

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

UNIVERSITÉ FRÈRES MENTOURI CONSTANTINE 1  
FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES  
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre : ...  
N° de série : ...

## THÈSE

Présentée pour obtenir le diplôme de **Doctorat en Sciences** en Physique

Option: Sciences des Matériaux

## THÈME

*Contribution à l'étude de l'implantation des  
ions de carbone dans le silicium*

Par :

Amar Bouguerra

Soutenu le : 17/ 11/ 2016

Devant le jury

Pr. M. SEBAÏS	<b>Président</b>	Université Frères Mentouri Constantine 1
Pr. R. LABBANI	<b>Rapporteur</b>	Université Frères Mentouri Constantine 1
Pr. C. AZIZI	<b>Examineur</b>	Université d'Oum El Bouaghi
Pr. A. NOUIRI	<b>Examineur</b>	Université d'Oum El Bouaghi
Pr. M. ZAABAT	<b>Examineur</b>	Université d'Oum El Bouaghi

## *Dédicace*

*Je dédie ce modeste travail à :*

*Mes chers parents que nulle dédicace ne puisse exprimer  
mes sincères sentiments. Que dieu leur prête bonheur et longue vie.*

*Ma femme qui m'a apporté joie et bonne humeur. Je lui suis reconnaissant du  
soutien qu'elle a su me prodiguer lors des moments difficiles.*

*Mes chères sœurs qui m'ont toujours soutenu pendant tout au long  
de mon parcours. Qu'elles trouvent ici l'expression de ma haute gratitude.*

*Mes très chers enfants ; Ramzi, Zineb et Anfel Hibat Errahmene.*

## REMERCIEMENTS

*Mes remerciements vont tout d'abord à Dieu le tout puissant de m'avoir donné l'énergie, la patience et le courage nécessaires à l'aboutissement de ce travail.*

*Ce travail a été réalisé au laboratoire de physique mathématique et subatomique (LPMPS), du département de physique de l'université Constantine 1, sous la direction du professeur R. Labbani.*

*Ma gratitude profonde et mes vifs remerciements à M<sup>elle</sup> Rebiha Labbani, Professeur à l'université de Constantine 1. Sa compétence scientifique, ses conseils précieux et sa disponibilité ont permis de mener ce sujet de recherche dans un contexte motivant, favorable et très enrichissant. Je la remercie vivement pour la confiance et la considération qu'elle m'a toujours octroyées.*

*Toute ma gratitude à Mr. Laurent Ottaviani, Maître de Conférences à l'institut – IM2NP – Université d'Aix-Marseille, pour sa collaboration et son importante participation au sujet. Je dois aussi signaler le grand plaisir que j'ai eu à travailler au sein de l'équipe OPTO-PV à l'institut IM2NP.*

*J'adresse mes respectueux remerciements à Monsieur M. Sebais, Professeur à l'université de Constantine 1, qui m'a fait l'honneur d'examiner ce travail et de présider le jury de soutenance.*

*Je remercie très sincèrement M<sup>me</sup> C. AZIZI, Professeur à l'université d'Oum El Bouaghi, qui m'a fait l'honneur d'examiner ce travail en acceptant d'être membre du jury.*

*Je remercie vivement Monsieur A. Nouiri, Professeur à l'université d'Oum El Bouaghi, d'avoir accepté de juger mon travail et de faire part au jury d'examen.*

*Je suis très reconnaissant à Monsieur M. Zaabat, Professeur à l'université d'Oum El Bouaghi, d'avoir accepté de faire partie de ce jury.*

# Sommaire

<i>Introduction générale</i> .....	1
------------------------------------	---

## *Chapitre I : Notions sur les interactions des ions avec la matière solide*

<b>1-1 Généralités sur le silicium et le carbone</b> .....	<b>3</b>
1-1-1 Le silicium .....	3
1-1-2 Le carbone .....	4
<b>1-2 Interaction des ions avec la matière</b> .....	<b>6</b>
1-2-1 Introduction .....	6
1-2-2 Types d'interaction .....	6
1-2-3 Section efficace de collision .....	8
1-2-3.1 Section efficace géométrique de collision .....	8
1. Types de section efficace .....	8
1-2-3.3 Définition statistique de la section efficace .....	9
1-2-4 Potentiel interatomique d'interaction ion-matière .....	10
1-2-4.1 Définition .....	10
1-2-4.2 Type des fonctions d'écran .....	12
a- Modèle classique .....	12
b- Modèle Quantique (Z.B.L) .....	14
1-2-5 Théories de ralentissement et de l'arrêt des ions dans un matériau .....	14
1-2-5.1 Cible amorphe .....	14
a- Pouvoir d'arrêt nucléaire .....	16
b- Pouvoir d'arrêt électronique.....	19
1-2-5.2 Cible Cristalline: Effet de Canalisation .....	21
a- Types de canalisation .....	22
b- Potentiel continu d'interaction .....	23
c- Angle critique de canalisation .....	24
d- Distribution des ions canalisés .....	25
<b>1-3 Implantation ionique</b> .....	<b>26</b>
1-3-1 Introduction .....	26
1-3-2 Domaines d'utilisation .....	26
1-3-3 Avantages et inconvénients de la technique .....	26
1-3-4 Description d'un implanteur ionique .....	27
1-3-4.1 Source d'ions .....	27
1-3-4.2 Dispositif d'analyse magnétique .....	27
1-3-4.3 Tube d'accélération .....	28
1-3-4.4 Système de déflexion électrostatique .....	28
1-3-4.5 Mesure de la dose d'implantation .....	28

<b>1-4 Distribution en profondeur des ions implantés .....</b>	<b>30</b>
1-4-1 Introduction .....	30
1-4-2 Profil des ions implantés .....	31
1-4-2-1 Distribution Gaussienne .....	31
a- Paramètres d'une distribution gaussienne .....	31
b- Profil de distribution des atomes implantés .....	32
1-4-2-2 Distribution de Pearson IV .....	33
<b>1-5 Défauts d'implantation .....</b>	<b>35</b>
1-5-1 Processus de création de défauts d'implantation .....	35
1-5-2 Profil des défauts d'implantation .....	37
1-5-3 Nombre des défauts ponctuels et Dose critique d'amorphisation .....	38
<b>1-6 Recuit post-implantation .....</b>	<b>39</b>
1-6-1 Différents types de recuit thermique .....	40
a. Recuit à flux thermique .....	40
b. Recuit adiabatique .....	40
c. Recuit isotherme .....	41
1-6-2 Cinétique de guérison des défauts .....	41
1-6-2.1 Défauts ponctuels .....	41
1-6-2.2 Couche amorphe .....	43
<b>1-7 Programmes de Simulation .....</b>	<b>45</b>
1-7-1 Programme TRIM .....	45
1-7-1.1 Echange d'énergie entre projectile et atome cible .....	46
1-7-1.2 Calcul des pouvoirs d'arrêt .....	46
1-7-1.3 Calcul des profils des ions, des atomes de recul et des défauts .....	47
1-7-1.4 Calcul des phonons .....	47
1-7-2 Programme Crystal- TRIM .....	48
1-7-2.1 Description du programme .....	48
a- Hypothèses du programme .....	48
b- Systèmes de coordonnées utilisés .....	48
1-7-2.2 Etude des collisions binaires .....	49
a- Angle de diffusion et énergie transférée .....	49
b- Perte d'énergie électronique .....	51
c- Energie après collision .....	51
1-7-2.3 Enregistrement des grandeurs physiques .....	52
1-7-2.4 Mouvement d'ion dans un cristal de silicium .....	52
1-7-2.5 Effet d'endommagement du réseau cristallin .....	54

## *Chapitre II : Techniques d'élaboration et de caractérisation des échantillons*

<b>2-1 Implantation des substrats par des ions de carbone .....</b>	<b>55</b>
2-1-1 Appareillage mis en œuvre .....	55
2-1-2 Conditions expérimentales d'implantation .....	56
<b>2-2 Recuit post - implantation .....</b>	<b>56</b>
2-2-1 Introduction .....	56
2-2-2 Dispositif expérimental mis en œuvre .....	57
2-2-3 Conditions expérimentales .....	57
<b>2-3 Spectrométrie de masse d'ions secondaires (SIMS) .....</b>	<b>59</b>
2-3-1 Description de la technique .....	59
2-3-2 Aspect analytique d'une mesure SIMS pour un profil de concentration .....	62
2-3-3 conditions expérimentales .....	63
<b>2-4 Spectroscopie Raman .....</b>	<b>64</b>
2-4-1 Principe de la technique .....	64
2-4-2 Instrumentation .....	68
<b>2-5 Micro dureté .....</b>	<b>70</b>
2-5-1 Introduction .....	70
2-5-2 Essais de dureté Knoop .....	70
2-5-2.1 Principe de la technique .....	70
2-5-2.2 Avantages et Inconvénients de la méthode .....	72
2-5-3 Essai de dureté Vickers .....	73
2-5-3.1 Principe de la technique .....	73
2-5-3.2 Avantages et Inconvénients de la méthode.....	74
2-5-4 Instrumentation et conditions expérimentales .....	75

## *Chapitre III : Simulation des interactions entre les ions C<sup>+</sup> implantés et les substrats de Silicium*

<b>3-1 Introduction .....</b>	<b>76</b>
<b>3-2 Programme TRIM .....</b>	<b>76</b>
3-2-1 Perte d'énergie et pouvoir d'arrêt .....	77
3-2-2 Calcul des paramètres du profil des ions C <sup>+</sup> .....	78
3-2-3 Simulation des profils de défauts.....	83
3-2-4 Simulation dans les conditions expérimentales d'implantation .....	84

<b>3-3 Programme Crystal Trim .....</b>	<b>86</b>
3-3-1 Influence des paramètres du faisceau d'ions sur les profils de distribution .....	86
a) Energie d'implantation .....	86
b) Dose d'implantation .....	87
c) Angle d'incidence du faisceau d'ions (Tilt) .....	89
3-3-2 Influence des paramètres liés au substrat sur les profils de distribution .....	91
a) Température du substrat .....	91
b) Orientation du substrat .....	92
c) Présence d'une Couche d'oxyde (SiO <sub>2</sub> ) .....	93
3-3-3 Simulation dans les conditions expérimentales .....	95
a) Conditions expérimentales d'implantation .....	95
a-1) Profils de distribution des ions implantés .....	95
a-2) Profils des défauts .....	97
a-3) Perte d'énergie .....	98
b) Comparaison par rapport aux conditions expérimentales de la littérature .....	99
<b>3-4 Conclusion partielle .....</b>	<b>100</b>
 <i>Chapitre IV : Caractérisation des échantillons élaborés</i> 	
<b>4-1 Introduction .....</b>	<b>101</b>
<b>4-2 Mesures SIMS .....</b>	<b>101</b>
4-2-1 Profils expérimentaux de distribution .....	101
a) substrats implantés et non traités thermiquement .....	101
b) Effet du recuit post implantation sur les profils de distribution .....	103
4-2-2 Comparaison des profils expérimentaux avec la simulation.....	105
<b>4-3 Spectroscopie Raman .....</b>	<b>109</b>
4-3-1 Etude de l'échantillon référence (non implanté) .....	109
4-3-2 Etude des échantillons implantés et non recuits .....	110
4-3-3 Etude des échantillons implantés et recuits thermiquement .....	112
<b>4-4 Essais de dureté .....</b>	<b>115</b>
4 4-1 protocoles de mesure .....	115
4-4-2 Effet de l'implantation ionique sur la dureté .....	117
4-4-3 Effet des recuits post-implantation .....	118
<b>4-5 Conclusion partielle .....</b>	<b>119</b>
 <i>Conclusion générale</i> .....	 120
<i>Annexe : Travaux scientifiques publiés</i> .....	122
<i>Références</i> .....	132

# *Introduction générale*



## Introduction générale

La technique d'implantation ionique est devenue un outil très utile dans le domaine de la fabrication de dispositifs à semi-conducteurs. Elle représente un moyen de modification des propriétés de surface pour une grande variété de matériaux. Elle est utilisée dans plusieurs domaines. En microélectronique, c'est une méthode de dopage et de fabrication de semi-conducteurs intéressants tel que le carbure de silicium (SiC). Cette technique est employée aussi dans d'autres domaines tels que les céramiques, les métaux et les polymères.

L'implantation ionique consiste à introduire les atomes ionisés d'un matériau, avec suffisamment d'énergie, pour pénétrer dans l'échantillon cible (en général une plaquette). Elle permet un contrôle précis de la quantité totale d'atomes implantés (dose d'implantation ou fluence) et du profil de concentration des ions implantés. Elle permet aussi de changer les propriétés chimiques et structurales de la cible (amorphisation partielle ou générale de la cible qui nécessite un recuit thermique de recristallisation).

Cette thèse s'inscrit dans les travaux de recherche du laboratoire de l'équipe 'Rayonnements et Applications' du laboratoire ' Physique Atomique et Subatomique' de l'Université Frères Mentouri – Constantine 1.

Dans le cadre de ce travail de recherche, nous nous sommes proposés de contribuer à l'étude théorique et expérimentale de l'implantation des ions de carbone dans des substrats de silicium. Cette opération est particulièrement mise en œuvre dans la fabrication du carbure de silicium (SiC) qui est un matériau prometteur en microélectronique. En effet, ce composé possède des propriétés électroniques, chimiques et structurales intéressantes.

L'implantation des ions de carbone dans des cibles monocristalline Si(100) a été réalisée à l'institut de Physique Nucléaire de Lyon en collaboration avec l'institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence «*IM2NP*» (Université d'Aix- Marseille). Les traitements thermiques, post-implantation, des cibles implantées ont également été effectués à l'institut IM2NP.

Cette thèse de doctorat est structurée en quatre chapitres :

Dans le premier chapitre, nous présenterons les généralités sur les interactions des ions avec la matière solide. Par la suite, nous décrirons la technique de l'implantation ionique, la distribution en profondeur des ions implantés ainsi que les défauts créés par l'implantation.

Après, nous décrirons le recuit post-implantation et en fin, nous aborderons les programmes de simulation utilisés dans ce travail.

Le second chapitre sera consacré à la description des différentes techniques d'élaboration et de caractérisation des échantillons préparés. Dans la partie de l'élaboration, nous décrirons le montage expérimental utilisé pour l'implantation ionique et le four thermique utilisé pour les recuits post-implantation. Dans la partie de la caractérisation, nous décrirons les trois techniques utilisées : la Spectrométrie de Masse à Ionisation Secondaire (SIMS), la Spectroscopie Raman et le test de la micro-dureté Vickers.

Dans le troisième chapitre, nous présenterons les différents résultats obtenus par les programmes de simulation utilisés (codes Trim et Crystal-Trim). Plusieurs paramètres liés à l'implantation seront étudiés (orientation du substrat, dose et énergie d'implantation, tilt du faisceau d'ion,.....).

Le quatrième chapitre sera consacré à la présentation et la discussion des résultats expérimentaux obtenus par les différentes techniques utilisées. Une comparaison des résultats expérimentaux (obtenus par la technique SIMS) avec ceux prévus par simulation sera effectuée afin de montrer la fiabilité des programmes de simulation utilisés (Trim et Crystal-Trim).

Par la suite, une conclusion générale de ce travail sera donnée et les points essentiels seront soulevés.

Enfin une annexe sera proposée pour exposer les travaux publiés de cette thèse.

# *Chapitre I*

*Notions sur les interactions des ions*

*avec la matière solide*

## 1-1 Généralités sur le silicium et le carbone

### 1-1-1 Le silicium

Le silicium est l'élément le plus abondant sur terre après l'oxygène, soit 26 % de sa masse [1]. Il est répandu principalement sous forme de dioxyde de silicium ( $\text{SiO}_2$ ). Il possède une structure cristallographique de type diamant (fig.1-1) avec un paramètre de maille de 0,5430710 nm [2]. Sa configuration électronique est de type  $[\text{Ne}] 3s^2 3p^2$ .

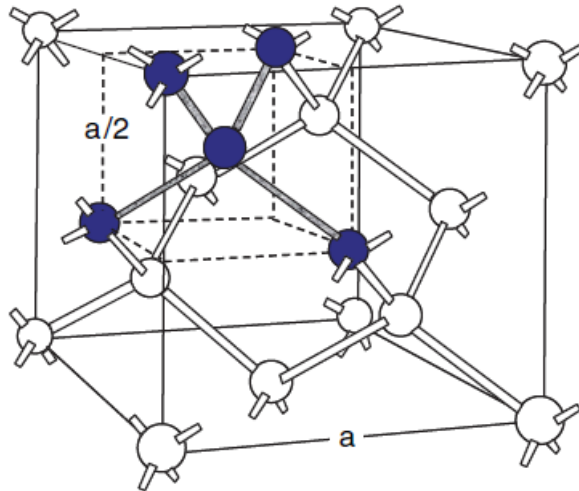


Figure 1 -1 Illustration de la structure cristallographique du silicium. Les atomes sombres constituent la cellule unitaire [2].

Vu ses propriétés électroniques semiconductrices, le silicium est largement utilisé dans plusieurs domaines technologiques. La structure mono cristalline présente un outil de valeur dans la fabrication des dispositifs électroniques. Par ailleurs, la présence des joints de grains, dans le cas d'une structure polycristalline, favorise la formation des imperfections dans la microstructure du silicium. Ces imperfections, telles que les impuretés et les défauts cristallographiques, peuvent avoir des effets significatifs sur les propriétés électroniques locales du matériau. En effet, en l'absence d'une structure cristalline idéale, il serait pratiquement impossible de construire des dispositifs à grande échelle d'intégration «Very Large - Scale Integration (VLSI) ». Ces dispositifs dans lesquels des milliards de circuits à base de transistors, doivent tous travailler de manière fiable. Ils sont combinés en une seule puce pour former un microprocesseur [3].

Dans le domaine des énergies renouvelables, les cellules solaires à base de silicium cristallin sont les plus commercialisées dans le monde (plus de 90 % du marché mondial de cellules

solaires [4]). Cependant, l'efficacité des cellules solaires décroît nettement si elles sont à base de silicium polycristallin. Cela est dû à la présence de défauts tels que des sous-joints de grains, des joints de grains et des dislocations [4].

### 1-1-2 Le carbone

Le carbone est un élément non-métallique appartenant au groupe (IVA) du tableau périodique. Il possède une configuration électronique de type (He)  $2S^2 2p^2$  [5]. Le carbone est présent dans la nature dans deux formes allotropiques principales :

- le graphite de structure cristalline hexagonales. C'est la forme stable à température et pression ambiante ;
- le diamant de structure cristalline tétraédrique (structure type « diamant »). C'est la forme stable à haute température et haute pression et métastable à température et pression ambiante.

Actuellement, l'élaboration de formes synthétiques de carbone, telles que les nano tubes de carbone (CNT), a élargie le domaine d'applications technologiques de cet élément.

En outre, l'incorporation du carbone par la technique d'implantation ionique dans des substrats de Si, est très intéressante. En effet, elle permet l'amélioration des propriétés électroniques et mécaniques des substrats implantés. Dans ce contexte, on peut citer la formation de couches enterrées de carbure de silicium (SiC) dans le silicium monocristallin. Ce composé (i.e SiC) est considéré comme un matériau prometteur. Il est particulièrement intéressant dans l'industrie électronique en raison de ses propriétés physiques et électroniques importantes. Ces dernières sont dues aux aspects céramique et semi conducteur de ce matériau. En effet, il a une conductivité thermique élevée, une large bande interdite, une température de fusion très élevée et une haute tension de claquage. Grâce à ces propriétés, le SiC est largement utilisé dans la fabrication de dispositifs électroniques de puissance qui fonctionnent en hautes températures, hautes puissances et sous des radiations très élevées [6].

Parmi ces dispositifs, on peut citer [6];

- Diodes électroluminescentes à base du SiC,
- Photo- détecteurs à base de SiC (dans le domaine militaire et spatial) notamment dans la gamme de la lumière bleue,
- Dispositifs reliés aux énergies renouvelables,
- Commandes de moteurs et télécommunications.

Dans le cadre de ce travail de recherche, nous nous sommes proposé de contribuer à l'étude du comportement des atomes de carbone implantés dans le silicium monocristallin. Notre objectif ne consiste pas à élaborer le SiC car les doses de carbone mises en œuvres sont insuffisantes pour obtenir ce matériau. Notre but était plutôt l'étude de plusieurs effet accompagnant l'implantation du carbone dans Si qui sont utiles aux industrialistes désirant élaborer le SiC par implantation ionique.

## **1-2 Interaction des ions avec la matière :**

### **1-2-1 Introduction**

Dans cette partie de la thèse, on va élucider les aspects fondamentaux de l'interaction des ions avec la matière. Il est connu, depuis longtemps, que l'irradiation des matériaux par des ions induit de profondes modifications. Le spectre de ces modifications est assez large. Il s'étend des modifications localisées de liaisons chimiques à la formation de zones amorphes étendues. Ces transformations dépendent des caractéristiques de l'ion et du matériau. En revanche, ce qui est bien moins clair, c'est la manière dont l'énergie, qui est déposée initialement sur les électrons du matériau, se transmet aux atomes. Divers modèles ont bien sûr été proposés, mais à l'heure actuelle, la quantification de ces mécanismes de transfert reste un verrou essentiel pour la communauté internationale [7].

### **1-2-2 Types d'interaction**

Lorsqu'un ion incident pénètre dans un matériau-cible (Fig1-2), celui-ci est freiné sous l'effet de deux mécanismes complémentaires [8]:

- a) Interactions ion-électrons de valence ;
- b) Collisions nucléaires.

Dans le premier cas, les ions incidents perdent leur énergie sans que leur direction de propagation soit sensiblement affectée.

Dans le deuxième cas, les ions perdent leur énergie par collision élastique avec les atomes du matériau-cible. La direction des ions est fortement changée et les atomes qui ont subi une collision, peuvent être déplacés de leur position d'équilibre. Ceci se produit si l'énergie transférée, par collisions nucléaires aux atomes du matériau cibles, est supérieure à l'énergie de liaison du solide. Il entraîne un très fort endommagement du réseau, avec l'apparition de défauts d'implantation tels que des sites vacants (lacunes), des sites interstitiels occupés, des couples « lacune-interstitiel ». Par ailleurs, si le faisceau ionique est suffisamment intense, des atomes superficiels seront éjectés. C'est le phénomène de pulvérisation pour lequel le taux peut être voisin de 1. C'est-à-dire pour chaque ion incident on aura un atome éjecté. De plus, au cours de la pulvérisation du matériau en surface, diverses émissions (atomes, ions, électrons, photons...) peuvent avoir lieu. La figure (1-3) montre l'ensemble de ces phénomènes en surface.

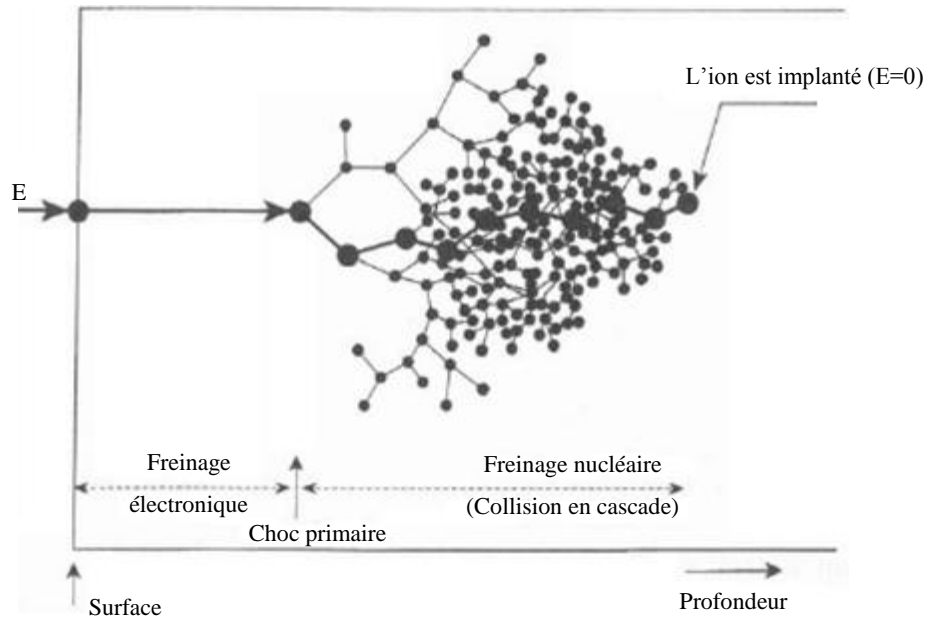


Fig. 1-2 : Illustration du parcours d'un ion incident dans la cible. Les déplacements des atomes de la matière sont également schématisés [9].

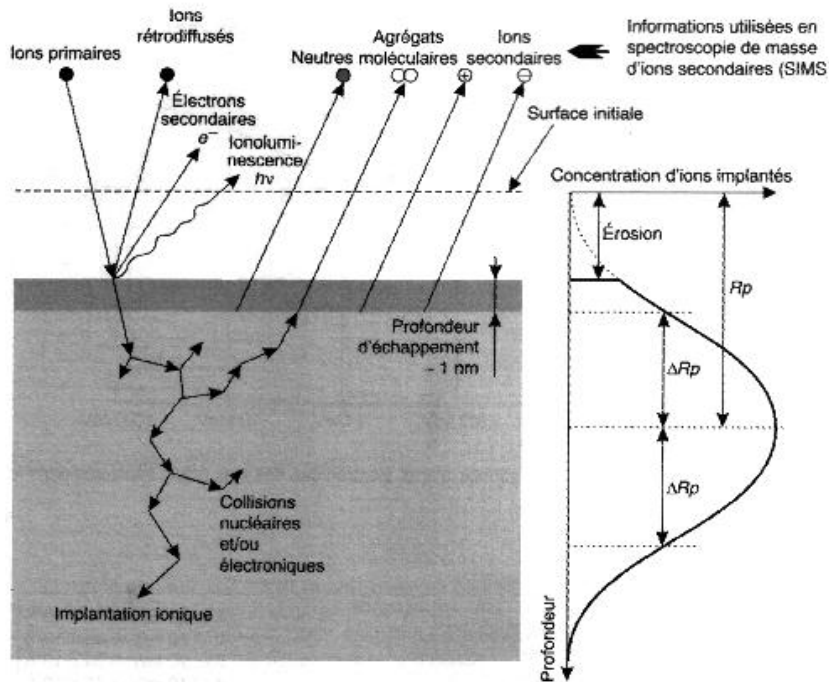


Fig. 1-3 : Illustration des phénomènes de surface et de volume ayant lieu par interaction des ions avec la matière [10].



### 1-2-3 Section efficace de collision

#### 1-2-3.1 Section efficace géométrique de collision

Si une particule A de masse  $m_A$  et de rayon  $R_A$  interagit avec une autre particule B de masse  $m_B$  et de rayon  $R_B$  (fig.1-4), l'interaction entre A et B est possible uniquement si le paramètre d'impact  $b$  vérifie la relation [11] :

$$b < R_A + R_B \quad (1)$$

La section efficace géométrique est l'aire fictive que doit avoir la particule incidente A pour y avoir une collision avec la particule cible B, elle est donnée par la relation :

$$\sigma_g = \pi (R_A + R_B)^2 \quad (2)$$

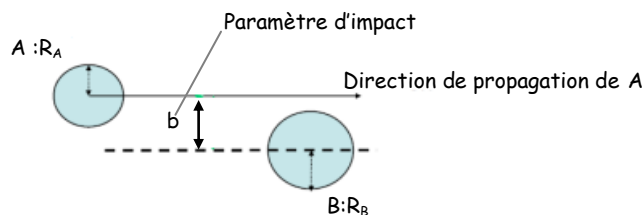


Fig. 1-4 : Schéma Simplifié du paramètre d'impact d'une collision entre deux particules A et B [11].

#### 1-2-3.2 Types de section efficace

La valeur de la section efficace dépend des particules (incidentes et cibles), de leurs vitesses relatives et du type de l'effet physique étudié ; diffusion, absorption, ionisation, excitation,... [12]. En outre, comme il existe plusieurs types de particules incidentes et de particules cibles, il y'a un grand nombre de phénomènes d'interactions. Cependant, on peut se contenter à la perte d'énergie donnée ou à son émission dans une direction donnée (si la direction est modifiée). Dans les deux cas, on parle de la section efficace différentielle en énergie ( $d\sigma/dE$ ) ou en angle ( $d\sigma/d\Omega$ ).

### 1-2-3.3 Définition statistique de la section efficace

Il est impossible de déterminer expérimentalement des sections efficaces microscopiques en bombardant un atome avec une seule particule. Ainsi, on utilise des informations statistiques extraites d'un grand nombre de bombardements (faisceau) sur une cible macroscopique (milieu) [12]. On suppose que les projectiles du faisceau interagissent uniquement avec le milieu et pas entre eux (Fig. 1-5).

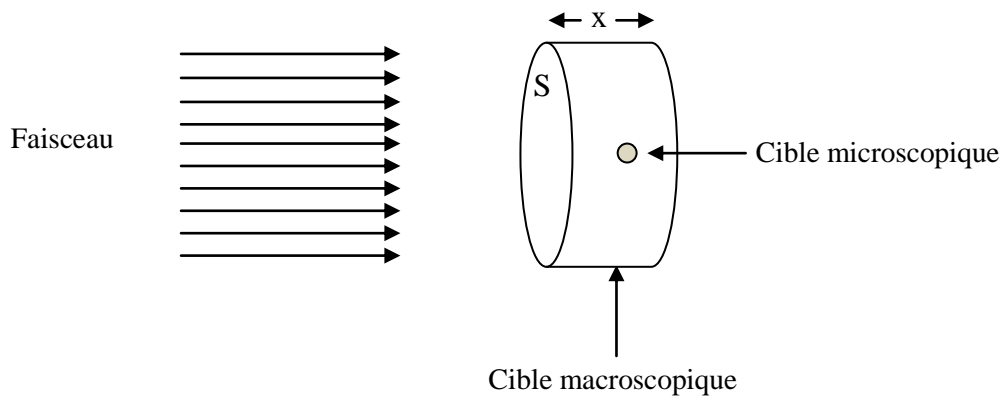


Fig. 1-5 : Schéma Simplifié d'une cible bombardée par un faisceau d'ion [12].

Considérons un faisceau de particules, avec une densité de courant  $J$  (i.e nombre de part.  $\times s^{-1} \times m^{-2}$ ), interagissant avec un milieu cible d'aire ( $S$ ) inférieure à l'aire du faisceau et provoquant une série d'interactions homogènes dans le milieu. pour un processus d'interaction  $A$  avec une particule de la cible, caractérisée par une section efficace  $\sigma_A$ , le nombre d'interactions  $A$  ( $n_A$ ) induits par le faisceau par unité de temps est donné par la relation [12] :

$$n_A = JS \times \frac{\sigma_A}{S} = J\sigma_A \quad (3)$$

Pour un milieu cible de volume  $V = Sx$  et une densité de particules cibles  $N$ . Dans ce milieu ( $N \approx 10^{23} cm^{-3}$ ), le nombre total d'interaction  $A$  est donné par [12] :

$$n_A = N \times Sx \times J\sigma_A = JS \times Nx\sigma_A \quad (4)$$

- Si  $Nx\sigma_A \ll 1$ , alors :  $n_A = N \times Sx \times J\sigma_A = JS \times P_A$  (5)

Où  $P_A$  est la probabilité pour un projectile de subir un processus A

- Si  $Nx\sigma_A$  n'est pas très petit, donc il est possible d'avoir des collisions multiples (projectile - particules cibles). Si  $P_n$  est la probabilité pour le projectile d'initier précisément  $n$  événements A (équivalent, dans la représentation géométrique, d'avoir  $n$  particules cibles dans le cylindre de volume  $V = x\sigma_A$  associé à une trajectoire),  $P_n$  suit une distribution de Poisson telle que [12] :

$$P_n = \frac{(Nx\sigma_A)^n}{n!} e^{-Nx\sigma_A} \quad (6)$$

### 1-2-4 Potentiel interatomique d'interaction ion-matière

#### 1-2-4.1 Définition

L'étude des interactions des ions avec la matière dépend principalement de la connaissance du potentiel interatomique. En effet, il permet de déterminer plusieurs paramètres d'interactions notamment le taux de la perte d'énergie des ions qui pénètrent dans le matériau [13].

Considérons deux atomes de masse  $M_1$  et  $M_2$  et de nombre atomique  $Z_1$  et  $Z_2$  respectivement. Si  $r$  est la distance d'interaction entre ces deux atomes,  $r_0$  est la distance entre deux atomes voisins et  $a_0$  le rayon de Bohr ( $a_0 = 0.53 \text{ \AA}$ ), on peut envisager trois types d'interactions possibles suivant les valeurs de  $r$  (figure 1-5) [14].

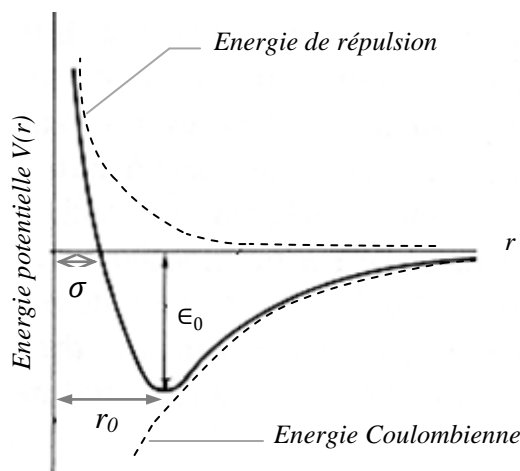


Fig. 1-5: Potentiel interatomique entre deux atomes [15]

- $r \gg r_0$

Pour des distances interatomiques relativement élevées, le potentiel interatomique est proche de zéro. Cependant, lorsque deux atomes s'approchent de sorte que les niveaux externes (couches de valence) se chevauchent, des interactions attractives apparaissent sous forme de potentiel de Lennard-Jones [14] qui s'exprime par la relation [16] :

$$V(r) = 4 \epsilon_0 \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (7)$$

Avec :

$\epsilon_0$  : Profondeur du puits du potentiel au minimum de  $V(r)$

$\sigma = 2a_0$  : la distance pour laquelle  $V(\sigma)=0$

- $r \ll r_0$

Dans ce cas, les noyaux des deux atomes deviennent le pair le plus proche de particules chargées dans le système. Leur potentiel interatomique coulombien (interaction entre deux noyaux) s'écrit [14] :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \quad (8)$$

- $a_0 < r < r_0$

A ces distances intermédiaires, une énergie potentielle positive d'interaction entraîne une force de répulsion entre les deux atomes. Les contributions majeures pour ce potentiel sont la répulsion électrostatique entre les deux noyaux positivement chargés et l'augmentation de l'énergie nécessaire pour maintenir les électrons des atomes voisins dans la même région de l'espace sans violer le principe d'exclusion de Pauli [14]. Ainsi, il y a une réduction du potentiel interatomique coulombien à cause de l'écrantage électrostatique des charges nucléaires (par la charge d'espace des électrons internes). Le potentiel interatomique universel est alors un potentiel coulombien écranté qui s'écrit [14,16] :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(r) \quad (9)$$

Où  $\Phi(r)$  représente la fonction d'écran nucléaire, car les électrons de la cible et de l'ion incident font écran à la charge nucléaire. Elle est telle que :

- pour  $r = 0$ ,  $\Phi = 1$ ,
- pour  $r > 0$ ,  $\Phi < 1$

Des études menées sur plusieurs paires (projectile-atome cible) ont démontré que le potentiel interatomique universel  $V(r)$  est une bonne approximation pour les potentiels répulsifs entre les combinaisons (ion-atome) [17].

