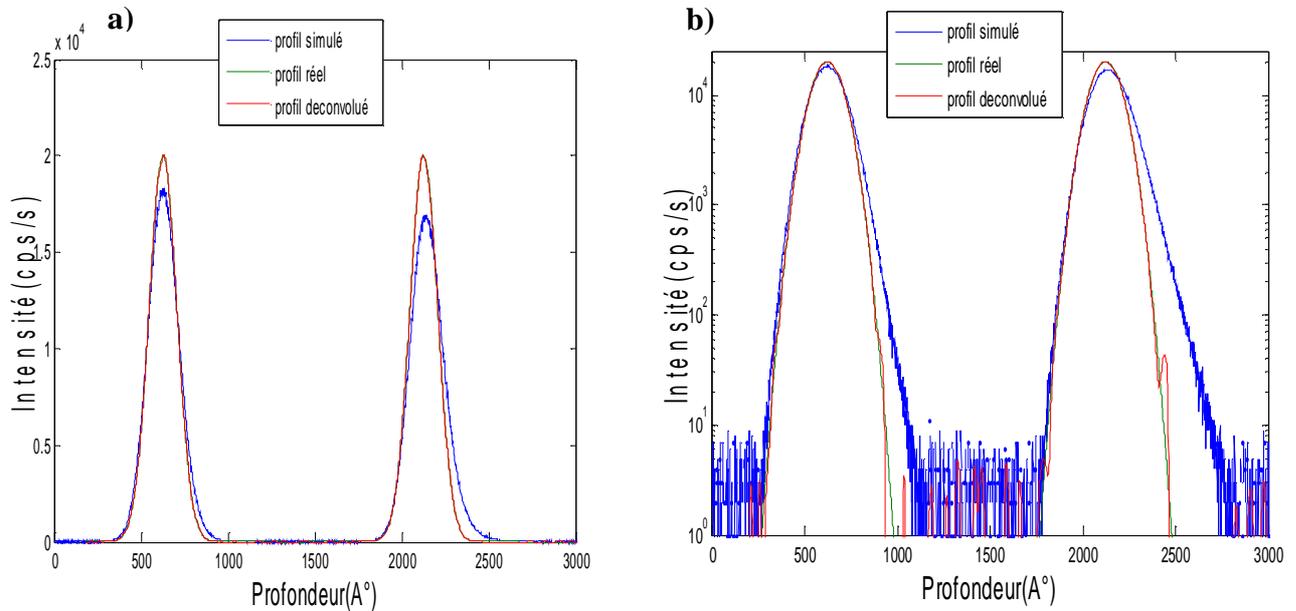
- i) Quand  $n$  augmente (pour  $\alpha$  fixe), on voit apparaître d'autres lobes.
- ii) Quand  $n$  est fixe et  $\alpha$  est croissant, on voit ces lobes se résorber progressivement.

Remarquons que ces lobes pourraient être le résultat d'une mauvaise distribution de la dose.

### 2.2.2. Le cas d'une DRF variante

La figure 3.5 donne un exemple de la déconvolution de deux gaussiennes de  $\sigma=80$  Å, convoluée par une fonction de résolution variante.

Sur l'échelle logarithmique la restauration du profil est parfaite. Toutefois on observe l'élargissement de profil simulé. Ceci est dû à la variation des paramètres de la DRF ; qui augmentent de façon conséquente avec la profondeur. En effet cette observation rend compte de l'importance de la dégradation engendrée par les phénomènes parasites.



**Figure3-5** : déconvolution de deux gaussiennes avec une DRF variante. Résultat pour :  
*a) et b)  $s=80\text{Å}$ ,  $a=0.01$  et  $n=200$  itérations.*

### 2.2.3. Le cas d'une DRF semi-variante

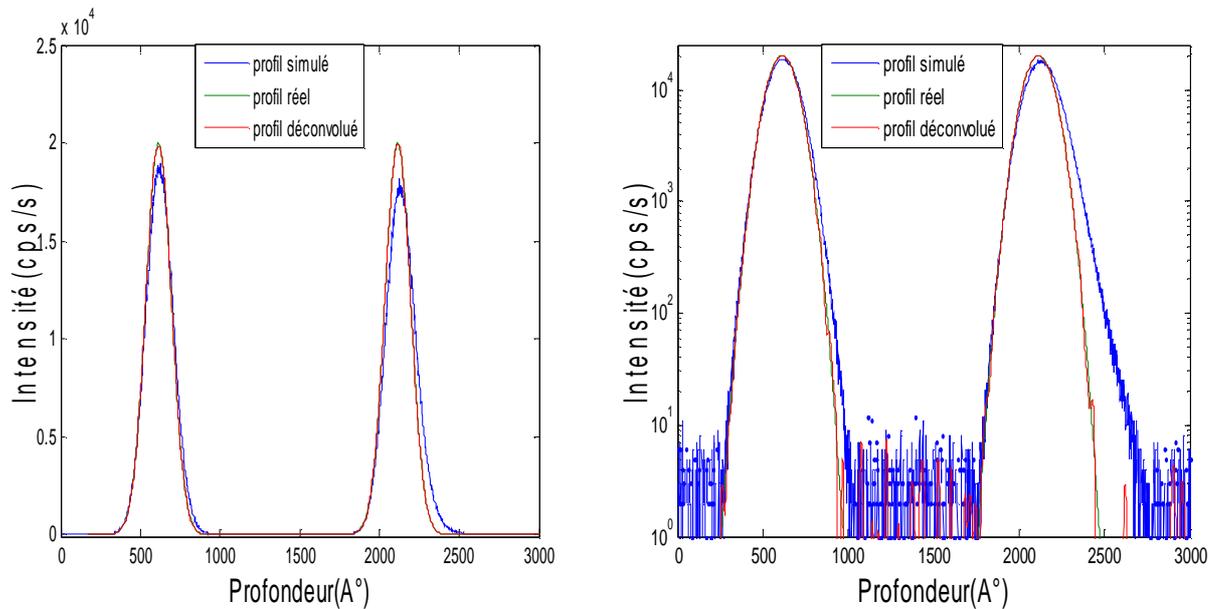
On a supposé au cas précédent que les variations commencent au début de la mesure.

Mais physiquement les variations commencent à une profondeur de transition  $dc$  où les phénomènes parasites se développent, dans notre exemple on a choisi  $dc=1500\text{Å}$ .

Sur la figure 3.6, on voit clairement qu'avant  $dc$  on obtient les mêmes profils que dans le cas classique.

La combinaison d'une DRF constante (avant la dégradation de la résolution en profondeur) et d'une DRF variante (là où les variations des paramètres sont importants) constitue a priori une solution adéquate pour une restauration complète du profil.

Il est évident que le choix du paramètre  $dc$  est déterminant d'un point de vue numérique.



**Figure 3.6:** déconvolution de deux gaussiennes avec une DRF semi-variante. Résultat pour  $s=80\text{\AA}$ ,  $a=0.01$  et  $n=200$  itérations, représentation logarithmique et linéaire.

#### 2.2.4. Estimation des performances générales de la déconvolution variante

Nous avons dans un premier temps repéré les largeurs à mi-hauteur des profils simulés et déconvolués afin d'apprécier les performances de l'algorithme en matière de restitution de la largeur du profil initial, ainsi que le gain de résolution obtenu.

Les résultats des gaussiennes d'écart-type  $80\text{\AA}$  avec un paramètre de régularisation  $\alpha=0.01$  et nombre d'itération  $n=200$  sont résumés sur le tableau I.

Notons que la convolution par une DRF variante modifié les profils de manière appréciable, par exemple une gaussienne de FWHM de  $186.88\text{\AA}$  présente après convolution une FWHM de  $221.82\text{\AA}$ .

On voit que la FWHM de profil déconvolué est identique (ou presque) au profil initial, ici on constate que l'algorithme de déconvolution restaure le profil réel d'une manière tout à fait satisfaisante.

Un autre terme désigne directement de quel facteur est améliorée la résolution en profondeur après déconvolution, c'est le *gain* en résolution qui est défini par le rapport de la largeur de la fonction mesurée (dans ce cas simulé) sur celle de la fonction déconvoluée.

D'après le tableau I, on trouve que le gain est le même dans chaque cas.

Le gain dans le cas classique est de **1.06**, par contre dans le cas du variant il est de **1.17**. Mais on a les deux gains dans le cas d'une DRF semi-variante.

dc (Å)	• Une gaussienne		• Deux gaussiennes	
	0	1500	0	1500
FWHM(x)	• 186.88	• 186.88	• 186.88	• 186.88
FWHM(y)	• 221.82	• 206.23	• 206.57 • 221.05	• 196.94 • 210.75
FWHM (x <sub>est</sub> )	• 189.07	• 187.10	• 188.18 • 187.49	• 186.82 • 187.36
FWHM(y) Cas classique	• 199.02		• 197.23 • 198.23	
FWHM (x <sub>est</sub> ) Cas classique	• 186.92		• 184.83 • 185.59	

**Tableau I :** la FWHM d'un signal et de deux gaussiennes.  $\alpha=0.01$ ,  $n=200$

Aussi pouvons-nous énoncer la conclusion suivante :

- ☞ *Si la DRF est constante* : on obtient presque les même FWHM des profils mesurés et déconvolués.
- ☞ *Si la DRF est variante* : les FWHM augmentent avec la profondeur de la gaussienne sur le signal mesuré. Cependant les FWHM restent les mêmes sur le profil déconvolué. On observe ainsi une compensation de l'augmentation progressive de l'écart-type des gaussiennes par la diminution de la FWHM des profils déconvolués.
- ☞ *Si la DRF est semi-variante* : avant la valeur dc on est dans le cas d'une DRF constante. Après cette valeur on revient au cas d'une DRF variante. L'augmentation du gain dans ce dernier cas est un avantage certain de cette combinaison par rapport au deux cas précédents.

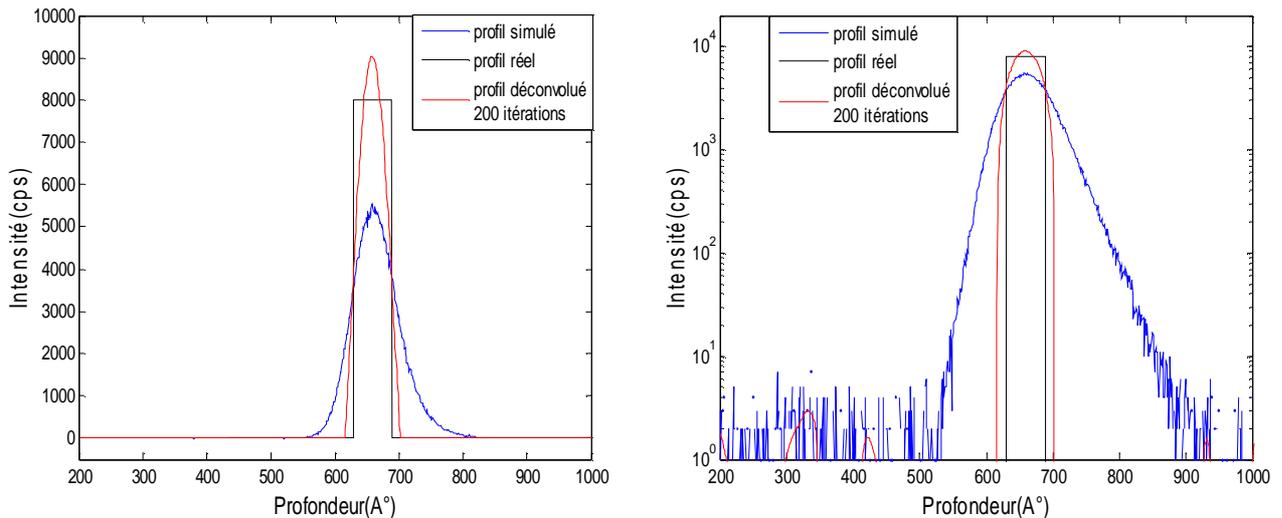
### 2. 3. Créneau de 60Å de largeur, convolué par une DRF constante et variante

Un profil en créneau est particulièrement riche en hautes fréquences (on sait que la DRF est un filtre passe-bas) et il est normal que l'algorithme de déconvolution ne puisse pas le restituer complètement. Un créneau de concentration aura donc de fortes chances d'être restitué sous la forme d'une courbe en cloche, caractérisée par exemple par sa FWHM.

### 2.3.1. Cas d'une DRF constante

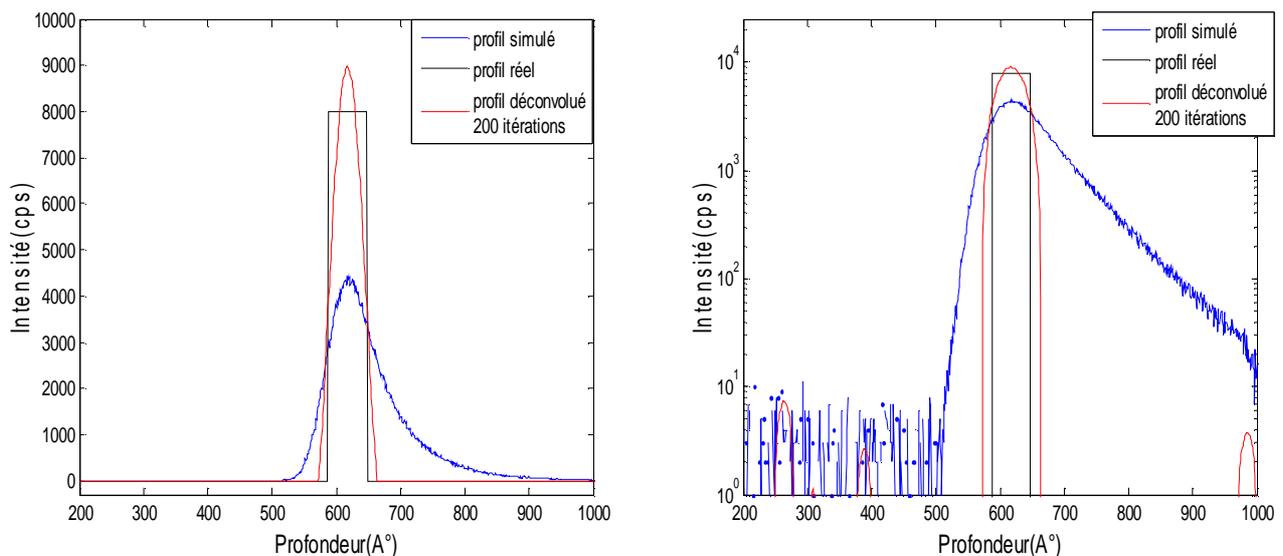
Ce créneau de faible largeur peut encore être considéré comme une structure fine dans le sens où les fronts montant et descendant simulés s'étendent sur pratiquement toute la longueur du profil. L'intérêt de déconvoluer un créneau de cette taille est donc de restaurer sa largeur réelle.

La figure 3.7 nous montre l'exemple de la déconvolution d'un créneau de 60Å, convolué par une DRF d'écart-type  $\sigma_{Tot} = 32.42\text{Å}$ .



**Figure 3.7 :** Déconvolution d'un créneau de 60Å de largeur convolué par une DRF d'écart-type  $\sigma_{Tot} = 32.42\text{Å}$ .  $SNR = 35\text{dB}$ ,  $\alpha = 0.01$ ,  $n = 200$  itérations. Représentation linéaire et logarithmique.

### 2.3.2. Cas d'une DRF variante



**Figure 3.8 :** déconvolution d'un créneau de 60Å de largeur convolué par une DRF variante.  $SNR = 35\text{dB}$ ,  $\alpha = 0.01$ ,  $n = 200$  itérations. Représentation linéaire et logarithmique.

La largeur du profil déconvolué peut être mesurée d'une manière simple. Les fronts du créneau ne sont pas complètement restaurés, mais sont suffisamment raides pour que l'on puisse supposer que la largeur du profil déconvolué soit presque la même que celle du profil réel. Comparons les largeurs des différents profils par leur FWHM (largeur à mi-hauteur) :

FWHM \ DRF	DRF constante	DRF variante
FWHM (y)	78.94 Å	92.16 Å
FWHM(x)	60 Å	60 Å
FWHM (xest)	54.25 Å	54.12 Å

**Tableau 2** : la FWHM de deux DRF (constante et variante)

Dans ces exemples, on voit clairement que la FWHM sous-estime la largeur du profil initial. La figure 3.8 montre que le profil déconvolué possède une forme étroite dans les hauts niveaux et plus évasée dans les bas niveaux (ce qui est visible sur le tracé linéaire). Cette forme particulière conduit à une légère surestimation du niveau de concentration par le profil déconvolué.

Dans les deux cas de la déconvolution classique et variante on obtient la même FWHM de profil déconvolué, malgré l'élargissement existant dans le profil simulé dans le cas de la déconvolution variante et la grande différence de la largeur de profil simulé (ce qui est visible sur le tracé logarithmique), ceci est dû à un choix judicieux de la DRF.

La contrainte de positivité s'applique sur pratiquement tout le profil déconvolué et élimine presque complètement les oscillations.

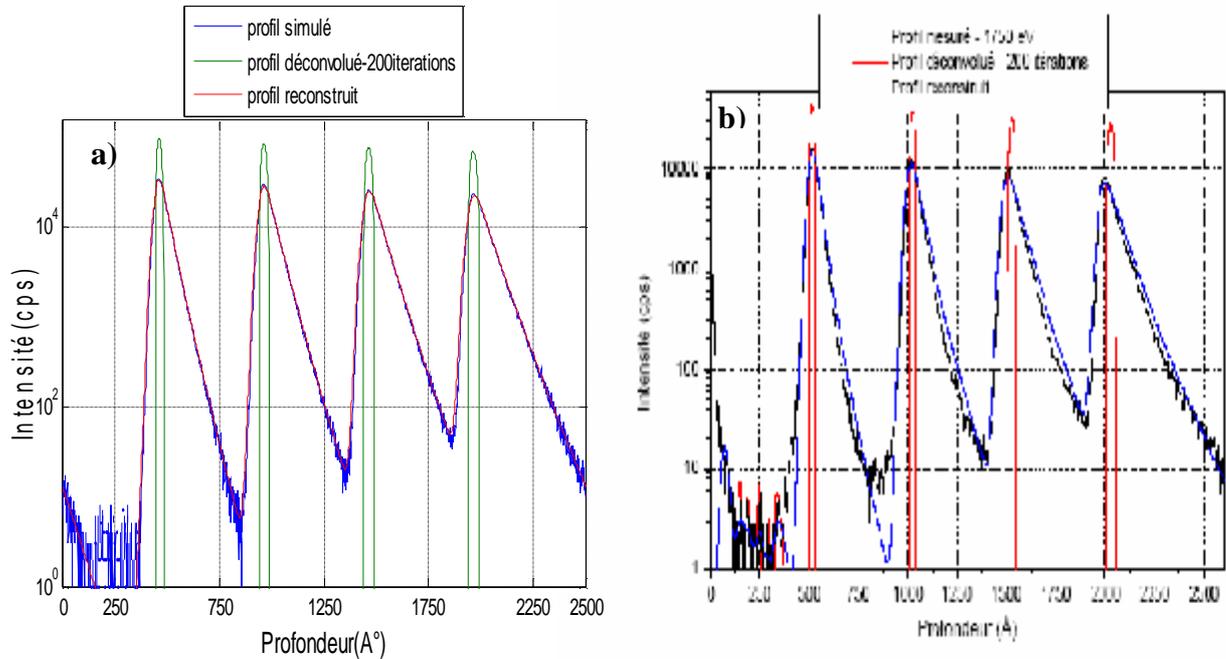
Un autre moyen d'estimer la qualité de la déconvolution est de comparer la pente des fronts de chaque profil. L'idéal serait de restaurer la pente infinie du profil réel. Dans cet exemple, nous comparons les fronts en prenant les abscisses des valeurs du profil à 90% du maximum et 10% du minimum. La distance séparant ces deux valeurs dans le cas d'une DRF constante est de 73Å pour le profil simulé, alors qu'elle n'est plus que de 29Å pour le profil déconvolué. On obtient donc un gain d'environ 2.5 sur cette longueur de queue de profil, qui peut être considéré comme un gain en résolution.

Dans le cas d'une DRF variante est de 134Å pour le profil mesuré, alors qu'elle n'est plus que de 30Å pour le profil déconvolué, on obtient donc un gain d'environ 4.5.

Par conséquent le gain obtenu dans le cas d'une DRF variante est plus meilleur que celui dans le cas d'une DRF constante.

## 2.4. Deltas -dopage

Nous avons procédé à la simulation de la déconvolution des quatre pics convolué par une DRF variante dans la mesure du possible dans les mêmes conditions que lors du profil expérimental (provenant également de l'étude de G. Mancina) [2], qui sont citées au paragraphe 2.1.



**Figure 3.9 :** Résultat de la déconvolution avec une DRF variante.  $\alpha=10^{-4}$ ,  $n=200$  itérations .a) cas simulé. b) cas mesuré [2].

Au début du profil il n'y a pas d'artéfacts, et par comparaison avec la figure b), on constate que la simulation donne presque exactement le même résultat que l'expérience.

Le profil reconstruit est le résultat de la convolution du profil déconvolué par la DRF.

On observe que le profil reconstruit par la simulation est bon par rapport à l'expérimentation, nous reviendrons plus loin pour approfondir cet aspect.

Suivant la figure a), la déconvolution conduisant à un profil très fin. De même on observe une croissance des largeurs des pics déconvolués avec la profondeur.

	<b>Pic1</b>	<b>Pic2</b>	<b>Pic3</b>	<b>Pic4</b>
<b>n</b>	200	200	200	200
<b>FWHM(y)</b>	59,30	67,50	76,31	84,55
<b>FWHM (<math>x_{est}</math>)</b>	26,85	30,37	34,09	36,70
<b>Gain en FWHM</b>	2,20	2,22	2,23	2,30
<b>n</b>	200	400	600	1000
<b>FWHM (<math>x_{est}</math>)</b>	26,85	26,30	26,62	26,42
<b>Gain en FWHM</b>	2,20	2,56	2,86	3,20

**Tableau 3** : différents gains en résolution de concentration de chaque pic.

A partir du tableau 3 on peut retenir:

i) pour n constant le FWHM (du profil déconvolué) augmente entre le 1<sup>ère</sup> pic et le 4<sup>ème</sup> pic. Le gain demeure quasi constant.

ii) en augmentant n, on arrive à maintenir les FWHM peu variable tout en améliorant le gain.

La coupure d'un profil à une profondeur où le signal n'est pas nul peut conduire à des problèmes, elle peut rendre la dose d'une telle structure incomplète.

Pour palier ce problème, nous avons choisi de diviser le signal à l'endroit où le bruit domine. Une faute de section dans cette région est moins critique [6].

### 3. DECONVOLUTION DE SIGNAUX MESURES « MULTI DELTAS-DOPAGE »

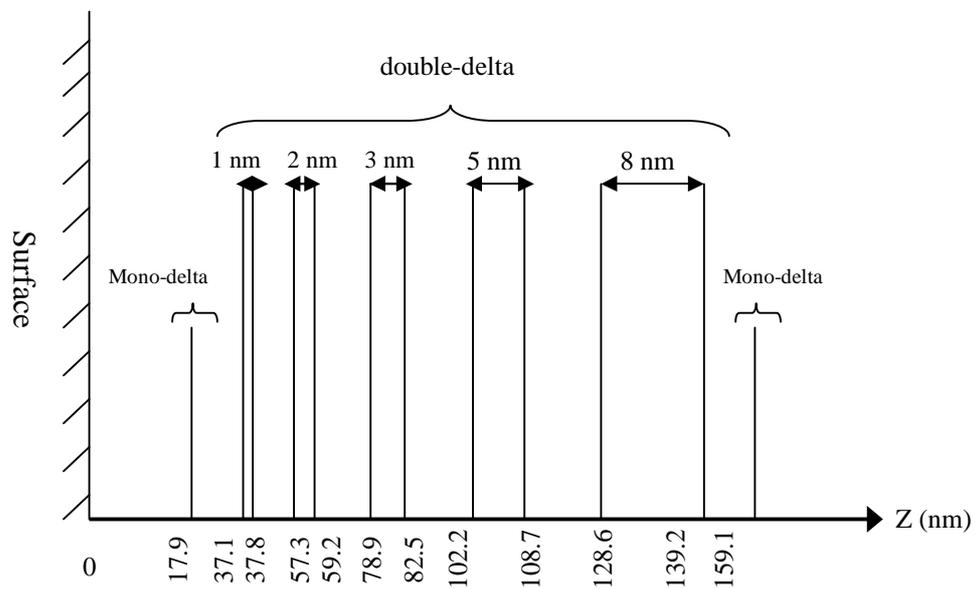
Les profils en forme de delta-dopage constituent des structures idéales pour appliquer une méthode de déconvolution puisque ce sont les profils les plus affectés par la convolution lors de l'analyse SIMS. Leur déconvolution donne une idée exacte de ce qu'on peut attendre de la résolution en profondeur tant sur le plan expérimental que numérique. De plus ils nous donnent une idée claire sur la dégradation des conditions expérimentales lors de l'analyse. C'est pourquoi nous nous sommes intéressés à ce type de profils.

Nous disposons d'un échantillon réalisé au LETI par RP-CVD (Reduced pressure-chemical vapor deposition) [47, 18]. C'est un multi delta- dopage de Bore dans le Silicium. Il comporte 5 double-delta dopages (2 couches séparées de 1, 2, 3, 5, 8 nm) encadrés par 2 mono-delta dopages, l'espace entre chaque couche étant de 20 nm (figure3.10).

Les profils mesurés sont réalisés à l'aide de l'instrument Cameca IMS 5f, où  $O_2^+$  a été utilisé comme source d'ions primaires au niveau de laboratoire de physique de la matière de l'INSA de Lyon. Il y a trois d'énergies sans et avec soufflage (Tableau 4).

Energie d'impact (keV)	Angle d'incidence (°)	Rugosité
0.5	54	Oui
0.5	44	Aucune
1	48	Oui

**Tableau 4** : différentes conditions d'analyses



**Figure 3.10** : structure de multi delta-dopages de bore dans Si.

### Organigramme

L'organigramme ci-dessous démontre les étapes du procédé de la déconvolution des profils expérimentaux.