#### 1-2-4.2 Type des fonctions d'écran

Le développement de la fonction d'écran est basée sur le choix d'un model atomique adéquat. Dans ce contexte, il existe deux modèles différents : classique et quantique.

##### (a) Modèle classique

Le calcul de la distribution de charges, des atomes en collision, se fait généralement en utilisant des modèles statistiques simples [13]. Les principales distributions classiques de la charge sont données par Thomas-Fermi, Bohr, Molière et Lenz-Jensen [14]. Elles ont été développées en se basant sur le numéro atomique et sans tenir en compte les informations sur la structure du nuage électronique [14,18]. L'approche de la création des fonctions d'écran interatomiques, pour des atomes classiques, est basée sur l'utilisation du potentiel d'un atome singulier puis sur l'ajustement du rayon d'écran pour le potentiel de deux atomes.

- **Fonction de Thomas-Fermi**

La forme la plus récente et la plus connue est appelée l' asymptotique de Sommerfeld [14,18]. Elle est exprimée par :

$$\Phi_{TF}(x) = \left(1 + \left(\frac{x}{\alpha}\right)^\lambda\right)^{\frac{-3}{\lambda}} \quad (10)$$

Où :

$$\lambda = 0.8034, \quad \alpha = 12^{2/3}, \quad x = \frac{r}{a_{TF}}$$

Tel que :

$$a_{TF} (a_{Lindhard}) = \frac{0.8853 a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (11)$$

Avec :

$a_0$ : Rayon de Bohr pour un atome singulier où  $a_0 = 0.0529 \text{ nm}$

Cependant, il existe deux formes plus simples et plus approximatives proposées par Lindhard et al. [14] ;

$$\Phi_{TF}(r) = 1 - \frac{r}{(3+r^2)^{1/2}} \quad (12)$$

et

$$\Phi_{TF}(r) = 1 - \frac{1}{2r} \quad (13)$$

- **Fonction de Bohr**

Elle est exprimée par la relation ci-dessous [18] :

$$\Phi_{Bohr}(x) = \exp(-x) \quad (14)$$

➤ Cas de l'utilisation de l'atome de Bohr (modèle atomique de Bohr) :

$$x = \frac{r}{a_{Bohr}}$$

où  $a_{Bohr}$  : Rayon d'écran de Bohr pour deux atomes ( $Z_1$  et  $Z_2$ ) ;

$$a_{Bohr} = \frac{a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (15)$$

➤ Cas de l'utilisation de l'atome de Thomas-Fermi :

$$x = \frac{r}{a_{TF}}$$

- **Fonction de Molière**

Cette fonction est typiquement valable pour les grandes valeurs de  $x$ . Elle s'écrit comme [18] :

$$\Phi_M(x) = [0.35 \exp(-0.3x)] + [5.5 \exp(-1.2x)] + [0.1 \exp(-6.0x)] \quad (16)$$

- **Fonction de Lenz-Jensen**

Elle est exprimée par la forme suivante [18]:

$$\begin{aligned} \Phi_{LJ}(x) = & [0.7466 \exp(-1.038x)] + [0.2433 \exp(-0.387x)] \\ & + [0.0102 \exp(-0.206x)] \end{aligned} \quad (17)$$

**(b) Modèle Quantique (Z.B.L)**

Le calcul des fonctions d'écran dans ce modèle est basé sur le modèle atomique quantique de Hartree-Fock [13]. Ziegler, Biersack et Littmark prolongèrent, en 1985, l'étude faite par Wilson et al. (1977) en performant des calculs détaillés des potentiels interatomiques pour 261 paires d'atomes [14]. Le calcul du potentiel total d'interaction a permis de produire la fonction d'écran universelle  $\Phi(x)$  qui s'écrit [17] :

$$\Phi(x) = \sum_{i=1}^4 A_i \exp(-B_i x) \tag{18}$$

Avec :

$A_1 = 0.1818$	$A_2 = 0.5099$	$A_3 = 0.2802$	$A_4 = 0.0282$
$B_1 = 3.2000$	$B_2 = 0.9423$	$B_3 = 0.4028$	$B_4 = 0.2016$

**1-2-5 Théories de ralentissement et d'arrêt des ions dans un matériau**

**1-2-5.1 Cible amorphe**

Lorsque on envoi un faisceau d'ions accélérés sur la surface d'un matériau, on permet d'introduire (implanter) un élément (sous forme d'ion) dans la zone superficielle de ce matériau (avec une concentration et une profondeur contrôlées). D'après la théorie LSS (Lindhard, Scharff et Schiott) [19,20] et en supposant l'absence des effets de la canalisation, la diffusion et des interactions avec les défauts, l'ion implanté cède son énergie aux atomes de l'échantillon cible via deux voix selon le type de collision avec les atomes de la cible :

- Perte d'énergie par collision élastique avec les atomes du matériau-cible dite pouvoir d'arrêt nucléaire  $(dE/dx)_n$  ;
- Perte d'énergie par collision inélastique avec le cortège électronique des atomes de la cible, c'est le pouvoir d'arrêt électronique  $(dE/dx)_e$ .

Ces deux pertes d'énergies, bien que corrélées [21], sont considérées comme indépendantes avec une bonne approximation [17].

La perte d'énergie totale par unité de longueur peut être écrite comme suit [22]:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{tot} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE}{dx}\right)_n \tag{19}$$

On déduit le pouvoir total  $S(E)$  qui a pour expression :

$$S(E) = \frac{1}{N} \left( \frac{dE}{dx} \right)_{tot} = S_n + S_e \quad (20)$$

Où :

$S_n$  : le pouvoir d'arrêt nucléaire

$S_e$  : le pouvoir d'arrêt électronique

$N$  : concentration atomique de la cible

La variation du pouvoir total  $S(E)$  en fonction de la vitesse de l'ion incident est représentée sur la figure (1-7), elle révèle la présence de quatre zones différentes [23] :

- **Zone I:** pour des énergies qui varient de quelques KeV jusqu'à 25KeV. La contribution nucléaire prédomine et elle est plus importante pour les ions lourds.
- **Zones II:** dominées par l'arrêt électronique (jusqu'à 1 MeV).
- **Zone III:** Elle est dite la zone de Bethe-Block, c'est la zone où le pouvoir d'arrêt décroît quand l'énergie augmente.

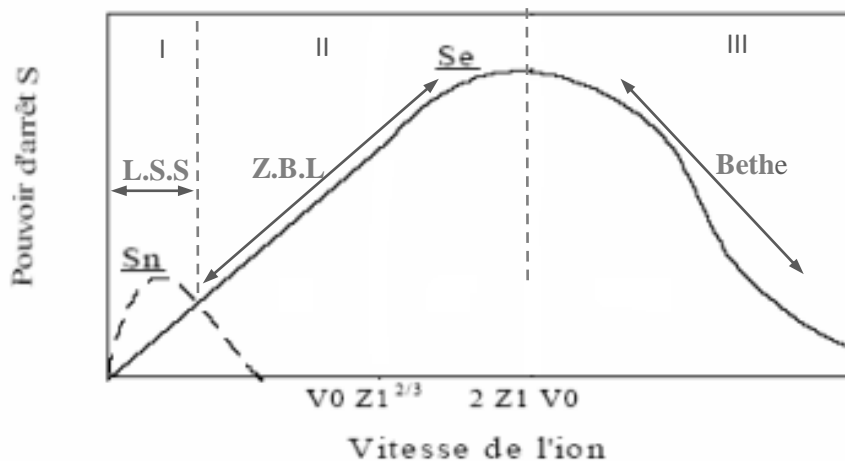


Fig. 1-6: Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire et électronique en fonction de la vitesse de l'ion incident [23],  $Z_1$  : le numéro atomique de l'ion incident,  $V_0$  : la vitesse de Bohr.

$$\left( V_0 = \frac{e^2}{h} = 2.2 \times 10^8 \text{ cm/s} \right).$$



**a) Pouvoir d'arrêt nucléaire :**

Le pouvoir d'arrêt nucléaire est l'interaction des noyaux et de leurs électrons internes avec la particule incidente. Ce pouvoir se déduit du potentiel atome-atome de type Coulombien à haute énergie. À faible énergie, on utilise un potentiel écranté (eq.9).

• **Modèle L.S.S (potentiel de Thomas-Fermi)**

Pour des énergies d'incidences relativement basses (généralement inférieures à 25 KeV), le pouvoir d'arrêt nucléaire peut être dérivé d'un potentiel coulombien écranté (potentiel de Thomas-Fermi). Il est originalement donné par Lindhard, Scharff et Schiott, il s'écrit [24] :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = NS_n(E) = N \int_{T_{min}}^{T_{max}} T \frac{d\sigma(E)}{dT} dT \quad (21)$$

Avec :

$N$  : Densité atomique volumique.

$S_n(E)$  : Section efficace d'arrêt nucléaire.

$T$  : Energie transférée à l'atome cible.

$\frac{d\sigma(E)}{dT}$  : Probabilité pour qu'une particule perde une énergie entre  $T$  et  $T+dt$  au profit d'un atome cible.

Pour simplifier les calculs, on remplace généralement l'énergie  $E$  par une énergie réduite (sans dimension)  $\epsilon$  qui s'écrit [24] :

$$\epsilon = \frac{M_2}{M_1 + M_1} \frac{a_L}{Z_1 Z_2 e^2} E \quad (22)$$

Où

$M_I$  : Masse du projectile,

$M_2$  : Masse de l'atome cible.

$E$  : Energie d'incidence du projectile

$a_L$  (ou  $a_{TF}$ ) : Rayon d'écrantage de Lindhard pour l'interaction de Thomas-Fermi (eq.11).

Donc, l'énergie réduite s'écrit [24] :

$$\epsilon = \frac{32.53 M_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}}{(M_1 + M_1) Z_1 Z_2} E (KeV) \quad (23)$$

La Section efficace d'arrêt nucléaire  $S_n(E)$  peut être exprimée sous une forme réduite  $S_n(\epsilon)$  par la relation [24]:

$$S_n(E) = \frac{Z_1 Z_2 M_1}{M_1 + M_2} 4\pi e^2 a_L S_n(\epsilon) \quad (24)$$

Donc :

$$S_n(E) = 8.462 \times 10^{-15} \frac{Z_1 Z_2 M_1 S_n(\epsilon)}{(M_1 + M_2)(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (eV \text{ cm}^2) \quad (25)$$

Et le pouvoir d'arrêt nucléaire peut s'écrire sous la forme [24] :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = 509.6 \frac{\rho Z_1 Z_2 M_1 S_n(\epsilon)}{M_2 (M_1 + M_2)(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (eV \text{ nm}^{-1}) \quad (26)$$

Cependant, l'équation (25) peut être simplifiée et remplacée par une expression analytique proposée par Wilson et al [24]. Elle se base sur un potentiel dit Kr-C (Krypton-Carbone) :

$$S_n(E) = \frac{0.5 \ln(1+\epsilon)}{\epsilon + 0.10718 \epsilon^{0.37544}} \quad (27)$$

• **Modèle Z.B.L (potentiel universel)**

Dans ce model, la fonction d'écran de Thomas-Fermi est remplacée par la fonction universelle  $\Phi(x)$  décrite dans l'équation (18), les résultats obtenus en utilisant ce potentiel universel sont plus précis.

L'énergie réduite de ZBL est [25]:

$$\epsilon = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{a_u}{Z_1 Z_2 e^2} E \quad (28)$$

Avec:

$$a_u = \frac{0.8853 a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \quad (29)$$

Donc :

$$\epsilon = \frac{32.53 M_2}{(M_1 + M_2) Z_1 Z_2 (Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} E \quad (KeV) \quad (30)$$

La section efficace d'arrêt nucléaire  $S_n(E_0)$  d'un ion d'énergie  $E_0$  dans le système du laboratoire où l'atome cible est au repos (c'est-à-dire pas de recul) est donnée par [26,27]:

$$S_n(E_0)(eV \text{ cm}^2/\text{atome}) = \frac{8.462 \cdot 10^{-15} Z_1 Z_2 M_1}{(M_1 + M_2)(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} S_n(\epsilon) \quad (31)$$

Tel que [25] :

$$S_n(\epsilon) = \frac{\ln(1+1.1383 \epsilon)}{2(\epsilon + 0.01321 \epsilon^{0.21226} + 0.19593 \epsilon^{0.5})} , \quad \text{si } \epsilon \leq 30 \quad (32)$$

et

$$S_n(\epsilon) = \frac{\ln(\epsilon)}{2\epsilon} , \quad \text{si } \epsilon > 30 \quad (33)$$

D'après la figure (1-7), on remarque que :

- Pour  $\epsilon < 10$ , l'allure de la section efficace d'arrêt nucléaire  $S_n(\epsilon)$  varie selon le modèle utilisé ;
- Pour  $\epsilon \geq 10$ , l'allure est identique pour tous les modèles proposés.

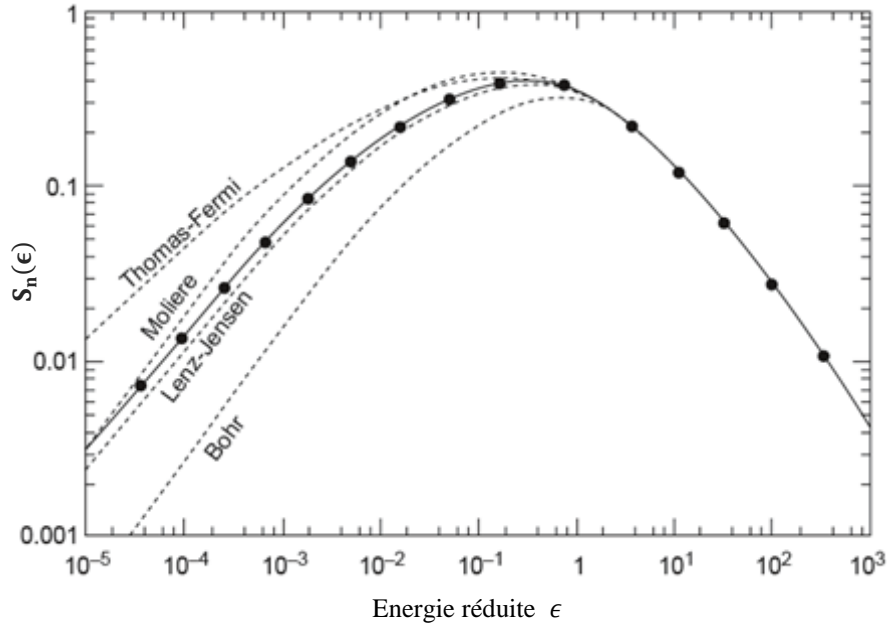


Fig. 1-7: Comparaison entre les sections efficaces d'arrêt nucléaire calculées par :  
 (—) modèle ZBL, (.....) autres modèles classiques [26].

**b) Pouvoir d'arrêt électronique:**

Les pertes d'énergie électroniques  $(dE/dx)_e$  résultent de la quantité d'énergie cédée aux électrons des atomes qui composent le matériau. Ce phénomène entraîne soit l'ionisation des atomes de la cible au voisinage de la trajectoire de l'ion incident, soit l'excitation des électrons libres de ces atomes. Le pouvoir d'arrêt inélastique  $S_i(E)$  est défini à partir des pertes d'énergie inélastiques par unité de longueur en tenant compte de la densité atomique du matériau  $N$ .

Les interactions inélastiques entre les ions incidents et les atomes cibles sont beaucoup plus complexes que les interactions élastiques. En effet, les interactions inélastiques ne peuvent pas être décrites par des chocs entre deux corps à cause des masses infiniment petites des électrons [24].

**• Domaine basse énergie**

Pour des énergies d'incidence relativement basses ( $E \leq 1 \text{ MeV}$  pour  $H_e^+$ ), le pouvoir d'arrêt électronique est proportionnel à la vitesse de la particule. Il est dit le régime de Lindhard-Scharff (LS) qui est valable pour une vitesse du projectile  $v_I$  [28,29]:

$$v_1 \leq Z_1^{2/3} v_0 = Z_1^{2/3} \frac{e^2}{h} \quad (34)$$

Avec :  $v_0 = 2.18 \times 10^8 \text{ cm.s}^{-1}$

Dans le régime L.S, la section efficace d'arrêt électronique peut être approximée par [24] :

$$S_e(E) \approx 3.846 \times 10^{-15} Z_1^{1/6} \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \sqrt{\frac{E(\text{keV})}{M_1}} \quad (\text{eV cm}^2) = KE^{1/2} \quad (35)$$

Et le pouvoir d'arrêt électronique s'écrit [24] :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = 231.6 \rho Z_1^{1/6} \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2} M_2 \sqrt{M_1}} \sqrt{E(\text{keV})} \quad (\text{eV nm}^{-1}) \quad (36)$$

Avec  $\rho$  : la densité volumique ( $\text{g cm}^{-3}$ ).

En notation réduite, on utilise la même conversion appliquée pour la perte nucléaire (eq.24) et la section efficace d'arrêt électronique s'écrit [24] :

$$S_e(\epsilon) = 0.0793 Z_1^{1/6} \frac{Z_1^{1/2} Z_2^{1/2} (M_1 + M_2)^{3/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} M_1^{3/2} M_2^{1/2}} \sqrt{\epsilon} = K \epsilon^{1/2} \quad (37)$$

Avec  $K$  de l'ordre de 0.1 à 0.2.

• **Domaine haute énergie**

Pour des énergies d'incidence élevées ( $v \gg \frac{e^2}{h}$ ), la section efficace d'arrêt électronique diminue. Elle est décrite par la formule de base de Bethe-Bloch (En absence des corrections concernant la vitesse relativiste et la structure électronique) [26] :

$$S_e(\epsilon) = \frac{4\pi e^4 Z_1^2 Z_2}{m_e v^2} \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right) \quad (38)$$

Et le pouvoir d'arrêt électronique s'écrit [26] :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = N S_e(\epsilon) = \frac{4\pi e^4 Z_1^2 N Z_2}{m_e v^2} \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right) \quad (39)$$

Avec :

$v$  : vitesse de la particule,

$m_e$  : masse au repos de l'électron,

$I$  : potentiel d'excitation moyen du matériau.

### 1-2-5.2 Cible Cristalline: Effet de Canalisation

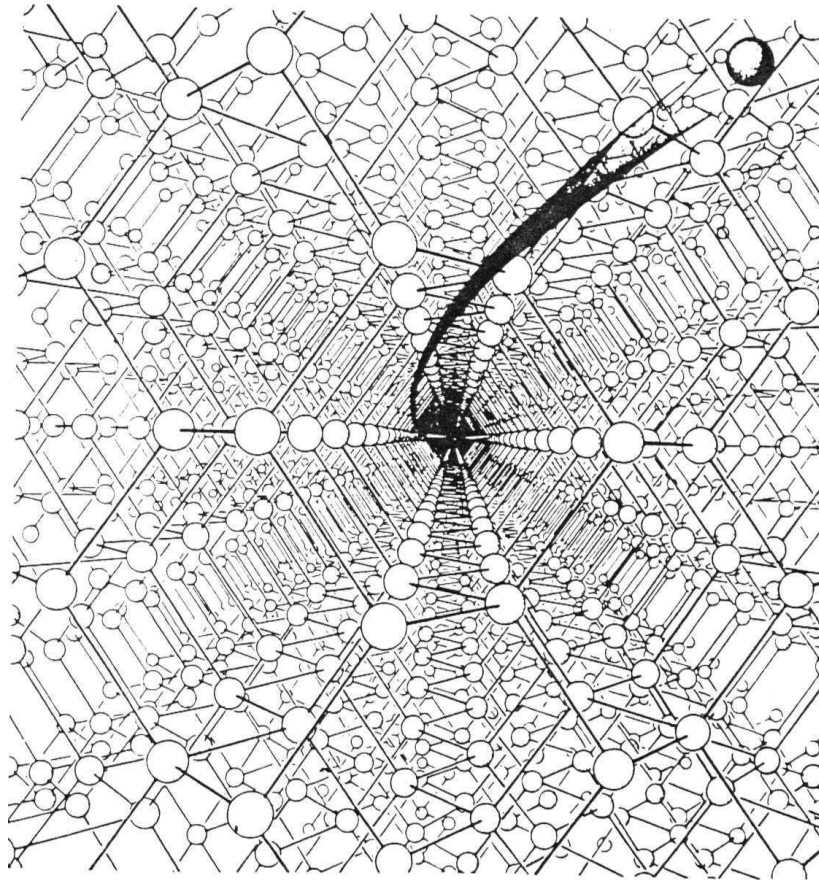


Fig. 1-8: Vue en bas d'un canal axial  $\langle 110 \rangle$  dans un cristal de structure diamant. Cas de la trajectoire spirale d'une particule canalisée [30].

Pour un matériau cible homogène et isotrope, les paramètres d'impact impliqués dans les collisions, avec les atomes cibles individuels, sont indépendants des orientations relatives de la direction du faisceau d'ions et de la cible. Par conséquent, les rendements de ces interactions sont aléatoires. Dans le cas où le matériau cible est monocristallin, les situations deviennent tout à fait différentes. La distribution des paramètres d'impact et les rendements, des processus physiques, sont révélées être fortement dépendants des orientations relatives (du faisceau et de la cible) [31]. Si un faisceau d'ions positifs pénètre dans un monocristal, le long d'axe ou d'un plan cristallins, la probabilité des événements associés aux collisions (proches des noyaux) est fortement réduite (réactions nucléaires, diffusions à grands angles...). Ceci est caractéristique du phénomène de canalisation. Il est dû au fait que les collisions binaires subies par les ions sont fortement corrélées quand le faisceau est

pratiquement aligné avec une direction cristalline. Elles tendent à repousser les ions loin des axes ou des plans cristallins. Un flux uniforme d'ions qui entrent dans un cristal, en condition de canalisation, est donc progressivement concentré au centre du canal délimité par les rangées ou les plans atomiques. La détermination des conditions pour lesquelles la canalisation peut se produire est basée sur l'approximation de Lindhard (1965) [32].

**a) Types de canalisation**

Du point de vue classique, on peut comprendre qualitativement l'effet de la canalisation comme suit ;

- Si la direction d'une particule incidente sur la surface d'un monocristal se trouve à proximité d'une direction principale de ce dernier, la particule va subir, avec une forte probabilité, une diffusion aux petits angles. Elle va passer à travers plusieurs couches d'atomes dans le cristal. Pour une direction de propagation, de la particule, proche des plans atomiques, les ions suivent des trajectoires qui oscillent en avant et en arrière dans des canaux ouverts, en passant à travers le cristal. Cette canalisation de mouvement est dite planaire (fig. 1.9).

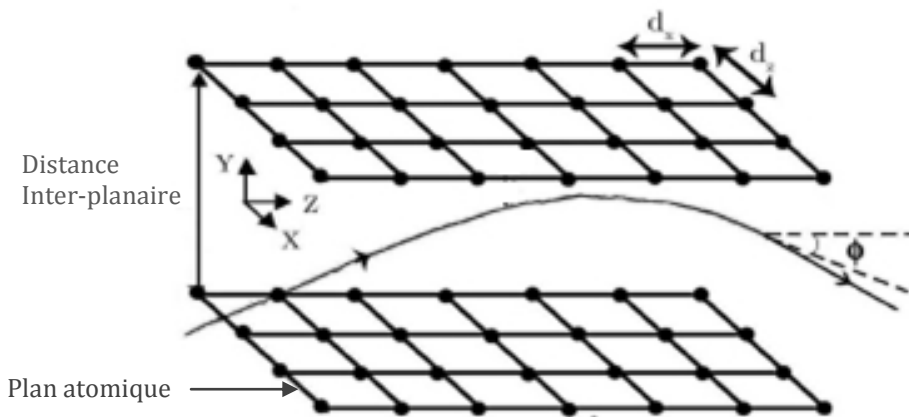


Fig. 1-9: Représentation simplifiée d'une canalisation planaire [31].

- Les mêmes phénomènes se produisent lorsque la direction d'incidence des ions se trouve à proximité d'un grand axe de symétrie du monocristal. Par conséquent, La particule subit une série de collisions corrélées et successives à petites angles ; c'est la canalisation axiale (fig. 1-10).

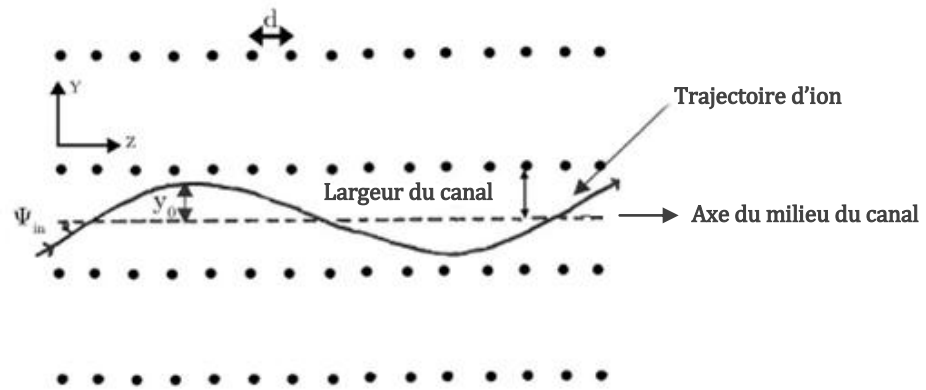


Fig. 1-10: Représentation schématique d'une canalisation axiale [31].

### b) Potentiel continu d'interaction

Comme la direction de la particule canalisée implique des collisions avec de nombreux atomes, on peut considérer que la série discrète de collisions binaires est comparable à l'interaction continue du projectile avec une rangée ou un plan uniformément chargé. On peut alors décrire l'interaction des particules canalisées, avec une rangée, en termes de potentiel continu et unique  $U(r)$ .

- Dans le cas d'une canalisation axiale, ce potentiel est donné par la relation [33]:

$$U_a(r) = \frac{1}{d} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\sqrt{Z^2 + r^2}) dz \quad (40)$$

Où :

$Z$  : la profondeur de pénétration

$d$  : la distance interatomique moyenne

$r$  : la distance perpendiculaire à la rangée

Le potentiel coulombien écranté  $V(r)$  d'un seul atome cible (dit potentiel de Lindhard) est [34]:

$$V(r) = Z_1 Z_2 e^2 \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{\sqrt{r^2 + C^2 a_{TF}^2}} \right) \quad (41)$$

Où :



$C = \sqrt{3}$  : Constante de Lindhard

$Z_1, Z_2$  : nombres atomiques du projectile et de l'atome cible respectivement

$a_{TF}$  : Distance d'écrantage de Thomas-Fermi (éq.11)

Ainsi, le potentiel axial peut être écrit comme suit [33] :

$$U_a(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \ln \left[ \left( \frac{Ca}{r} \right)^2 + 1 \right] \quad (42)$$

- Dans le cas d'une canalisation planaire, le Potentiel continu est donné par [35]:

$$Y_p(y) = (Nd_p) \int_0^{+\infty} 2\pi r dr V(\sqrt{r^2 + y^2}) \quad (43)$$

Où :

$N$  : Densité atomique volumique.

$d_p$  : Distance inter- planaire.

$y$  : Distance perpendiculaire entre le projectile et le plan (XZ) ( voir fig. 1-9).

En utilisant l'équation (41), l'expression finale du potentiel continu  $Y_p(y)$  s'écrit [33] :

$$Y_p(y) = 2\pi Z_1 Z_2 e^2 N d_p \left[ \sqrt{(y^2 + C^2 a_{TF}^2)} - y \right] \quad (44)$$

### c) Angle critique de canalisation

L'effet de la canalisation exige que les ions incidents soient alignés par rapport à un axe, ou un plan, du cristal de sorte que cette orientation ne dépasse pas un petit angle dit l'angle critique de canalisation. Celui-ci est défini comme l'angle maximum des projectiles incidents pour qu'ils demeurent dans la trajectoire du canal. L'angle critique  $\psi_c$  se calcule très simplement en écrivant la condition de canalisation ; l'énergie cinétique transverse de l'ion reste inférieure au potentiel répulsif de la rangée où du plan [33].

- Dans le cas d'une canalisation axiale, la relation de  $\psi_c$  s'écrit [33]:

$$\psi_c = \sqrt{\frac{2Z_1 Z_2 e^2}{E d}} \quad (45)$$

Tel que :

$E$  : Energie d'incidence des particules.

$d$  : Distance entre deux atomes successifs le long du canal.

- Dans le cas d'une canalisation planaire, l'angle critique  $\psi_c$  s'écrit [33]:

$$\psi_p = \sqrt{\frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2 N d_p a_{TF}}{E}} \quad (46)$$

#### d) Distribution des ions canalisés

La distribution des ions canalisés dépend de plusieurs facteurs tels-que : l'énergie et l'angle d'incidence du faisceau, l'état de la surface et la température du substrat, la présence de différents défauts cristallins produit par le processus de l'implantation lui-même. Pour illustration, on montre sur la figure (1-11), l'implantation canalisée le long de la direction  $\langle 100 \rangle$  du cristal [36]. On voit que la pénétration d'ions est plus profonde par rapport à une direction non canalisée.

La partie canalisée des ions implantés a une distribution de la forme [14]:

$$N(x) = \text{Exp}(-x/\lambda_c) \quad (47)$$

Où :  $\lambda_c$  est le parcours maximum des ions canalisés.

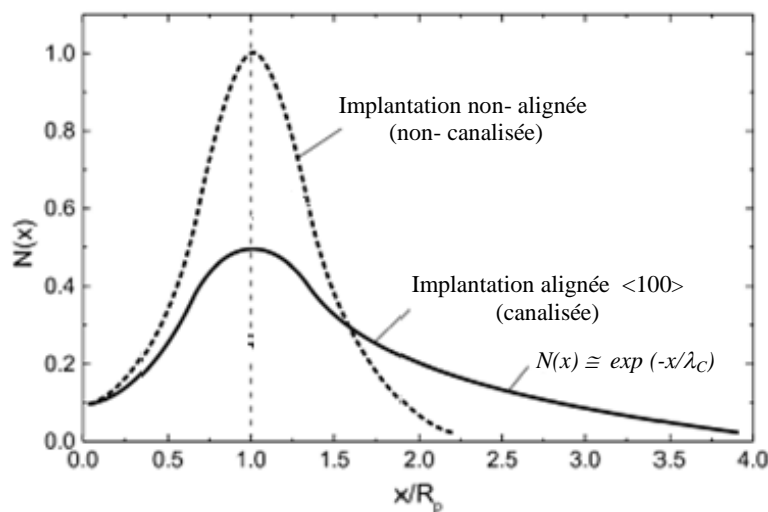


Fig. 1-11: Distribution des ions d'As implantés avec une énergie de 100 keV dans Si ; La courbe continue traduit l'implantation canalisée le long de l'axe et la courbe pointillée pour l'implantation non alignée [36].

## **1-3 Implantation ionique**

### **1-3-1 Introduction**

L'implantation ionique est un processus technologique qui consiste à créer des ions positifs (d'une impureté spécifique) à partir d'un gaz ionisé par une source à filament. Ces ions sont extraits par application d'une tension négative puis accélérés à l'aide d'un champ électrique. Ils sont focalisés et balayés et enfin implantés sur la surface de la cible. Ces ions peuvent être accélérés sous une tension de quelques KeV (implantation plasma) à quelques MeV (implantation haute énergie). La profondeur moyenne de pénétration des ions est déterminée par : le type du dopant, les matériaux cibles et l'énergie d'accélération. Les doses d'implantation correspondantes varient généralement entre  $10^{11}$  et  $10^{18}$  ion /cm<sup>2</sup> pour un courant variant de 1μA à quelques centaines de milliampères. Les ions implantés, dans le matériau, sont stoppés dans une région proche de la surface (de quelques nanomètres à quelques micromètres). L'implantation ionique est donc, avant tout, une méthode de traitement de surface [36, 37].

### **1-3-2 Domaines d'utilisation**

L'implantation ionique est utilisée dans plusieurs domaines. En microélectronique, c'est une méthode de dopage des semi-conducteurs (brevetée en 1957 par William Shockley à Bell Labs [37]). A partir de 1971, le procédé fut employé pour la fabrication des circuits intégrés. Dans le domaine des céramiques, elle est mise en œuvre pour améliorer la dureté de ces matériaux fragiles. En application pour les métaux, elle diminue l'usure adhésive, les frottements et l'oxydation. Enfin pour les polymères, L'implantation ionique sert à améliorer les coefficients de frottement [38].

### **1-3-3 Avantages et inconvénients de la technique :**

Les Avantages majeurs de l'implantation ionique sont [8, 38, 39]:

- Température de traitement inférieure à 100°C;
- La nature et la distribution en profondeur des ions implantés sont aisément contrôlables ;
- Dépassement des solubilités limites de l'élément implanté dans un matériau donné et / ou introduire des ions qui ne pourraient pas être introduits par d'autres méthodes (comme la simple diffusion ou l'épitaxie) ;

- Application sur tout type de matériaux et pour tout type d'impureté ;
- Possibilité d'implanter via une couche mince passive (SiO<sub>2</sub>) ;
- Amélioration des propriétés de surface sans affecter les propriétés volumiques des matériaux ;
- L'échelle possible des doses, et donc des concentrations visées, est relativement large : de quelques 10<sup>15</sup> à quelques 10<sup>21</sup> ions / cm<sup>3</sup>.

Malgré les nombreux avantages de cette technique, elle possède comme même quelques inconvénients tels que [8, 39] :

- Présence de dégâts d'irradiation, sous forme de lacunes, interstitiels et défauts étendus, incomplètement récupérés par le recuit post-implantation ;
- Caractère directionnel de la technique : d'où la difficulté de traiter des objets à trois dimensions par ce procédé ;
- Souvent les sources de gaz employées sont extrêmement toxiques telles que l'arsine (AsH<sub>3</sub>), et la phosphine (PH<sub>3</sub>) ;
- Equipement lourd et très coûteux.