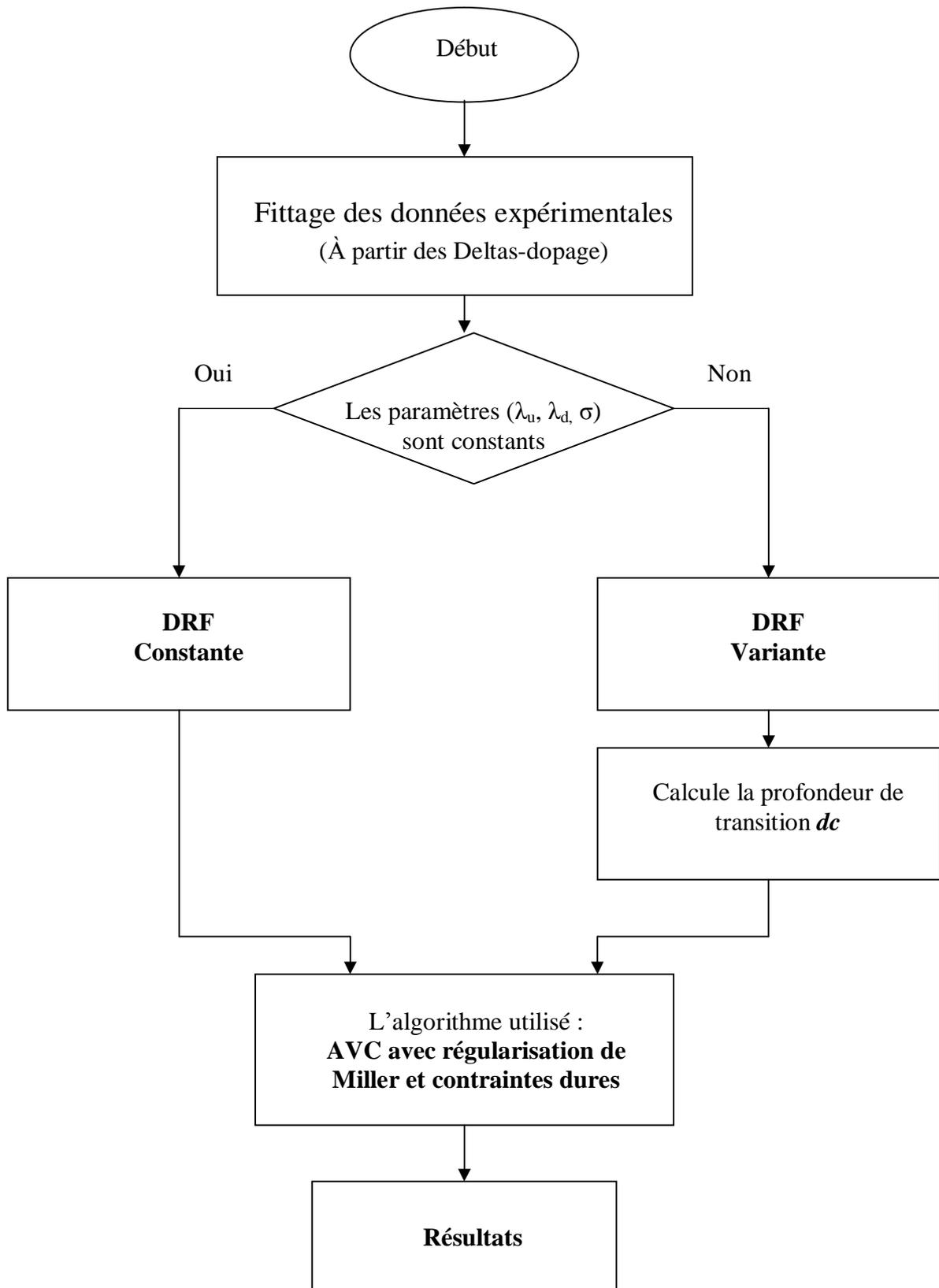


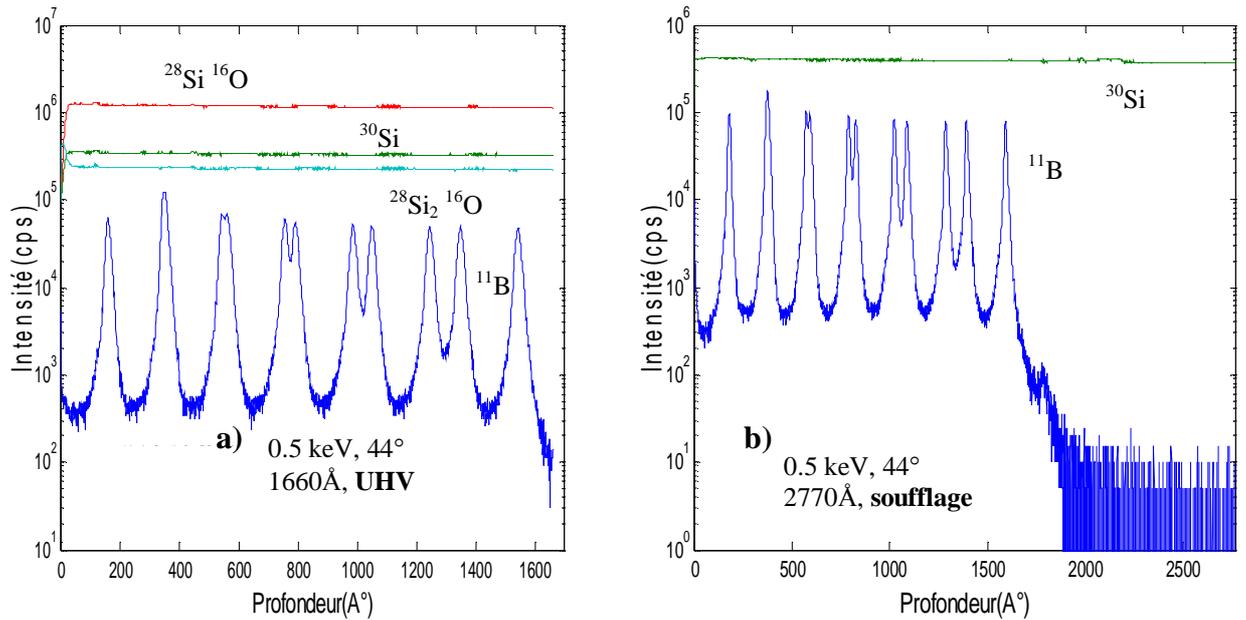
Figure 3.11: les différentes étapes de la déconvolution.

### 3.1. Déconvolution avec une DRF constante

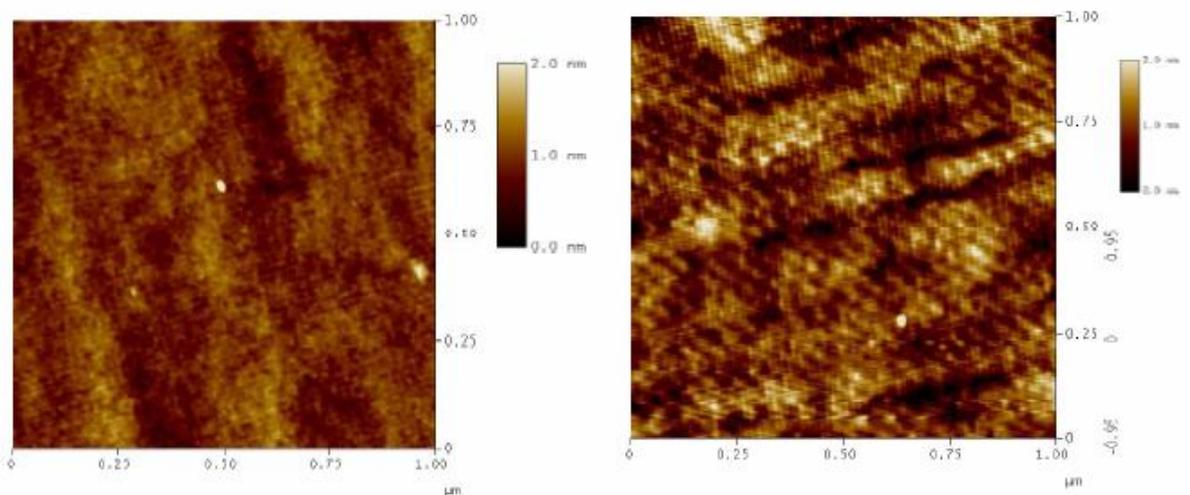
#### 3.1.1. Profils mesurés

D'après le tableau ci-dessus et pour 0.5keV 44°, aucune variation des signaux n'est observée (figure 3.12). Les paramètres de la DRF mesurés sur les 1<sup>er</sup>, 6<sup>eme</sup>, 7<sup>eme</sup> pics sont les même, dont ( $\lambda_u=6.3$ ,  $\lambda_d=8.2$ ,  $\sigma_g=4.8$ ) pour le cas a) et ( $\lambda_u=6$ ,  $\lambda_d=7$ ,  $\sigma_g=4$ ) pour le cas b).

Donc on peut considérer que les paramètres de la DRF obtenus sont constants.



**Figure 3.12 :** profils SIMS de l'échantillon delta-dopage pour une énergie d'impact 0.5keV, 44°. **a)** sans soufflage, **b)** avec soufflage.

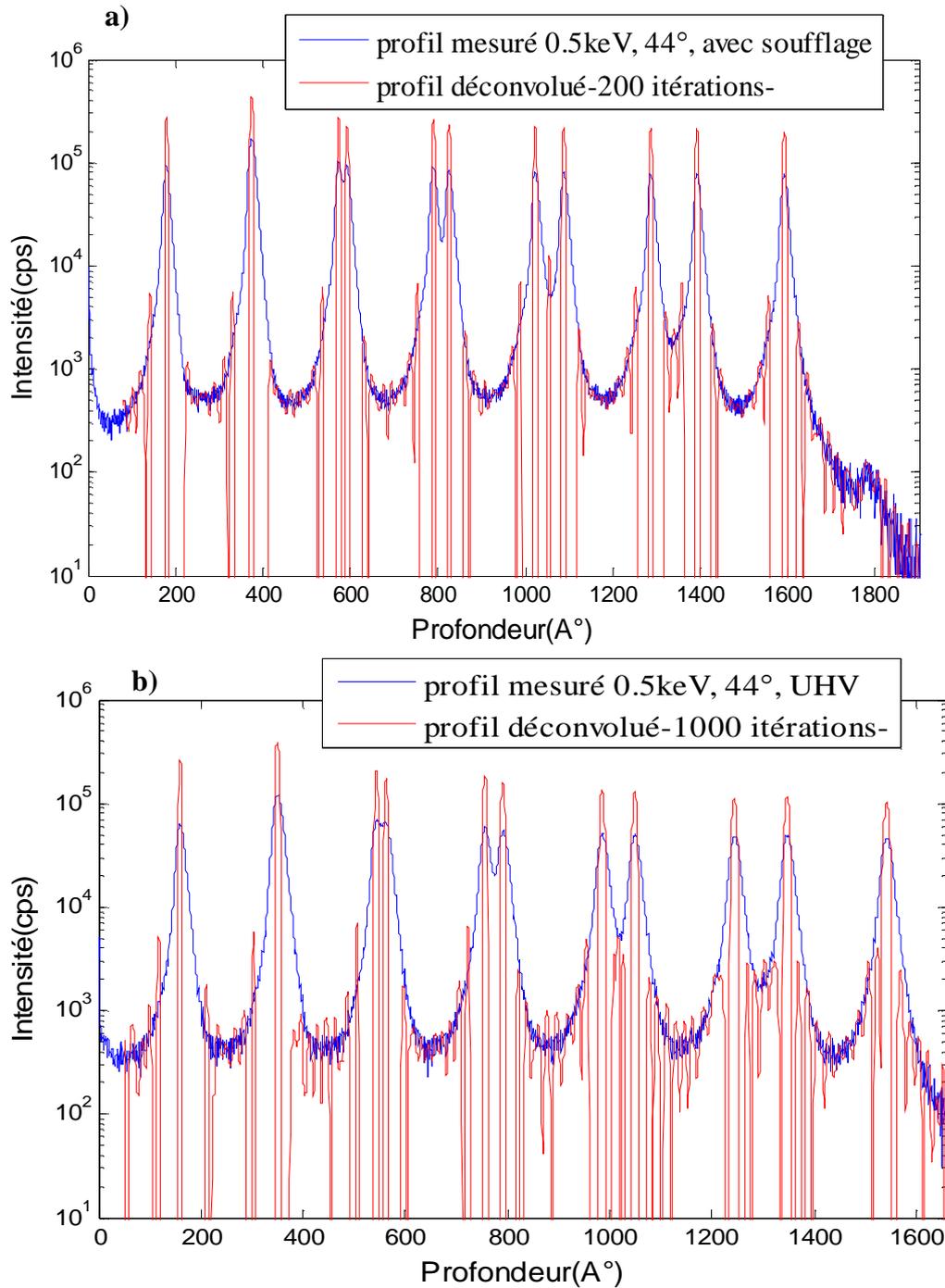


**Figure 3.13:** Image AFM ( $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ ) en fond de cratère SIMS (sans soufflage). 0.5 keV 44° [18].

L'analyse par AFM confirme que pour 0.5 keV la surface est relativement lisse et ne présente aucune rugosité supplémentaire.

### 3.1.2. Déconvolution du multi deltas-dopage. Profil en profondeur à 0.5 keV 44°, avec et sans soufflage

La figure 3.14 montre les résultats de la déconvolution du profil mesuré à 0.5keV, 44°.



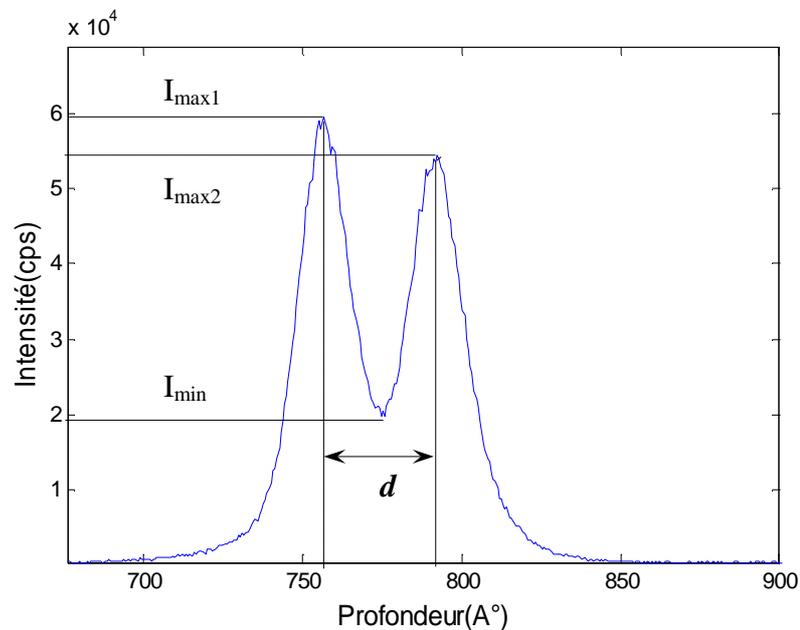
**Figure 3.14 :** résultat de la déconvolution à 0.5keV, 44°. **a)** avec soufflage :  $a=10^{-5}$ ,  $n=200$  itérations. **b)** sans soufflage :  $a=10^{-4}$ ,  $n=1000$  itérations.