#### **1-3-4 Description d'un implantateur ionique**

Un schéma type d'un implantateur ionique est représenté sur la figure (1-12), il comprend:

##### **1-3-4.1 Source d'ions :**

Dans laquelle des électrons émis par un filament chauffant ionisent un gaz. Par exemple, l'ionisation des gaz d'arsine AsH<sub>3</sub>, de phosphine PH<sub>3</sub> et du méthane CH<sub>4</sub> produit des ions d'arsenic As<sup>+</sup>, de phosphore P<sup>+</sup> et de carbone C<sup>++</sup>. A la sortie de la chambre d'ionisation, un champ électrostatique primaire est appliqué pour permettre l'extraction des ions du compartiment source et les pré-accélérer vers l'aimant d'analyse [36].

##### **1-3-4.2 Dispositif d'analyse magnétique :**

Un champ magnétique est utilisé pour effectuer une analyse physique du faisceau d'ions émis. La séparation des ions se fait suivant leurs masses, vitesse et valeur du champ magnétique. Une fente, placée en sortie, permet de sélectionner une seule espèce d'ion avec une énergie déterminée [8].

### 1-3-4.3 Tube d'accélération :

Le faisceau d'ion est accéléré (avec des énergies comprises entre 10 KeV et quelques MeV) par l'utilisation d'électrodes rondes (jusqu'à 20 électrodes) sous un vide qui peut arriver jusqu'à  $10^{-6}$  torr [36].

### 1-3-4.4 Système de déflexion électrostatique :

Des lentilles électromagnétiques permettent de balayer l'échantillon en refocalisant le faisceau divergé sortant avant son passage aux pastilles du scan électrostatique. A ce niveau, les ions subissent une déflexion horizontale 'x', suivie d'une autre verticale 'y'.

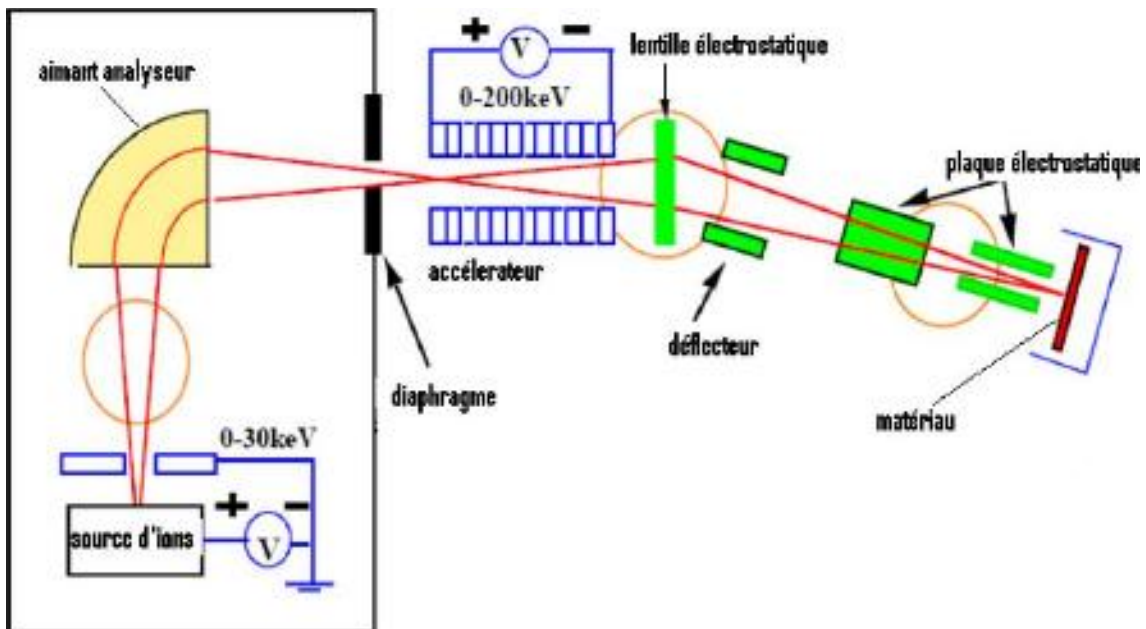


Figure 1-12 : Schéma simplifié d'un implantateur ionique [40].

### 1-3-4.5 Mesure de la dose d'implantation:

Pour mesurer le courant généré par les ions implantés, on utilise généralement des cages de Faraday. Elles sont électriquement isolées et dans lesquelles les ions du faisceau sont collectés. Le nombre des ions percutant l'échantillon peut être calculé en mesurant le courant de la décharge du substrat par un circuit électronique approprié (Fig. 1-13). La dose d'implantation

est définie par la fluence et correspond au nombre total d'ions implantés par unité de surface [36] :

$$\Phi \text{ (ion/cm}^2\text{)} = \frac{1}{A} \int_0^t \frac{I}{q} dt \quad (48)$$

$I$  étant le courant implanteur,  $t$  le temps d'implantation,  $q$  la charge de l'électron et  $A$  la surface d'implantation.

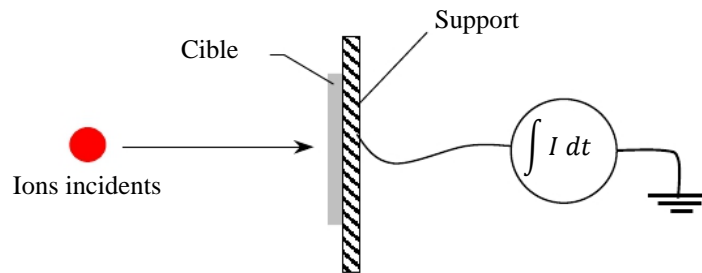


Figure 1-13 : Schéma simplifié de la mesure d'un courant électrique généré par implantation ionique [41].

## 1-4 Distribution en profondeur des ions implantés

### 1-4-1 Introduction

L'étude du profil des ions implantés dans un matériau cible est un sujet croissant essentiellement pour deux raisons : la première est que l'implantation ionique a reçu récemment de nombreuses applications et demeure encore en voie d'expansion ; la seconde est qu'il existe maintenant des techniques très précises pour déterminer les profils expérimentaux comme par exemple la technique ERDA (Elastic Recoil Detection Analysis ) et surtout la technique SIMS (Secondary Ion Mass spectrometry), ce qui permet d'effectuer des comparaisons avec les profils théoriques.

La distance totale parcourue par un ion le long de sa trajectoire est appelé parcours (noté  $R$ ). Toutefois, ce qui intéresse l'utilisateur, c'est plutôt la distance parcourue dans la direction normale à la cible, que l'on appelle le parcours projeté. Le processus de ralentissement étant essentiellement statistique d'où les paramètres pertinents sont le parcours projeté moyen (noté  $R_p$ ) et la dispersion des valeurs autour de  $R_p$  caractérisée par un écart type longitudinal  $\Delta R_p$  et transversal  $\Delta R_\perp$  [42] (Fig. 1-14).

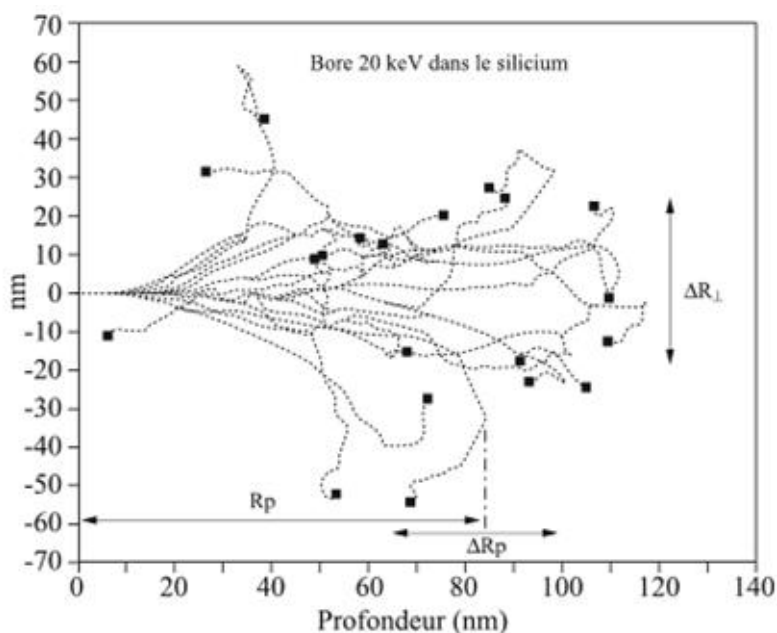


Fig. 1-14 : Simulation de parcours de vingt ions de bore de 20 keV dans le silicium (les trajectoires sont représentées par un trait pointillé et les ions à l'arrêt par un carré noir) [42].

## 1-4-2 Profil des ions implantés

### 1-4-2.1 Distribution Gaussienne

#### a) Paramètres d'une distribution gaussienne

Pour calculer les grandeurs liées à l'implantation ionique ( $R$ ,  $R_p$ ,  $\Delta R_p$  et  $\Delta R_{\perp}$ ), les notions liées à la collision binaire et aux pouvoirs d'arrêt sont appliquées au problème statistique d'une succession de collisions. Pour cela, il existe deux solutions : la résolution d'une équation de transport proposée par Lindhard [43] et une approche de type Monte Carlo [44]. Les résultats obtenus par ces deux méthodes sont similaires [42].

- Le parcours  $R$  d'un ion avec une énergie initiale  $E_0$  dans un matériau cible peut être déterminé à partir des pouvoirs d'arrêt nucléaires et électroniques ( $S_n(E)$ ,  $S_e(E)$ ) [36]:

$$R = \frac{1}{N} \int_0^{E_0} \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)} \quad (49)$$

Où  $N$  est la concentration des ions implantés.

- Le parcours projeté  $R_p$  (fig 1-15) s'écrit sous la forme [45] :

$$R_p = \frac{1}{\Phi} \int_0^{+\infty} x N(x) dx \quad (50)$$

Tel que :  $\Phi$  est la dose d'implantation (dite fluence) et  $N(x)$  est la concentration des ions implantés à une profondeur  $x$ .

Une expression analytique approximative du paramètre  $R_p$  a été proposée par Lindhard et al. [14] :

$$R_p \cong \frac{R}{1 + (M_2/3M_1)} \quad (51)$$

- La déviation standard (straggling)  $\Delta R_p$  (fig 1-15) est donnée par la relation [45]:

$$\Delta R_p^2 = \frac{1}{\Phi} \int_0^{+\infty} (x - R_p)^2 N(x) dx \quad (52)$$

D'après Lindhard et Scharff, l'écart projeté des ions peut également être approximé par la relation [36] :



$$\Delta R_p \cong \frac{2R_p \sqrt{M_1 M_2}}{3 M_1 + M_2} \quad (53)$$

- La déviation latérale  $\Delta R_{\perp}$  où l'écart du parcours projeté sur le plan perpendiculaire à la direction d'incidence est donnée par la relation [45] :

$$\Delta R_{\perp}^2 = \frac{1}{\Phi} \int_0^{+\infty} y^2 N(y) dy \quad (54)$$

### b) Profil de distribution des atomes implantés

Le profil de concentration (fig 1-15) des atomes implantés dans le cas d'un substrat amorphe peut s'écrire sous la forme gaussienne [2]:

$$N(x) = N_{max} \cdot \exp \left[ -\frac{(x-R_p)^2}{2 \Delta R_p^2} \right] \quad (55)$$

Où le maximum du profil de concentration à  $x = R_p$  est donné par [2] :

$$N_{max} = \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p} = \frac{(0.4) \cdot \Phi}{\Delta R_p} \quad (56)$$

La figure (1-15) représente une distribution gaussienne théorique. Elle est particulièrement valable dans les cas des substrats amorphes et pour des masses du projectile et de l'atome cible très proches. Si les masses  $M_1$  et  $M_2$  sont différentes, l'allure de cette distribution est modifiée (fig 1-16).

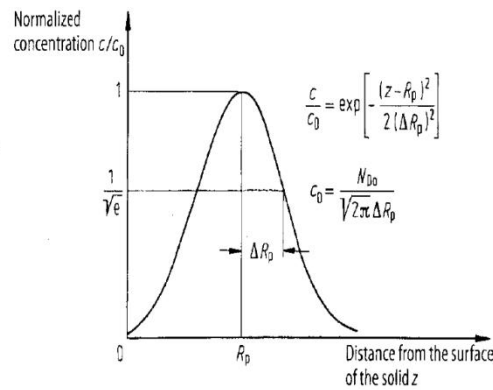


Fig. 1-15: Profil de Concentration Gaussien (et symétrique) d'ions implantés dans un substrat amorphe [46].

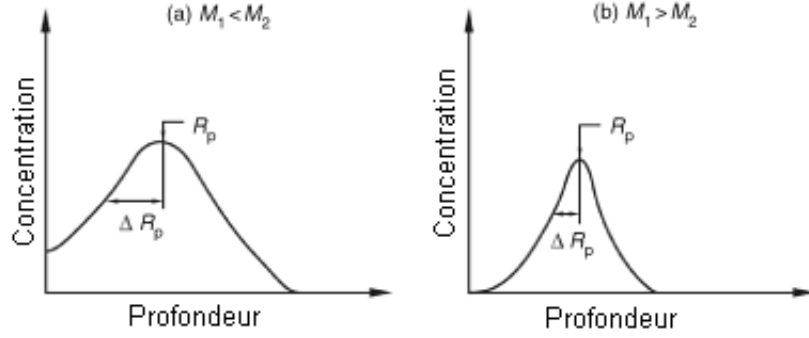


Fig. 1-16: Distribution en profondeur des ions implantés dans une cible amorphe pour :

(a) :  $M_1 < M_2$  et (b) :  $M_1 > M_2$  [47].

### 1-4-2.2 Distribution de Pearson IV

En comparant aux distributions mesurées expérimentalement, on peut constater que, sauf quand  $M_1 = M_2$ , l'approximation gaussienne n'est pas satisfaisante [42], ce qui mène à introduire deux nouveaux paramètres sans dimension qui caractérisent l'allure de la distribution [45]:

- Paramètre décrivant l'asymétrie (skewness) du profil de distribution donné par la relation :

$$\gamma = \frac{1}{\Phi \Delta R_p^3} \int_0^{+\infty} (x - R_p)^3 N(x) dx \quad (57)$$

- Paramètre décrivant le caractère pointu ou écrasé du pic de concentration maximum (kurtozis) exprimé par:

$$\beta = \frac{1}{\Phi \Delta R_p^4} \int_0^{+\infty} (x - R_p)^4 N(x) dx \quad (58)$$

Les valeurs  $\gamma \approx 0$  et  $\beta \approx 3$  correspondent à une distribution gaussienne.

Le profil de concentration (dit distribution de type Pearson IV) est donné par [42]:

$$f(x) = k \left[ b_2(x - R_p)^2 + b_1(x - R_p) + b_0 \right]^{1/2b_2} \exp \left[ -\frac{b_1/b_2 + 2b_1}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \operatorname{arctg} \frac{2b_2(x - R_p) + b_1}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \right] \quad (59)$$

Où k est une constante obtenue grâce à la condition de normalisation [42] :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1 \quad (60)$$

Les constantes  $b_0$ ,  $b_1$  et  $b_2$  sont exprimées par [42] :

$$\begin{aligned}
 b_1 &= -\frac{\gamma \Delta R_p (\beta + 3)}{A} & b_0 &= -\frac{\Delta R_p^2 (4\beta - 3\gamma^2)}{A} \\
 b_2 &= -\frac{(2\beta - 3\gamma^2 - 6)}{A} & A &= 10\beta - 12\gamma^2 - 18
 \end{aligned}
 \tag{61}$$

Le maximum d'une distribution Pearson se situe à  $x = R_p + b_1$ . Suivant le signe du paramètre  $\gamma$ , il existe deux formes différentes de la distribution [42] :

- **Si  $\gamma < 0$** , le pic est au-delà de  $R_p$  et la concentration est plus importante vers la surface que vers la profondeur. C'est le cas pour des projectiles légers dans une cible lourde. Par exemple du bore dans le silicium (Fig 1-17-a),
- **Si  $\gamma > 0$** , La situation est inverse. C'est le cas d'un projectile lourd dans une cible légère, comme de l'arsenic dans le silicium (Fig 1-17-b).

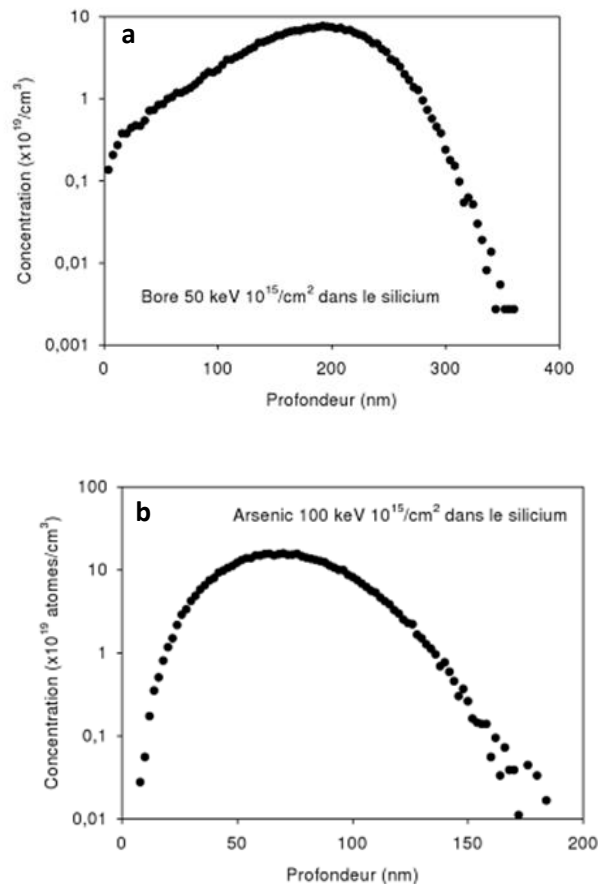


Fig. 1-17: Profils Simulés par le code SRIM des atomes : B (50keV/  $10^{15} \text{cm}^{-2}$ ) (a) et As (100keV/  $10^{15} \text{cm}^{-2}$ ) (b), implantés dans du silicium [17].

## 1-5 Défauts d'implantation

### 1-5-1 Processus de création de défauts d'implantation

Lors d'une collision entre un ion incident d'énergie  $E$  et un atome de la cible, l'énergie transférée à celui-ci est  $T$ . Si cette énergie est supérieure à une énergie seuil  $E_d$  appelée énergie de déplacement (variant généralement de 15 à 50 eV), l'atome de recul ainsi libéré pourra à son tour parcourir une certaine distance dans la cible en cédant son énergie en collisions nucléaires et électroniques. Ainsi de suite, il se crée une succession de déplacements atomiques jusqu'à ce que l'énergie de chaque atome en cascades et en particulier celle de l'ion primaire, soit inférieure à  $E_d$ . La durée totale de la cascade est très courtes : moins de la picoseconde [42].

Suite aux déplacements des atomes de la cible, des lacunes seront créées pour former des défauts simples lacune-interstitiel (appelés les paires de Frenkel) ou des défauts plus compliqués (dislocations, zones amorphes ...). Cette création dépend du rapport  $M_1/M_2$ , de l'énergie d'ion, de la dose, du courant et de la température de la cible. Pour des énergies de projectiles suffisamment élevées ( $E >$  quelques keV), la distance entre les atomes du premier recul PKA (primary knock-on atoms) est remarquable. En pratique, l'ordre de grandeur du nombre des défauts créés (dans le silicium à basse température) est de quelques centaines d'atomes déplacés par ion incident pour un projectile léger, quelques milliers pour une masse moyenne et quelques dizaines de milliers pour un projectile lourd [42] (fig.1-18).

La structure cristalline vue par l'ion incident influence aussi sur l'état d'endommagement cristallin. Un ion canalisé interagit principalement par interaction électronique avec le réseau cible et l'endommagement sera moins important.

Pour une dose d'ions implantés, l'endommagement final dans le réseau cristallin sera une superposition des régions perturbées créées par chaque ion tout au long de sa trajectoire. Si la dose devient importante, l'ordre cristallin sera complètement détruit et une couche amorphe sera créée tout autour. Elle aura tendance à s'élargir vers la surface et en volume [48] (fig. 1-19).

D'autre part, les transferts sous le seuil ( $E_d$ ) représentent souvent une part significative de l'énergie cédée au milieu ralentisseur et ils constituent parfois la majorité des événements. Ceci se traduit par une création importante de phonons, c'est-à-dire des vibrations thermiques et donc une élévation locale de la température.

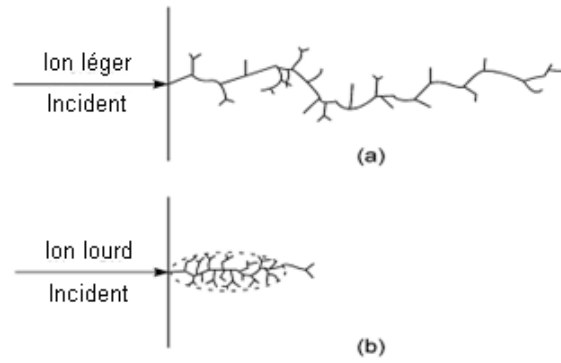


Fig. 1-18: Schématisation des endommagements causés par un ion léger (a) et un ion lourd (b) avec la même énergie d'incidence [49].

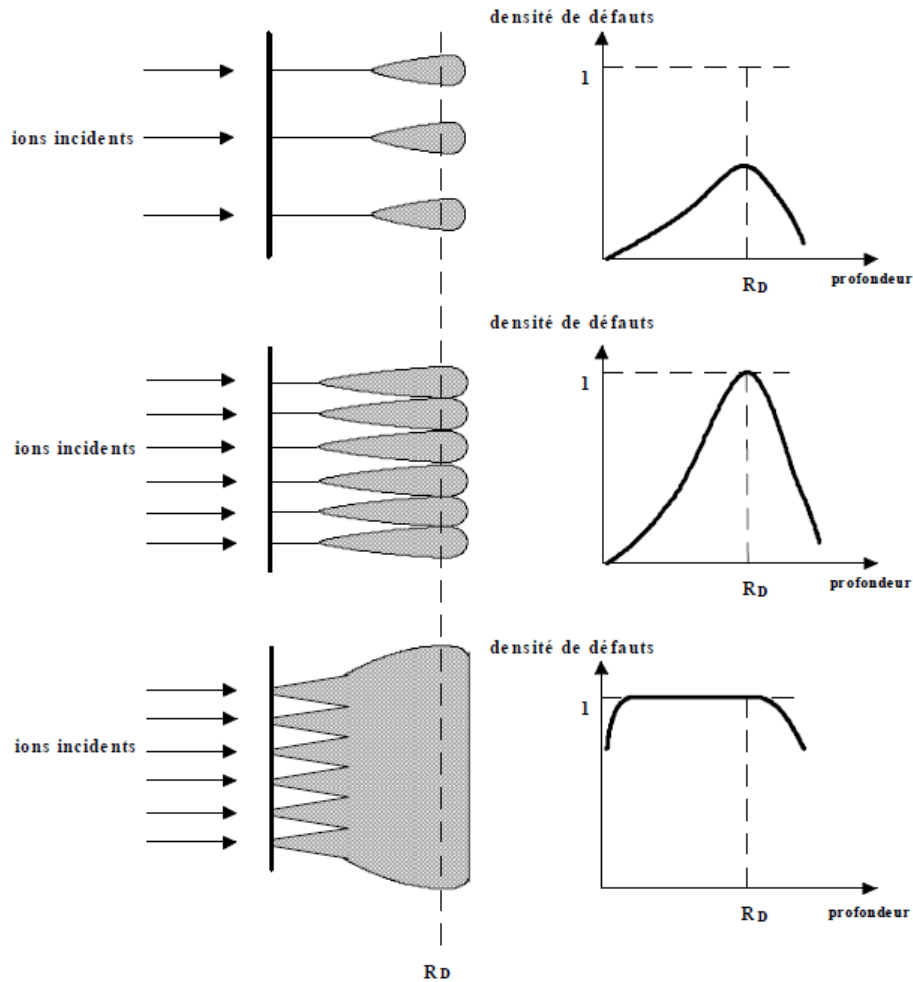


Fig. 1-19: Création de défauts autour des ions implantés pour un nombre d'ions croissant jusqu'à la génération d'une large couche amorphe [50].

### 1-5-2 Profil des défauts d'implantation

Comme pour les ions implantés, les défauts ont une distribution statistique avec un maximum  $R_D$  et un écart type de distribution  $\Delta R_D$ . Par rapport au parcours projeté des ions implantés, la profondeur moyenne des défauts  $R_D$  possède une valeur plus faible et elle est toujours décalée vers la surface [36].

La densité de défauts est maximale quand l'énergie perdue, dans les collisions nucléaires,  $\left(\frac{dE}{dx}\right)_n$  est maximale. Ceci se produit à la profondeur  $R_D$ . Autour de cette valeur, les profils de défauts sont quasiment gaussiens et les variations de  $R_D$  et  $R_p$ , avec l'énergie incidente suivent la même variation. Ceci se produit Lorsque le pouvoir d'arrêt nucléaire est maximal alors que les ions ont toujours une énergie et ne sont pas encore implantés. La distribution de défauts est assimilée à une distribution gaussienne centrée à  $R_D$  et dont l'écart type serait  $\Delta R_D$  (Fig.1-20) [8].

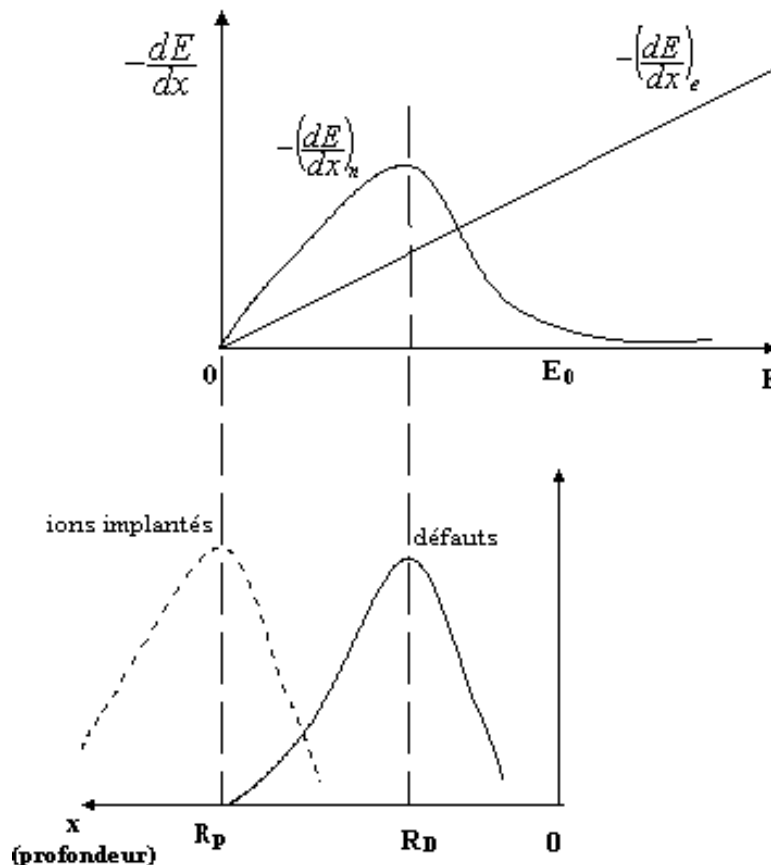


Fig. 1-20: Détermination de la profondeur moyenne des défauts et du parcours projeté des ions à partir du pouvoir d'arrêt [50].

### 1-5-3 Nombre de défauts ponctuels et Dose critique d'amorphisation

Le nombre moyen d'atomes délocalisés par un ion incident s'exprime par [48]:

$$N_d = \frac{E}{2E_d} \quad (62)$$

Dans le cas d'une dose d'implantation  $\Phi$ , le nombre d'atomes déplacés par unité de surface est donné par [40]:

$$N_d = \frac{\Phi E}{2E_d} \quad (63)$$

Cette relation est valable dans le cas des collisions élastiques. Pour la généraliser, il faut remplacer l'énergie incidente par l'énergie perdue par les collisions nucléaires. L'équation de la densité de défauts par unité de volume est [48]:

$$N_d(x) = \frac{\left(\frac{dE}{dx}\right)_n}{2E_d} \Phi \quad (64)$$

Le maximum de la fonction  $N_d(x)$  correspond à  $x = R_D$ . Si la dose d'implantation augmente, la densité de défauts augmente jusqu'à une valeur comparable à la densité atomique du matériau cible [48]:

$$N_d(x) \approx n_{\text{atome}} \quad (\text{en } \text{cm}^{-3})$$

On dit qu'il y a amorphisation quand on atteint cette concentration. La dose d'implantation est alors appelée dose critique d'amorphisation  $\Phi_c$  qui s'écrit [48] :

$$\Phi_c = \frac{2E_d n_{\text{atome}}}{\left(\frac{dE}{dx}\right)_{n,\text{max}}} \quad (65)$$

En pratique, Le nombre d'atomes déplacés et mesuré expérimentalement est inférieur à l'estimation théorique. Ceci est dû essentiellement à [48]:

- la Canalisation des particules qui est dépendante de l'orientation du réseau cristallin cible,
- la Recombinaison de défauts lacunes-interstitiels,
- l'activation de la diffusion thermique des défauts, notamment des interstitiels et lacunes isolés par le réchauffement de la cible par l'implantation ionique.

### 1-6 Recuit post-implantation

Suite à l'implantation ionique, la cible semiconductrice monocristalline présente un nombre considérable de défauts structuraux en fonction de la quantité d'ions implantés. Par conséquent, il est nécessaire de réaliser un traitement thermique (dit Recuit post-implantation).

Le recuit thermique post-implantation sert d'une part à guérir les défauts structuraux générés par l'implantation mais également à entraîner la diffusion des dopants implantés vers des sites substitutionnels où ils seront électriquement actifs. Schématiquement, l'idéal d'un processus de recuit est montré sur la Figure (1-21). Au départ, la distribution de défauts est centrée à  $R_D$ . Elle est maximale mais, après recuit, doit tendre vers zéro. Inversement, la concentration des impuretés en site substitutionnel est (pratiquement) nulle. Après recuit, elle croît avec une distribution en profondeur centrée sur  $R_p$ . Idéalement, si toutes les impuretés s'activent (passage en site substitutionnel), la distribution finale en impuretés activées (substitutionnelles) doit se confondre avec la distribution en impuretés implantées [8].

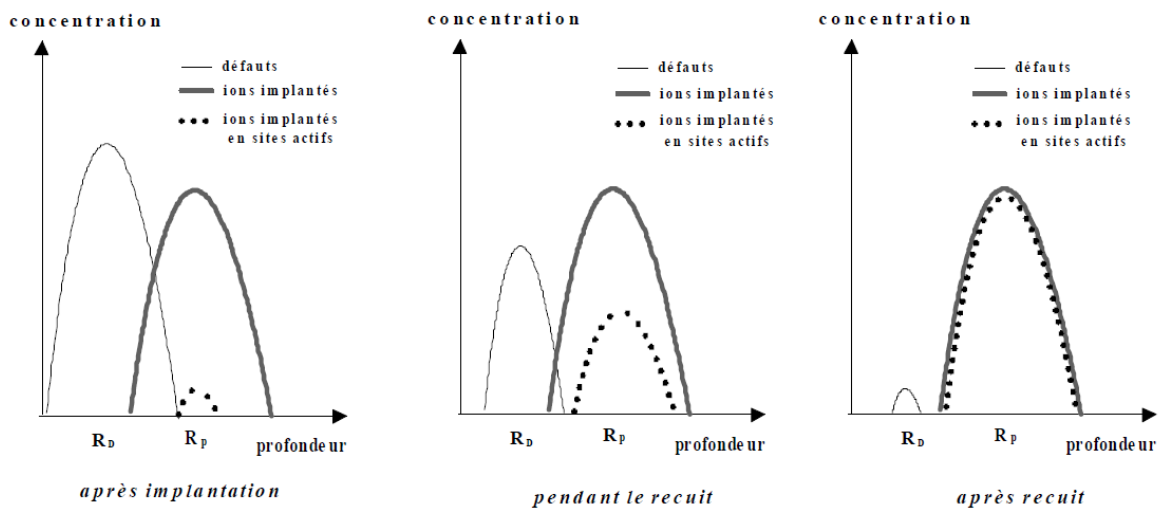


Fig. 1-21 Schémas décrivant l'évolution des distributions en profondeur des défauts, des impuretés implantées et des impuretés en sites substitutionnels [48].



### 1-6-1 Différents types de recuit thermique

Un traitement thermique consiste à jouer sur trois éléments :

- la température,
- le temps de maintien,
- et le milieu de séjour durant le maintien en température (neutre ou réactif).

Il s'effectue en trois phases différentes :

- la montée en température (vitesse de chauffage),
- le maintien en température,
- le refroidissement.

Par rapport au mode d'apport d'énergie thermique, les techniques de recuit post-implantation se classent généralement en trois catégories :

#### a) Recuit à flux thermique

Pour ce recuit, la température du matériau pendant le recuit décroît en s'éloignant de la zone chauffée localement. Cette zone est créée par un balayage électronique ou laser de quelques millisecondes, avec un diamètre du faisceau compris entre 5 et 500  $\mu\text{m}$  et une vitesse de balayage de 1 à 100  $\text{cm. s}^{-1}$ .

#### b) Recuit adiabatique

Ce type de traitement est caractérisé par une extrême brièveté du recuit thermique (elle n'excède pas quelques centaines de nanosecondes). Par conséquent, la chaleur diffuse peu dans le matériau chauffé.

Pour réaliser ce type de recuit, on utilise généralement des faisceaux pulsés laser, électroniques ou ioniques, de largeur de l'ordre du centimètre carré. Pendant les recuits pulsés, la température de surface excède celle de fusion et la recristallisation se réalise en phase liquide.

Cette méthode présente un grand intérêt grâce au peu de défauts résiduels. Elle a lieu Si la recristallisation se fait à partir d'une interface loin de la zone endommagée. L'activation électrique des concentrations de dopants bien supérieures à la solubilité limite d'incorporation est alors possible. Par contre, on souffre d'une non-reproductibilité des faisceaux pulsés et les gradients thermiques importants peuvent induire des défauts dans le substrat [48].

### c) Recuit isotherme

C'est le recuit dont la durée est suffisamment longue pour avoir une répartition uniforme de la chaleur dans le matériau traité. Dans cette catégorie, on trouve les recuits dits "classiques" à tube en quartz horizontal employés industriellement. La durée de traitement en phase isotherme est bien supérieure à celle de la phase transitoire, avec une durée typique de plusieurs dizaines de minutes [48].

Actuellement, on tend vers l'utilisation de techniques appelées recuit thermique rapide (Rapid Thermal Annealing - **RTA**). Le terme RTA recouvre l'ensemble des techniques utilisant des temps courts (les plus courts possibles) tout en conservant l'isothermie. En d'autres termes, bien que limitée au maximum, la durée du traitement doit permettre une répartition uniforme de la chaleur dans le matériau considéré. Ceci possède la différence par rapport au mode de flux thermique (pour lequel la température décroît au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la zone chauffée localement). Il diffère aussi du mode adiabatique, pour lequel la chaleur diffuse peu dans le matériau chauffé pendant le traitement (du fait de l'extrême brièveté du recuit tel que le recuit « lasers » par exemple). Le RTA est un outil très fiable pour faire face à la problématique majeure de l'implantation ionique : nécessité de minimiser la quantité de dopants redistribués pendant l'activation et reconstruction du réseau cristallin. Les rampes de montée et de descente restent de l'ordre de la minute et sont facilement programmables. C'est donc une technologie-clé dans la fabrication des dispositifs [8].

Dans notre travail, c'est justement ce type de recuit qui a été employé. Les échantillons ont été recuits suivant le mode RTA, permettant de limiter la diffusion importante des impuretés implantées. Il est bien adapté à l'étude de couches très minces.

## 1-6-2 Cinétique de guérison des défauts

### 1-6-2.1 Défauts ponctuels

On distingue deux types de défauts ponctuels fondamentaux dans les semiconducteurs élémentaires comme le silicium. Le premier est la lacune notée V (Vacancy) qui correspond à un atome manquant dans un réseau cristallin parfait. Le second est l'autointerstitiel noté I (Interstitial) et qui représente un atome de silicium intercalé dans le réseau périodique du silicium. Un défaut ponctuel rendu mobile par le recuit post-implantation pourra disparaître suite à différents mécanismes illustrés sur la figure (1-22) [50,51] :

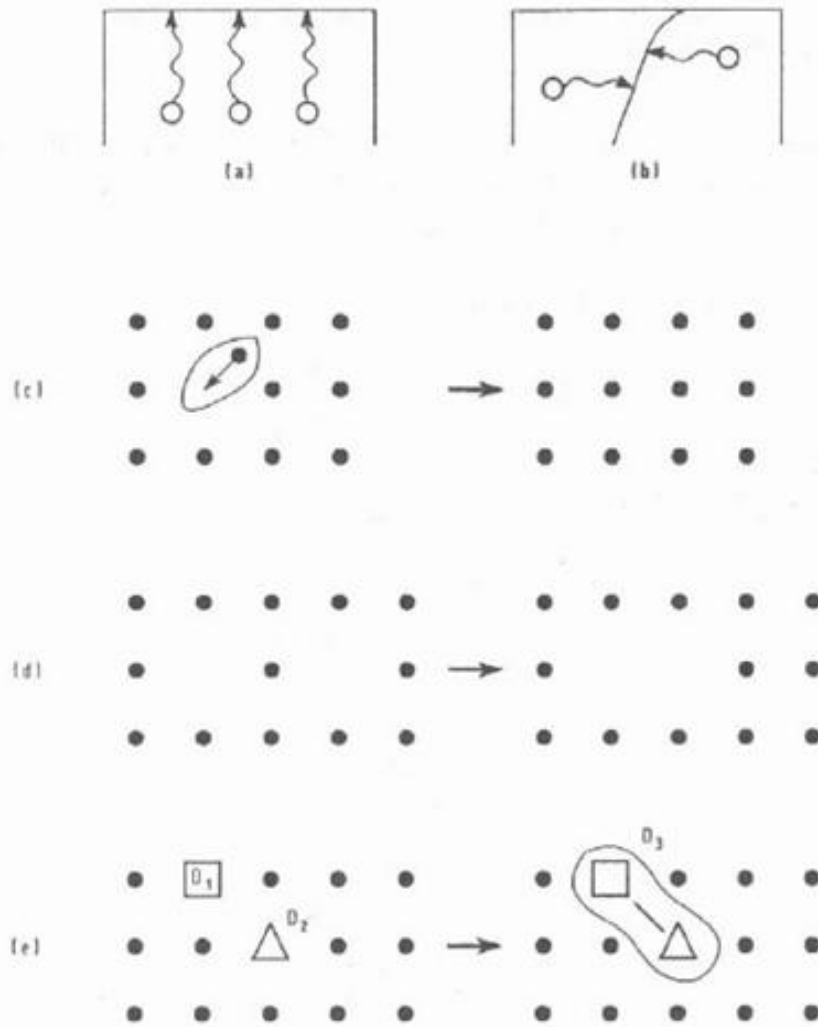
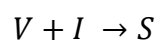


Fig. 1-20 : Représentation de quelques mécanismes d'évolution de défauts cristallins [50]:

- a) piégeage à la surface
- b) piégeage sur des dislocations
- c) recombinaison lacune – interstitiel
- d) association de lacunes
- e) formation d'un défaut complexe

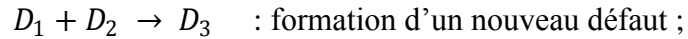
Le défaut peut donc disparaître [8]:

- soit par piégeage à la surface ou sur une dislocation ;
- soit par recombinaison. Le défaut élémentaire induit par bombardement (i.e. un couple lacune-interstitiel) se recombine

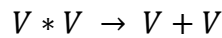
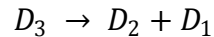


L'interstitiel se recombine avec une lacune, et ainsi on a l'annihilation du défaut soit :

- par formation d'un complexe par association de deux défauts identiques (formation d'une dilacune) ou par association de deux défauts différents (formation d'un nouveau défaut)



- Soit par dissociation d'un défaut complexe pour donner un des défauts simples qui va pouvoir disparaître par l'un des mécanismes précédents.



### 1-6-2.2 Couche amorphe

Dans la plupart des semiconducteurs la couche amorphe réalisée par implantation ionique est un état métastable par rapport à l'état cristallin. Le recuit thermique va entraîner le passage amorphe/cristallin à partir de la phase cristalline qui constitue le germe de recristallisation. La couche amorphe créée garde en mémoire l'état cristallin du matériau. L'état cristallin étant plus stable que la phase amorphe, nous avons tendance (dûe à l'agitation thermique même à température ambiante) à la formation de zones cristallines. Cette recristallisation formée directement dans la phase amorphe ne suit pas forcément l'ordre initial du cristal. Ce qui conduit à la formation de petites zones polycristallines désorientées. L'augmentation de la température et du temps de maintien accélèrent ce processus et pour rétablir l'ordre cristallin initial, la recristallisation doit se faire à partir de l'interface amorphe/cristal [48].

Les figures ci-dessous, présentent la recristallisation des couches amorphes dans le cas où celles-ci sont formées en surface (fig.1-23) ou amorphe enterrée (fig.1-24).

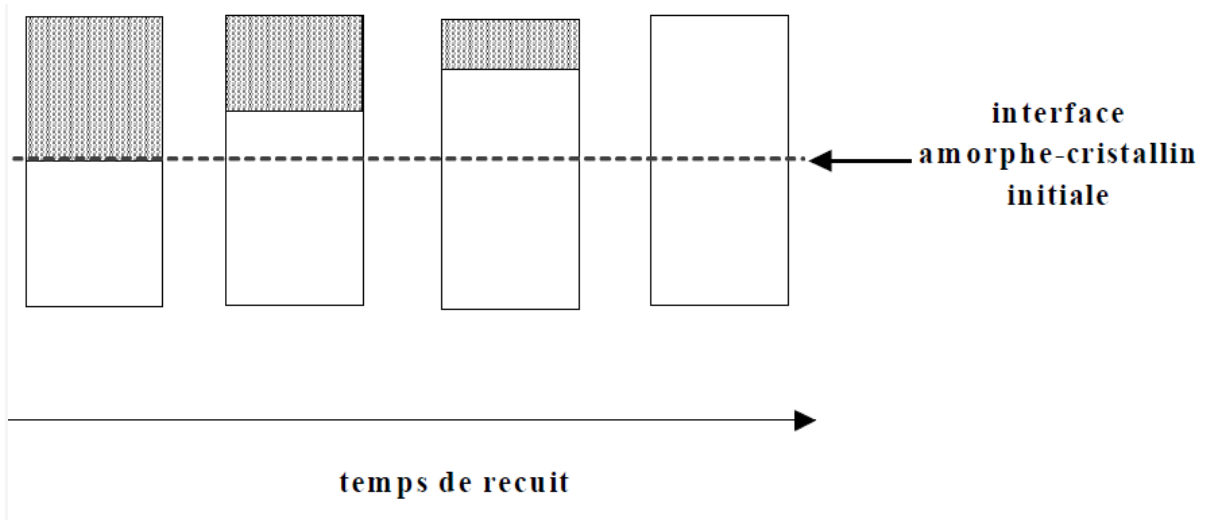


Figure 1-23 Recrystallisation d'une couche amorphe pendant le recuit post-implantation pour une implantation superficielle [48].

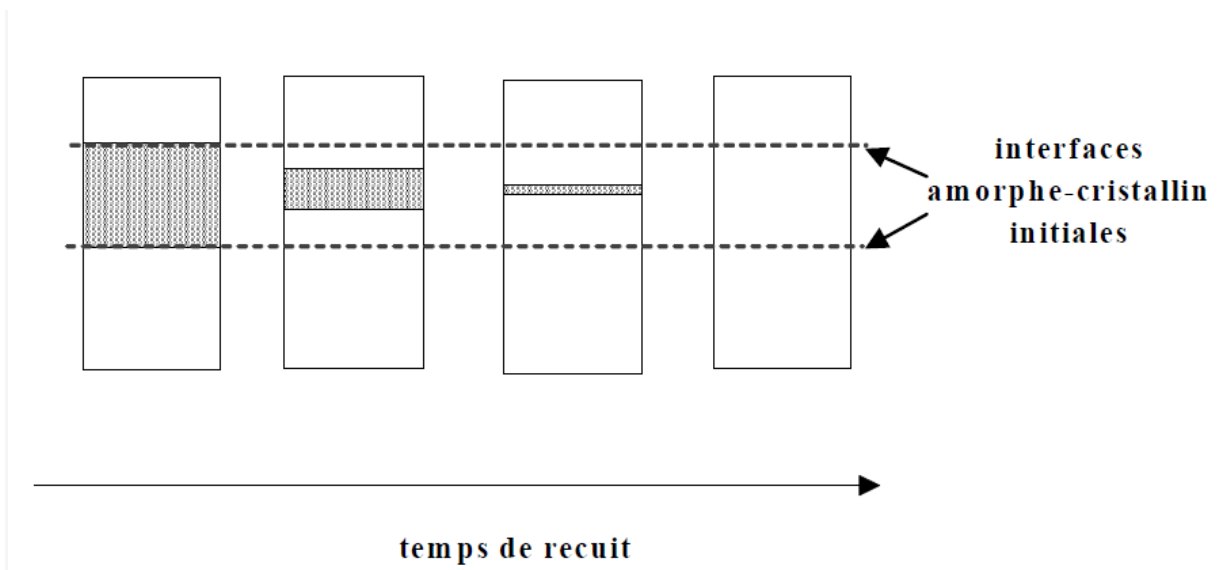


Figure 1-24 : Recrystallisation d'une couche amorphe enterrée pendant le recuit post-implantation pour une implantation profonde à forte énergie [48].

Dans le deuxième cas, l'épitaxie en phase solide se réalise à partir de deux interfaces cristallin/amorphe. en ayant en surface une région qui bien qu'endommagée, reste cristalline. Dans les deux cas, le recuit post-implantation est un recuit isotherme. Cela signifie une température homogène dans tout le substrat y compris la couche amorphe.

## 1-7 Programmes de Simulation

Il existe plusieurs programmes permettant de modéliser le déplacement des atomes dans une cible irradiée. Ces programmes ont été créés spécialement pour simuler des implantations ioniques. Les codes existants peuvent être classés en deux groupes principaux :

- Programmes utilisant la dynamique moléculaire sur la base de la résolution de l'équation de mouvement de Newton c'est une fonction du temps, qui a été proposée par Harrison pour la simulation de la pulvérisation [24]. La méthode de la dynamique moléculaire est très précise et permet le calcul pour des énergies inférieures à 25 keV. Cependant, son grand défaut est d'être coûteuse en temps de calcul. À titre d'exemple, nous pouvons citer, le code QDYN [43].
- Programmes basés sur l'approximation des collisions binaires (de l'anglais, Binary collision Approximation, BCA). C'est une méthode plus simple à mettre en œuvre et plus rapide en temps de calcul. Le terme « BCA » signifie aussi qu'une collision se produit toujours et seulement entre deux atomes: un atome en mouvement et un atome au repos. L'inconvénient majeur de ces programmes c'est qu'ils ne sont pas fiables pour des énergies d'implantation relativement basses (quelques KeV). Parmi ces programmes, on peut citer : le code "MARLOW" [52] qui est le premier à utiliser les méthodes de Monte-Carlo, le code TRIM et le code Crystal TRIM.

Dans notre travail, on a utilisé les deux derniers programmes cités ci-dessus. Le programme TRIM (Transport of Ions in Matter ) utilisé généralement dans le cas des cibles amorphes et le programme Crystal-TRIM conçu pour le cas monocristallin.

### 1-7-1 Programme TRIM

Il est basé sur l'approximation des collisions binaires. En utilisant les techniques de Monte-carlo, le programme TRIM a d'abord été conçu pour modéliser le parcours des ions incidents dans une cible amorphe [53]. Il a été ensuite modifié de façon à tenir compte des collisions des atomes de recul pour l'étude de la pulvérisation [54]. Le code TRIM s'applique pour une cible contenant jusqu'à quatre éléments dans trois couches distinctes et il permet le choix des projectiles (énergie, angle d'incidence, dose) et des cibles (les éléments constituants). TRIM peut générer les données concernant la distribution finale en 3D, ainsi que les phénomènes

associés à la perte d'énergie comme les endommagements de la cible, la quantité et la nature des atomes pulvérisés, l'ionisation et la production des phonons [55]. Les orientations cristallines ne sont pas prises en compte : la cible est considérée comme amorphe et le paramètre caractérisant le composé est sa densité.

### 1-7-1.1 Echange d'énergie entre projectile et atome cible

Dans le programme TRIM, on considère un ion incident  $M_1$  d'énergie  $E$ . Après sa collision avec un atome  $M_2$ , l'énergie de l'ion devient  $E_1$  et celle transférée à l'atome cible est  $E_2$ . Notant que  $E_d$  est l'énergie de déplacement d'un atome cible de son site. Nous distinguons les cas suivants [55] :

- Si  $E_1 > E_d$  et  $E_2 > E_d$ , l'atome cible quitte son site (création d'une lacune).
- Si  $E_1 > E_d$  et  $E_2 < E_d$ , l'atome cible vibre et ne quitte pas son site (création de phonons).
- Si  $E_1 < E_d$  et  $E_2 > E_d$ , l'atome  $M_1$  prend le site de  $M_2$  (remplacement) et dissipe l'énergie  $E_1$  en vibration (création des phonons, lorsque  $M_1 \approx M_2$ ). Si  $M_1 \neq M_2$ , l'atome  $M_1$  prend un interstice et produit des phonons.
- Si  $E_1 < E_d$  et  $E_2 < E_d$ , l'atome  $M_1$  occupe un site interstitiel et l'énergie  $E_1 + E_2$  donne des phonons.

### 1-7-1.2 Calcul des pouvoirs d'arrêt

Le calcul du pouvoir d'arrêt nucléaire est effectué par la formule donnée par Ziegler Biersack et Littmark (ZBL) (éq. 26) dont le potentiel interatomique écranté utilisé est le potentiel universel (ZBL) (eq. 09).

Quant au pouvoir d'arrêt électronique, pour des ions lourds à basses vitesses, il est calculé en se basant sur la théorie LSS (collision avec gaz d'électrons libres). Cette dernière est liée à l'approximation de densité locale qui considère le gaz ( avec lequel la particule interagit) de densité différente. Ce calcul est valable pour des collisions distantes. Pour les collisions proches, le pouvoir d'arrêt électronique doit être corrigé en se basant sur la théorie de Brandt-Kitagawa pour estimer la charge effective du projectile [18,27]. Pour les vitesses élevées, le pouvoir d'arrêt électronique est calculé par la formule de Bethe (éq.39) [20].

### 1-7-1.3 Calcul des profils des ions, des atomes de recul et des défauts

Pour déterminer les profils de distribution des projectiles et des défauts, il y'a deux types de calcul dans la code TRIM :

- **Calcul rapide**

Ce type de calcul ne prend pas en compte les cascades des atomes cibles et limite le calcul aux trajectoires des ions. Il s'exécute avec un temps très court et il est basé sur la méthode de Kinchin-Pease [55], L'ion incident est suivi jusqu'à ce qu'il cède suffisamment d'énergie aux cibles de sorte que l'énergie restante soit inférieure à un seuil déterminé.

- **Calcul approfondi**

En plus de la poursuite des projectiles, cette option poursuit chaque atome reculé jusqu'à ce que son énergie devienne insuffisante pour déplacer n'importe quel atome de la cible [55]. Lorsqu'une collision entre l'ion et l'atome cible conduit à faire reculer ce dernier, le code TRIM s'arrête à suivre le trajet d'ion et commence à suivre le trajet de l'atome reculé. Ce dernier subit à son tour des collisions qui peuvent mettre d'autres atomes cibles en mouvement. Une fois tous ces atomes de recul atteignent une énergie de coupure, le programme revient à nouveau à suivre le mouvement d'un nouvel ion implanté avec son énergie incidente et sa nouvelle direction. Le processus progresse jusqu'à ce qu'une autre collision statistiquement sélectionnée a lieu avec sa branche de reculs. La procédure continue aussi longtemps que l'énergie de la particule incidente demeure supérieure de l'énergie du seuil de déplacement  $E_d$ . Autrement dit, le code TRIM enregistre l'historique de la collision de l'ion primaire et tous les événements secondaires puis il passe à suivre le tir d'un nouvel ion dans la cible [13].

### 1-7-1.4 Calcul des phonons

La création des phonons dans la cible se produit par la perte d'énergie des projectiles et aussi par la perte d'énergie des atomes de recul de la cible. Elle a lieu lorsque ces deux énergies sont inférieures à l'énergie du seuil de déplacement  $E_d$ . Le nombre des phonons créés est déduit de ces énergies produisant des vibrations dans le spécimen [55].



## 1-7-2 Programme Crystal- TRIM

### 1-7-2.1 Description du programme

Dans notre travail, on a utilisé principalement ce code. Il à été développé en se basant sur les codes MARLOW et TRIM, il est plus performant par rapport au code TRIM puisque il simule les effets d'implantation d'ions dans une cible mono-cristalline de silicium, de germanium ou de toute structure diamant. Il tient compte de différents paramètres :

- Paramètres liés faisceau d'ion:
  - Energie et dose (Fluence) d'implantation ;
  - Angle d'incidence du faisceau (le tilt) ;
  - type du faisceau (*i.e.* atomique ou moléculaire).
- Paramètres lié au substrat:
  - Orientation cristallographique
  - Température du substrat
  - présence de couches superficielles à composition arbitraire (jusqu'à 10 couches) [56].

#### a) Hypothèses du programme

Le code Crystal-TRIM est basé sur les hypothèses générales suivantes [57]:

- le changement de la composition de la cible, par l'implantation, est négligée ;
- les atomes de la cible sont au repos avant toute collision avec un projectile;
- Les projectiles se déplacent en lignes droites entre les collisions binaires avec les atomes cibles. Ces lignes correspondent aux trajectoires asymptotiques du projectile avant et après les collisions ;

#### b) Systèmes de coordonnées utilisés

Dans l'algorithme du Crystal-Trim, deux systèmes de coordonnées sont utilisés :

- le système du cristal (centre des masses ion-atome cible) qui décrit le mouvement des projectiles,
- le système de la cible (système du laboratoire) pour décrire : (i) le dépôt d'énergie électronique et nucléaire, (ii) le nombre d'atomes déplacés ou arrêtés dans certain élément de volume et (iii) l'incidence, la rétrodiffusion où la transmission d'ion.

### 1-7-2.2 Etude des collisions binaires

#### a) Angle de diffusion et énergie transférée

Dans le code Crystal-TRIM, l'interaction répulsive entre deux atomes est décrite en utilisant le potentiel interatomique ' universel ' (équation 09). La fonction d'écran universelle  $\Phi(x)$  utilisée est calculée suivant le modèle quantique (ZBL) (équation 18).

La figure (1-25) décrit, dans le référentiel barycentrique, la collision entre l'ion incident de masse  $m_1$  et d'énergie cinétique  $E$  avec un atome, initialement immobile et de masse  $m_2$  [58]. Le triangle superposé aux deux orbites des particules s'appelle le triangle de diffusion. Il est constitué de différentes grandeurs comme le paramètre d'impact  $p$ , la distance minimale d'approche  $R_0$ , les rayons de courbure des trajectoires au minimum approche  $\rho_1$  et  $\rho_2$  et  $(\delta_1, \delta_2)$  deux termes de correction pour fermer le triangle [58].

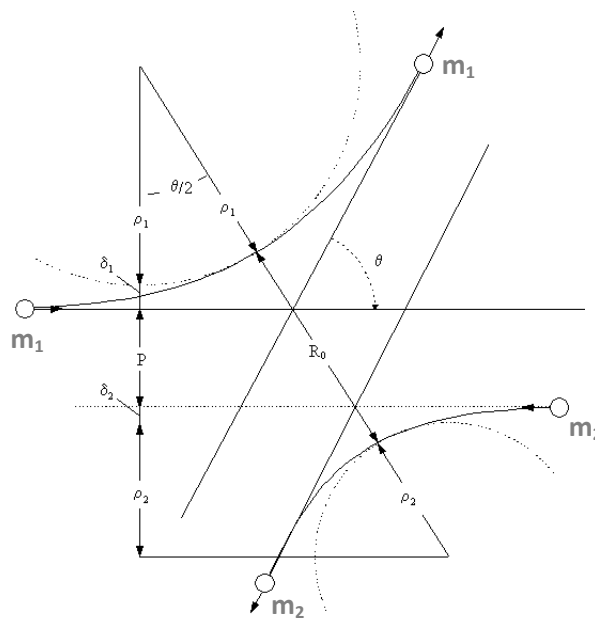


Figure 1-25 représentation d'une collision entre deux particules dans le CM [58].

Le type de calcul de l'angle de diffusion  $\theta$  dépend principalement de la valeur de l'énergie réduite  $\epsilon$  (éq. 22). En effet, pour:

- $0 \leq \epsilon \leq 5$

La formule de  $\theta$  s'écrit [57] :

$$\cos(\theta/2) = \frac{b + r_c + \Delta}{r_0 + r_c} \quad (66)$$

Tels que :

$$r_0 = \frac{R_0}{a_{TF}} \quad , \quad b = \frac{P}{a_{TF}} \quad (67)$$

$a_{TF}$  : Rayon d'écrantage de Lindhard (éq. 11)

$R_0$  : La distance minimale d'approche obtenue par la solution itérative de l'équation [57]:

$$1 - V(R_0)/E_C - (P/R_0)^2 = 0 \quad (68)$$

$E_C$  : L'énergie disponible dans système de centre de masse [57]:

$$E_C = \frac{E}{1+m_1/m_2} \quad (69)$$

Et  $r_C = \frac{\rho}{a} \quad (70)$

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 = \frac{2(V(R_0) - E_C)}{V'(R_0)} \quad (71)$$

Où :  $V'(R_0)$  est la dérivée du potentiel interatomique à  $R_0$

La quantité  $\Delta$  peut être approximée par la relation [57]:

$$\Delta = \delta_1 + \delta_2 \approx h \frac{r_0 - b}{1+g} \quad (72)$$

Avec  $g = \frac{\gamma}{[(1+h^2)^{1/2} - h]} \quad (73)$

Et  $h = 2 \alpha \in b^\beta \quad (74)$

Où  $\alpha = 1 + \frac{C_1}{\epsilon^{1/2}} \quad , \quad \beta = \frac{C_2 + \epsilon^{1/2}}{C_3 + \epsilon^{1/2}} \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{C_4 + \epsilon}{C_5 + \epsilon} \quad (75)$

Avec  $C_1 = 0.9926$  ,  $C_2 = 0.01162$  ,  $C_3 = 0.007122$  ,  $C_4 = 0.007122$  et  $C_5 = 14.61$

- $5 \leq \epsilon \leq 15$  et  $15 \leq \epsilon \leq 100$

Le programme de simulation utilise des approximations analytiques non itératives [59] :

$$\sin^2(\theta/2) = \frac{1}{1 + (1 + C_1 b + C_2 b^2 + C_3 b^3)(2\epsilon b)^2} \quad (76)$$

$5 \leq \epsilon \leq 15$  :  $C_1 = 1.335130$  ,  $C_2 = 0.021334$  ,  $C_3 = 0.448670$

$15 \leq \epsilon \leq 100$  :  $C_1 = 0.693082$  ,  $C_2 = 1.054096$  ,  $C_3 = 0.013611$

Dans la gamme des énergies  $E \leq 100$ , l'angle de diffusion  $\vartheta$  dans le système du laboratoire est calculée en utilisant l'équation [57,60] :

$$\vartheta = \frac{f(1+m_1/m_2)}{(f+m_1/m_2)} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E a_{TF}} \sum_{i=1}^4 A_i B_i K_1(b B_i) \quad (77)$$

Où  $K_1$  est la fonction de Bessel modifiée de l'ordre 1.

Dans ce cas, l'énergie transférée est calculé par [57]:

$$T_n = \frac{m_1 m_2}{(m_1+m_2)^2} E \left[ \left( \frac{(f+(m_1/m_2))^2}{f} \right) \vartheta^2 + (1-f)^2 \right] \quad (78)$$

Avec 
$$f = \left( 1 - \frac{\Delta E_{el}}{E_C} \right)^{1/2}$$

Où  $\Delta E_{el}$  est la perte d'énergie électronique dans la collision.

### b) Perte d'énergie électronique

La perte d'énergie électronique due à une collision d'un projectile avec un atome cible peut être calculée par une expression semi-empirique similaire à la formule d'Oen-Robinson [52]:

$$\Delta E_{el} = S_{el}^{ZBL} \frac{\exp(-C_{el} 0.3 (R_0/a_{TF}))}{\int_0^{P_{max}} 2\pi P dP \exp(-C_{el} 0.3 (R_0/a_{TF}))} \quad (79)$$

Tels que :

$S_{el}^{ZBL}$  : La section efficace d'arrêt électronique basée sur le potentiel universel ZBL (voir équation 35).

$C_{el}$  : Paramètre empirique qui dépend de l'énergie et de la direction des ions incidents.

$P_{max}$  : Paramètre d'impact maximal.

### c) Energie après collision

Après une collision binaire, l'énergie  $E'$  d'un projectile est donnée par la relation [57, 61] :

$$E' = E - T_n - \Delta E_{el} \quad (80)$$

Où :  $E$  : l'énergie du projectile avant la collision,  $T_n$  et  $\Delta E_{el}$  sont les pertes d'énergie nucléaire et électronique respectivement.

### 1-7-2.3 Enregistrement des grandeurs physiques

L'énergie  $T_n$  transférée du projectile au premier atome de recul (primary-knock-on atom) est par la suite transférée par ce dernier aux atomes secondaires de recul durant la cascade de la collision. Les contributions de ces atomes au dépôt des énergies nucléaire et électronique sont calculées en utilisant une formule développée par Robinson [62]. Lors d'une collision d'un projectile avec un atome cible, l'énergie nucléaire déposée est obtenu par [57] :

$$E_n = \frac{T_n}{1+k_d g(\epsilon_d)} \quad (81)$$

$$k_d = 0.1334 \frac{Z_2^{2/3}}{m_2^{1/2}} \quad (82)$$

$$g(\epsilon_d) = \epsilon_d + 0.4 \epsilon_d^{3/4} + 3.4 \epsilon_d^{1/6} \quad (83)$$

Où 
$$\epsilon_d = 0.01 \frac{T_n}{Z_2^{7/3}} \quad (84)$$

L'énergie électronique déposée s'écrit [57] :

$$E_{el} = \Delta E_{el} + T_n - E_n \quad (85)$$

Selon les valeurs de  $E_n$ , le nombre des déplacements des atomes  $N_d$  est calculé en utilisant le modèle Kinchin-Pease modifiée [57]:

$$\begin{aligned} N_d &= 1 & \text{si } E_d \leq E_n < 2.5 E_d \\ N_d &= 0.4 (E_n / E_d) & \text{si } E_n \geq 2.5 E_d \end{aligned} \quad (86)$$

Où  $E_d$  est l'énergie de déplacement qui est de l'ordre de 15 eV dans le cas d'une cible de silicium [57]. Dans le code Crystal-Trim, les quantités  $E_n$ ,  $E_{el}$  et  $N_d$  sont enregistrés à partir du début de mouvement du premier atome de recul.

### 1-7-2-4 Mouvement d'ion dans un cristal de silicium

Pour un ion d'énergie initiale  $E_0$ , la direction d'incidence est donnée par l'angle polaire  $\theta_0$  et l'angle azimutal  $\Phi_0$  (Fig. 1-26). Dans le code de simulation utilisé, le même paramètre maximal d'impact ( $P_{max}$ ) est utilisé pour toutes les collisions binaires considérées. Il est généralement égal à  $d/2$  (Fig. 1-27) [57]. Les collisions simultanées se produisant, si un

projectile se trouve à une position symétrique, et pouvant entrer en collision avec plus d'un atome cible (en même temps) sont considérées comme des collisions binaires successives.

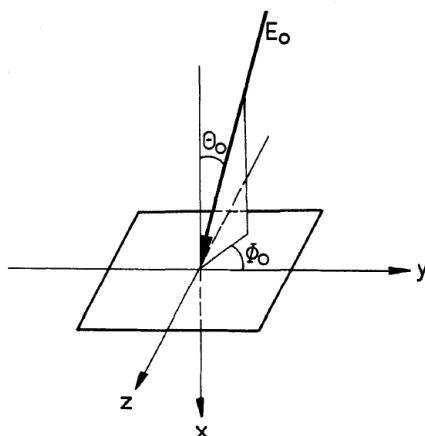


Figure 1-26 Illustration de la géométrie d'incidence d'ion et des axes du système cible [57].

Dans la simulation du mouvement des projectiles dans un réseau cristallin, des cellules de base sont introduites (Fig.1-27). Après avoir sélectionné une cellule de base, le projectile entre en collision successives avec un certain nombre d'atomes. Les paramètres d'impact correspondants doivent être inférieurs à  $P_{max}$ . Lorsque toutes les collisions potentielles (à l'intérieur d'une cellule) ont été effectuées, le projectile se déplace dans la prochaine cellule de base. Pour obtenir une simulation efficace, la cellule de base est choisie généralement plus petite par rapport à la maille élémentaire du réseau. Dans le cas d'un cristal de silicium (structure diamant de type A4), il existe deux types de cellules de base selon le nombre de sites de réseau à l'intérieur de chaque cellule ( $3/2$  et  $1/2$ ) (Fig 1-27).

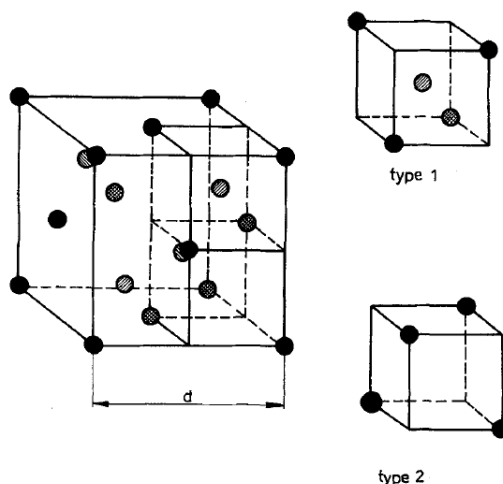


Figure 1-27 Représentation de la cellule unitaire du réseau de silicium (constante de réseau  $d$ ) et des deux types de cellules de base [57].

La vibration des atomes cibles est prise en compte par un modèle simple, de vibrations thermiques, inclus dans le programme. Ce modèle suppose que ces mouvements sont non corrélés puisque le temps d'une collision binaire est beaucoup plus petit par rapport à la période d'une vibration thermique. Les deux effets peuvent être traités de façon indépendante [57].

### 1-7-2.5 Effet d'endommagement du réseau cristallin

Le modèle d'endommagement utilisé dans la simulation est basé sur les hypothèses suivantes [57] :

- La concentration des défauts est suffisamment faible pour que la constante du réseau cristallin ne change pas de manière significative,
- En implantation ionique, les processus balistiques génèrent des sites vacants et des auto-interstitiels. Une recombinaison possible de ces défauts, pendant le bombardement ionique, n'est pas prise en compte,
- Les sites vacants sont évidemment créés sur les sites du réseau.

Dans le cristal vierge, le premier pseudo-projectile produit un certain nombre des déplacements atomiques. Dans la simulation du mouvement du deuxième pseudo-projectile, ces lacunes et interstitiels doivent être prises en compte. Dans un intervalle de profondeur ( $X$ ,  $X + \Delta X$ ) de la cible du silicium, la probabilité  $dp_d$  pour qu'un pseudo-projectile déplace un atome cible de son site atomique est donnée par [63]:

$$dp_d = \frac{1}{N} \left( \frac{N_d}{\Delta x} \frac{D_0}{n} \right) (1 - p_d) \quad (87)$$

Où

$N$  : la concentration atomique dans le cristal

$N_d$  : Le nombre des déplacements des atomes (éq. 86)

$D_0$  : La dose d'implantation

Par intégration de l'équation (87), la probabilité du déplacement atomique s'écrit [63]:

$$p_d = 1 - \exp\left(-\frac{1}{n} \frac{N_d}{\Delta x} D'_0\right) \quad (88)$$

Où  $D'_0 \leq D_0$  [63].

## *Chapitre II*

### *Techniques d'élaboration et de caractérisation des échantillons*



## 2-1 Implantation des substrats par des ions de carbone

### 2-1-1 Appareillage mis en œuvre

Le principe de l'implantation ionique a été établi dans le chapitre précédent. Il consiste à accélérer des ions positifs dans un champ électrique pour leur donner l'énergie nécessaire pour pénétrer dans le substrat à une profondeur donnée.

Dans ce travail, l'implantation des ions ( $C^+$ ) de carbone dans les substrats de silicium monocristallin Si(100), a été réalisée à l'institut de Physique Nucléaire de Lyon en collaboration avec l'institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence «*IM2NP*» (Université d'Aix- Marseille). L'implanteur ionique utilisé est de marque « IMIO 400 ». Il est représenté sur la figure (2-1).