Suivant la figure 3.14, le profil déconvolué nous montre une nette amélioration de la résolution en profondeur. Les  $\delta$ -dopages ne font plus que quelques angströms de large, et les pentes exponentielles ont été complètement supprimées. Quand aux quatre derniers doublets, la déconvolution les a totalement séparés, excepté le premier doublet. Ce qui nous a permis de discuter de la séparabilité de deux deltas-dopage adjacents dans le paragraphe suivant.

#### a) Séparation de deltas-dopage

Lorsque deux deltas-dopage sont trop proches, le mixage collisionnel entraîne une superposition des deux couches lors de la mesure (figure 3.15). On peut distinguer deux types de superposition des pics mesurés :

- Dans un premier cas, on discerne la présence des deux couches grâce aux maxima qui sont bien visibles. on peut alors définir, un taux de séparation  $T = \frac{I_{Max} - I_{Min}}{I_{Max}}$  de départ [1,2]. La déconvolution devra ici améliorer ce taux, et à mieux aboutir à la séparation complète des deux couches.
- Dans le deuxième cas, la mesure ne fera apparaître qu'un seul pic. Selon les conditions de mesure et le niveau de bruit, la déconvolution aboutira ou non à la distinction des deux couches (séparation complète ou partielle).



**Figure (3.15) :** Evaluation de la résolution en profondeur à partir de la mesure de deux couches très proches.

Les deux profils qu'on a contiennent deux deltas-dopage séparés d'une distance  $d$  égal à 10, 20, 30, 50, 80Å. Chaque profil a été déconvolué avec de différents paramètres de régularisation et nombre d'itérations. Nous présentons les résultats pour chaque déconvolution :

- Pour  $d$  égal à 30 et 50 et 80Å les deux pics sont totalement séparés, le profil déconvolué évolue alors de la même manière que dans le cas d'un simple delta-dopage. On observe cependant que la hauteur des pics déconvolués peut être légèrement différente entre l'un et l'autre (quelques pour-cent seulement).

- pour  $d$  égal à 20Å, la séparation est partielle pour  $n = 200$  itérations, mais à partir de  $n=1000$  et  $\alpha = 10^{-4}$ , la séparation de deux pics est totale, on observe aussi que le front descendant du premier et le front montant du deuxième sont moins abrupts que les fronts extérieurs. Cette dernière caractéristique suggère que de l'information est perdue localement, à l'endroit où la superposition a eu lieu [2].

- pour  $d$  égal à 10Å la séparation des pics est impossible par déconvolution.

Augmenter le nombre d'itérations n'amène aucune amélioration. (La limite de séparation dans ce cas reste obscure pour cela d'autres informations seraient nécessaires).

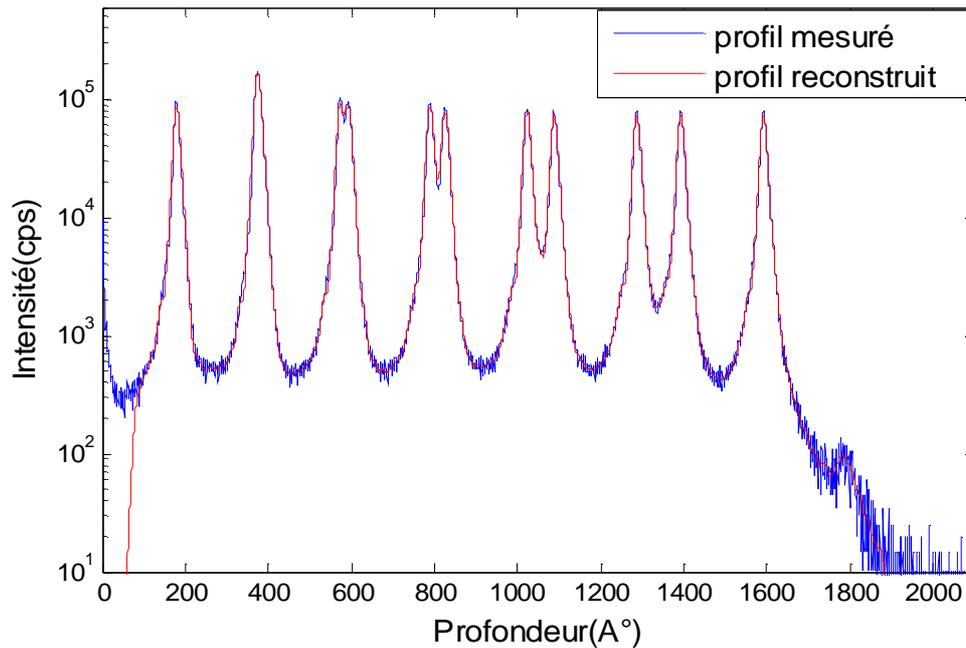
Le gain en résolution en profondeur est de 2.1 pour 200 itérations, et de 3.1 pour 1000 itérations dans le cas avec soufflage, et dans le cas sans soufflage est de 2 pour 1000 itérations. On constate que pour le même nombre d'itération et le paramètre de régularisation, le gain obtenu dans le cas avec soufflage est meilleur que dans le cas sans soufflage. De la comparaison entre les profils mesurés de ces deux analyses ressort que le soufflage améliore systématiquement la résolution par rapport au cas sans soufflage [18].

#### *Note sur la position des deltas-dopage*

Nous n'avons pas tenu compte de la position réelle des deltas dopage. Le *shift* total du profil mesuré résultant est donc mal connu mais il est constant dans tout le régime permanent, ce qui permet d'effectuer la déconvolution en choisissant arbitrairement la position de la DRF, puis d'ajuster *visuellement* le profil mesuré et le profil déconvolué.

#### ***b) Reconstruction du profil mesuré***

La reconstruction du profil est excellente, surtout pour les hauts niveaux de signal. Les écarts entre le profil mesuré et le profil reconstruit se situent principalement aux jonctions des pics de concentration, où le bruit est dominant (figure 3.16).



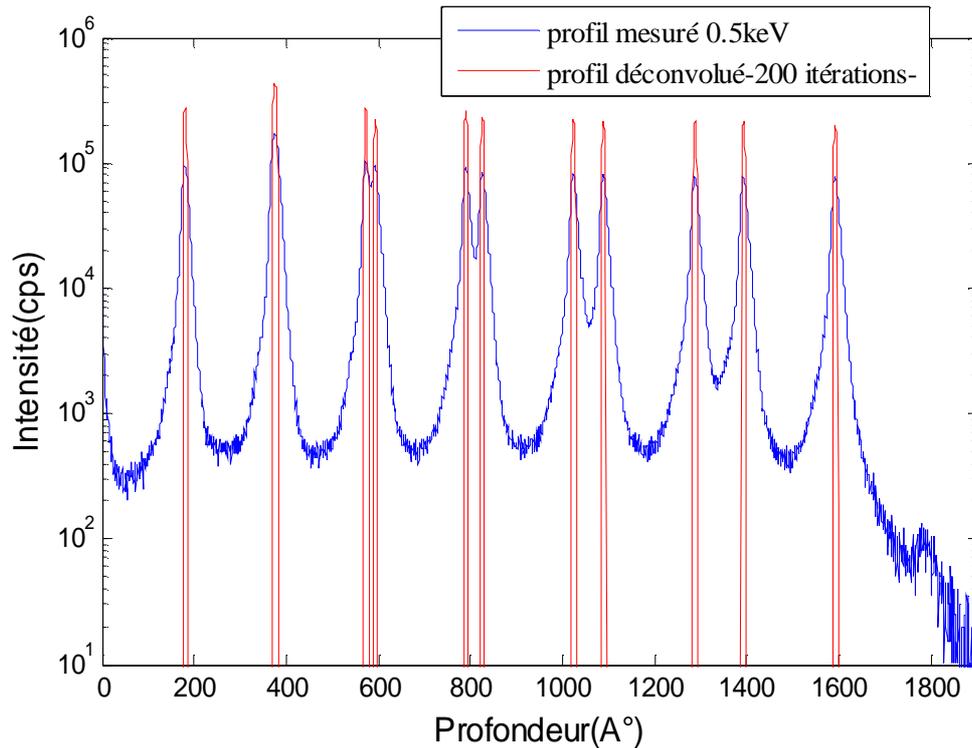
**Figure 3.16 :** *Reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué et de la DRF*

### 3.1.3. Utilisation de la contrainte de support

Dans notre cas, on peut démontrer que les artefacts présent aux bas du signal déconvolué, sont créés entièrement par le processus d'inversion et n'ont aucun rapport avec le signal original.

Pour éviter la présence des artefacts dans le profil déconvolué et l'obtention d'un signal propre, l'utilisation d'une contrainte de support peut être une solution (figure 3.17).

Notons cependant que l'interprétation des artefacts doit être prudente, surtout si leur dose n'est pas négligeable. Il ne faut surtout pas procéder à leur élimination systématique des profils. Un « artefact » qui tend à se décaler au cours de la déconvolution, peut finalement révéler une structure existante dans le profil réel mais est complètement masqué lors de la mesure ou une mauvaise répartition de la dose par la méthode de la déconvolution [2,6].



**Figure 3.17 :** Résultat de la déconvolution de l'échantillon LETI à 0.5 keV d'impact.

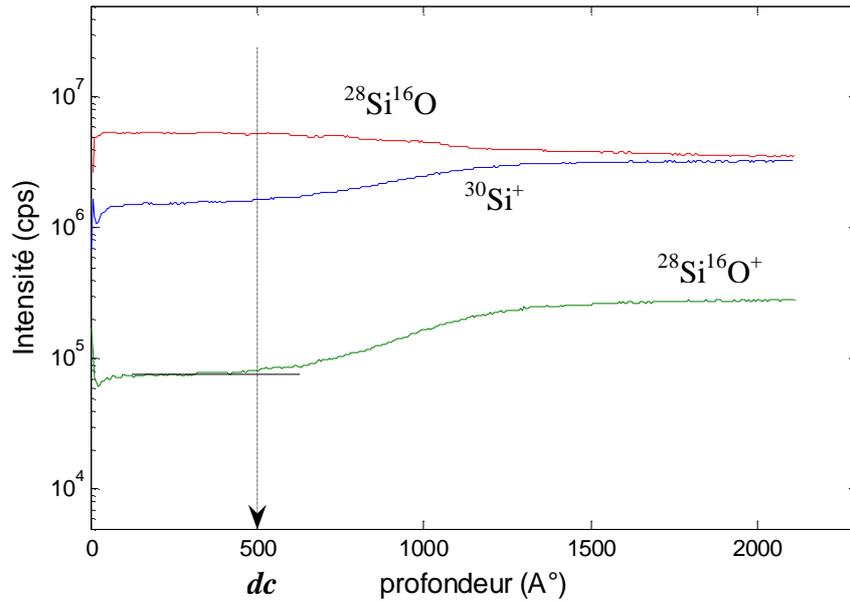
$a=10^{-4}$ ,  $n=200$  itérations avec l'utilisation d'une contrainte de support

### 3.2. Déconvolution variante

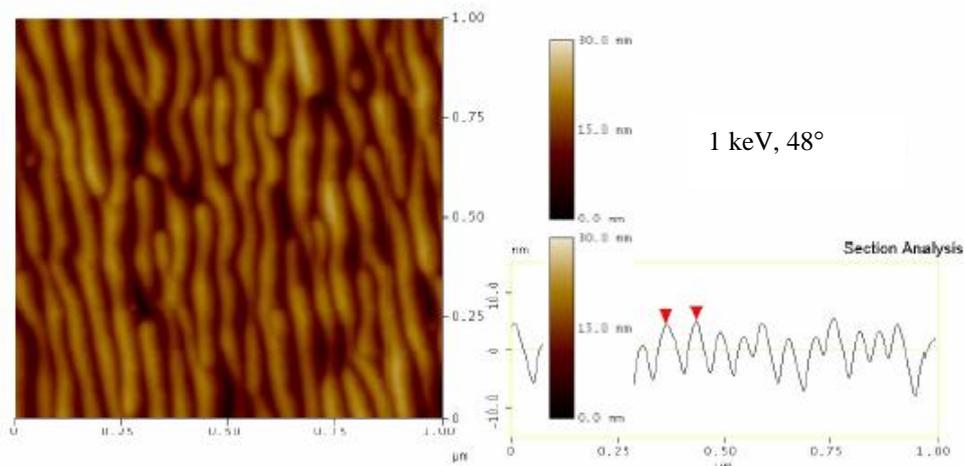
Dans cette partie nous allons traiter les profils SIMS expérimentaux par la *déconvolution variante*. Nous nous intéressons aux mesures où il y a un développement de la rugosité. Celle-ci apparaît lorsque entre autre les signaux de matrice subissent une variation.

Par exemple pour 1keV 48°, UHV, on remarque que les signaux de matrice Si commencent à varier (croissance pour  $^{28}\text{Si}^{16}\text{O}^+$ ,  $^{30}\text{Si}^+$  et décroissance pour  $^{28}\text{Si}_2^{16}\text{O}$ ) figure 3.18. Après cette phase de transition (*dc*), les signaux se stabilisent. Cette variation indique le début de développement de la rugosité.