Figure 2-1 : Plateforme de l'implantation ionique (IMIO 400) utilisé pour l'implantation des ions  $C^+$  dans les substrats Si(100).

Les principales caractéristiques de cet implantateur sont résumées ci-dessous :

- Source d'ions (de type Bernas Nier) permettant l'utilisation d'espèces gazeuses, liquides ou solides ;
- Energie du faisceau (i.e. Energie d'implantation) de 60 à 400 keV ;
- Courants produits variant de quelques  $\mu A$  à une centaine de  $\mu A$  ;
- Possibilité d'implantation de la quasi-totalité des éléments du tableau périodique ;
- Taille minimale du faisceau : 2 mm,
- Profondeur d'implantation, variant en fonction de l'échantillon et l'énergie du faisceau, pouvant atteindre 500 nm ;
- Balayage électrostatique sur une surface variant de  $2.6 \times 3.1$  à  $4.6 \times 10.6 \text{ cm}^2$  ;
- Doses implantées de  $10^{12} \text{ at.cm}^2$  à  $10^{17} \text{ at.cm}^2$ .

### 2-1-2 Conditions expérimentales d'implantation

- Plaquettes de silicium Si(100) de 2 pouces (50.8 mm), de type P, d'épaisseur 300  $\mu m$  et de résistivité  $\rho = 1.1 \Omega \text{ cm}$  ,
- Ions implantés :  $^{12}\text{C}^+$
- Doses d'implantation (fluences) :  $10^{16} \text{ cm}^{-2}$  et  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$ ,
- Energie d'implantation : 70 keV,
- Inclinaison (tilt) du faisceau d'ions par rapport à la normale à la surface des cibles :  $7^\circ$ .

## 2-2 Recuit post - implantation

### 2-2-1 Introduction

L'inconvénient majeur de l'implantation ionique est l'endommagement inévitable de la cible durant le ralentissement des ions. Pour pouvoir bénéficier des effets attendus de l'implantation, on doit d'abord réparer les dommages créés par cette dernière. Dans ce contexte, le recuit thermique post-implantation est une étape cruciale pour recristalliser la cible. On dit que l'on guérit les défauts.

Dans ce travail, on a employé un recuit thermique rapide (de l'anglais, Rapid Thermal Annealing RTA). Nous avons utilisé des temps courts (les plus courts possibles) de chauffage et de refroidissement tout en conservant l'isothermie.

### 2-2-2 Dispositif expérimental mis en œuvre

Le traitement thermique des échantillons a été réalisé dans le four prototype RTA de marque VEGATECT™ (Fig. 2-2) du Département Micro et Nanoélectronique de l'institut IM2NP. Ce four est doté d'un réacteur résistif vertical allié à un système de levage du porte-échantillon. Cela permet de contrôler parfaitement l'échauffement et les taux de refroidissement vers le bas, jusqu'à 20 °C /s. Un écran tactile de commandes et de contrôle assure une bonne maîtrise du fonctionnement de l'appareil (Fig.2-3).

Les principales caractéristiques de ce four sont :

- Tension: 380 V ;
- Température maximale:  $T_{\max} = 1800^{\circ}\text{C}$  ;
- Très forte dynamique de chauffe (jusqu'à 30°C/s) ;
- Recuit sous atmosphère d'argon ou d'azote ;
- Vide poussé jusqu'à  $10^{-5}$  mm Hg grâce à deux pompes (primaire et secondaire) ;
- Masse totale 445 kg.

### 2-2-3 Conditions expérimentales

- Températures utilisées : 875 °C, 1000°C, 1250 °C,
- Temps de maintien : 1h, 3h,
- Atmosphère de recuit : Argon (Ar),
- Vitesse de chauffage : 20°C/s,
- Vitesse de refroidissement : 20°C/s,



Figure 2-2 : Photo du four VEGATEC utilisé pour le recuit post-implantation.

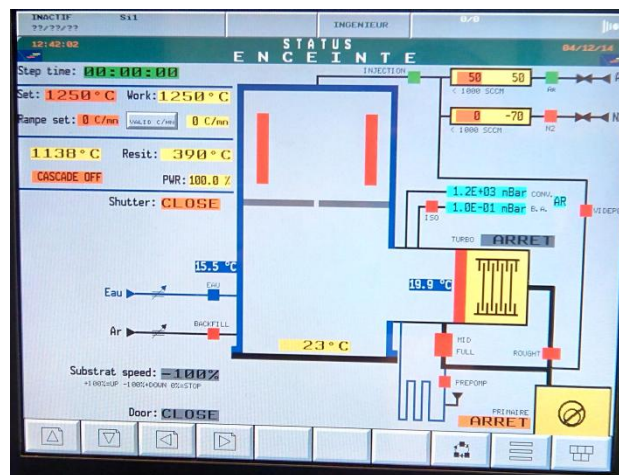


Figure 2-3 : Ecran tactile de commande et de contrôle du four.

## 2-3 Spectrométrie de masse d'ions secondaires (SIMS)

### 2-3-1 Description de la technique

La Spectroscopie de Masse d'Ions Secondaires (SIMS) est une technique d'analyse, physico-chimique, de surface à très grande sensibilité. Elle est basée sur l'irradiation de la cible à analyser par des ions lourds où l'énergie du faisceau primaire est de quelques centaines d'électronvolts à 50 keV. L'interaction du faisceau incident avec le matériau se traduit par la pulvérisation de la cible sous forme de particules chargées ou non (ions ou particules secondaires). Ce sont ces particules ionisées, au cours du processus de pulvérisation (ou parfois par post-ionisation des particules neutres pulvérisées), qui sont filtrées en masse (éventuellement en énergie) pour accéder à la composition de l'échantillon-cible.

La vitesse d'abrasion de l'échantillon durant l'analyse SIMS varie entre 0,5 et 5 nm/s [64]. Elle dépend de l'intensité du faisceau primaire, de la taille du balayage et des potentiels d'accélération des ions. L'analyse SIMS crée donc un cratère dans l'échantillon analysé, ce qui explique le caractère destructif de cette technique. Pour cette raison, il est préférable (dans la mesure du possible) de faire les mesures SIMS après avoir effectué toutes les analyses par les techniques non destructives. Autrement, il faut consacrer un morceau spécial d'échantillon pour ce type de mesure.

La technique SIMS permet d'aboutir à plusieurs informations sur le spécimen [65]. En effet,

- Elle permet de faire des analyses élémentaires du profil en profondeur (du nanomètre au micromètre) sur des solides avec une très grande sensibilité (du ppm au ppb selon les éléments). Il est notamment possible d'analyser les distributions de dopants dans le silicium.
- Elle offre la Possibilité de travailler sur des zones localisées ( $< 50\mu\text{m}^2$ )
- Elle permet l'accès à l'analyse isotopique élémentaire (i.e. emploi de traceurs isotopiques et mesure des rapports isotopiques d'un même élément)
- Elle donne la possibilité, dans certaines conditions, d'identifier des composés chimiques où des fractions moléculaires des composés contenus dans le matériau à analyser.

Ci-dessous on représente le schéma d'un dispositif d'analyse SIMS (Fig.2-4). Il comprend principalement [66] :

- **une colonne d'ions primaire (où chambre d'ionisation)** : on applique sur l'échantillon à analyser une sonde d'ions primaires. La colonne en question est généralement équipée de deux sources, produisant respectivement des ions d'éléments chimiques électro-négatifs

(oxygène) pour étudier les ions positifs, ou électropositifs (césium) pour étudier les ions négatifs.

- **Une colonne primaire de focalisation et d'accélération d'ions** : constituée d'un aimant et d'une colonne optique primaires pour focaliser et accélérer les ions produits par la chambre d'ionisation.
- **Une chambre d'analyse** : où l'échantillon est porté à haute tension.
- **Un système d'accélération des ions secondaires** : les ions secondaires issus de l'échantillon constituent la source d'information de l'analyse SIMS. Ils sont accélérés par une tension d'extraction.
- **Une colonne secondaire de séparation** : les ions secondaires sont triés en termes d'énergie grâce à un champ électrostatique puis séparés par impulsion à l'aide d'un spectromètre de masse magnétique (Fig. 2-5).
- **Une colonne d'optique ionique** : elle permet de reproduire directement par projection des ions secondaires sur un écran transducteur Ions-Photons, une image chimique de la surface de l'échantillon [66].
- **Le récipient sous vide** : soumis à des pressions ultravide ( $< 10^{-9}$  T).

La conversion de l'intensité du faisceau ionique en concentration d'impuretés est effectuée par étalonnage avec un échantillon de même matériau contenant une concentration ou une dose connue de l'élément recherché. Cet échantillon est analysé dans les mêmes conditions et permet de calculer le rapport entre la concentration et le nombre d'ions secondaires détectés.

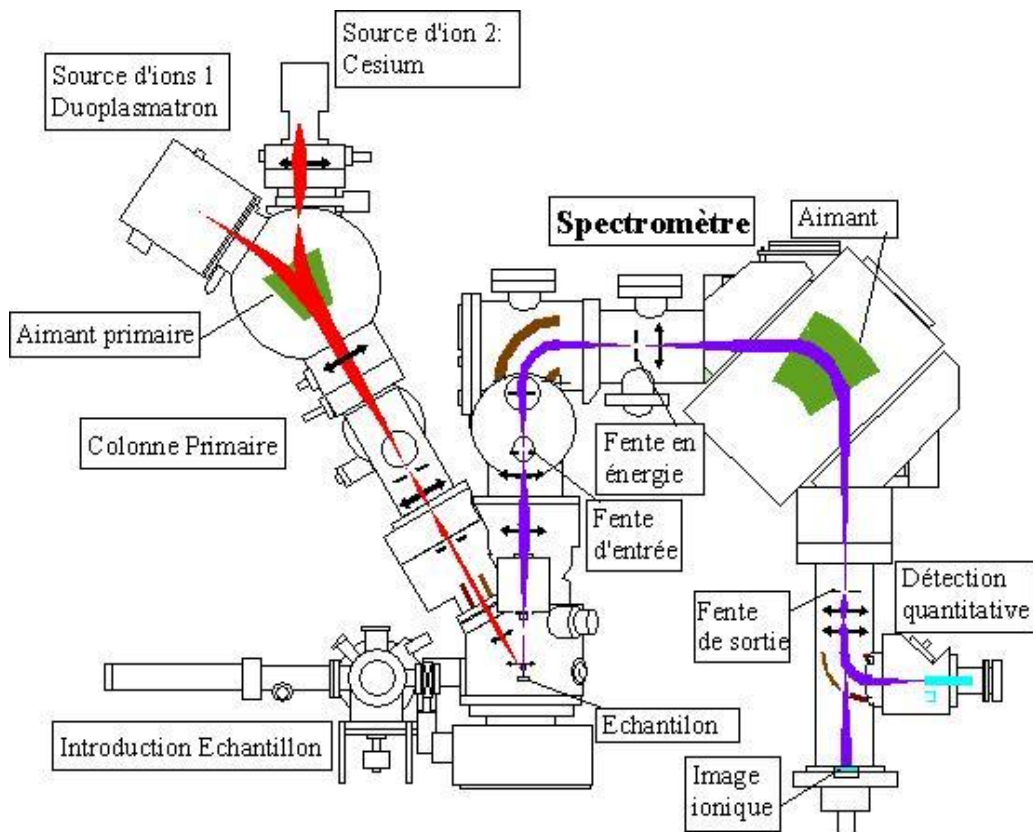


Figure 2-4 Schéma d'un spectromètre de masse d'ions secondaires [67].

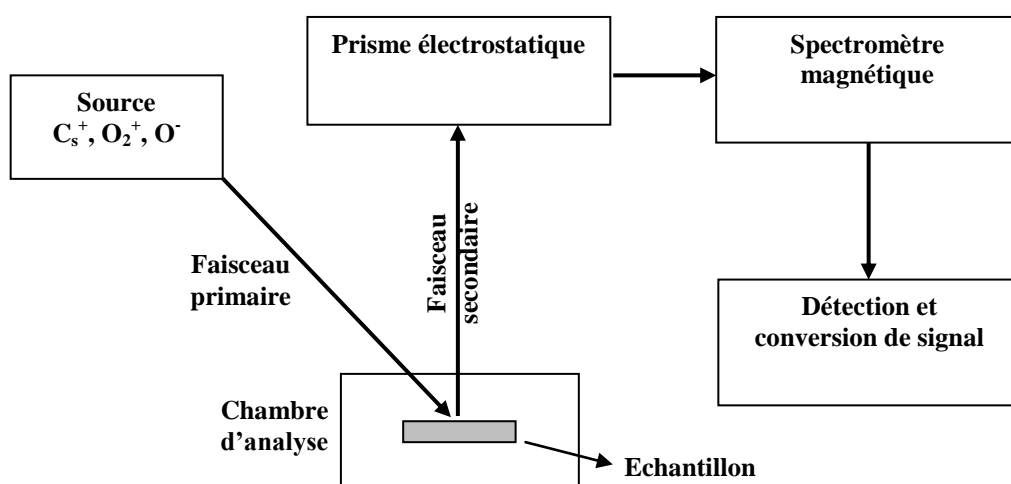


Figure 2-5 Illustration de la mise en œuvre de la technique SIMS.

### 2-3-2 Aspect analytique d'une mesure SIMS pour un profil de concentration

L'analyse de l'échantillon par cette technique est basée sur la mesure de l'intensité du faisceau ionique ( $I_X$ ) en fonction du temps. Cette intensité est proportionnelle à la concentration de l'élément analysé ( $C_X$ ) [8] :

$$C_X = SF_X I_X \quad (81)$$

$SF_X$  est appelé « facteur de sensibilité » (SF – Sensitivity Factor). Il dépend de l'espèce analysée, de la composition de la matrice et des conditions expérimentales. Vue l'impossibilité de déterminer le facteur  $SF_X$  expérimentalement, on doit effectuer une normalisation du signal par rapport à un signal de référence. Par exemple, on utilise le signal d'un élément de matrice dont la concentration ne varie pas en fonction de la profondeur (comme le Silicium). Ainsi la concentration s'écrit [8]:

$$\frac{C_X}{C_{REF}} = \frac{SF_X I_X}{SF_{REF} I_{REF}} \quad (82)$$

D'où

$$C_X = RSF_{X/REF} \frac{I_X}{I_{REF}} \quad (83)$$

Le coefficient RSF (Relative Sensitivity Factor) peut être calculé à partir de l'analyse SIMS d'un échantillon – étalon, dans lequel la concentration de l'élément qui nous intéresse est constante et connue. Dans ce cas [8]:

$$RSF_{X/REF} = C_X \frac{I_{REF}}{I_X} \quad (84)$$

Or, si on connaît la dose d'implantation ( $D$ ) d'un échantillon implanté, il peut aussi servir de l'étalon [8] :

$$D = \int C(x) dx = \int RSF_{X/REF} \frac{I_X(x)}{I_{REF}} dx \quad (85)$$

D'où

$$RSF_{X/REF} = D \frac{I_{REF}}{\int I_X(x) dx} \quad (86)$$



### 2-3-3 conditions expérimentales

Dans notre travail, on a fait les mesures SIMS à la «Plate-forme Caractérisation CIM-PACA » en collaboration avec l'équipe OPTO-PV de l'Institut Matériaux Microélectronique Nano-Science de Provence (IM2NP) de l'université Aix-Marseille. L'instrument utilisé est de type (SIMS- IMS 7F), il est illustré sur la figure (2-6).



Figure 2-6 Instrument SIMS , de type IMS 7F, mis en œuvre pour l'analyse des échantillons.

Comme l'élément considéré dans notre étude est le carbone  $^{12}\text{C}$ , qui est électronégatif et dont l'électronégativité est égale à 2.55 [68], on a utilisé le césium  $\text{Cs}^+$  comme ion primaire. Le  $\text{Cs}^+$  est en effet fortement recommandé pour ce type d'atome (c'est-à-dire le carbone). Les conditions expérimentales utilisées portent sur plusieurs paramètres. Elles sont résumées ci-dessous :

- Echantillons analysés : des fragments de wafer de silicium  $\text{Si}(100)$  ( $\sim 5\text{mm} \times 10\text{mm}$ ) implantés au carbone avec des doses de  $10^{16}\text{ cm}^{-2}$  et  $10^{17}\text{ cm}^{-2}$ .
- Ions primaire  $\text{Cs}^+$
- Courant primaire 100nA
- Energie d'impact 9keV

- Angle d'incidence faisceau primaire : 23,3°
- Surface abrasée (Raster) 200×200µm
- Pression d'analyse : 3e-10 mbar
- Diaphragme de contraste : 150 µm
- Diaphragme de champ : 750µm
- Résolution en masse  $M/\Delta M = 400$
- Eléments analysés :  $^{12}\text{C}$ - sur détecteur multiplicateur d'électrons (temps d'intégration : 1s)  
 $^{28}\text{Si}$ - sur détecteur «Faraday Cup» (temps d'intégration : 1s)
- **Paramètres expérimentales de calibration :**

Echantillon	Ref 16	Ref 17	A11	A13	B11	B13
Dose ( $\text{cm}^{-2}$ )	$1 \times 10^{16}$	$1 \times 10^{17}$	$1 \times 10^{17}$	$1 \times 10^{17}$	$1 \times 10^{16}$	$1 \times 10^{16}$
Température du recuit (°C)	-	-	1250	1250	1250	1250
Temps de maintien	-	-	1h	3h	1h	3h
$RSF (\text{at}/\text{cm}^3)$	$3,732 \times 10^{22}$	$3,53 \times 10^{22}$	$3,53 \times 10^{22}$	$3,53 \times 10^{22}$	$3,732 \times 10^{22}$	$3,732 \times 10^{22}$
Signal Ref.	$^{28}\text{Si}$	$^{28}\text{Si}$	$^{28}\text{Si}$	$^{28}\text{Si}$	$^{28}\text{Si}$	$^{28}\text{Si}$

## 2-4 Spectroscopie Raman

### 2-4-1 Principe de la technique

L'interaction entre la matière et une radiation d'excitation (laser) peut avoir plusieurs formes. En effet, le faisceau lumineux peut être : transmis ; réfléchi ; absorbé (et transformé en chaleur) ou diffusé par le milieu. La diffusion de la lumière par la matière peut avoir lieu selon deux processus différents [69,70] :

- **Diffusion élastique (appelée diffusion Rayleigh):** traduite par un simple changement de direction de propagation (seule la direction de la lumière est modifiée). Dans ce cas, la fréquence de la lumière diffusée est égale à celle de la lumière incidente (Fig. 2-7),
- **Diffusion inélastique (appelée diffusion Raman et diffusion Brillouin):** elle correspond à un échange d'énergie, du rayonnement à la matière, et modification de la fréquence. Cette diffusion représente une fraction beaucoup moins importante que celle du faisceau incident.

Dans un solide, il existe deux modes différents de vibration d'atomes [70] :

- Vibrations acoustiques (ondes en phase, peu énergétiques),
- Vibrations optiques (déplacement en opposition de phase),

Lorsque les vibrations acoustiques sont soumises à l'interaction du faisceau lumineux, on obtient la **diffusion Brillouin**. Quand à la **diffusion Raman**, elle a lieu avec les modes optiques. Dans le processus Raman, la matière peut aussi bien que recevoir céder de l'énergie aux photons. Par conséquent, on peut avoir des radiations décalées vers les basses fréquences (appelées **Stokes**) ou des radiations décalées vers les hautes fréquences (appelées **anti-Stokes**) (Fig. 2-7). L'ensemble des radiations diffusées forme le spectre Raman de l'échantillon qui comportera deux parties symétriques de part et d'autre de la fréquence d'excitation laser ( $\nu_0$ ). L'une appelée « Stokes Raman » et l'autre est dite « anti-Stokes Raman » [70] (Fig. 2-8). Il est à noter que l'intensité des raies Stokes est plus importante ( $\sim$  d'un facteur 1000) que celles des raies anti-Stokes [71]. Les spectres Raman sont donc généralement étudiés dans la région des raies Stokes. Ces spectres, généralement donnés en nombre d'onde ( $\text{cm}^{-1}$ ), sont obtenus en mesurant l'intensité de la diffusion Raman en fonction de la longueur d'onde. Dans le cas de la spectroscopie Raman, les longueurs d'onde des rayonnements incidents et diffusés se situent dans le domaine du visible ou proche de l'infrarouge.

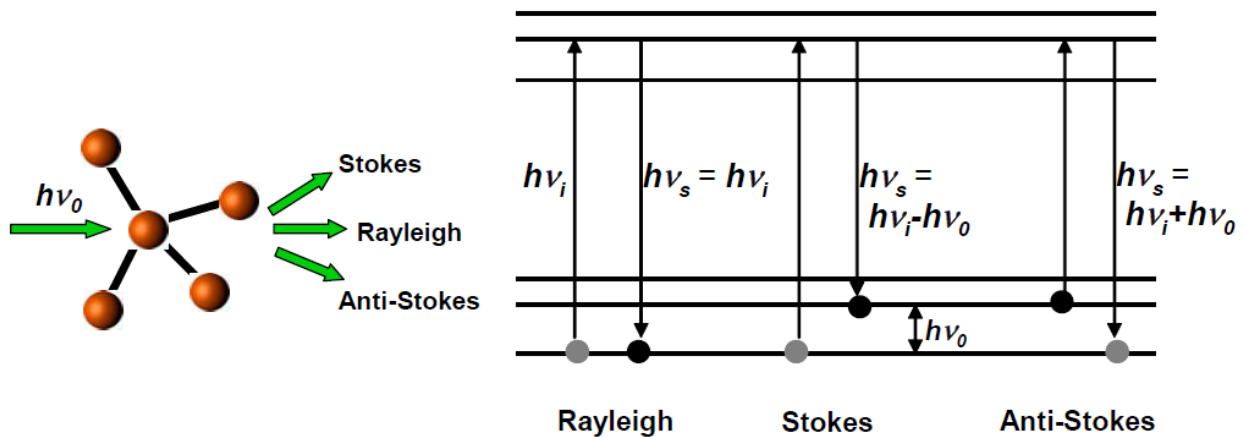


Figure 2-7 Illustration du principe de diffusion Raman [72].

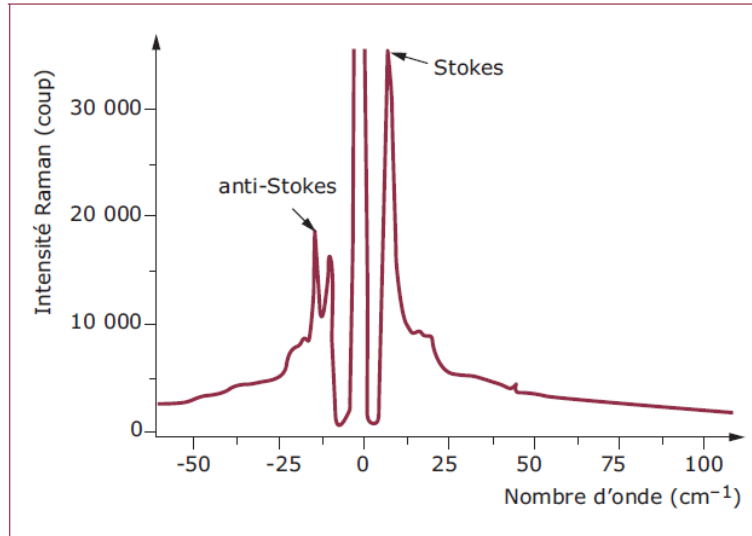


Figure 2-8 Représentation d'un Spectre Raman, à température ambiante, d'un ensemble ordonné de nanoparticules d'argent [70].

En pratique, la réponse Raman est dépendante du coefficient d'absorption de l'échantillon. Or ce coefficient est très sensible aux modifications du réseau qui sont dues à l'implantation d'impuretés et la guérison des défauts par recuit thermique. Cette technique sensible est donc utile pour analyser l'endommagement et la recristallisation du réseau [8].

Du point de vue classique, Un rayonnement électromagnétique de fréquence  $\nu_i$ , comportant, outre un champ magnétique sinusoïdal, un champ électrique de même fréquence. Ce rayonnement peut se coupler avec tout mouvement moléculaire faisant intervenir une variation de l'état de polarisation électrique de cette molécule. Ceci se produit lorsque la fréquence de l'onde électromagnétique est différente de la fréquence de vibration moléculaire [73]. Ce phénomène est le phénomène de diffusion qui est lié à la polarisabilité moléculaire et il est dominant. L'effet Raman met en jeu des variations de polarisabilité électronique. La polarisabilité ( $\alpha$ ) n'est rien d'autre que la réponse d'un milieu au champ électrique appliquée. Elle varie en fonction des distances inter - atomiques. En particulier, les variations de polarisabilité associées à un mode propre de vibration (phonon) peuvent s'écrire en fonction d'un développement limité de l'amplitude de vibration des atomes  $u$  comme [8] :

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 u + \alpha_2 u^2 + \dots \quad (87)$$

Où  $\alpha_0$  : la polarisabilité à la distance internucléaire d'équilibre.

Dans le domaine du visible, la longueur d'onde de la lumière incidente est grande devant les dimensions de la molécule. Le champ électrique d'une onde électromagnétique incidente est donc supposé uniforme sur l'ensemble du système [74] :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(\omega_i t) \quad (88)$$

Avec  $E_0$  et  $\omega_i$  l'amplitude et la pulsation de l'onde incidente respectivement.

Sous l'effet du champ électrique ( $\vec{E}$ ), un moment dipolaire électrique induit ( $\vec{P}$ ) apparaît, il s'exprime par [8] :

$$\vec{P} = \alpha \vec{E} = (\alpha_0 + \alpha_1 u + \alpha_2 u^2 + \dots) \vec{E}_0 \cos(\omega_i t) \quad (89)$$

Si le déplacement atomique obéit à une relation de la forme :

$$u(t) = u_0 \cos(\Omega t) \quad (90)$$

Avec  $\Omega$  : la pulsation du déplacement atomique

Le moment dipolaire électrique induit  $\vec{P}$  s'écrit :

$$\vec{P} = (\alpha_0 + \alpha_1 u_0 \cos(\Omega t) + \alpha_2 u_0^2 \cos^2(\Omega t) + \dots) \vec{E}_0 \cos(\omega_i t) \quad (91)$$

D'où

$$\vec{P} = \alpha_0 \vec{E}_0 \cos(\omega_i t) + \alpha_1 u_0 \vec{E}_0 \cos(\omega_i t) \cos(\Omega t) + \alpha_2 u_0^2 \vec{E}_0 \cos(\omega_i t) \cos^2(\Omega t) + \dots \quad (92)$$

Et

$$\begin{aligned} \vec{P} = & \alpha_0 \vec{E}_0 \cos(\omega_i t) + \frac{1}{2} \alpha_1 u_0 \vec{E}_0 [\cos(\omega_i + \Omega)t + \cos(\omega_i - \Omega)t] \\ & + \alpha_2 u_0^2 \vec{E}_0 \cos(\omega_i t) \cos^2(\Omega t) + \dots \end{aligned} \quad (93)$$

Le premier terme ( $\alpha_0 \vec{E}_0 \cos(\omega_i t)$ ) correspond à une diffusion sans changement de fréquence (celle du photon incident), on l'appelle la diffusion Rayleigh ou la diffusion élastique. Le second terme représente un dipôle oscillant correspondant à l'émission de photons de fréquences égales à  $\omega_i + \Omega$  et  $\omega_i - \Omega$  par création ou absorption d'un phonon de pulsation  $\Omega$ . C'est la diffusion Raman du 1<sup>er</sup> ordre. Les photons de pulsations ( $\omega_i - \Omega$ ) et ( $\omega_i + \Omega$ ) s'appellent stokes et anti - stokes respectivement.

Le terme  $\alpha_2 u^2$  représente l'effet Raman du second ordre, il correspond à l'émission ou l'extinction de deux phonons simultanément.

L'intensité de la radiation diffusée peut être calculée en évaluant la puissance moyenne rayonnée par le dipôle oscillant induit. Elle s'exprime par [8]:

$$I_R \propto [\vec{e}_i \cdot \mathfrak{R} \cdot \vec{e}_d] \quad (94)$$

Où  $\vec{e}_i$  : la polarisation de l'onde incidente,

$\vec{e}_d$  : la polarisation de l'onde diffusée

$\mathfrak{R}$  : le tenseur Raman (tenseur d'ordre 2) donné par la relation :

$$\mathfrak{R} = \alpha_1 u(\omega) \quad (95)$$

### 2-4-2 Instrumentation

Un schéma simplifié du spectromètre Raman est représenté sur la figure (2-9), il comprend :

- **Une source excitatrice (laser)** où le faisceau est focalisé sur l'échantillon à analyser par une optique appropriée ;
- **Un porte échantillon mobile** permettant le balayage à deux dimensions, en (XY), de la surface de l'échantillon par le faisceau laser;
- **Un microscope optique** permettant l'observation et l'analyse d'échantillons;
- **Un double monochromateur** : permettant de séparer les différents composants de la lumière diffusée par l'échantillon. En effet, le principal problème est de supprimer la contribution de la raie Rayleigh car elle est beaucoup plus intense par rapport à la diffusion Raman ;
- **Un système d'analyse spectrale (spectromètre) ;**
- **Un détecteur de rayonnement très sensible ;**
- **Un système de conversion** : constitué d'un photomultiplicateur qui converti les photons reçus en un signal électrique.

Dans ce travail, nous avons utilisé (en collaboration avec le laboratoire des céramiques de l'université Constantine 1) un spectromètre Raman de marque «SENTERRA». Il est illustré sur la figure (2-9). Ces principales caractéristiques sont mentionnées ci-dessous [75] :

- une haute performance et haute sensibilité permettant d'analyser tous types de structures (y compris l'identification des systèmes amorphes et l'analyse des films très fins pour lesquels les méthodes de diffraction sont parfois difficiles à réaliser) ;

- Une calibration en nombre d'onde interne en continu (qui assure la meilleure précision en nombre d'onde  $0.1\text{cm}^{-1}$ ) et la non nécessité d'utiliser des étalons externes pour la calibration ;
- De multiples excitations lasers: 1064 nm, 785 nm, 633 nm, 532 nm et 488 nm ;
- Un microscope optique de la série BX Olympus très performant et permettant une excellente visualisation et contraste de l'échantillon ainsi que la focalisation du laser sur ce même échantillon.

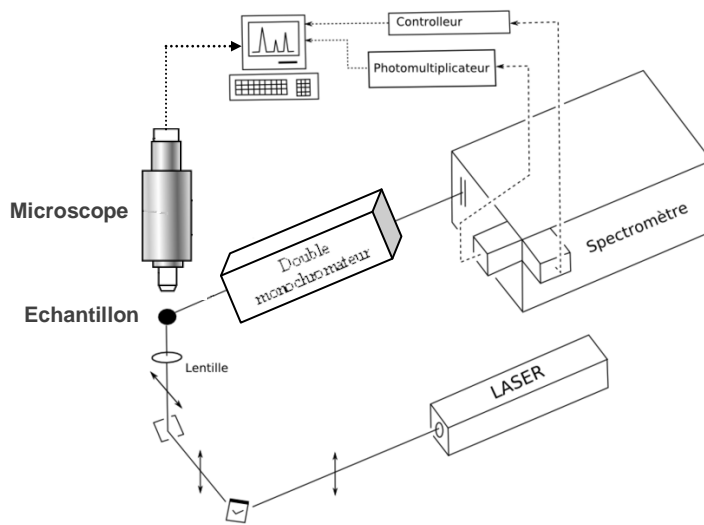


Figure 2-8 Schéma de base d'un spectromètre Raman où les différents composants sont représentés avec leurs connexions.

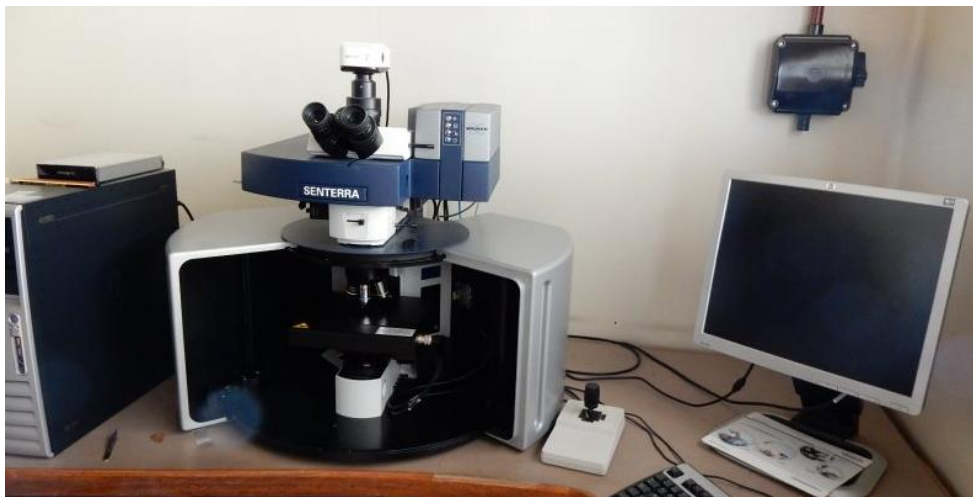


Figure 2-9 Photo du spectromètre Raman «SENTERRA» -BRUKER- mis en œuvre pour les analyses des échantillons.

## 2-5 Micro dureté

### 2-5-1 Introduction

L'essai de dureté est une mesure de la résistance, d'un matériau solide, à la pénétration d'un autre matériau. Il consiste à enfoncer un pénétrateur, dont les formes et les dimensions varient en fonction du type d'essai, dans le métal à tester. La dureté est alors une propriété physique complexe et difficile à interpréter. Elle dépend des caractéristiques de ce matériau, de la nature et de la forme du pénétrateur et du mode de pénétration [76]. Certains matériaux, tels que les métaux, sont plus durs que d'autres. Par conséquent, et selon les types des matériaux, il existe différentes mesures de dureté tels que : les essais par rayage, par rebondissement ou par oscillations de pendules [76].

Les techniques de mesure de la dureté sont classées selon l'échelle de la mesure [77]:

- Techniques de mesure de la macro-dureté comme les techniques Brinell et Rockwell,
- Techniques de mesure de la micro-dureté comme les techniques Vickers et Knoop ,
- Techniques de mesure de la nano-dureté comme la technique de Berkovich.

Dans le domaine des couches minces ou superficielles, les méthodes de mesure de la micro dureté sont les plus adéquates à ces types de matériaux. Elles permettent d'évaluer la dureté de ces couches, notamment lors des traitements thermiques et mécaniques.

Le principe de ces méthodes est toujours le même : un pénétrateur indéformable (généralement en diamant) laisse une empreinte dans le matériau à tester. On mesure les dimensions de l'empreinte et on en déduit la dureté [77].