Jiang et al [20] trouvent que cette profondeur est de 500 Å pour 1keV 48°, ce qui correspond au *dc* que nous avons estimé.



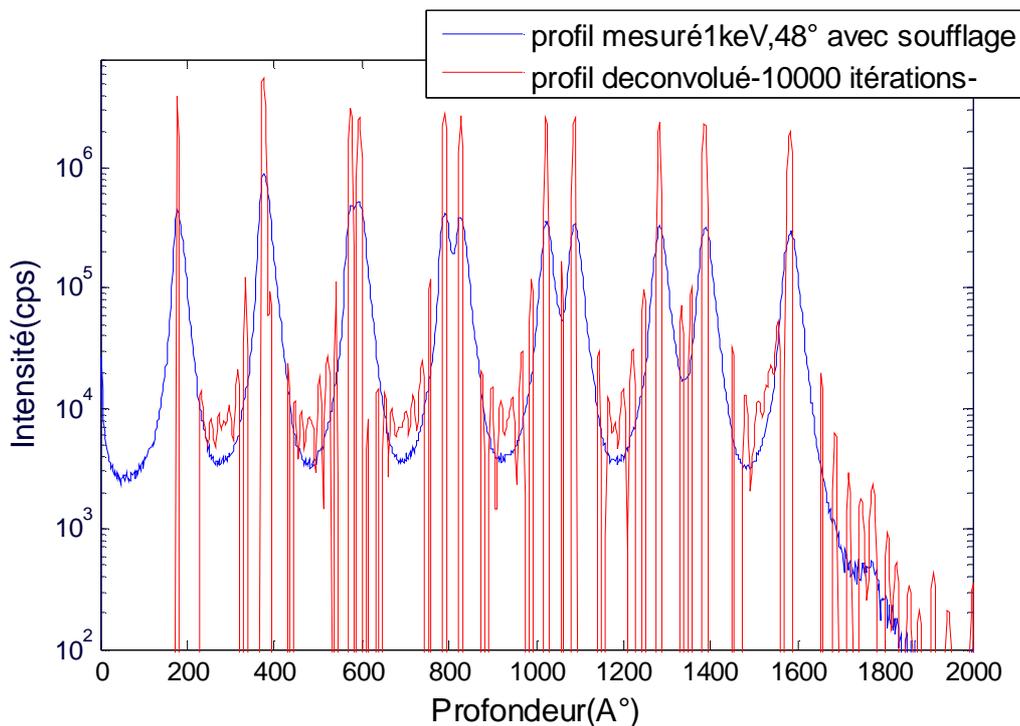
**Figure 3.18** : Variation des signaux de matrice en fonction de la profondeur, conditions d'analyse : 1keV, UHV et 48° d'angle incidence.



**Figure 3.19** : a gauche, images AFM ( $1\mu\text{m}\times 1\mu\text{m}$ ) en fond de cratère SIMS. A droite en haut l'amplitude maximale des ondulations et en bas l'analyse de section de chaque image pour différentes énergies d'impact et angles d'incidences sans soufflages d' $\text{O}_2$ , le sens du faisceau d' $\text{O}_2^+$  est de la gauche vers la droite. 1 keV 48° avec un cratère de 210 nm[18].

La figure 3.19 montre les images topographique ( $1\times 1$ )  $\mu\text{m}^2$  en fond de cratère pour une énergie d'impact 1keV et angle incidence 48°. La rugosité se manifeste sous forme d'ondulations régulières dans la direction perpendiculaire au faisceau d'ions incidents.

### 3.2.1. Déconvolution du multi deltas-dopage. Profil en profondeur à 1keV d'impact, 48°, avec soufflage



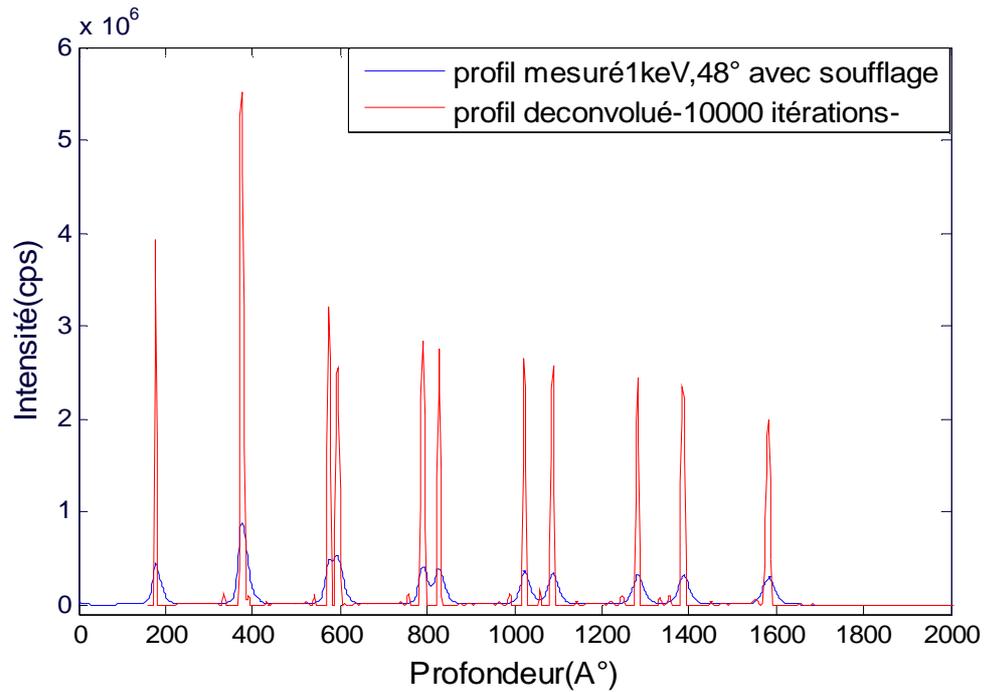
**Figure 3.20 :** Résultat de la déconvolution de l'échantillon LETI à 1keV d'impact, 48°, avec soufflage,  $Te=2.102$ .  $\alpha=10^{-4}$ ,  $n=10000$  itérations.

Les paramètres de la DRF sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{u\text{ in}} = 5.7\text{\AA}, \lambda_{d\text{ in}} = 11.9\text{\AA}, \sigma_{\text{in}} = 5.1\text{\AA} \text{ (1}^{\text{er}}\text{e pic)} \\ \lambda_{u\text{ f}} = 5.8\text{\AA}, \lambda_{d\text{ f}} = 12.1\text{\AA}, \sigma_{\text{f}} = 10.3\text{\AA} \text{ (dernier pic)} \end{array} \right.$$

La figure 3.20 représente le résultat de la déconvolution que nous avons effectué dans les mêmes conditions que précédemment ( $\alpha=10^{-4}$ ,  $n=1000$  itérations puis 5000, 10000) avec une profondeur de transition  $dc=600\text{\AA}$ , d'un échantillon qui été a analysé à 1keV, 48° angle d'incidence, avec soufflage et  $Te=2.102\text{\AA}$ . Le résultat est très satisfaisant.

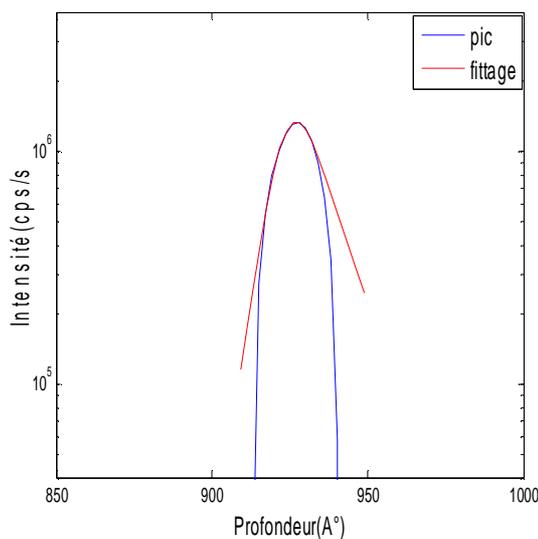
Le résultat est tout aussi saisissant lorsqu'il est présenté à échelle linéaire. Malheureusement l'échelle linéaire nous cache plusieurs détails du résultat surtout au bas niveau du signal (figure 3.21).



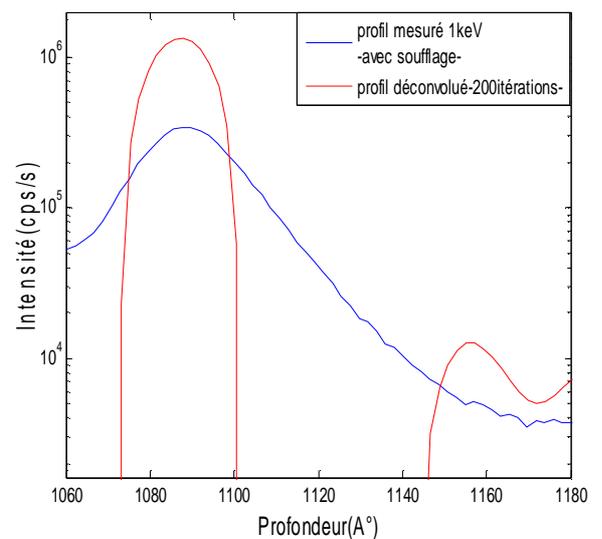
**Figure 3.21 :** Résultat de la déconvolution de l'échantillon LETI à 1 keV d'impact, 48°, avec soufflage,  $a=10^{-4}$ ,  $n=10000$  itérations, échelle linéaire.

### a) Description des pics déconvolus

Le fitage des pics déconvolus (figure 3.22) montre que ces derniers possèdent une forme gaussienne, tout au moins dans la partie haute du profil. Cet élargissement des structures à caractère gaussien, est plus ou moins corrigé en fonction du nombre d'itérations effectuées lors de la déconvolution.



**Figure 3.22 :** Fitage du pic # 9 par une fonction gaussienne



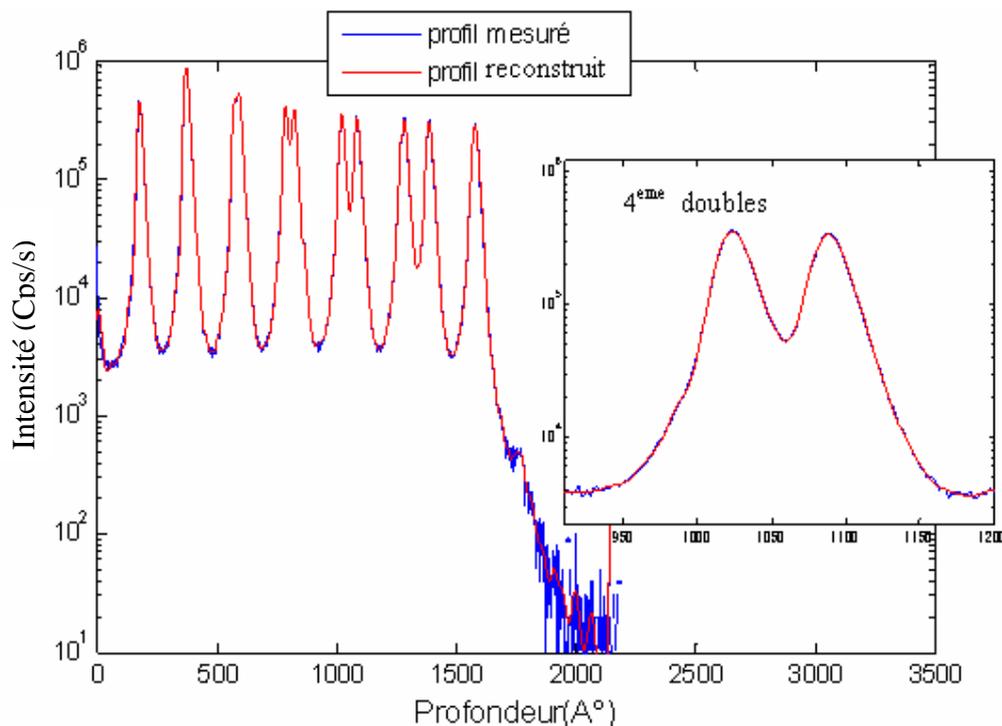
**Figure 3.23 :** Vue détaillée du pic # 9 mesuré et déconvolué

La figure 3.23 montre le détail de la déconvolution et permet d'apprécier visuellement le gain en résolution en profondeur qu'il est possible d'obtenir.

### b) Reconstruction du profil mesuré

La figure 3.24 montre que le profil reconstruit est parfaitement superposé au profil mesuré, au bruit près, et la reconstruction est plus bonne par rapport dans le cas où la DRF est constante.

La qualité de la reconstruction vient renforcer la confiance dans la solution obtenue. Elle confirme le fait que cette solution a pu engendrer le profil mesuré puisqu'elle est capable de le reconstruire avec une bonne précision.