### 2-5-2 Essais de dureté Knoop

#### 2-5-2.1 Principe de la technique

On utilise un pénétrateur en diamant, taillé suivant une pyramide allongée avec une base de forme losange. Le rapport de longueur entre les deux diagonales est généralement de 7. Les angles entre les deux grandes arêtes et les deux petites (figure 2-10) sont de  $172,5^\circ$  et  $130^\circ$  respectivement. L'avantage du pénétrateur Knoop est de donner une empreinte suffisamment grande pour une très faible charge tout en sollicitant un volume très réduit de matière. L'application d'une force perpendiculaire, pendant un temps de 10 à 15 secondes, du pénétrateur produit une échancrure de dimension qui varie de 10 à 100  $\mu\text{m}$  dans le spécimen [78].



La micrographie de l'empreinte de Knoop est représentée sur la figure (2-11). Des mesures très localisées ( $100 \mu m$ ) peuvent être réalisées par des tests à des poids légers [79].

La dureté Knoop (HK) est calculée en mesurant la longueur de la longue diagonale de l'empreinte. Elle s'exprime par le rapport de la charge appliquée  $F$  à l'aire projetée  $A$  de l'empreinte [79] :

$$HK = F/A = \frac{0.102 F}{0.07028 l^2} \approx 14.23 \frac{0.102 F}{l^2} \quad (96)$$

Avec :  $F$  (N) charge,

$A$  ( $mm^2$ ) surface,

$l$  (mm) longueur de la plus grande diagonale de l'empreinte.

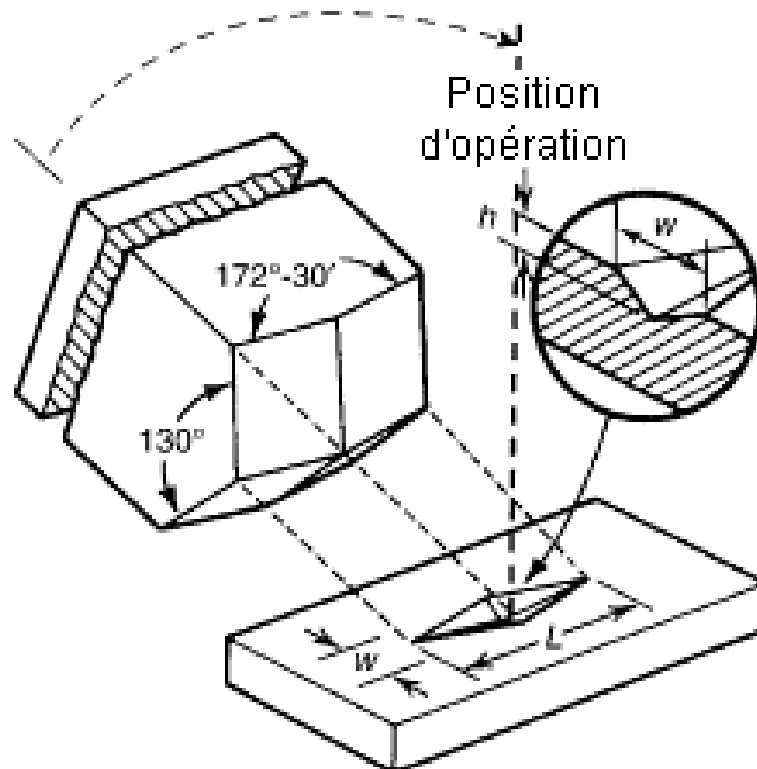


Figure 2-10 Principe de test de la dureté par la méthode de Knoop [80].

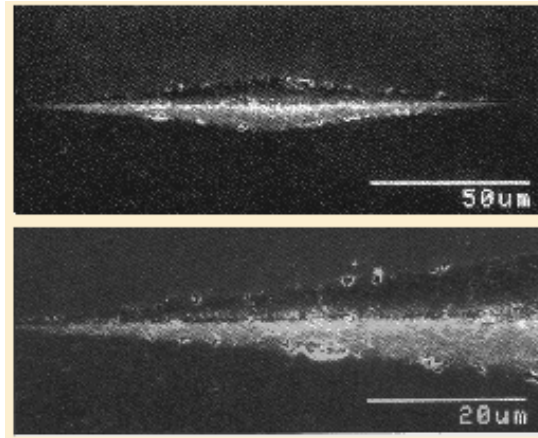


Figure 2-8 image prise par Microscope électronique à balayage (MEB) d'une empreinte du test Knoop ( $F= 19.6$  N) dans un échantillon de nitrure de silicium [81].

### 2-5-2.2 Avantages et Inconvénients de la méthode.

Les avantages de la méthode Knoop sont [82]:

- Elle peut être utilisée avec tous types de matériaux (doux ou durs),
- Il existe un seul type de pénétrateur, qui peut être utilisé pour tous les tests.
- Elle est plus adéquate aux couches très minces et aux matériaux fragiles (verre et céramique) pour lesquels aucune autre méthode n'est appropriée.
- Le test est non destructif, et il n'y a que des dégâts très mineurs à la surface de l'échantillon (à cause de sa faible pénétration),

Les inconvénients de la méthode Knoop sont [82] :

- Nécessité d'avoir une surface polie et en bonne état, sinon l'évaluation précise est difficile.
- La mesure de longueur du diagonal est plus difficile que celle de Vickers.
- Le processus est assez lent (par rapport à la méthode de Vickers). Le temps d'essai se situe entre 30 et 60 secondes, sans compter le temps nécessaire pour préparer l'échantillon,
- Pointe du pénétrateur très sensible à l'endommagement.

### 2-5-3 Essai de dureté Vickers

#### 2-5-3.1 Principe de la technique

L'essai de microdureté Vickers utilise comme pénétrateur un diamant de forme pyramidale à base carrée formant un angle de  $136^\circ$  entre les faces opposées (Fig.2-12). L'utilisation d'un pénétrateur pyramidal permet d'obtenir des empreintes géométriquement semblables entre elles, d'où des valeurs identiques pour la dureté. Le choix du diamant est crucial pour éviter la déformation du pénétrateur quand on mesure des duretés élevées. La pénétration des plus petites micro empreintes est de l'ordre de  $0,5 \mu m$ , alors que les charges réduites provoquent des empreintes de 7 à  $40 \mu m$  [76]. Un exemple typique d'une empreinte de Vickers est représenté sur la figure (2-13).

Après l'enlèvement du poids appliqué, le diamant laisse une empreinte carrée et l'on mesure la longueur des deux diagonales de l'empreinte ( $d_1$  et  $d_2$ ) grâce à un microscope micrométrique lié à la machine. L'utilisation de la longueur moyenne de la diagonale, dans la formule générale de la dureté, permet de minimiser l'erreur du calcul.

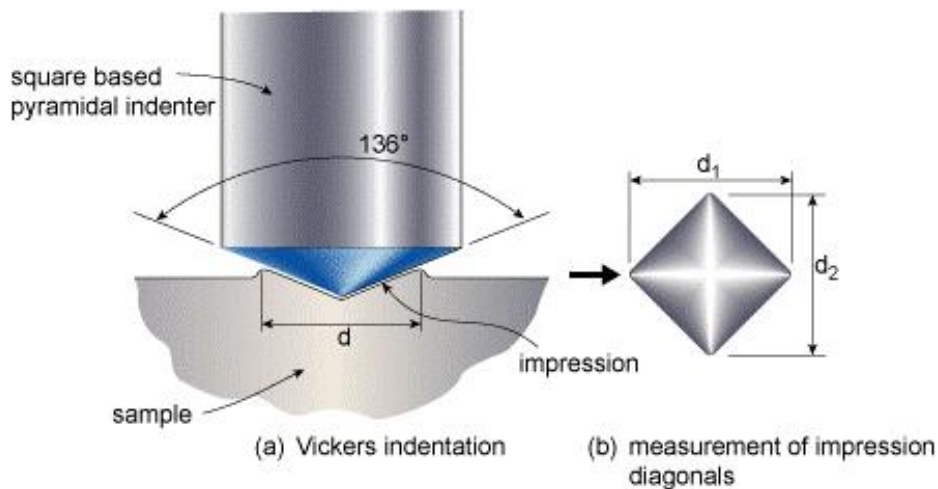


Figure 2-12 Principe de test de la dureté par la méthode de Vickers [83].

La formule de Vickers est valable aussi bien pour le calcul de la macrodureté que la microdureté. Elle est exprimée par le quotient de la charge d'essai  $F(N)$  par l'aire de l'empreinte de la diagonale moyenne  $d$ , c'est-à-dire [76] :

$$HV = 0.102 \frac{2 F \sin \frac{136^\circ}{2}}{d^2} = 0.1891 \frac{F}{d^2} \quad (97)$$

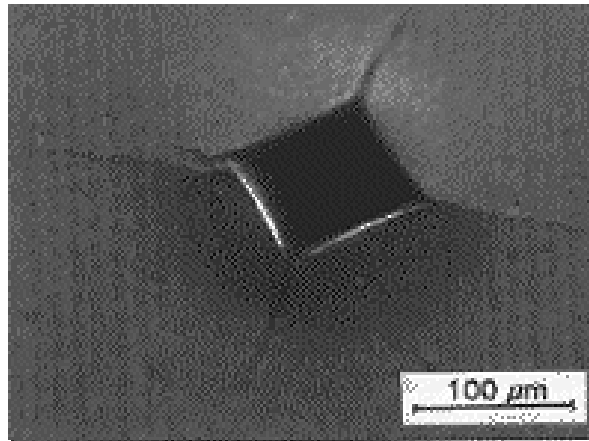


Figure 2-13 Micrographie d'une empreinte de Vickers ( $F = 98 \text{ N}$ ) dans un échantillon de nitrure de silicium [81].

### 2-5-3.2 Avantages et Inconvénients de la méthode

Les avantages de l'essai de Vickers sont [76, 82]:

- la gamme des charges utilisables (49 à 980 N) permet d'appliquer cette méthode dans toute l'échelle des duretés et avec tous types d'échantillons (dur ou doux),
- Possibilité de mesurer la dureté des surfaces, des couches minces et des petites pièces,
- L'utilisation d'un seul type de pénétrateur pour tous les tests,
- L'essai est non destructif et l'échantillon peut être analysé par la suite par d'autres techniques de caractérisation,
- la dureté Vickers est reliée aux caractéristiques contrainte-déformation du matériau, notamment avec la résistance à la traction. Les mesures peuvent être converties en termes de valeurs de contrainte.

Les inconvénients de l'essai de Vickers sont [76, 82]:

- Les empreintes étant petites, une bonne mesure des diagonales nécessite un polissage aussi parfait que possible de la surface,
- Le processus de mesure est relativement lent, sans compter le temps nécessaire pour préparer l'échantillon,
- Très sensible aux effets de vibrations surtout dans le domaine de micro-dureté,
- Pointe du pénétrateur très sensible à l'endommagement.

### 2-5-4 Instrumentation et conditions expérimentales

Dans ce travail, on a étudié la dureté des échantillons élaborés en utilisant l'essai Vickers. L'instrument utilisé est un Vickers micro duromètre de marque « INNOVATEST » piloté par micro (figure 2-14), ses principales caractéristiques sont :

- Tourelle motorisée (qui contient le pénétrateur et les objectifs) ;
- Microscope électronique doté de deux objectifs à moyen et à haute résolution ;
- transfert numérique de valeurs ;
- Charges appliquées variant de 0.01kgf/0.098N à 1kgf/9.8N ;
- Commande motorisée de charge ;
- Porte échantillons mobile à deux dimensions (XY), avec une résolution de 0.01mm, permettant de bien choisir la surface à analyser et de visualiser les empreintes des essais.

La charge appliquée dans les mesures est égale à 0.05 Kgf soit 0.49 N pour un temps de maintien égal à 10 s. Un exemple typique d'une mesure Vickers est représenté sur la figure (2-14).



Figure 2-14 Photo du micro duromètre utilisé pour les mesures de duretés des échantillons.

## *Chapitre III*

*Simulation des interactions entre les ions  
C<sup>+</sup> implantés et les substrats de Silicium*

### 3-1 Introduction

L'implantation ionique est une technique cruciale pour le dopage des semi-conducteurs et la fabrication de certains composants électroniques (comme le SiC par exemple). Elle est aussi utilisée récemment dans la fabrication des cellules solaires [84]. Une bonne maîtrise de cette technique nécessite l'utilisation de programmes de simulation basés sur des modèles théoriques d'interaction ion - matière. En effet, une bonne prédiction des différents phénomènes liés à l'irradiation (tels que : les profils de distribution des ions implantés et les défauts produits par l'implantation) aide à bien comprendre et à maîtriser les processus de fabrication des dispositifs électroniques basés sur cette technique. Dans ce chapitre, on va utiliser deux programmes de simulation, basés sur l'approximation de collisions binaires, pour prévoir et étudier plusieurs phénomènes liés à l'implantation ioniques. Le code TRIM est utilisé dans le cas des cibles amorphes, tandis que le code Crystal – TRIM est conçu spécialement dans le cas des cibles cristallines.

### 3-2 Programme TRIM

Dans ce calcul, plusieurs phénomènes liés à l'implantation ionique du carbone, dans des cibles amorphes de silicium, ont été simulés. L'étude est réalisée par le code TRIM pour les paramètres d'implantation suivants :

Dose d'implantation ( $cm^{-2}$ )	Energie d'implantation (KeV)	Tilt du faisceau d'ions
$2.7 \times 10^{17}$	80	$0^\circ - 7^\circ$

Dans le programme TRIM, on a choisi une cible de silicium d'épaisseur 10000 Å. Le mode de calcul dit : «Detailed Calculation with full Damage Cascade » est le mode le plus compliqué. En effet, en plus de la poursuite des projectiles, cette option poursuit chaque atome reculé jusqu'à ce que son énergie devienne insuffisante pour déplacer n'importe quel atome de la cible. Les valeurs de l'énergie de déplacement, d'un atome de silicium, ( $E_d$ ) et l'énergie de liaison Si-Si ( $E_b$ ) sont égales à 15 eV et 2 eV respectivement. Ces valeurs (qui sont données par défaut par le code TRIM) sont légèrement différentes par rapport à celle tabulées dans la littérature [20,85]. En ce qui concerne le nombre d'ions, nous avons utilisé 99999 (proposé initialement par le programme). Cependant, dans certains cas, nous avons utilisé 10000 ions à titre de comparaison.

### 3-2-1 Perte d'énergie et pouvoir d'arrêt

Sur la figure (3-1), on représente les variations des pertes d'énergie, électronique et nucléaire, du carbone en fonction de son énergie d'incidence. A partir de cette variation, on peut voir que l'énergie transférée au réseau de silicium est régie principalement par les collisions électroniques. En effet, c'est le pouvoir d'arrêt électronique qui est prédominant. La perte d'énergie électronique est maximale aux alentours de 2800 keV (1190 keV/micromètre). Elle peut être répartie en quatre zones différentes :

- **Zone 1** (varie d'une vingtaine de keV jusqu'à  $\sim 1000$  keV) : le pouvoir d'arrêt électronique est sensiblement proportionnel à l'énergie de la particule. En effet, un petit changement de l'énergie d'incidence provoque une grande variation de l'énergie transférée. C'est le régime d'interaction de Lindhard - Scharff (LS) [27] où la variation du pouvoir d'arrêt électronique est donné par l'équation (37) ;
- **Zone 2** (entre  $\sim 1000$  keV et  $\sim 2200$  keV) : le pouvoir d'arrêt électronique augmente en fonction de l'énergie d'implantation mais avec une vitesse nettement inférieure par rapport à celle de la zone 1 ;
- **Zone 3** (entre  $\sim 2200$  keV et  $\sim 4000$  keV) : la perte d'énergie électronique est stabilisée à une valeur proche de la valeur maximale (1190 keV/micromètre) ;
- **Zone 4** (au-delà de  $\sim 4000$  keV) : La section efficace d'arrêt électronique diminue en fonction de l'énergie d'incidence. L'interaction des ions implantés avec les cortèges électroniques des atomes cibles suit le régime de Bethe-Bloch (équations 38 et 39).



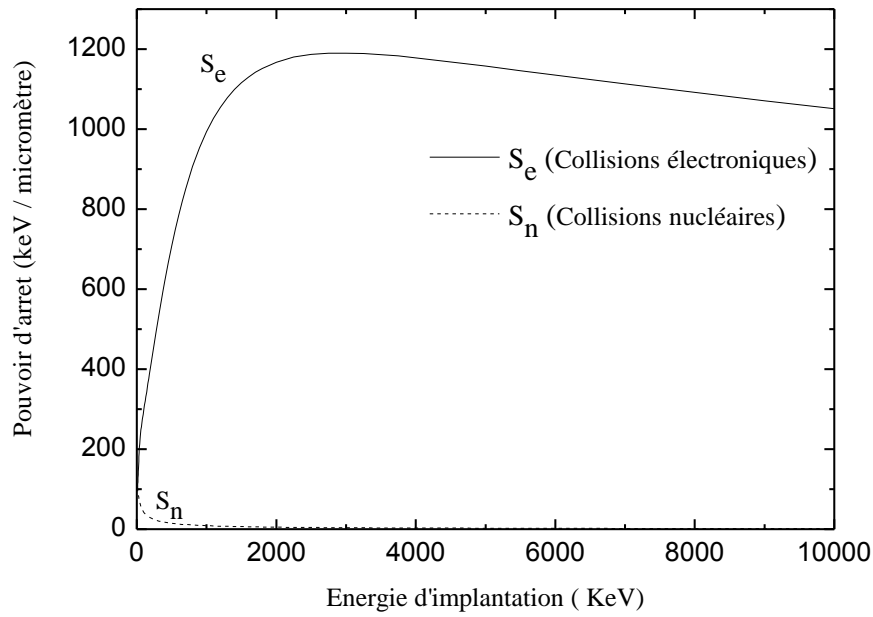


Fig. 3-1: Simulation, par le code TRIM, des pouvoirs d'arrêts nucléaire et électronique des ions  $C^+$  (implantés dans Si) en fonction de l'énergie d'implantation.

### 3-2-2 Calcul des paramètres du profil des ions $C^+$

Dans le processus de l'implantation ionique, il est indispensable de prévoir les paramètres d'implantation (d'ions dans une cible) tels que le parcours projeté moyen  $R_p$  et l'écart-type (straggling)  $\Delta R_p$ . La figure (3-2) représente le profil de distribution des ions de carbone implantés dans une cible amorphe de silicium (pour une énergie de 80 keV, une dose de  $2,7 \times 10^{17} C^+/cm^2$  et un tilt de  $7^\circ$ ). D'après ce profil, on peut remarquer que la distribution simulée a une forme quasi gaussienne qui est en accord avec l'étude expérimentale fournie par la littérature [86].

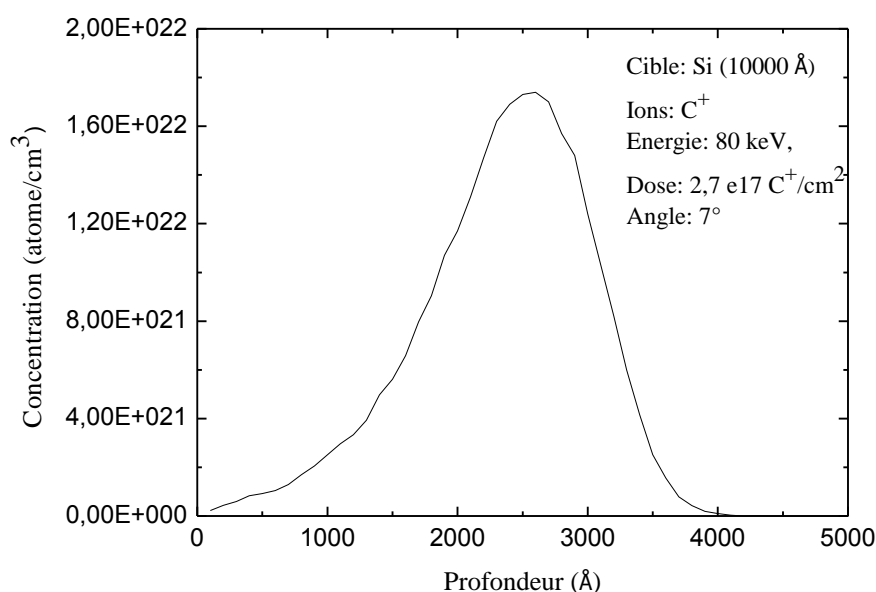


Fig. 3-2: profil de distribution, des atomes de carbone dans Si, simulé par le code TRIM.

La simulation de la distribution a été réalisée pour un nombre d'ions  $C^+$  égal à 99999. Les paramètres extraits du profil de la figure (3-2) sont les suivants: le parcours projeté  $R_p = 2295 \text{ \AA}$ , l'écart-type  $\Delta R_p = 655 \text{ \AA}$ , l'asymétrie  $\gamma = -0,588$  et l'aplatissement  $\beta = 3.247$ .

Tout d'abord, nous notons que les valeurs de  $R_p$  et de  $\Delta R_p$  sont légèrement inférieures à celles mesurées expérimentalement et citées dans la littérature ( $R_p = 2600 \text{ \AA}$ ,  $\Delta R_p = 760 \text{ \AA}$ ) [86]. Cette différence est due au fait que le profil simulé n'a pas de forme gaussienne parfaite. En effet, la valeur négative de l'asymétrie indique que le pic est penché vers la surface [86]. Tandis que la valeur obtenue de l'aplatissement indique la présence d'une petite queue dans le profil de distribution.

En outre, on note que la simulation effectuée pour un tilt de  $0^\circ$  a donné des résultats comparables à ceux qui correspondent à un angle de  $7^\circ$  (Tableau 3-1). Ceci est logique puisque le code TRIM suppose que les cibles sont amorphes ce qui explique l'absence totale de l'effet de canalisation.

Méthode	R <sub>p</sub> (Å)	ΔR <sub>p</sub> (Å)	γ	β
TRIM (φ = 0°)	2309	655	- 0.602	3.2711
TRIM (φ = 7°)	2295	655	- 0.588	3.2472
Littérature [12]	2600	760	.....	.....

Tableau 3-1 Comparaison des paramètres simulés et expérimentaux des profils de distribution des ions C<sup>+</sup> implantés dans Si (80 keV, 2,7 x 10<sup>17</sup> C<sup>+</sup>/cm<sup>2</sup>)

En outre, on note, dans le code TRIM, que deux paramètres liés au substrat sont pris en considération. Le premier concerne l'énergie de déplacement ( $E_d$ ) et il définit la quantité (en termes d'énergie) qu'un atome de recul doit posséder pour surmonter les forces du réseau et de se déplacer loin de sa position d'origine [17]. Le deuxième paramètre concerne l'énergie de liaison du réseau «binding energy» ( $E_b$ ) qui représente l'énergie perdue (sous forme d'émission de phonons) par les atomes de la cible quand ils quittent le réseau [17]. Les valeurs par défaut de  $E_d$  et  $E_b$ , pour les semi-conducteurs, sont inclus dans la base de données du TRIM. Elles sont égales à 15 eV et 2 eV respectivement. Elles sont un peu différentes de celles données dans la littérature (par exemple  $E_d = 13$  eV et  $E_b = 3$  eV) [17, 87]. Dans le tableau 2, nous présentons les valeurs simulées de  $R_p$ ,  $\Delta R_p$ ,  $\gamma$  et  $\beta$  obtenues par simulation pour les valeurs par défaut de  $E_d$  et  $E_b$  ainsi que pour celles fournies par la littérature [17, 87]. Selon ces résultats, on constate que la simulation effectuée pour les valeurs par défaut de  $E_d$  et  $E_b$ , donne des résultats identiques avec la simulation exécutée avec les valeurs données dans la littérature.

Méthode	R <sub>p</sub> (Å)	ΔR <sub>p</sub> (Å)	γ	β
TRIM (E <sub>d</sub> =15eV, E <sub>b</sub> =2eV)	2292	654	-0.6131	3.2448
TRIM(E <sub>d</sub> =13eV, E <sub>b</sub> =3eV)	2292	654	-0.6131	3.2448
Littérature [12]	2600	760	.....	.....

Tableau 3-2 : Paramètres simulés de distribution des atomes de carbone pour différentes valeurs de  $E_d$  et  $E_b$ .

La simulation par le programme TRIM utilise par défaut un nombre total, d'ions incidents, égal à 99999 ions. Dans notre étude, nous avons remarqué que ce calcul nécessite un temps de simulation très long (~ 600 minutes pour un processeur P4 de fréquence 3.4 GHz) surtout si nous choisissons le mode «Calcul détaillé ». Pour cette raison, on a essayé d'utiliser un nombre inférieur d'ions (par exemple  $N = 10000$  ions) et faire une comparaison par la suite. Tout d'abord, le temps de simulation a significativement diminué (~ 60 minutes). En ce qui concerne les valeurs de  $R_p$ ,  $\Delta R_p$ ,  $\gamma$  et  $\beta$ , on peut remarquer, d'après le tableau (3-3), que les résultats sont très proches ce qui signifie qu'il est possible de réduire le nombre d'ions au cours de la simulation par TRIM.

Méthode	$R_p(\text{Å})$	$\Delta R_p(\text{Å})$	$\gamma$	$\beta$
TRIM (N=10000 ions)	2292	654	-0.6131	3.2448
TRIM (N=99999 ions)	2295	655	-0.5880	3.2472
Littérature [12]	2600	760	.....	.....

Tableau 3-3 : paramètres simulés du profil des atomes de carbone implanté dans Si pour deux nombres différents d'ions ( $N= 10000$  et  $N= 99999$ ). La simulation était exécutée pour :

$$80 \text{ keV}, 2,7 \times 10^{17} \text{ C}^+/\text{cm}^2 \text{ et } \varphi = 7^\circ.$$

Sur la figure (3-3), on a représenté les variations de l'écart type longitudinal ( $\Delta R_p$ ) et latéral ( $\Delta R_\perp$ ) en fonction de l'énergie d'implantation des ions. On peut voir que cette variation est proportionnelle à l'énergie d'incidence. Cependant, les valeurs de  $\Delta R_p$  et  $\Delta R_\perp$  sont très proches dans la gamme d'énergie variant de 10 keV jusqu'à environ 225 keV et ils ont la même valeur (soit 1132 Å) pour une énergie  $E \sim 192$  keV. Au fur et à mesure que l'énergie d'incidence augmente, les valeurs de la déviation latérale  $\Delta R_\perp$  deviennent plus grandes par rapport à celles de l'écart type longitudinal  $\Delta R_p$ .

Les variations du parcours projeté moyen  $R_p$  en fonction de l'énergie d'incidence sont représentées sur la figure (3-4). D'après cette figure, on remarque bien que  $R_p$  est proportionnel à  $E$ . Cette variation est quasi-parabolique dans le domaine d'énergie situé entre 10 keV et ~ 660 keV, puis devient quasi-linéaire pour le reste de la courbes.

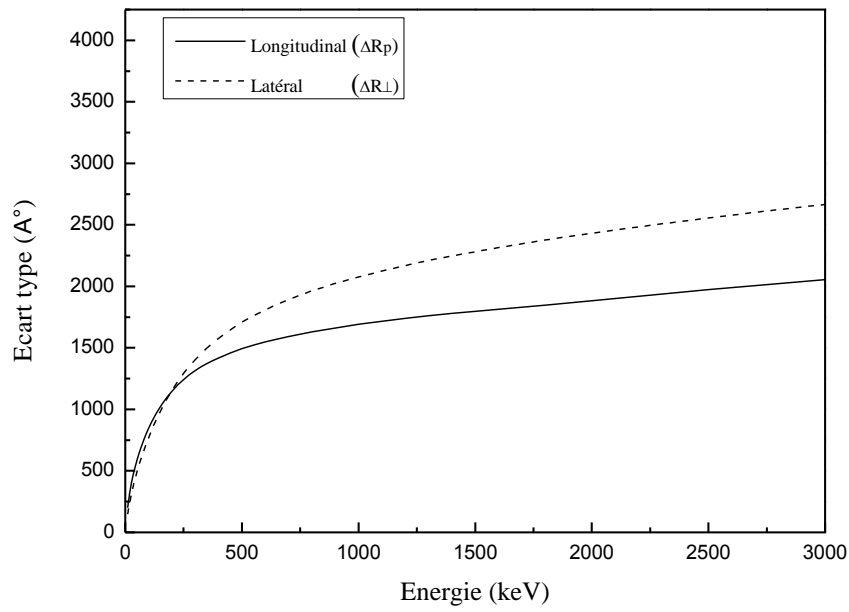


Fig. 3-3: Simulation par TRIM des variations des écarts types longitudinal ( $\Delta R_p$ ) et latéral ( $\Delta R_L$ ) en fonction de l'énergie d'implantation.

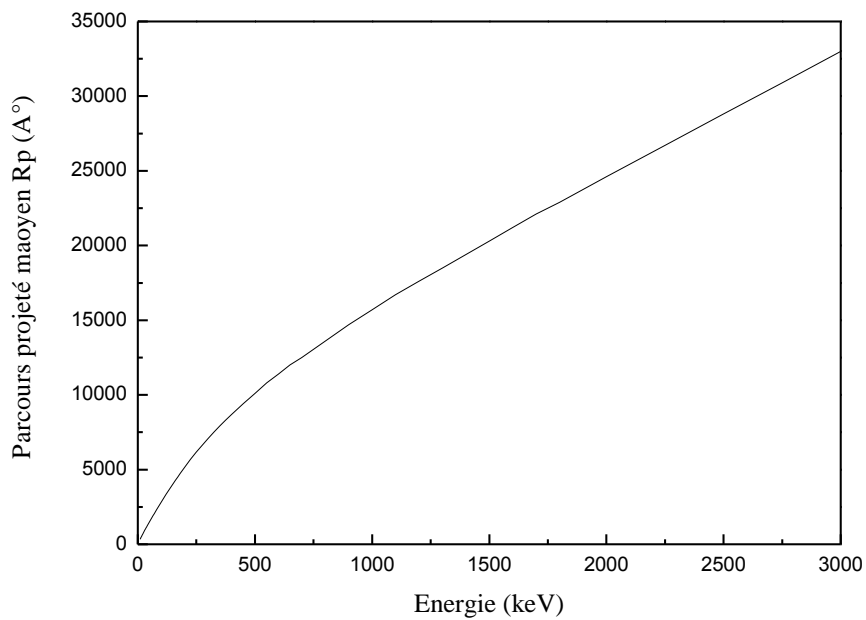


Fig. 3-4: Simulation par TRIM de l'évolution du parcours projeté moyen ( $R_p$ ) en fonction de l'énergie d'incidence.

### 3-2-3 Simulation des profils de défauts

Lors de l'implantation d'ions dans une cible solide, de nombreux défauts sont créés dans le matériau. Dans ce travail, nous avons utilisé le code TRIM pour prédire la distribution des phonons (Fig. 3-5) et des lacunes ou sites vacants (Fig. 3-6) générés dans une cible de silicium par implantation d'ions de carbone (dose =  $2,7 \times 10^{17} C^+ cm^{-2}$ , énergie 80 keV).

Tout d'abord, à partir de ces figures, on constate que les dommages causés par l'implantation sont dues à la fois aux ions implantés et aussi aux atomes de recul «recoils». Mais, il est clair que les défauts (à savoir phonons ou sites vacants) générés par les atomes de recul sont plus importants que ceux générés par les ions. Par ailleurs, on peut remarquer que les allures des profils des phonons et des lacunes ne sont pas gaussiennes. En outre, la simulation montre que les défauts créés par les ions sont localisés plus profondément dans la cible par rapport à celles générées par les atomes de recoils. En effet, à partir des figures (3-5) et (3-6), nous avons remarqué que les pics des concentrations des phonons et des lacunes dus aux atomes de recul correspondent à une profondeur qui est égale à environ 2000 Å de la cible. Tandis que dans le cas des défauts créés par les ions, les pics des concentrations maximales ont été observés à 2200 Å qui est légèrement inférieure au parcours projeté  $R_p$ .

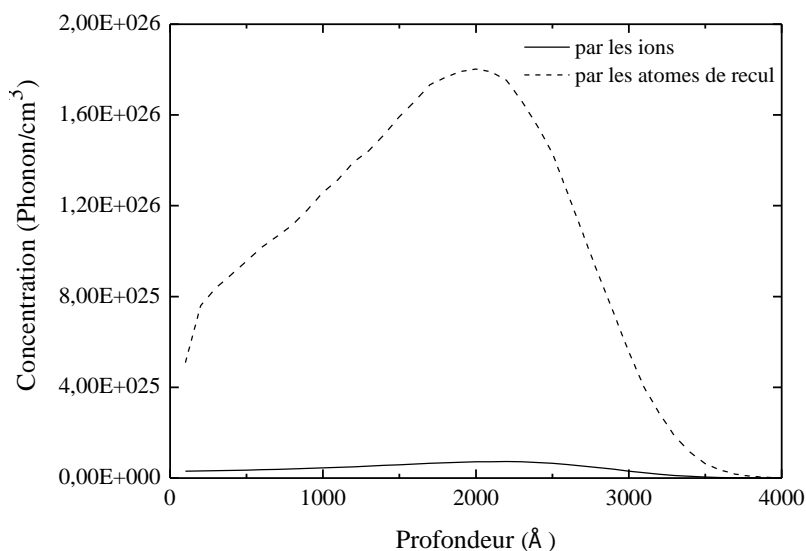


Fig. 3-5 Prédiction TRIM du profil des phonons générés dans une cible de silicium implantée avec des ions de carbone (Dose =  $2,7 \times 10^{17} C^+ cm^{-2}$ , énergie = 80 keV)

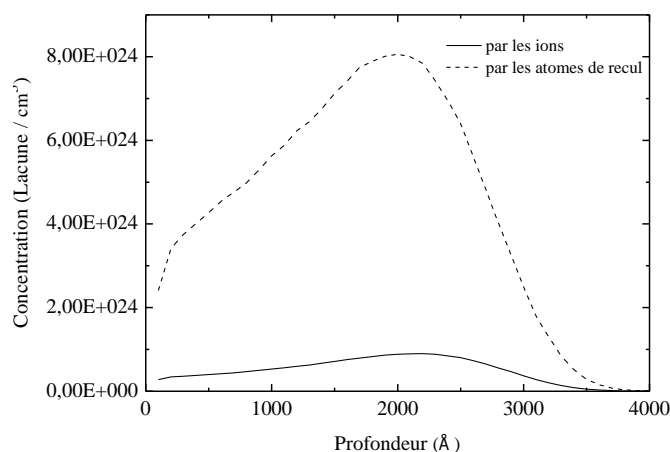


Fig. 3-6 Prédiction TRIM du profil des lacunes générées dans une cible de silicium implantée avec des ions de carbone (Dose =  $2,7 \times 10^{17} C^+ cm^{-2}$ , énergie = 80 keV)

### 3-2-4 Simulation dans les conditions expérimentales d'implantation

Dans cette partie du travail, on a essayé d'étudier la distribution des ions de carbones implantés et des défauts générés en utilisant les conditions réelles de l'implantation. Les spectres de distributions des ions  $C^+$  sont représentés sur la figure (3-7) pour les deux doses  $1E16 C^+/cm^2$  (a) et  $1E17 C^+/cm^2$  (b) respectivement. Les allures des spectres sont similaires et quasi gaussiennes.