**Figure 3.24:** Reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué et de la DRF

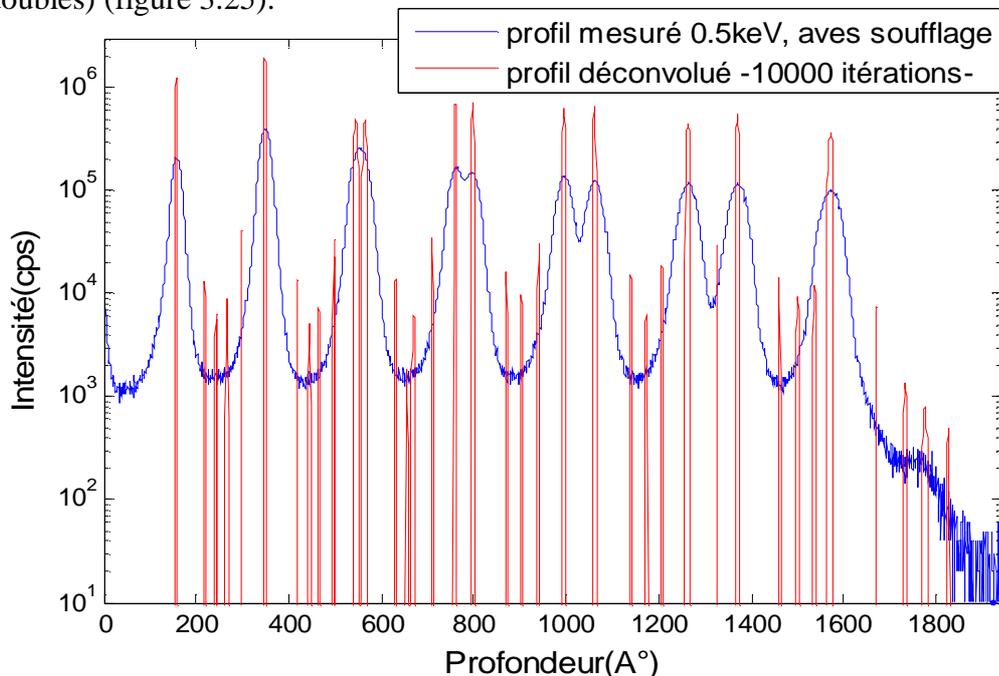
Notons que nous n'avons pas considéré la mesure sans soufflage ou le pas d'échantillonnage est grand :

- i) d'après le critère de Shannon, si l'on souhaite avoir la possibilité de restaurer les plus hautes fréquences d'un profil de concentration, il est nécessaire d'avoir un pas d'échantillonnage inférieur à  $0.6 \text{ \AA}$ .
- ii) on ne peut pas espérer s'approcher de la forme originale d'un delta-dopage par déconvolution si le pas d'échantillonnage de la mesure est de 5 ou  $10 \text{ \AA}$  [48, 49].

### 3.2.2. Déconvolution du multi deltas-dopage. Profil en profondeur à 0.5keV d'impact, 54°, avec soufflage

Cet échantillon a été analysé à 0.5keV, 54°, avec soufflage, avec un pas d'échantillonnage  $T_e = 0.7138\text{\AA}$ , et d'après les signaux de matrice de Si nous remarquons qu'ils sont constants, mais la mesure des paramètres de la DRF montre qu'il y a un élargissement des deltas-dopage avec la profondeur ( $\sigma$  varie de  $7.6\text{\AA}$  à  $19.2\text{\AA}$ ), pour cela on suppose que la variation commence au début c'est-à-dire  $d_c = 0$ .

Nous avons effectué la déconvolution avec un paramètre de régularisation  $\alpha=10^{-4}$ , on variant pour chaque fois le nombre d'itérations. Le résultat à  $n=10000$  est satisfaisant (où la séparation de doubles deltas-dopages est total, avec cependant une impossibilité à séparer les deux couches de 1<sup>er</sup> doubles) (figure 3.25).



**Figure 3.25 :** Résultat de la déconvolution de l'échantillon LETI à 0.5 keV

*d'impact, 54°, avec soufflage,  $T_e=0.7138$ .  $\alpha=10^{-4}$ ,  $n=10000$  itérations.*

Après le premier delta dopage il apparaît des *artefacts*, s'amplifiant avec les nombres d'itérations. Cette observation nous suggère :

- i) soit une dégradation du rapport *signal/bruit* (la représentation logarithmique du profil mesuré nous montre clairement que le rapport *signal/bruit* est meilleur là où les artefacts apparaissent).
- ii) soit la précision pour que nous trouvions la profondeur de transition  $d_c$  dans certain cas est difficile.

### 3.3. Gain en résolution en profondeur par déconvolution

Le tableau ci-dessous résume les différents gains en résolution et en maximum de concentration (Le gain en maximum représente le rapport entre le maximum du pic déconvolué et mesuré) sur les deux échantillons précédents qui sont analysés à 0.5keV et 1keV d'impact, pour deux nombres d'itérations 1000 et 10 000.

<b>1keV à 48°</b>	Pic1	Pic2	Pic8	Pic10	Pic12
FWHM (y)	20.71	22.23	25.90	26.01	31.34
n= 10 000 itérations					
FWHM (xest)	4.77	8.97	8.83	8.25	10.27
Gain en FWHM	4.34	2.48	2.93	3.15	3.05
Gain en Max	8.65	6.73	7.32	7.50	6.70
n= 1000 itérations					
FWHM (xest)	8.50	11.99	12.98	12.71	15.13
Gain en FWHM	2.44	1.85	2.00	2.05	2.07
Gain en Max	5.85	5.24	5.21	5.22	4.84
<b>0.5 keV à 54°</b>	Pic1	Pic2	Pic8	Pic10	Pic12
FWHM (y)	23.45	27.57	37.43	42.42	49.07
n = 10 000 itérations					
FWHM (xest)	2.76	4.12	5.92	8.62	10.10
Gain en FWHM	8.50	6.69	6.32	4.93	4.85
Gain en Max	6.00	4.73	4.73	3.81	3.55
n= 1000 itérations					
FWHM (xest)	5.42	7.71	10.09	13.08	15.86
Gain en FWHM	4.33	3.57	3.71	3.24	3.09
Gain en Max	3.48	2.99	2.95	2.54	2.45

**Tableau5** : Gains en résolution en profondeur et en maximum de concentration apportés par la déconvolution.  $a=10^{-4}$ .

D'après le calcul de la FWHM, il y'a une croissance des pics déconvolués avec la profondeur, contrairement a ce qui a été trouvé par rapport au gaussienne où elle est stable.

i) Pour 1000 itérations on obtient presque le même gain en résolution.

ii) Pour l'échantillon analysé a 0.5 keV à 54°, par exemple le gain de 8<sup>eme</sup> pic passe de 3.71 à 6.32 entre 1000 et 10000 itérations, par contre dans l'échantillon analysé a 1keV à 48° le gain de même pic passe de 2 à 2.93. Cette amélioration notable des performances avec le nombre d'itérations est due à la qualité de mesure ; pas d'échantillonnage faible ( $T_e=0.7138\text{\AA}$ ) dans l'échantillon analysé a 0.5 keV à 54° par rapport a l'autre échantillons ( $T_e=2.102\text{\AA}$ ).

Le gain obtenu par l'échantillon analysé à 0.5 keV à 54° est presque le même que celui de la simulation, mais avec un nombre d'itération plus élevée que dans la simulation. Car dans cette dernière, la DRF sert à la déconvolution est strictement la même que celle intervenant lors de la construction du profil mesuré.

Ni le delta-dopage ni la mesure n'étant parfait, le fittage pourra donner des paramètres de DRF  $\lambda_u$ ,  $\lambda_d$ ,  $\sigma$  légèrement différents des paramètres réels. Une légère erreur sur ces paramètres peut donc entraîner la naissance d'artéfacts lors de la déconvolution [42].

On peut retenir certaine réserves pour la déconvolution du 1<sup>ere</sup> delta-dopage, puisque on est presque sur qu'il a été analysé en régime transitoire. Ainsi que le 2<sup>eme</sup> delta-dopage ou la séparation est impossible par déconvolution.

La comparaison du maximum du pic déconvolué avec celui mesuré permettra d'obtenir une concentration de la couche plus réaliste (bien qu'insuffisante) que celle donnée par le profil mesuré. En effet, l'élargissement des courbes lors de la mesure conduit logiquement à la diminution de leurs valeurs maximales [6].

#### 4. DECONVOLUTION AVEC UNE FAUSSE DRF

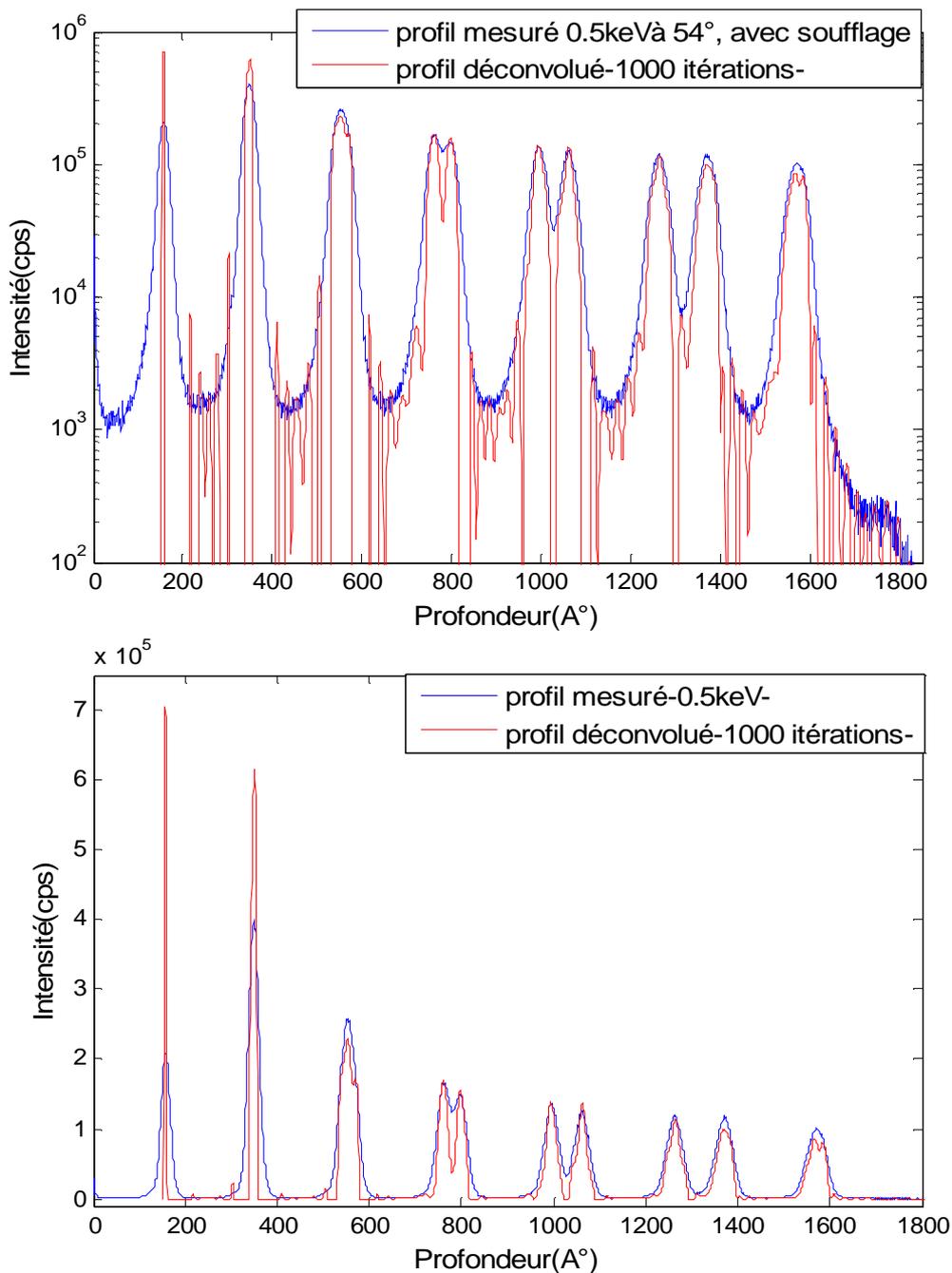
Si en ne prend pas en considération l'apparition de la rugosité et en suppose que la DRF est constante (les paramètres de la DRF mesurés par le fittage d'un pic).

La question qui se pose ; que se passera-t-il, lorsque il y a un développement de la rugosité avec une DRF constante.

Nous avons essayé de donner une réponse à cette question, en prélevant l'un des échantillons précédent (0.5keVd'impact), avec le quel on a effectué la déconvolution classique dont Les paramètres de la DRF sont ici  $I_u=6\text{\AA}$ ,  $I_d=7\text{\AA}$ ,  $s=7.6\text{\AA}$ . Ils sont tirés du fittage du 1<sup>ere</sup> pic.

La première chose qui frappe est le peu de différence entre le profil mesuré et déconvolué à partir de 4<sup>ème</sup> double delta-dopage figure 3.26. Dans la représentation linéaire en particulier, on n'observe qu'une suppression partielle de la composante gaussienne du profil mesuré.

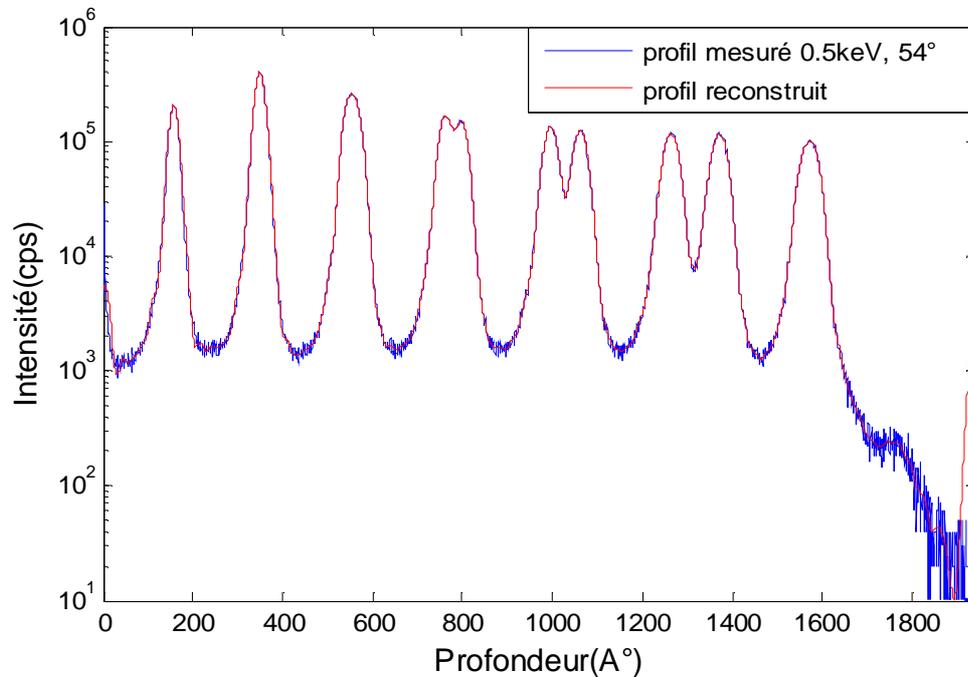
On note que le profil déconvolué n'est pas complètement restauré, surtout les derniers pics. La DRF est alors légèrement faussée à cette profondeur [50]. Ceci nous permet de conclure que la DRF est inévitablement variante.



**Figure 3.26 :** Résultat de la déconvolution de l'échantillon LETI à 0.5 keV d'impact à 54°, avec soufflage,  $T_e=0.7138\text{\AA}$ ,  $a=10^{-4}$ ,  $n=1000$  itérations. Avec un DRF constante.  
**a)** représentation logarithmique, **b)** représentation linéaire.

**Remarque**

La figure 3.27 nous permet de conclure qu'une bonne reconstruction ne révèle pas toujours un bon résultat de la déconvolution. Une bonne reconstruction reste toujours nécessaire, mais insuffisante.



**Figure3.27** : Reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué et la DRF constante

## 5. INTERPRETATION

Comme bilan à l'étude de nos mesures expérimentales on retient:

- i) Le soufflage réduit globalement la rugosité quand elle se présente.
- ii) La rugosité n'existe pas dans les deux autres cas de profils (avec soufflage et sans soufflage).

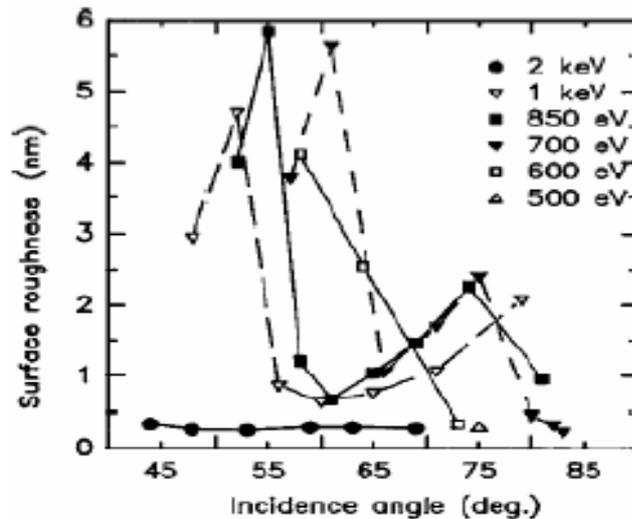
Dans la littérature :

♦ *Pour le cas sans soufflage:*

À haute énergie (6keV), la rugosité apparaît plutôt quand l'angle d'incidence augmente pour une énergie donnée; la profondeur de transition passe de 2.3 à 2.9  $\mu\text{m}$  quand l'angle varie de 45 à 30° [23] et de 0.5 à 4  $\mu\text{m}$  quand l'angle varie de 55 à 30° [21].

D'autre part la rugosité varie un peu avec l'énergie pour un angle d'incidence fixe ( $\theta = 60^\circ$ ); la profondeur de transition passe de 3.2 à 2.9  $\mu\text{m}$  quand l'énergie d'impact varie de 6 à 5.5 keV [23].

À basse énergie, Jiang [20] montre qu'en au dessous d'un 1keV, la variation de  $d_c$  n'est plus monotone et décroissante comme à plus haute énergie.



**Figure 3.28 :** La rugosité en fonction de l'angle d'incidence pour différentes énergies d'impact d'après [20].

♦ Pour le cas avec soufflage

À haute énergie, les études faites dans les références [51, 52] montrent que la rugosité diminue sensiblement avec la pression d'oxygène.

À basse énergie, les travaux ont montré qu'en réduisant l'angle d'incidence, aucun symptôme de rugosité n'était observé; L'explication de ceci est attribuée à la formation de  $\text{SiO}_2$ . Cet oxyde rattrape la rugosité et donne au cratère une forme plutôt homogène [53]. De plus, les signaux de matrice présente une légère variation comparée au cas précédent [8].

Nous retiendrons comme tendance générale que l'augmentation de l'énergie va dans le sens d'une diminution de la rugosité. D'autre part plus l'angle incidence  $\theta$  augmente plus la rugosité augmente ( $d_c$  diminue).

La recherche d'une optimisation passe sans doute par une *corrélation* entre l'effet simultané de l'angle incidence  $q$  et de l'énergie.

## 6. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons appliqué la méthode de la déconvolution que nous avons développé au cours de ce travail à des profils simulés, ainsi qu'à des échantillons « multi deltas-dopage ».

*Pour les profils simulés*, nous avons pu mettre en évidence une forme de la DRF variante au moment, où se traduit une nette dégradation provoquée par l'influence de rugosité. Ensuite, on applique la méthode de déconvolution sur de nombreuses structures simulées rencontrées lors de l'analyse SIMS, afin de tester la déconvolution variante.

Les performances relativement équivalent à celle de DRF constante, notre fonction (DRF variante) a prouvé son efficacité.

*Pour les profils mesurés*, l'étude des échantillons contenant des deltas dopage nous a permis de dégager les conclusions suivantes:

Pour les échantillons où il n'y a pas de rugosité (cas de DRF constante), les profils déconvolués montrent une nette amélioration de la résolution en profondeur.

Pour les échantillons où il y a une rugosité (cas d'une DRF variante), cette dernière apparaît de façon directe (lorsque les signaux de matrice subissent une variation), où indirecte (après le fittage des deltas-dopage).

Le fait que nous avons obtenu des performances équivalentes à celles de la DRF constante nous conforte quant à l'efficacité de notre DRF variante.

Nous avons démontré que l'augmentation notable du gain avec le nombre d'itération est inversement proportionnelle avec le pas d'échantillonnage.

Il s'avère absolument nécessaire d'utiliser une DRF adéquate pour chaque cas.

Même si nos échantillons ne nous ont pas permis de montrer l'effet de l'énergie et de l'angle d'incidence, la littérature a montré qu'une recherche d'une optimisation passe toujours par une corrélation entre l'effet simultané de l'énergie et de l'angle d'incidence.

## CONCLUSION GENERALE

Le travail présenté dans ce mémoire porte sur l'amélioration de la résolution en profondeur en analyse SIMS, et de manière plus générale, sur la restauration d'information à partir des profils de concentration en profondeur au moyen de la techniques de déconvolution en régime variant. Nous nous sommes limités au cas du bore dans le silicium.

L'influence de l'apparition de la rugosité sur la résolution en profondeur se traduit par une nette dégradation de celle-ci et une baisse de la vitesse d'érosion.

L'apparition de la rugosité peut être marquée par la variation des signaux de matrice, et à partir d'une profondeur de transition  $dc$  la fonction de la résolution devient variée avec la profondeur. Dans cette condition, l'application de *la déconvolution variée* est nécessaire. La fonction de la résolution trouvée devient ainsi la réponse impulsionnelle du système de mesure. Sa connaissance est essentielle à la mise en œuvre de la déconvolution. Au cours de ce travail, nous avons développé un algorithme de déconvolution intégrant plusieurs types d'informations parmi lesquelles la réponse impulsionnelle est variée.

Notre étude s'est poursuivie par la déconvolution de profils simulés de différentes formes et plus ou moins dégradés. Cette étude nous a permis de cerner les performances ultimes de notre méthode de déconvolution ainsi que le choix de la DRF en accord avec les conditions de l'analyse. En particulier dans le deltas-dopage où nous avons ensuite appliquée la déconvolution à des profils expérimentaux, ce qui nous a permis de tester ces performances.

Les principaux éléments qui ressortent de ce travail sont les suivants :

**W** Avec une déconvolution classique, Les performances de l'algorithme de *Van Cittert sous contraintes et régularisation de Miller* sont bonnes.

**W** La convolution de profil réel avec la réponse impulsionnelle variée, nous a permis d'obtenir un profil simulé presque identique à celui du cas expérimental.

W La déconvolution apporte un gain de résolution en profondeur appréciable. Les résultats obtenus par une déconvolution variante sont comparables à ceux obtenus par une déconvolution classique.

W L'apparition de la rugosité peut être connue de façon directe (lorsque les signaux de matrice subissent une variation), ou indirecte (après le Fittage des deltas-dopage).

W La méthode de déconvolution conduit à la formation d'oscillations ou artefacts qui apparaissent sur les profils déconvolués. Nous avons démontré que la contrainte de positivité appliquée a une action efficace sur la disparition d'une grande partie de ces artefacts.

W Une mauvaise qualité de fittage de la fonction de résolution provoque une incertitude dans le résultat de la déconvolution et constitue l'une des causes de la génération des artefacts. Elle se traduit généralement par une mauvaise reconstruction.

W Dans des conditions expérimentales où certains paramètres varient, l'utilisation de la DRF constante fausse le résultat de la déconvolution après la profondeur de transition.

W Une bonne reconstruction bien qu'elle soit nécessaire dans tous les cas, est insuffisante : Un mauvais résultat du point de vue restauration de l'information peut conduire à une reconstruction satisfaisante.

W Ces remarques confirment le fait qu'une déconvolution doit toujours être subordonnée à une analyse de bonne qualité : échantillonnage suffisant, bruit aussi faible que possible, et une bonne qualité de fittage de la DRF, déterminer avec précision la profondeur de transition  $dc$  lorsqu'il y a variation.

W Nous retiendrons comme tendance générale que l'augmentation de l'énergie va dans le sens d'une diminution de la rugosité. D'autre part plus l'angle incidence  $\theta$  augmente plus la rugosité augmente ( $dc$  diminue).

W Les mesures avec soufflage d'oxygène sont de meilleures qualités.

La recherche d'une optimisation passe sans doute par une *corrélation* entre l'effet simultané de l'angle incidence  $q$ , de l'énergie et de la pression d'oxygène lors du soufflage.

### **Prospectives**

Nous avons introduit la réponse impulsionnelle variante dans les régimes permanent et de rugosité, on pourrait maintenant envisager l'étude de la variation de la réponse impulsionnelle dans le régime transitoire de l'analyse. Cette étude soulèverait bien des problèmes puisque les mécanismes de l'analyse SIMS sont mal connus dans ce régime.

La solution idéale passe par la possibilité de modéliser la variation de ces phénomènes transitoires d'une part, d'autre part d'injecter ces évolutions dans une DRF alors adéquate.

Il serait intéressant d'appliquer la méthode de déconvolution, à d'autres dopants dans le Silicium, puis à d'autres matrices pour lesquelles les problèmes d'effets de matrice et d'érosion non homogène sont plus aigus.

Enfin, on pourrait envisager la modélisation de la rugosité. Nous avons donné un aperçu sur ce phénomène. Il reste toute fois à compléter et approfondir cet aspect.

## ملخص:

إن التطور المستمر و السريع للأجهزة المصنوعة من أنصاف النواقل و الذي لا توأكبه تطور أجهزة التحليل ذات الحساسية و الجودة العالية في القياس، مع أن استعمالها أصبح ضرورة ملحة في خضم هذا التطور خاصة في مجال دراسة التحلل في العمق (SIMS). أدى ذلك للجوء إلى استعمال تقنيات معالجة الإشارات-التشاكل العكسي- و تطبيقها على النتائج المقاسة.

غير أنه عند استعمال الطاقة المنخفضة، تظهر عوامل تؤدي إلى إفساد نتائج القياس و أهم هاته

العوامل الخشونة.

في دراستنا هذه ولتحسين دراسة التحلل في العمق قمنا بتطوير دالة الجهاز، و استعمالها داخل الخوارزمية، فأدى ذلك إلى تحسن ملموس كما و كيفا في حالة عينات من السليسيوم المطعم بطبقات رقيقة جدا من البور التي عينا بها، و لقد أثبتت المعالجة المتغيرة مع العمق فعاليتها و ضرورة وجودها في حالة ظهور عامل الخشونة. نستطيع القول أن استعمال المعالجة في حالتها الثابتة و المتغيرة يتوقف على ظهور هاته العوامل خلال القياس، كما استطعنا استخلاص أنه توجد ارتباط متبادل بين الطاقة وزاوية السقوط في اختيار أحسن شروط القياس.

## Résumé:

L'électronique actuelle se caractérise par une réduction rapide et continue des dimensions des composants constitués de matériaux semi-conducteurs, tel le silicium. Ceci conduit à l'utilisation de zones dopées à forts gradients de concentrations sur de très faible profondeur. Dans ces conditions, l'analyse dimensionnelle et compositionnelle par la technique SIMS est fortement entachée d'erreur. D'une part, au niveau purement instrumentale, les performances ultimes de la technique SIMS sont atteintes, et d'autre part la résolution en profondeur qui est actuellement de quelques nanomètres n'est pas suffisante. En particulier à basse énergie, il faut prendre en compte d'autres phénomènes parasites tel que la rugosité induite en cours d'analyse. Ce travail est consacré à la restauration d'informations à partir des profils de concentration en profondeur au moyen d'une technique de déconvolution. Nous avons pour cela élaboré une procédure de calcul à base d'une DRF variante. Notre étude s'est poursuivie par la déconvolution de profils simulés de différentes formes, afin de cerner les performances ultimes de notre méthode de déconvolution. Nous avons ensuite appliqué notre logiciel à des profils expérimentaux, de type multi-deltas dopage du Bore dans le Silicium.