Pour les profils des défauts, on constate qu'ils sont décalés vers la surface par rapport aux profils des ions et les intensités sont nettement supérieures par rapport aux profils d'ions (fig.3-8). Ce résultat est logique puisque la majorité des défauts sont produits par les atomes arrachés de leurs sites ou les atomes de recul comme le confirme la figure (3-9).

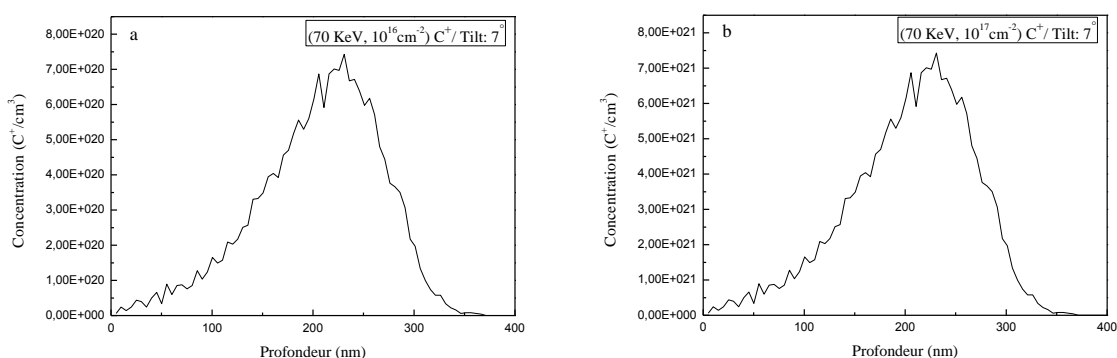


Fig. 3-7 Profils simulés par Trim des distributions des ions  $C^+$  implantés dans Si(100).

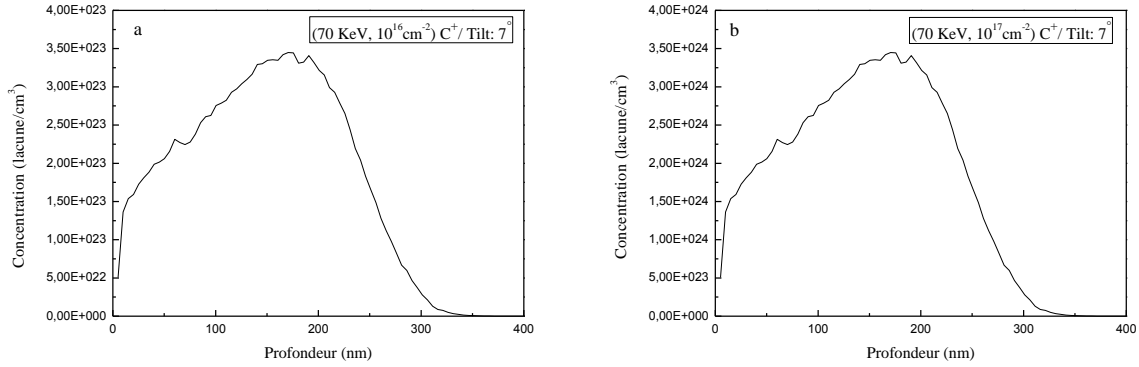


Fig. 3-8 Profils simulés par Trim des distributions totales des sites vacants créés par l'implantation des ions  $C^+$  dans Si(100).

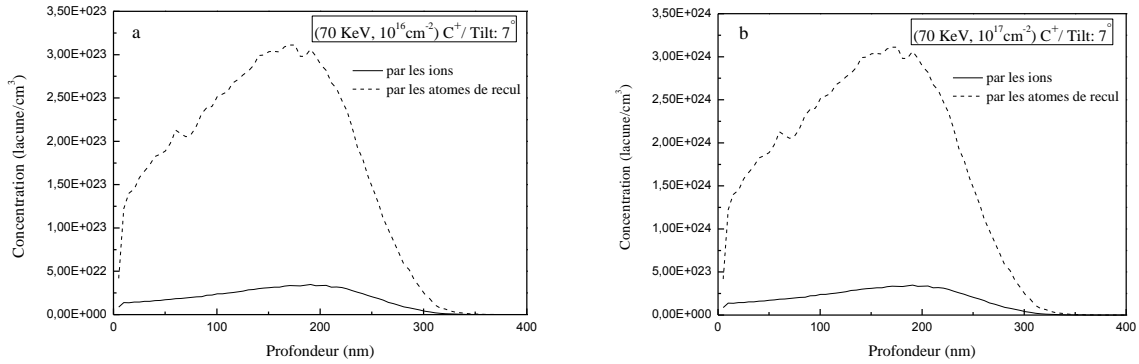


Fig. 3-9 Profils simulés des défauts créés par les ions et les atomes de reculs pour deux doses :  $10^{16} C^+ cm^{-2}$  (a) et  $10^{17} C^+ cm^{-2}$  (b).

(70 KeV $C^+$ ) / Si(100), Tilt: $7^\circ$				
Doses ( $C^+/cm^2$ )	$R_p(nm)$	$\Delta R_p(nm)$	$\gamma$	$\beta$
$10^{16}$	203	61	-0.549	3.1
$10^{17}$	203	61	-0.549	3.1

Tableau 3-4 : Valeurs théoriques, calculées par Trim, des paramètres de distribution des atomes de carbone implantés dans Si(100).



### 3-3 Programme Crystal Trim

La simulation par le code Crystal TRIM est plus performante par rapport au code précédent ( i.e. TRIM). En effet, elle prend en compte plusieurs paramètres liés au faisceau d'ion (dose, énergie, tilt...etc.) et au substrat (orientation cristallographique, température...etc.). D'où la possibilité de simuler l'interaction ion-cible monocristalline contrairement au code TRIM.

Dans cette partie de travail, on va étudier plusieurs phénomènes liés à l'implantation d'ions tels que : les paramètres des profils de distribution des ions et des défauts, les dépôts d'énergie et la canalisation des ions dans des cibles mono cristallines de Si.

#### 3-3-1 Influence des paramètres du faisceau d'ions sur les profils de distribution

##### a) Energie d'implantation

La figure (3-10) représente les variations du profil de distribution du carbone implanté, dans des cibles Si(100), en fonction de différentes valeurs d'énergies d'implantation (30 keV, 50 keV et 100 keV). On peut constater que l'allure de ces profils suit une distribution quasi-gaussienne. On peut aussi noter que les valeurs du parcours moyen projeté ( $R_p$ ) et de l'écart type ( $\Delta R_p$ ) augmentent au fur et à mesure que l'énergie d'implantation augmente (tableau 3-5). Les courbes deviennent de plus en plus profondes.

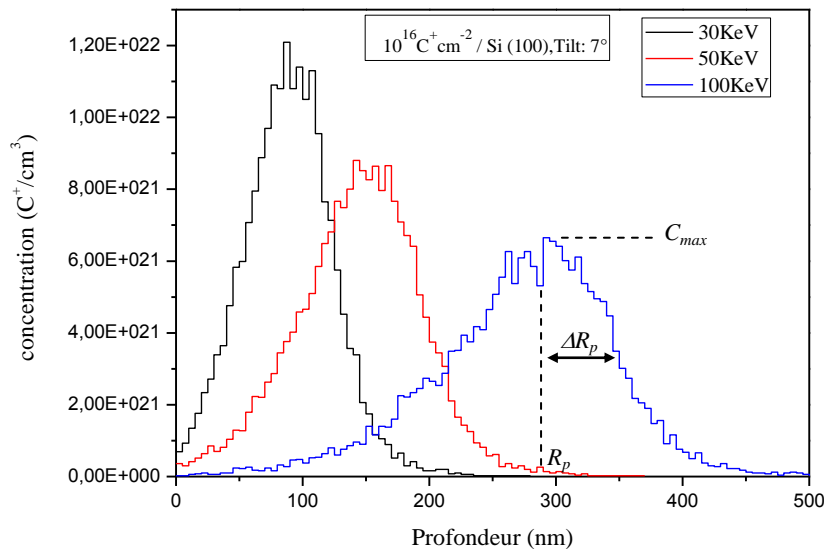


Fig. 3-10 Profils de distribution des atomes de carbone, dans Si(100), avec différentes valeurs d'énergies d'implantation.

Energies	$R_p(nm)$	$\Delta R_p(nm)$	$\gamma$	$\beta$
30 keV	91	36	0.127	3.45
50 keV	146	50	-0.143	3.42
100 keV	276	72	-0.473	3.82

Tableau 3-5 : paramètres simulés du profil des atomes de carbone dans Si(100) pour différentes valeurs d'énergies d'implantation. (Dose =  $10^{16} C^+ cm^{-2}$  ; tilt:  $7^\circ$ )

### b) Dose d'implantation

L'évolution simulée du profil de distribution des ions de carbone, implantés à 50 keV, avec trois doses ( $1 \times 10^{16}$ ,  $5 \times 10^{16}$  et  $1 \times 10^{17} C^+ / cm^2$ ) est représenté sur la figure (3-11-a). D'après cette figure, il est clair que les trois courbes ont les mêmes valeurs de ( $R_p$ ) et de ( $\Delta R_p$ ) (soit 146 nm et 50 nm respectivement). Cependant, ces profils diffèrent par rapport aux valeurs de concentrations maximales  $C_{max}$  (tableau 3-6). Ceci est logique puisque la concentration finale des ions implantés dépend essentiellement de la dose initiale d'implantation.

Si on augmente l'énergie d'implantation à 100 keV (fig. 3-11-b), on aboutit au même résultat, c'est-à-dire que le parcours projeté moyen et l'écart type sont les mêmes pour les différentes doses ( soit 273 nm pour  $R_p$  et 73 nm pour  $\Delta R_p$ ).

Les valeurs négatives du paramètre  $\gamma$  « skewness » pour les deux figures (tableau 3-6) indiquent que les concentrations sont légèrement supérieures du côté de la surface de la cible. En comparant ces valeurs avec la valeur théorique de  $\gamma$  qui est égale à 0 dans le cas d'une distribution gaussienne idéale et symétrique, on peut constater que la différence des concentrations avant et après la position de  $R_p$  est beaucoup plus grande dans le cas d'une énergie d'implantation plus élevée (100 keV).

Pour le paramètre  $\beta$  « kurtosis », les valeurs obtenues (tableau 3-6) sont supérieures à la valeur théorique ( $\beta_0 = 3$ ) ce qui signifie qu'il y'a une petite queue de la distribution du côté profond de la distribution. On note que ce décalage augmente avec l'énergie d'implantation.

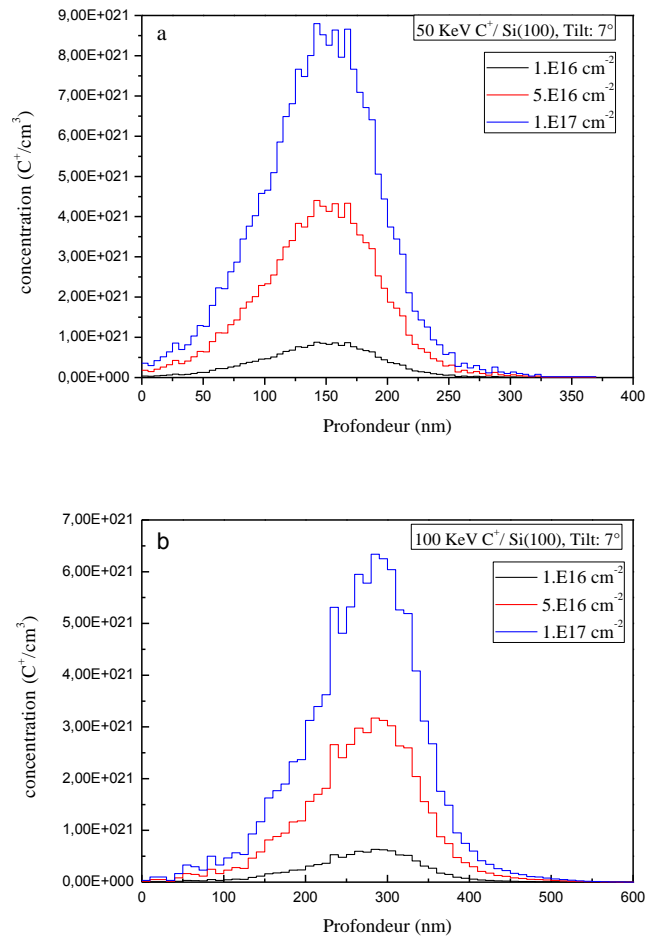


Fig. 3-11 Profils des atomes de carbone dans Si(100) avec différentes doses d'implantation et pour deux énergies d'implantation : 50 keV (a) et 100 keV (b).

Doses ( $cm^{-2}$ )	$R_p(nm)$	$\Delta R_p(nm)$	$C_{max}(cm^{-3})$	$\gamma$	$\beta$
50 keV					
1. E16	146	50	8.7 E20	-0.143	3.42
5. E16	146	50	4.4 E21	-0.143	3.42
1. E17	146	50	8.9 E21	-0.143	3.42
100 keV					
1. E16	273	73	6.3 E20	-0.343	3.95
5. E16	273	73	3.2 E21	-0.343	3.95
1. E17	273	73	6.3 E21	-0.343	3.95

Tableau 3-6 : paramètres simulés des profils de carbone, implanté dans Si(100), pour différentes doses d'implantation et un tilt égal à 7°.

### c) Angle d'incidence du faisceau d'ions (Tilt)

La technique de l'implantation ionique peut être réalisée pour différents angles d'incidence en inclinant le porte substrat. Le choix du tilt du faisceau est crucial dans plusieurs applications technologiques.

Dans ce travail, on a essayé d'étudier l'effet de l'angle d'incidence sur les profils de concentration des ions de carbone implantés avec deux énergies différentes (50 keV et 100 keV) dans une cible de silicium Si(100). Comme le montre la figure (3-12) ci-dessous, les formes des profils de distribution qui correspondent à l'angle ( $\varphi = 0^\circ$ ) ne sont pas gaussiennes. Ce résultat est dû à l'effet de canalisation qui favorise une pénétration plus profonde des ions dans la cible où ils sont focalisés entre deux plans ou dirigés suivant un axe cristallographique principal ( par exemple  $\langle 100 \rangle$  ). En comparant les deux profils des deux énergies, on peut voir que le taux des ions canalisés dans le cas de 50 keV est plus grand par rapport à 100 keV. Ce résultat signifie que plus l'énergie d'implantation augmente, plus l'ion implanté a tendance à faire des collisions non-corrélées et il diffuse avec des angles plus grandes ce qui diminue en conséquence le nombre d'ions canalisés.

Cependant, pour les angles d'incidence  $7^\circ$  et  $10^\circ$ , les courbes sont similaires est de forme quasi-gaussienne, avec des profils plus profonds dans le cas de la valeur  $E = 100$  keV (tableau 3-7).

Par conséquent, il est fortement recommandé d'éviter le tilt  $0^\circ$  pour l'élaboration des couches enterrées et homogènes du carbure de silicium SiC.

Tilt	$R_p(nm)$	$\Delta R_p(nm)$	$C_{max} (cm^{-3})$	$\gamma$	$\beta$
50 keV					
$7^\circ$	146	50	8.7 E20	-0.143	3.42
$10^\circ$	147	48	1.0 E21	-0.210	3.32
100 keV					
$7^\circ$	273	73	6.3 E20	-0.343	3.95
10	272	71	6.7 E20	-0.458	3.94

Tableau 3-7 : paramètres simulés du profil des ions  $C^+$  implantés dans Si(100), pour différents angles d'implantation, (dose =  $10^{16} C^+ cm^{-2}$ ).

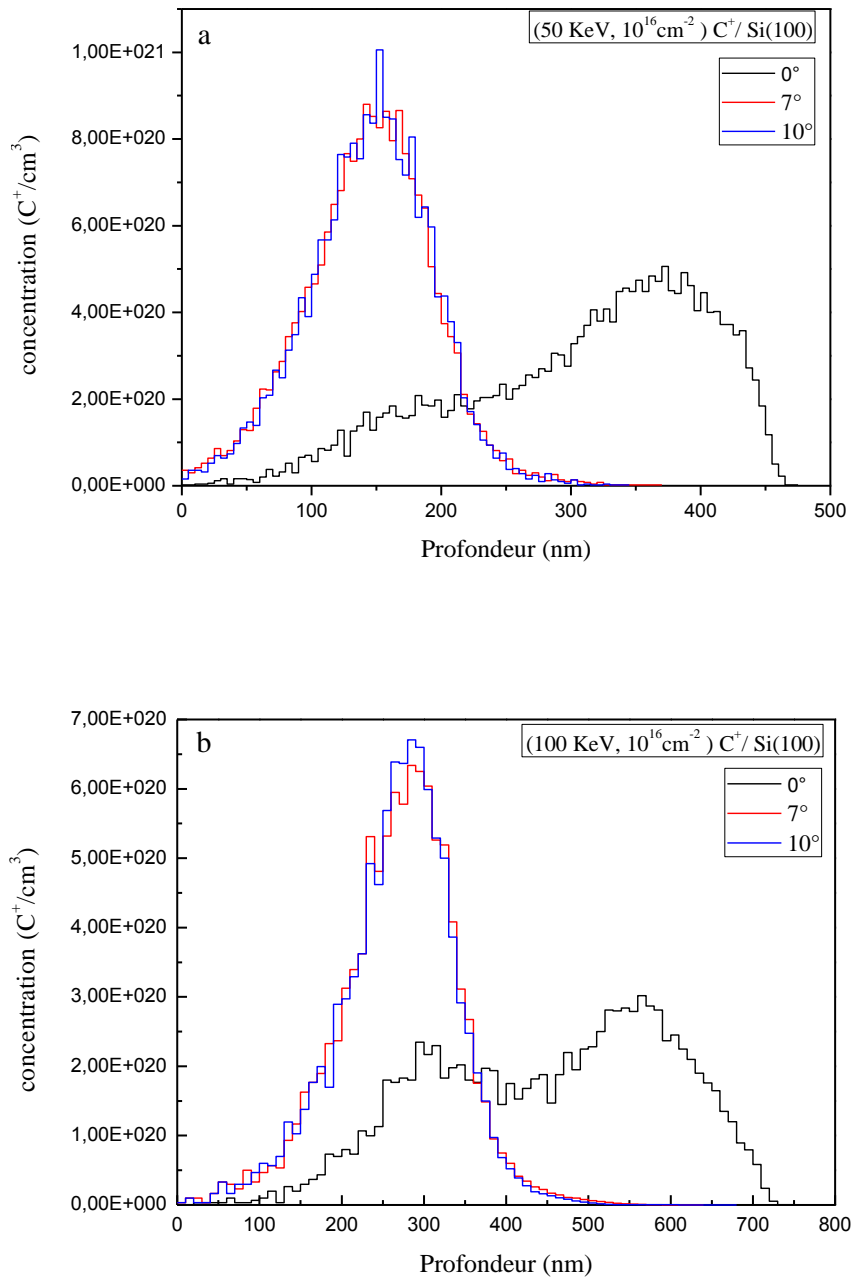


Fig. 3-12 Profils des atomes de carbone, dans Si(100), avec différents angles d'implantation et pour deux énergies d'implantation : 50 keV (a) et 100 keV (b).

### 3-3-2 Influence des paramètres liés au substrat sur les profils de distribution

#### a) Température du substrat

Certains dispositifs expérimentaux des implantateurs ioniques sont dotés d'un équipement de chauffage des portes substrats afin de réaliser les implantations des cibles à des températures choisies. En effet, l'échauffement de la cible pendant l'implantation sert à guérir les défauts créés et à recristalliser partiellement la cible. Cependant, une recristallisation optimale et fiable, n'est possible que par un traitement thermique de post-implantation.

Dans cette partie de travail, on a essayé d'étudier l'effet de la température de la cible sur la distribution des ions implantés. Pour cela, on a choisie trois températures différentes :  $25^{\circ}C$ ,  $200^{\circ}C$  et  $400^{\circ}C$ . Les résultats représentés sur la figure (3-13) montrent que les profils de distribution ne dépendent pas de la température des substrats. En effet, les deux énergies d'implantation utilisées (50 keV et 80KeV), les valeurs de  $R_p$  et  $\Delta R_p$  sont quasiment les mêmes (tableau 3-8). Ce résultat est prévisible puisque le code Crystal-Trim ne prend pas en compte la recristallisation du réseau durant l'implantation d'ions.

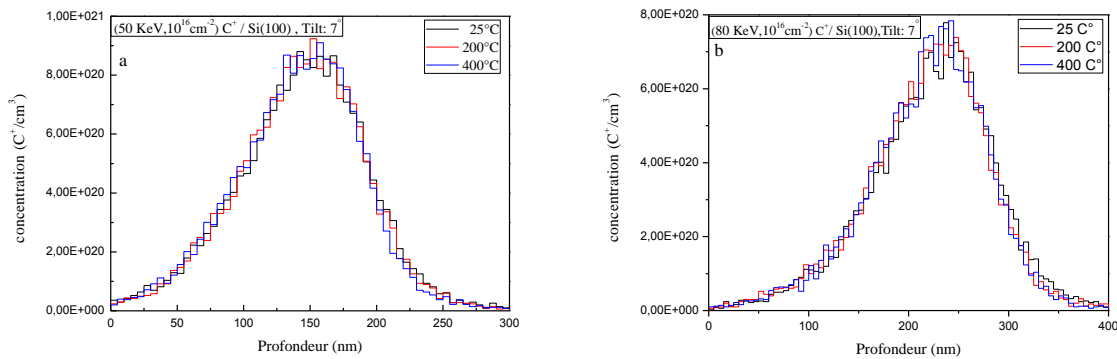


Fig. 3-13 Profils simulés de distribution des atomes de carbone dans Si(100) pour différentes températures de substrats.

Temperatures	$R_p(nm)$	$\Delta R_p(nm)$	$C_{max} (cm^{-3})$	$\gamma$	$\beta$
50 keV					
25 C°	146	50	8.7 E20	-0.143	3.42
200 C°	145	48	9.2 E20	-0.194	3.32
400C°	143	48	9.1 E20	-0.189	3.38
80 keV					
25 C°	226	64	7.8 E20	-0.319	3.70
200 C°	221	62	7.4 E20	-0.360	3.72
400C°	221	61	7.8 E20	-0.461	3.72

Tableau 3-8 : Résultats principaux obtenus à partir de la figure (3-13)

### b) Orientation du substrat

Dans cette partie de notre travail, nous avons simulé les profils de distribution des atomes de carbone pour deux orientations différentes du substrats Si:  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$ . D'après la figure (3-14) ci dessous, il est clair que la distribution du carbone pour l'orientation  $\langle 100 \rangle$  est légèrement plus profonde par rapport à la direction  $\langle 111 \rangle$ . Ce résultat est obtenu pour les deux énergies d'implantations utilisées. Ceci est logique car la direction  $\langle 100 \rangle$  est moins dense par rapport à la direction  $\langle 111 \rangle$  (voir fig.3-15) [88]. Sur le tableau (3-9), on résume les différents paramètres obtenus par les calculs exécutés.

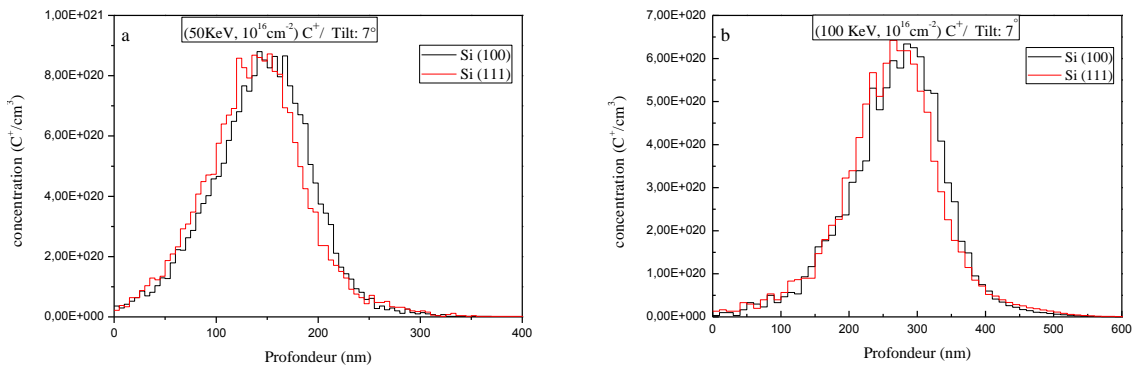


Fig. 3-14 profils en profondeur du carbone implanté dans Si (100) et Si (111) pour des énergies d'implantation égales à 50 keV (a) et 100 keV (b).

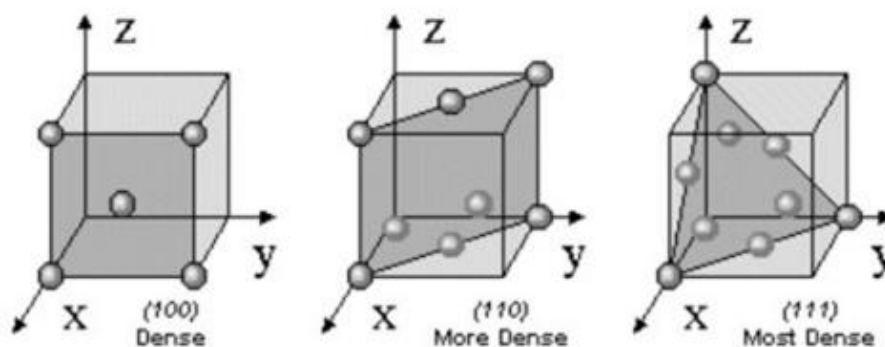


Fig. 3-15 Représentation schématique des principaux plans cristallographiques du silicium [88].

Orientation du substrat	$R_p(nm)$	$\Delta R_p(nm)$	$C_{max} (cm^{-3})$	$\gamma$	$\beta$
50 keV					
<100>	146	50	8.7 E20	-0.143	3.42
<111>	140	52	8.7 E20	0.197	3.94
100 keV					
<100>	273	73	6.3 E20	-0.343	3.95
<111>	266	77	6.4 E20	-0.099	4.34

Tableau 3-9 : Résultats principaux obtenus à partir des profils de redistribution de la figure (3-14).

### c) Présence d'une Couche d'oxyde ( $SiO_2$ )

En pratique, le Silicium s'oxyde à température ambiante en présence de l'atmosphère contenant de l'oxygène. Or, dès que la couche du dioxyde de silicium atteint une épaisseur de 20 Å à 30 Å (correspondant à quelques couches atomiques) l'oxydation se bloque. Celle-ci est désignée par l'oxyde natif. Pour augmenter l'épaisseur de la couche du  $SiO_2$ , pour des besoins technologiques, on utilise ce qu'on appelle une oxydation thermique à haute température (généralement comprises entre 900 C° et 1200 C°) [89]. Celle-ci s'effectue sous oxygène chargé de vapeur d'eau (oxydation humide) ou sous flux d'oxygène pur (oxydation sèche).

Dans ce travail, on a étudié l'effet de la présence de la couche d'oxyde sur les profils de distribution des ions de carbone. Pour ce faire, on a choisie trois épaisseurs différentes de la couches ; 20 Å, 100 Å et 200 Å. La figure (3-16-a) représente les profils simulés pour un tilt



de  $7^\circ$ . Il est clair que les courbes sont proches l'une de l'autre mais on remarque que plus l'épaisseur du  $SiO_2$  augmente, plus les courbes sont poussées légèrement vers la surface. Ceci est dû au freinage des ions par interaction avec les atomes de la couche d'oxyde. On remarque aussi que la présence du  $SiO_2$  n'influe pas sur la forme quasi-gaussienne des distributions car l'oxyde de silicium est de structure amorphe.

Pour un faisceau perpendiculaire à la cible (tilt de  $0^\circ$ ), la couche  $SiO_2$  délimite le phénomène de canalisation et le nombre des ions canalisés diminue avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche (Fig.3-16-b).

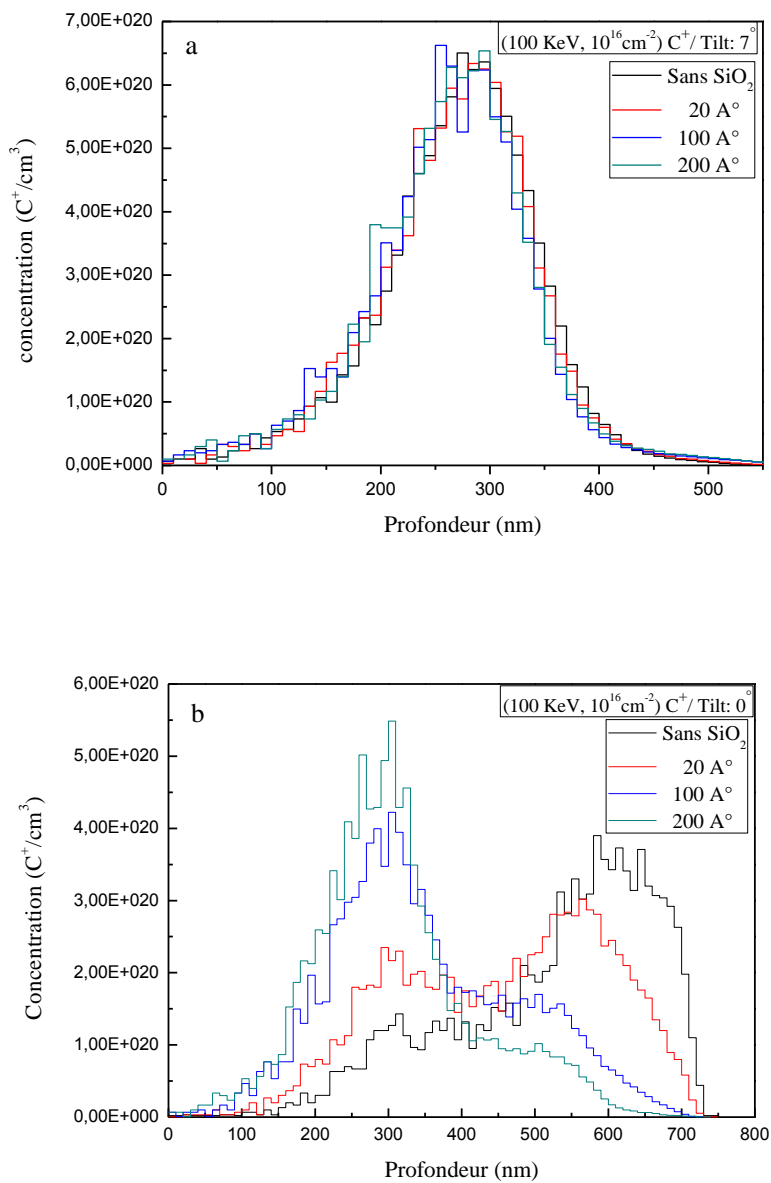


Fig. 3-16 profils simulés du carbone en fonction de plusieurs épaisseurs de la couche du  $SiO_2$  pour un tilt de  $7^\circ$  (a) et  $0^\circ$  (b).

(100 KeV, 10 <sup>16</sup> cm <sup>-2</sup> C <sup>+</sup> ) / Si(100), Tilt: 7°					
Épaisseur du SiO <sub>2</sub> (Å)	R <sub>p</sub> (nm)	ΔR <sub>p</sub> (nm)	C <sub>max</sub> (cm <sup>-3</sup> )	γ	β
0	276	72	6.5 E20	-0.4.59	3.93
20	273	73	6.3 E20	-0.3.43	3.95
100	266	77	6.6 E20	-0.189	4.42
200	260	76	6.5 E20	-0.142	4.37

Tableau 3-10 : paramètres simulés obtenus à partir de profils de carbone de la figure (3-16-a).

### 3-3-3 Simulation dans les conditions expérimentales

Dans cette partie du travail, on a fait la simulation pour les conditions réelles d'élaboration des échantillons. On a aussi tenté de faire une autre simulation avec d'autres conditions expérimentales pour se rassurer de la fiabilité des résultats théoriques obtenus.

#### a) Conditions expérimentales d'implantation

##### a-1) profils de distribution des ions implantés

La figure (3-17) représente la distribution en profondeur des ions de carbone implantés dans Si(100) avec une énergie de 70 keV et un tilt de 7° pour deux doses différentes (10<sup>16</sup> C<sup>+</sup>/cm<sup>2</sup> et 10<sup>17</sup> C<sup>+</sup>/cm<sup>2</sup>). L'allure de la distribution est quasi gaussienne et les valeurs du parcours projeté moyen R<sub>p</sub> et de la déviation standard ΔR<sub>p</sub> sont mentionnées dans le tableau (3-11). La valeur simulée obtenue du paramètre γ (tableau 3-11) est très proche de la valeur théorique (γ<sub>0</sub> = 0) ce qui signifie que la distribution est pratiquement symétrique par rapport à la position de (R<sub>p</sub>). Pour le paramètre (β), la valeur obtenue est supérieure par rapport à la valeur théorique (β<sub>0</sub> = 3). Une étude détaillée de ces valeurs avec les paramètres expérimentaux des profils donnés par la technique SIMS est effectuée dans le prochain chapitre.