Les profils déconvolués nous montrent une nette amélioration de la résolution en profondeur, les pics sont totalement séparés, les pentes exponentielles ont été complètement supprimées. Dans le cas d'une DRF variante, la qualité des résultats est comparable à celle effectuée avec une DRF constante.

Ainsi nous avons d'une part démontré la nécessité absolue d'une DRF variante pour certaines conditions expérimentales et d'autre part l'impact du choix de la DRF sur cette restauration.

**Mots clés:** fonction de résolution (DRF variante), Déconvolution, SIMS, Multi deltas dopage.



## **Abstract**

Current electronics is characterized by fast and continuous reduction dimensions of the components made up of semiconductor materials, such as silicon. This led to the use of zones doped with strong gradients of concentrations on very low depth. Under these conditions, the dimensional and compositional analysis by technique SIMS is strongly sullied with error. On the one hand, on the level purely instrumental, the ultimate performances of SIMS technique are reached, and on the other hand the depth resolution which is currently of some micrometers is not sufficient. In particular for low energy, it is necessary to take into account other parasitic phenomena such as the roughness induced being analysed. This work is devoted to the restoration of information starting from the profiles of depth concentration by means of a technique of deconvolution. We for that worked out a procedure of calculation based on a variant DRF. We then applied our software to experimental profiles, of type multilayer doping of Boron in Silicon.

The deconvolved profiles show us a clear improvement of the depth resolution, the peaks are completely separate, and the exponential slopes were completely removed. In the case of a variant DRF, the quality of the results is comparable with that carried out with a constant DRF. Thus we on the one hand showed the peremptory necessity for a variant DRF for certain experimental conditions and on the other hand the impact of the choice of the DRF on this restoration.

**Key Word:** Resolution Function (variant DRF), SIMS, Deconvolution, Multilayer.



## TM REFERENCES ~

- [1] **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, 231p, 1997.
- [2] **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, 184p. 2001.
- [3] **rap1**, « les surfaces et leurs caractérisations », IUP3, Génie des matériaux.  
<http://perso.wanadoo.fr/calanques2mars/images/page3/rap1.pdf>
- [4] **Paour N.**, « *Etude de la diffusion intervenant dans la résolution en profondeur en analyse SIMS : application a l'AlGaAs* » Thèse de Doctorat, CEA- Grenoble, 120p. 1997.
- [5] **Probion analysis**, « *Tutorial SIMS -Spectrométrie de masse- Material Analysis for Industry & Research* » site web: <Http://www.Probion.fr>
- [6] **Boulsina F.**, « *Contribution à l'amélioration de la résolution en profondeur lors de l'analyse SIMS par déconvolution* ». Mémoire de Magister, Université de Mentouri Constantine, 62p, 2003.
- [7] **Evans.** « *SIMS theory and instrumentation*», Charles Evans and Associates 1995-2005, site web: <Http://www.Cea.com>.
- [8] **Baboux N.**, « *Analyse ultime par Spectrométrie de Masses des Ions Secondaires des martiaux de la microélectronique avancée : Contribution à l'interprétation des profils de bore dans le silicium* ». Thèse de Doctorat, INSA de LYON, 124p, 2001.
- [9] **Wittmaack K.**, “*Influence of the depth calibration procedure on the apparent shift of impurity depth profiles measured under conditions of longterm changes in erosion rate*”, J. Vac. Sci. Technol, B, 18(1) : pp 1-6, 2000.
- [10] **Boulakroune M.**, « *Traitement numérique des mesures par sonde ionique. Application aux Siliciures* ». Mémoire de Magister, Université de Mentouri Constantine, 79p, 1999.
- [11] **Wittmaack K., Wach W.**, “*Profile distortions and atomic mixing in SIMS analysis using oxygen primary ions*”, Nuclear Instruments and method for Physic Research, Vol.191, pp. 327-334, 1981.
- [12] **Barlow R.D., Dowsett M.G., Fox H.S., Kubiak R.A.A., Newstead S.M.**, “*SIMS response functions for MBE grown delta layers in silicon*”, Nuclear Instruments and method for Physic Research, Vol.B72, pp. 442-446, 1992.
- [13] **Zouache T.**, « *Limites physiques lors de l'analyse par sonde ionique* ». Mémoire de Magister, université de Mentouri Constantine, 66p, 2000.

- [14] **Hofmann S.**, “*From Depth Resolution to Depth Resolution Function: Refinement of the Concept for Delta Layers, Single Layers and Multilayers*”, Surface and Interface Analysis. Vol.27, pp. 825-834, 1999.
- [15] **Hofmann S.**, “*Approaching the limits of high resolution depth profiling*”, Applied Surface Science, Vol.70/71, pp.9-19, 1993.
- [16] **Magee C.W., Honig R.E.**, “*Depth profiling by SIMS: Depth resolution, dynamique range and sensitivity*”, Surface and Interface Analysis. Vol.4, n°2, pp. 35-41, 1982.
- [17] **Dowsett M.G.**, “*Depth resolution parameters and separability*”, In: International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry 1995: Muenster, Germany (SIMS X) .A. Benninghoven ed. New York: Wiley, pp. 355-358, 1997.
- [18] **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, 132p, 2004.
- [19] **Alkemade P.F.A. et Jiang Z.X.**, “*Complex roughening of Si under oblique bombardment by low-energy oxygen ions*”, J. Vac. Sci. Technol. B, 19(5): (2001), pp.1699-1705
- [20] **Jiang Z.X. et Alkemade P.F.A.**, “*Secondary ion mass spectrometry and atomic force spectroscopy studies of surface roughening, erosion rate change and depth resolution in Si during 1 KeV 60° O<sub>2</sub><sup>+</sup> bombardment with oxygen flooding*”, J. Vac. Sci. Technol. B .., 16(4): (1998), pp.1971-1982
- [21] **Wittmaack K.**, “*Effect of surface roughening on secondary ion yields and erosion rates of silicon subject to oblique oxygen bombardment*”, Journal of Vacuum Science & Technology A, Vol 8, n°3, pp 2246-2250, 1990.
- [22] **Wittmaack K.**, “*Artifact in low energy depth profiling using oxygen primary ion beams : Dependance on Impact Angle and Oxygen Flooding Conditions*”, Journal of Vacuum Science & Technology B, Vol 16, n°5, pp 2776-2785, 1998.
- [23] **Stevie F.A. et Kahora P.M.**, “*Secondary ion yield changes in Si and GaAs due to topography changes during O<sub>2</sub><sup>+</sup> or Cs<sup>+</sup> ion bombardment*”, J. Vac. Sci. Technol. A, 6(1): (1988), pp.76-79
- [24] **Dowsett M.G., Rowlands G., Allen P.N, Barlow R.D.**, “*An analytic form for the SIMS response function measured from ultra-thin impurity layers*” Surface and Interface Analysis. Vol.21, pp. 310-315, 1994.
- [25] **Littmack U., Hofer W.**, “*Recoil mixing in solids by energetic ion beams*”, Nuclear Instruments and method for Physic Research, Vol.168, pp. 329-342, 1980

- [26] **Es-saadani A.**, « *Etude par spectrométrie de masse d'ions secondaires des contacts Tungstène / Silicium et Tungstène / Chrome / Silicium* ».Thèse de Doctorat, INSA de LYON, 140p, 1988
- [27] **Badheka R., Van den Berg J.A., Armour D.G., Wadsworth M.**, “*Theoretical calculations of the broadening of dilute Si, Al and Be doped delta layers in GaAs during SIMS depth profiling*”, Vacuum Vol. 44, n°3-4, pp. 331-335, 1993.
- [28] **Littmack U., Hofer W.O.**, “*The theory of recoil mixing in solids*”, In: Topics in current physics, Berlin: Springer-Verlag, pp. 159-200, 1984.
- [29] **Prost R.**, « *Contribution à l'élaboration d'algorithmes itératifs discrets super-résolvants de déconvolution avec contraintes. Applications* ». Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, 278p, 1984.
- [30] **Bertero M., Poggio T.A., Torre V.**, “*Ill-posed problems in early vision*”, Proceedings of IEEE, Vol 76, n°8, pp. 869-889, 1988.
- [31] **Demoment G.**, “*Image reconstruction and restoration : overview of common estimation ntructures and problems*”, IEEE Transactions on Acoustics, Speech and Signal Processing, Vol 37, n°12, pp. 2024-2035, 1989.
- [32] **Tikhnov A. N., Arsenin V. Y.**, “*Solution ill-posed problems*”, Washington: Halsted Press, 258p, 1977.
- [33] **Leung C.M., Lu W.-S.**, “*On the use of discreet Laplacian operators in image restoration*”, IEEE Pacific RIM Conference on Communications, Computers and Signal Processing Proceedings 1995, New York: IEEE, pp. 411-415, 1995.
- [34] **Leung C.M., Lu W.-S.**, “*Optimal determination of regularization parameters and the stabilizing operator*”, IEEE Pacific RIM Conference on Communication, Computers and Signal Processing Proceedings 1995, Victoria, BC., Canada. New York: Institute of Electrical and Electronics Engineers, pp. 403-406, 1995.
- [35] **Wahba G.**, “*Practical approximate solutions to linear operator equations when the data are noisy*”, SIAM, Journal of Numerical Analysis, Vol. 14, n°4, pp. 651-667, 1977.
- [36] **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, Vol. 25, pp. 464-477,1997.
- [37] **Katsaggelos A.K., Biemond J., Mersereau R.M., Schafer R.W.**, “*General formulation of constrained iterative restoration algorithm*”, IEEE International Conference on Acoustic, Speech and Signal Processing 1985, Tampa, Florida, USA. New York: Institute of Electrical and Electronics, pp. 700-703, 1985.
- [38] **Prost R., Goutte R.**, “*Discrete constrained iterative deconvolution algorithm with optimized rate of convergence*”, Signal Processing, Vol. 7, n°3, pp. 209-230, 1984.

- [39] **Van Cittert P.H.**, “*Zum Einfluss der spaltbreite auf die intensitätsverteilung in Spektrallinien II*” Zeitschrift für Physik, Vol 69, pp. 298-308, 1931.
- [40] **Thomas G.**, “*A modified version of Van Cittert iterative deconvolution procedure*”, IEEE Transactions on acoustics, speech and signal processing, Vol. 29, n°4, pp 938-939, 1981.
- [41] **Gautier B., Prost R., Prudon G., Dupuy J.C.**, “*Deconvolution of SIMS depth profiles of boron in silicon*”, Surface and Interface Analysis, Vol. 24, pp. 733-745, 1996.
- [42] **Gautier B., Prudon G., Dupuy J.C.**, “*Toward a better reliability in the deconvolution of SIMS depth profiles*”, Surface and Interface Analysis, Vol. 26, pp. 974-983, 1998.
- [43] **Gautier B., Dupuy J.C., Semmache R., Prudon G.**, “*SIMS depth profile correction for the study of the first step of diffusion of boron in silicon*”, Nuclear Instruments and methods for Physic Research, Vol. B 142, pp. 361-376, 1998.
- [44] **Barakat V.**, «*contribution à la restauration d'image dégradées par un système spatialement variant. Apport d'un modèle de l'image*» Thèse de Doctorat : INSA de Lyon, 149p, 1998.
- [45] **Barakat V., Guilpart B., Goutte R., Prost R.**, «*Model-Based Tikhonov-Miller image restoration image Restoration*”, Proceedings of International Conference on Image Processing, Santa Barbara CA, Vol. 1, pp. 310-313, 1997.
- [46] **Mancina G., Prost R., Prudon G., Gautier B., Dupay J.C.**, “*Deconvolution of SIMS depth profiles: toward the limits of the resolution by self- deconvolution test*”, In: International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry 1999: Brussels, Belgium (SIMS XII), A. Benninghoven ed. Amsterdam: Elsevier, 2000, p497-500
- [47] **Baboux N., Dupuy J.C., Prudon G., Holliger. P., Laugier F., Papon A.M et Hartmann J.M.**, “*Ultra-low energy SIMS analysis of boron deltas in silicon, journal of crystal growth*”, 245: (2002), pp.1-8.
- [48] **Dowsett M.G.**, “*Depth resolution parameters and separability*”, International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry 1995: Muenster, Germany (SIMS X), A. Benninghoven ed. New York: Wiley, 1997, p355-358.
- [49] **Dowsett M.G., Collins R.**, “*Noise, resolution and entropy in sputter profiling*”, Phil. Trans. R. Soc. Lod. A, 1996, N° 354, p 2713-2729.
- [50] **Fares B., Gautier B., Dupuy J.C., Prudon G., and Holliger P.**, “*Deconvolution of SIMS depth profiles in the presence of beam induced roughness*” 15 SIMS, The International Meeting on the SIMS analysis. Manchester, Angleterre, à paraître dans surface et interface Analysis, 12-16 Septembre 2005.
- [51] **Magee C.W., Mount G.R., Smith S.P., Herner B. et Grossman H.J.**, “*Spurting rate change and surface roughening during oblique incidence and normal incidence  $O_2^+$* ”

*bombardment of Silicon, with and without oxygen flooding*", J. Vac.Sci.Technol.B, 16(6):1998, pp.3099-3104.

- [52] **Canry J.C., et Brown A.**, "*Ultra-shallow depth profiling of Implants and multilayer samples using a modified Cameca IMS 4f*", in: Benninghoven et al, 1999, pp. 513-516.
- [53] **Ng G.M., Wee A.T.S., Huan G.H.A., et See A.**," *Effect oxygen flooding on crater surface composition and surface roughening in ultra shallow depth profiling*", in: Benninghoven et al, 1999, pp. 93-96.