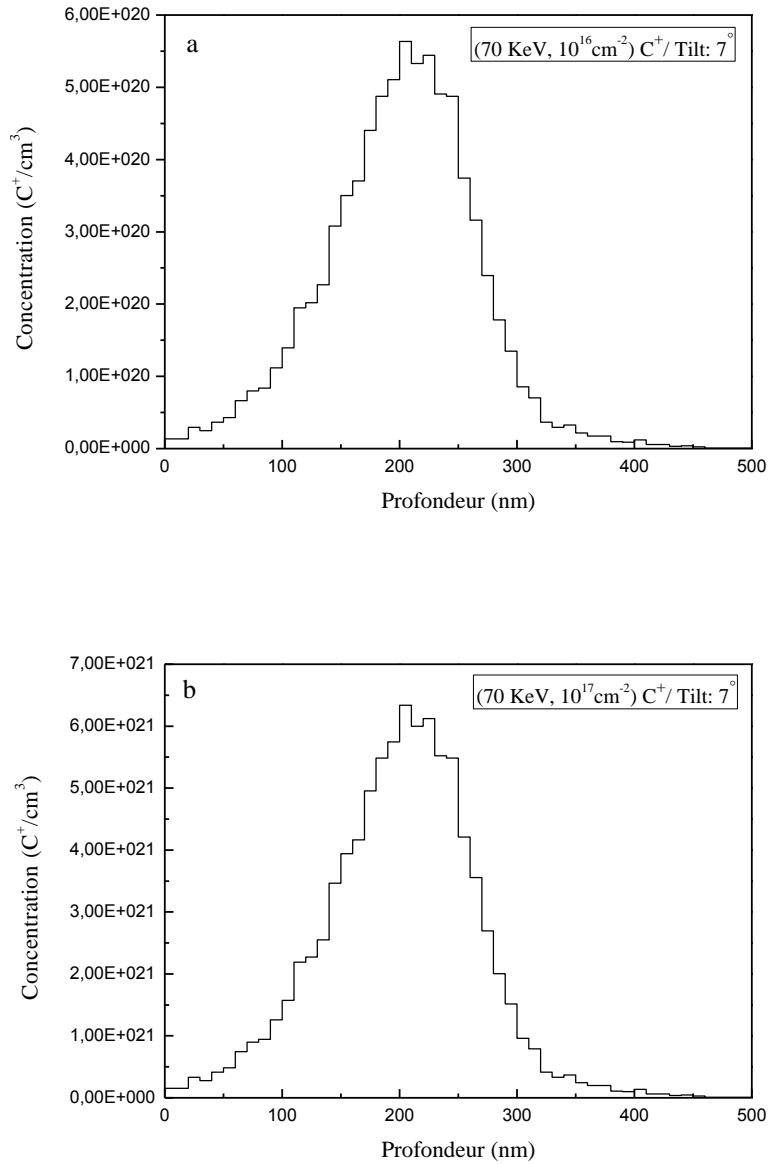


Fig. 3-17 profils simulés du carbone implanté dans Si(100) pour deux doses différentes ;  $10^{16} \text{ C}^+/\text{cm}^2$  (a) et  $10^{17} \text{ C}^+/\text{cm}^2$  (b).

(70 KeV $C^+$ ) / Si(100), Tilt: 7°				
Doses ( $C^+/\text{cm}^2$ )	$R_p(\text{nm})$	$\Delta R_p(\text{nm})$	$\gamma$	$\beta$
$10^{16}$	206	65	-0.098	3.8
$10^{17}$	206	65	-0.098	3.8

Tableau 3-11 : Valeurs théoriques des paramètres de distribution des ions de carbone implantés dans Si(100).

### a-2) profils des défauts

La figure (3-18) représente les profils des défauts ponctuels (lacunes ou sites vacants) créés par l'implantation. Les concentrations de ces défauts sont supérieures par rapport aux concentrations des ions d'un facteur environ égal à  $10^3$ . Ce résultat est logique puisque la création des lacunes se fait par les ions implantés et par les atomes de recul (de l'anglais recoils) générés par les projectiles. En outre, on remarque que les profils sont décalés vers la surfaces par rapport à ceux des ions ce qui est en accord avec la littérature [90]. En effet, la valeur du parcours projeté des ions ( $R_p$ ) est supérieure à la valeur ( $R_d$ ) correspondant au profil de défauts.

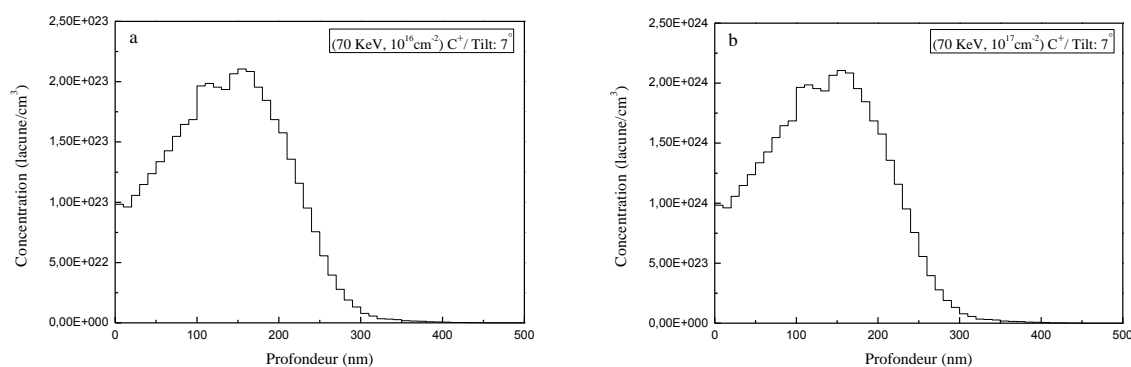


Fig. 3-18 profils simulés des sites vacants (lacunes) créés par implantation du carbone dans Si(100) pour deux doses différentes ;  $10^{16} C^+ /cm^2$  (a) et  $10^{17} C^+ /cm^2$  (b).

(70 KeV $C^+$ ) / Si(100), Tilt: $7^\circ$				
Doses ( $C^+/cm^2$ )	$R_d(nm)$	$\Delta R_d(nm)$	$\gamma$	$\beta$
$10^{16}$	140	70	0.136	2.55
$10^{17}$	140	70	0.136	2.55

Tableau 3-12 : Valeurs simulées des paramètres de distribution des lacunes créées par implantation de carbone dans Si(100).

### a-3) Perte d'énergie

Nous avons étudié les profils de pertes d'énergie électronique et nucléaire correspondant à une énergie d'implantation de 70 keV et un tilt de  $7^\circ$  suivant la direction  $\langle 100 \rangle$ . Les courbes représentées sur la figure (3-19) montrent qu'il y'a deux zones différentes d'interaction :

- **Zone 1** où la profondeur est inférieure à environ  $\sim 190$  nm : l'interaction électronique (avec les nuages électroniques des atomes du silicium) est dominante par rapport à celle dûe à l'interaction avec les noyaux.
- **Zone 2** à partir de 190 nm : les deux mécanismes d'interaction ont la même contribution par rapport à la perte d'énergie totale.

Ce résultat est en accord avec des résultats cités dans la littérature [91] pour d'autres éléments de masse atomique proche de celui du carbone (comme le bore) et pour des conditions proches de celles qu'on a étudiées.

L'allure du profil de pertes d'énergie électronique diffère de celle calculée par le model non-local de Lindhard- Scharff (L.S) décrit dans la partie (1-2-5) du premier chapitre. En effet, ce modele ne convient pas pour décrire les pertes électroniques pour l'implantation du carbone suivant la direction  $\langle 100 \rangle$ . Dans ce cas, des modèles locaux semi-empiriques doivent être appliqués, notamment le modèle d'Oen - Robinson [91].

En outre, il est clair que les valeurs de pertes d'énergie dépendent sensiblement de la dose d'implantation.

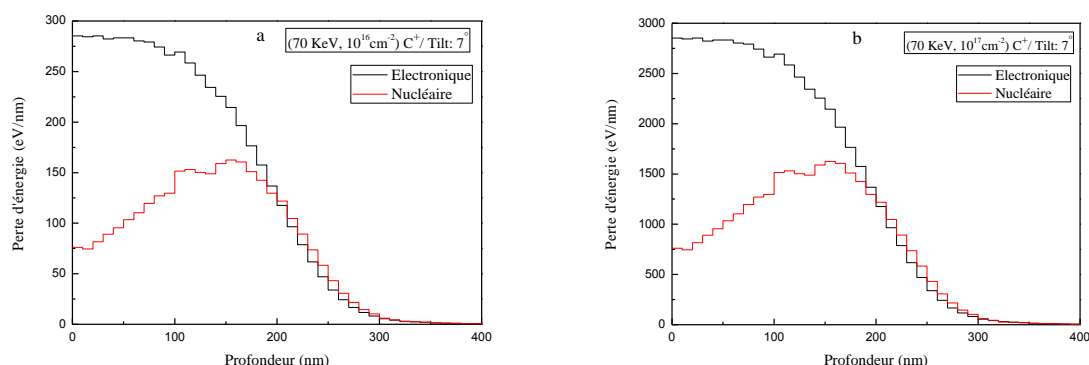


Fig. 3-19 Pertes d'énergie électronique et nucléaire simulées par Crystal-Trim pour des ions de carbone implantés dans Si(100) [ $10^{16} C^+ /cm^2$  (a) et  $10^{17} C^+ /cm^2$  (b)].

### b) Comparaison par rapport aux conditions expérimentales de la littérature

Afin de vérifier la fiabilité de nos résultats théoriques, nous avons effectué une comparaison entre les résultats simulés et expérimentaux fournis par la littérature [86]. Deux cas particuliers ont été choisis :

Doses ( $C^+/cm^2$ )	Energie (keV)	Tilt	Température du substrat
$2.7 \cdot 10^{17}$	80	$7^\circ$	$25\text{ C}^\circ$
$6.5 \cdot 10^{17}$	40	$7^\circ$	$400\text{ C}^\circ$

Les profils de distribution des ions de carbones et des défauts sont représentés sur les figures (3-20) et (3-21) ci-dessous.

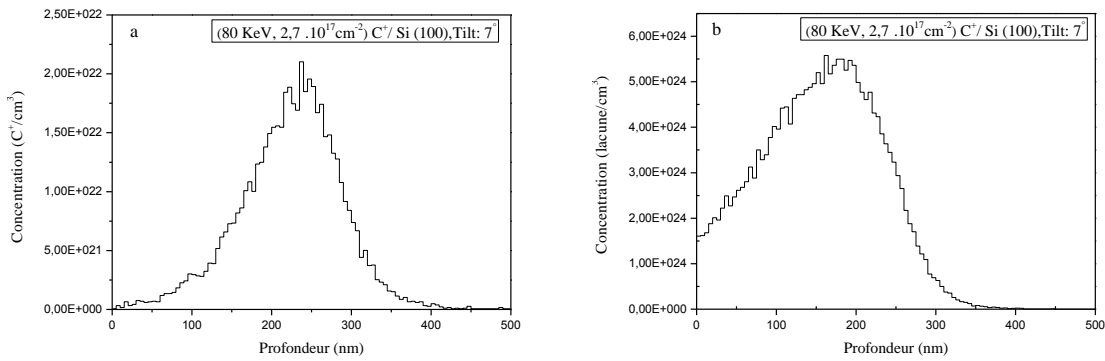


Fig. 3-20 : Profils simulés par Crystal-Trim des ions (a) et des défauts (b) pour les conditions d'implantation : 80 keV,  $2.7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2} C^+/\text{Si}(100)$ , Tilt:  $7^\circ$ .

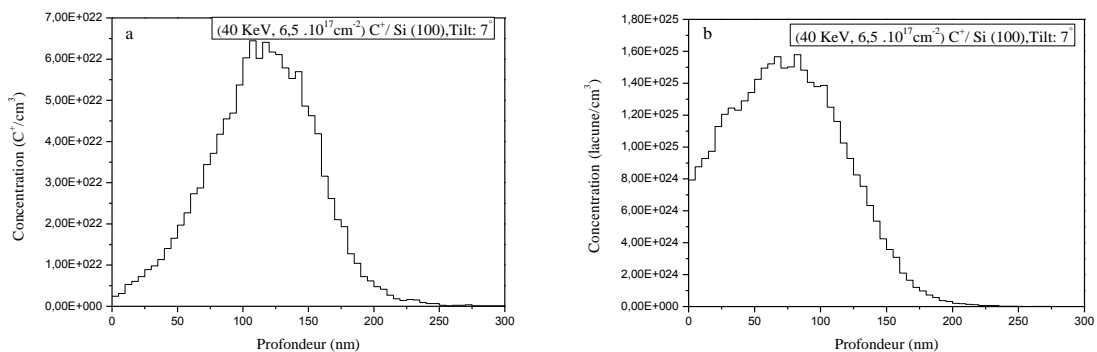


Fig. 3-21 : Profils simulés par Crystal-Trim des ions (a) et des défauts (b) pour les conditions d'implantation : 40 keV,  $6.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2} C^+/\text{Si}(100)$ , Tilt:  $7^\circ$ .

Les résultats mentionnés sur le tableau (3-13) confirment la fiabilité du programme Crystal Trim. En effet, les paramètres simulés ( $R_p$ ,  $\Delta R_p$  et  $R_{Cmax}$ ) sont en bon accord avec l'expérience [86]. En outre, on peut remarquer que les mesures obtenues par la technique ERDA « Elastic Recoil Detection Analysis » sont plus proches des résultats du Crystal-TRIM par rapport à ceux obtenus par la technique RBS « Rutherford backscattering spectrometry ». Ceci est dû aux caractéristiques des deux méthodes. En effet, la résolution en profondeur de la technique ERDA varie de 10 à 20 nm [87], tandis que pour l'analyse RBS, la résolution en profondeur est estimée en général autour de 63 nm [86]. Cela signifie que les mesures ERDA sont plus précises par rapport à celles de la technique RBS.

<b>80 KeV <math>C^+</math> dans Si(100) (Fig.3-20)</b>			
<b>Méthode</b>	<b><math>R_{Cmax}</math> (nm)</b>	<b><math>R_p</math> (nm)</b>	<b><math>\Delta R_p</math> (nm)</b>
Crystal Trim	250	226	64
ERDA [75]	243	245	85
RBS [75]	260	260	76
<b>40 KeV <math>C^+</math> dans Si(100) à 400°C (Fig.3-21)</b>			
Crystal Trim	120	116	42
ERDA [75]	131	127	55
RBS [75]	150	150	59

Tableau 3-13 Comparaison des paramètres simulés et expérimentaux des profils de distribution du carbone implanté dans Si(100).

### 3-4 Conclusion partielle

L'étude théorique, des interactions des ions implantés avec les atomes cibles, menée par les deux programmes de simulation nous a permis de prévoir les allures et les profondeurs des profils de distribution des ions implantés et des défauts créés par l'irradiation. On a aussi étudié l'effet de différents paramètres d'implantation ioniques tels que : l'énergie d'implantation, le tilt du faisceau ionique, l'orientation et la température du substrat et la présence d'une couche d'oxyde natif ( $SiO_2$ ) sur ces profils.

## *Chapitre IV*

# *Caractérisation expérimentale des échantillons élaborés*



## 4-1 Introduction

Au cours de ce quatrième chapitre, nous allons présenter les résultats des différentes analyses expérimentales utilisées. L'analyse des échantillons élaborés par la technique SIMS servira à déterminer les profils expérimentaux de distribution des atomes de carbone dans la matrice de silicium. Les résultats obtenus seront comparés avec ceux obtenus par les programmes de simulation. En outre, les mesures SIMS nous permettront d'étudier la diffusion des atomes implantés par les recuits post-implantation. Quant à l'analyse par la spectroscopie Raman, elle est sera utile pour l'étude de l'amorphisation des cibles par implantation. Elle permettra également d'investiguer la recristallisation de ces cibles par les traitements thermiques effectués. Enfin, l'étude de l'influence de l'implantation ionique et du traitement thermique sur les propriétés mécaniques des cibles sera réalisé par les essais de dureté Vickers.

## 4-2 Mesures SIMS

### 4-2-1 Profils expérimentaux de distribution

#### a) substrats implantés et non traités thermiquement

Sur les figures (4-1), on représente les profils expérimentaux de distribution des ions de carbone implantés avec une énergie de 70 keV, un tilt de 7° et une fluence (dose) de  $10^{16} \text{ C}^+ / \text{cm}^2$  (a) et  $10^{17} \text{ C}^+ / \text{cm}^2$  (b) dans des substrats Si(100). D'après ces profils, on peut constater que la distribution des ions implantés est quasi-gaussienne. Ceci est en accord avec les prédictions établies par les programmes de simulations utilisés. En outre, on remarque que l'allure des distributions en profondeur est presque la même. La seule différence entre ces profils concerne les concentrations finales des ions implantés. Elles sont plus grandes dans le cas de la dose  $10^{17} \text{ C}^+ / \text{cm}^2$ . Ce résultat est logique puisque la concentration finale dépend principalement de la fluence. Les valeurs expérimentales de  $R_p$ ,  $\Delta R_p$  et les concentrations maximales  $C_{max}$  sont récapitulées dans le tableau ci-dessous.

(70 KeV $\text{C}^+$ ) / Si(100), Tilt: 7°, substrats non recuits				
Doses ( $\text{C}^+ / \text{cm}^2$ )	$R_p(\text{nm})$	$\Delta R_p(\text{nm})$	$C_{max} (\text{C}^+ / \text{cm}^3)$	$R_{Cmax} (\text{nm})$
$10^{16}$	$209 \pm 5$	$64 \pm 5$	$5.95 \times 10^{20}$	$214 \pm 5$
$10^{17}$	$202 \pm 5$	$62 \pm 5$	$6.03 \times 10^{21}$	$211 \pm 5$

Tableau 4-1 : Paramètres expérimentaux des profils de distribution du carbone implanté dans des substrats Si(100).

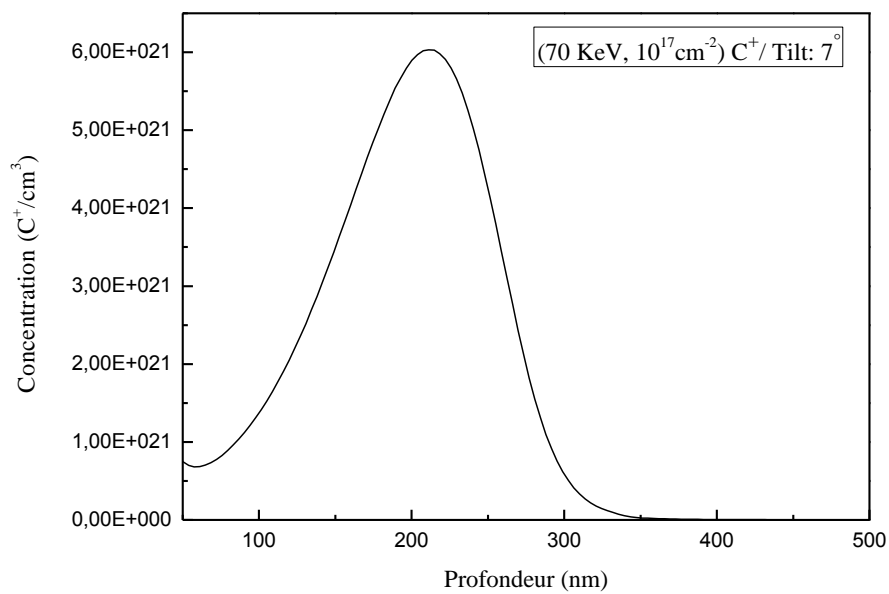
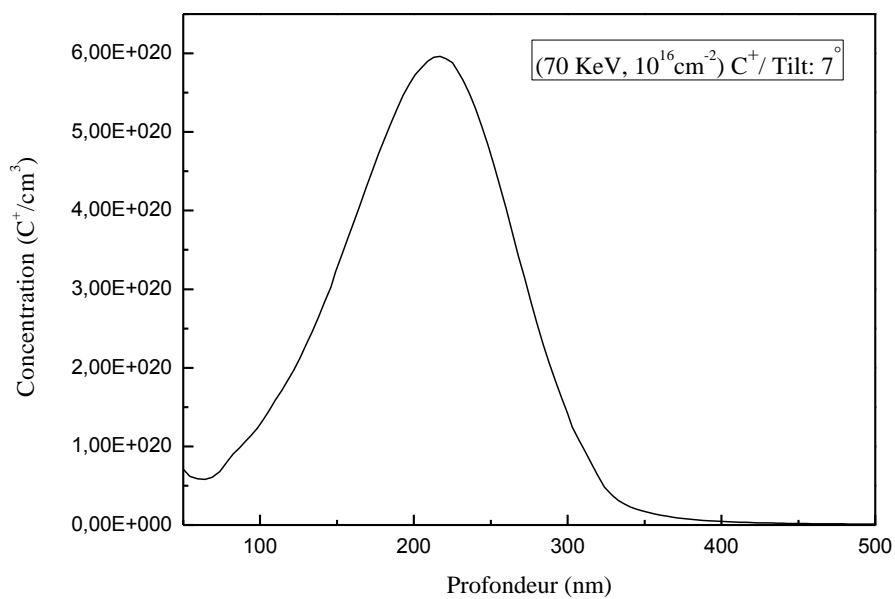


Fig. 4-1 Profils SIMS de distribution du carbone implanté dans les substrats Si(100).

Dose =  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  (a) et  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  (b).

## b) Effet du recuit post implantation sur les profils de distribution

Pour étudier l'effet des traitements thermiques sur la redistribution des atomes de carbone implantés, on va procéder par comparaison avec les spectres obtenus à partir d'échantillons implantés et non recuits. Pour le traitement de 1250 °C et pour deux différents temps de maintien ( $t = 1h$ ,  $t = 3h$ ), d'après les figures (4-2) et (4-3), on a constaté que la direction de diffusion des atomes de carbone dépend fortement de la dose d'implantation.

Dans le cas de la dose  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , le carbone diffuse vers la surface comme le témoignent les courbes de distribution (avant et après le recuit thermique) (Fig.4-2). En effet, on suppose que le traitement thermique permet aux atomes de carbone de diffuser vers les zones proches de la surface où il y'a plus de défauts créés par l'implantation tels que : couches amorphes localisée, joints de grains et défauts linéaires et ponctuels (i.e. dislocations et lacunes). La diffusion, suivant un sens unique, des atomes de carbone explique le décalage, vers la surface, des courbes de distribution initiales obtenues avant le recuit thermique avec une nette augmentation des concentrations près de la surface (à environ 100 nm de profondeur).

Dans le cas de la dose  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , la diffusion est concentrée autour d'une valeur moyenne  $R_0 \cong 198 \text{ nm}$  (fig.4-3) où il y'a eu un rétrécissement de la courbe de distribution et une augmentation des concentrations. En effet, la concentration maximale passe de  $6.03 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  (avant recuit) à  $7.4 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  après un recuit d'une heure et à  $9.8 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  pour un temps de maintien de trois heures (fig.4-3). On remarque aussi qu'il n'y'a pas eu de grande différence par rapport à l'allure des courbes de distribution en augmentant le temps de recuit pour le cas de la dose  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  (fig.4-2). Par contre, pour la dose  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , il est clair que les concentrations augmentent en fonction du temps. Cela est dû à l'amorphisation provoquée par la forte dose ( $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ). En effet, une amorphisation plus grandes donnerait plus de possibilités aux atomes de carbone de diffuser au fur et à mesure que le temps de maintien augmente.

Ceci est en accord avec la littérature où on démontre que l'augmentation de la dose d'implantation nécessite un temps de maintien plus lent d'où une amorphisation importante de la cible [42].

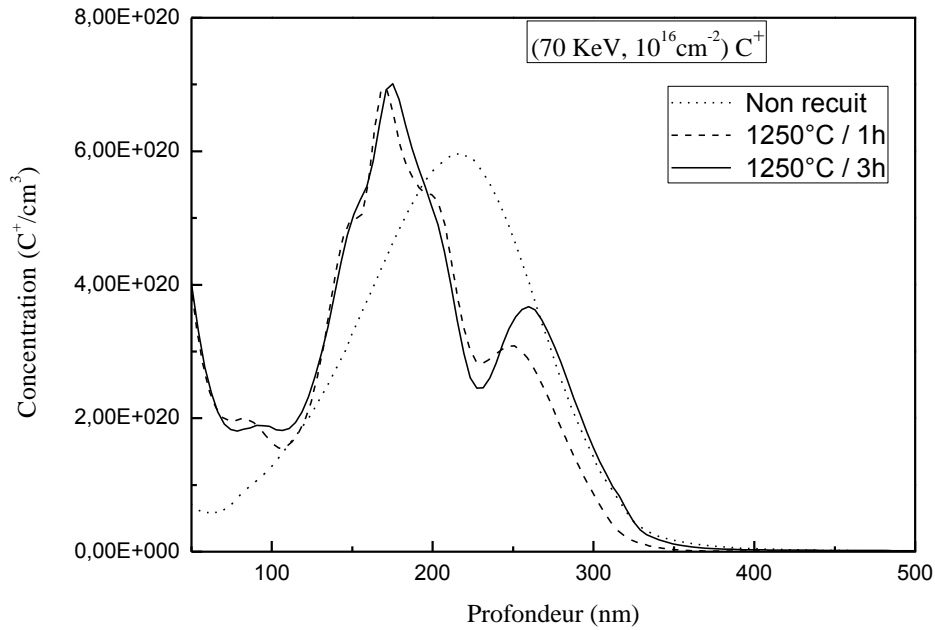


Fig. 4-2 Profils SIMS de distribution des atomes de carbone implantés avec une dose de  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ , dans des substrats Si(100), avant et après recuit thermique.

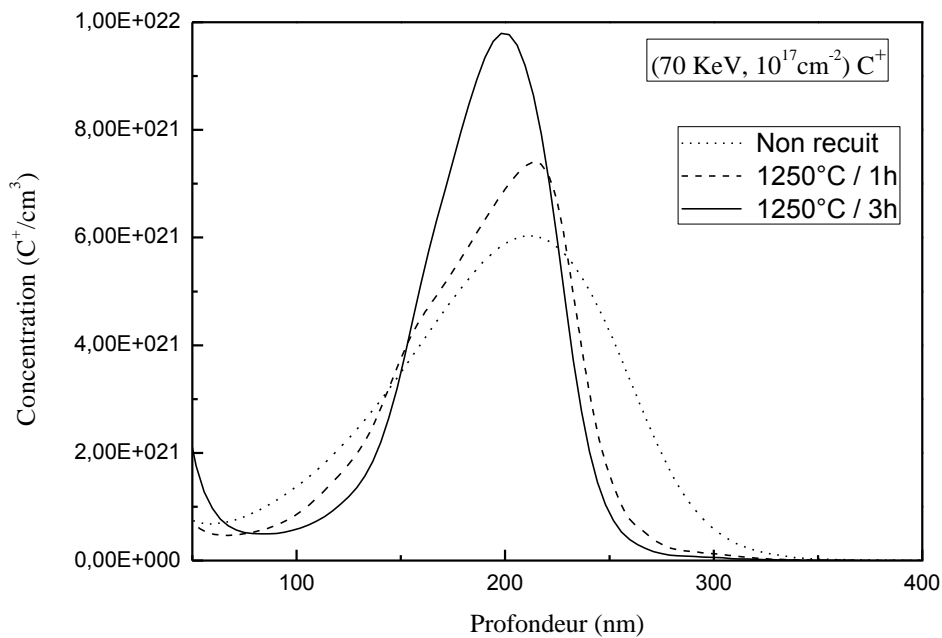


Fig. 4-3 Profils SIMS de distribution de carbone implanté avec une dose de  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ , dans des substrats Si(100), avant et après recuit thermique.

#### 4-2-2 Comparaison des profils expérimentaux avec la simulation

La disponibilité des techniques de mesure, des profils de distribution des ions implantés, offre un outil précieux de vérification des résultats théoriques obtenues par les différents programmes de simulation. Dans ce domaine, la technique SIMS est l'une des techniques les plus sensibles grâce à sa haute résolution en profondeur de quelques nanomètres ( $\sim 5\text{nm}$ ) [92]. Cet outil, très précis, nous a permis de vérifier la fiabilité de nos calculs théoriques. En effet, on a essayé de comparer les profils théoriques obtenus par les deux programmes utilisés (*i.e* Crystal Trim et Trim) avec les profils expérimentaux réalisés par la technique SIMS. Cette comparaison n'est valable que pour les substrats non traités thermiquement puisque les programmes utilisés simulent uniquement l'interaction ion implanté- atome cible durant le processus de l'implantation ionique.

La figure (4-4) représente une comparaison des profils théoriques et expérimentaux correspondant aux doses  $10^{16}\text{C}^+ \text{cm}^{-2}$  (a) et  $10^{17}\text{C}^+ \text{cm}^{-2}$  (b) respectivement. L'allure des différentes courbes est similaire (de forme quasi- gaussienne), mais on peut constater que le profil obtenu par le programme Trim est légèrement décalé en profondeur. Ce résultat est tout à fait logique puisque le code Trim n'est conçu que pour le cas des cibles amorphes. Cependant, les courbes obtenues par ce dernier sont optimales puisque la cible est partiellement amorphisée par l'implantation. D'autre part, on remarque que les profils obtenus par le code Crystal- Trim sont très similaires à ceux donnés par SIMS puisque ce code prend en compte la structure cristallographique de la cible.

Les différents paramètres des profils de distribution sont récapitulés dans le tableau (4-2). D'après ces valeurs reportées, on peut constater que nos résultats théoriques sont en très bon accord avec ceux fournis par SIMS ce qui confirme la fiabilité des programmes mis en œuvre (Crystal- Trim et Trim).

On représente dans la figure (4-5) les profils de distribution en échelle logarithmique. Ceci permettra aux lecteurs de mieux se situer car cette représentation est couramment utilisée en la littérature.

<b>(70 KeV C<sup>+</sup>) / Si(100), Tilt: 7°, substrats Si(100) non recuit</b>				
<b>Dose 10<sup>16</sup> C<sup>+</sup>/cm<sup>2</sup></b>				
	<b><i>R<sub>p</sub>(nm)</i></b>	<b><i>ΔR<sub>p</sub>(nm)</i></b>	<b><i>C<sub>max</sub> (C<sup>+</sup> / cm<sup>3</sup>)</i></b>	<b><i>R<sub>Cmax</sub> (nm)</i></b>
<b>SIMS</b>	209 ± 5	64 ± 5	5.95×10 <sup>20</sup>	214 ± 5
<b>Crystal- Trim</b>	206	65	6.80×10 <sup>20</sup>	216
<b>Trim</b>	203	61	7.25×10 <sup>20</sup>	227
<b>Dose 10<sup>17</sup> C<sup>+</sup>/cm<sup>2</sup></b>				
	<b><i>R<sub>p</sub>(nm)</i></b>	<b><i>ΔR<sub>p</sub>(nm)</i></b>	<b><i>C<sub>max</sub> (C<sup>+</sup> / cm<sup>3</sup>)</i></b>	<b><i>R<sub>Cmax</sub> (nm)</i></b>
<b>SIMS</b>	209 ± 5	64 ± 5	5.95×10 <sup>21</sup>	214 ± 5
<b>Crystal- Trim</b>	206	65	6.85×10 <sup>21</sup>	217
<b>Trim</b>	203	61	7.30×10 <sup>21</sup>	229

Tableau 4-2 : Paramètres théoriques et expérimentaux des profils de distribution de carbone implanté dans Si(100) sans recuit post implantation.

$R_p$  : le parcours projeté moyen,

$\Delta R_p$  : l'écart type longitudinal (stragglng),

$C_{max}$  : la concentration maximale,

$R_{Cmax}$  : la profondeur correspondant à  $C_{max}$  .

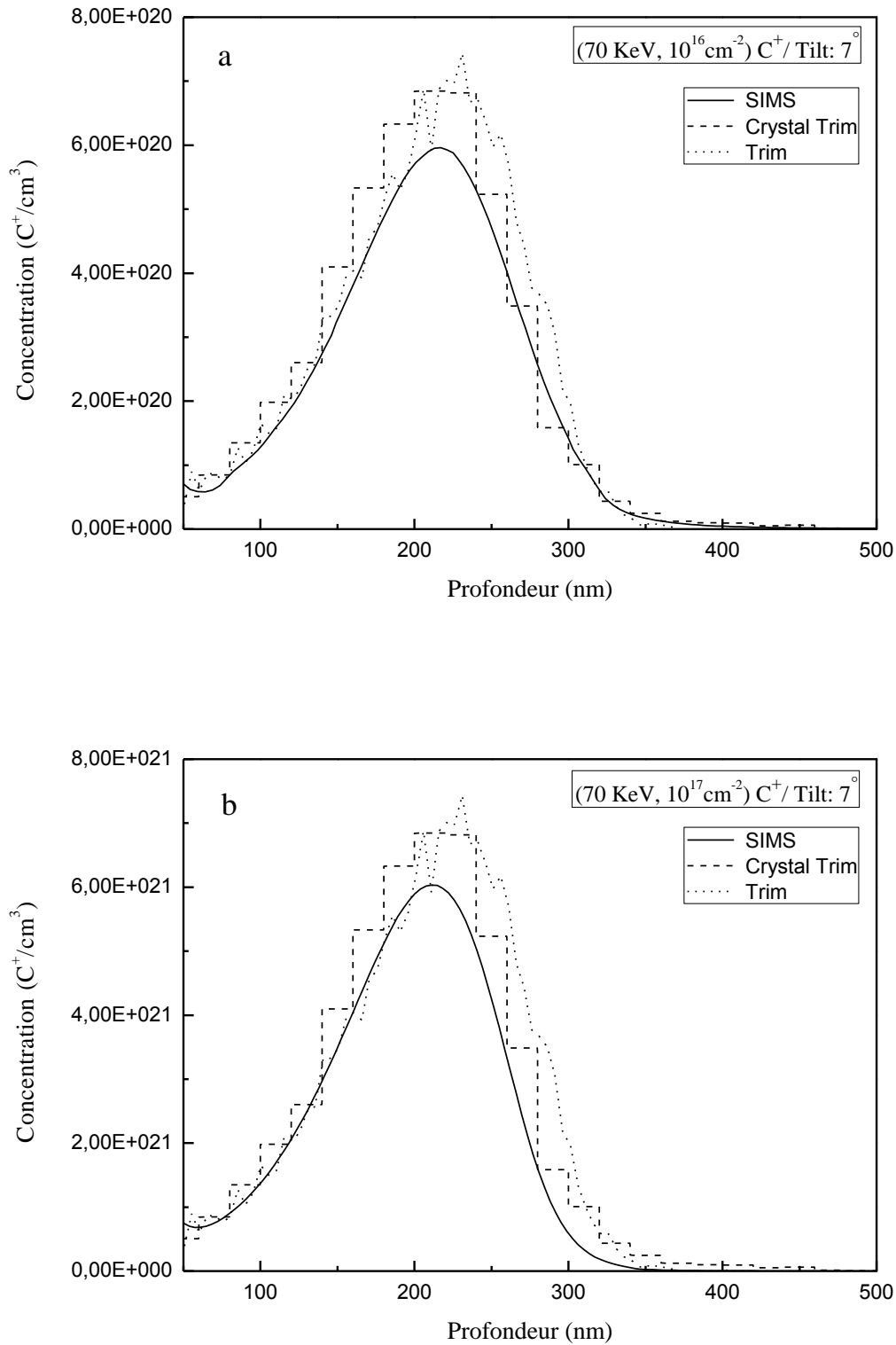


Fig. 4-4 Comparaison des Profils, théoriques et expérimentaux, de distribution de carbone implanté avec une dose de  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  (a) et  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  (b) dans des substrats Si(100).

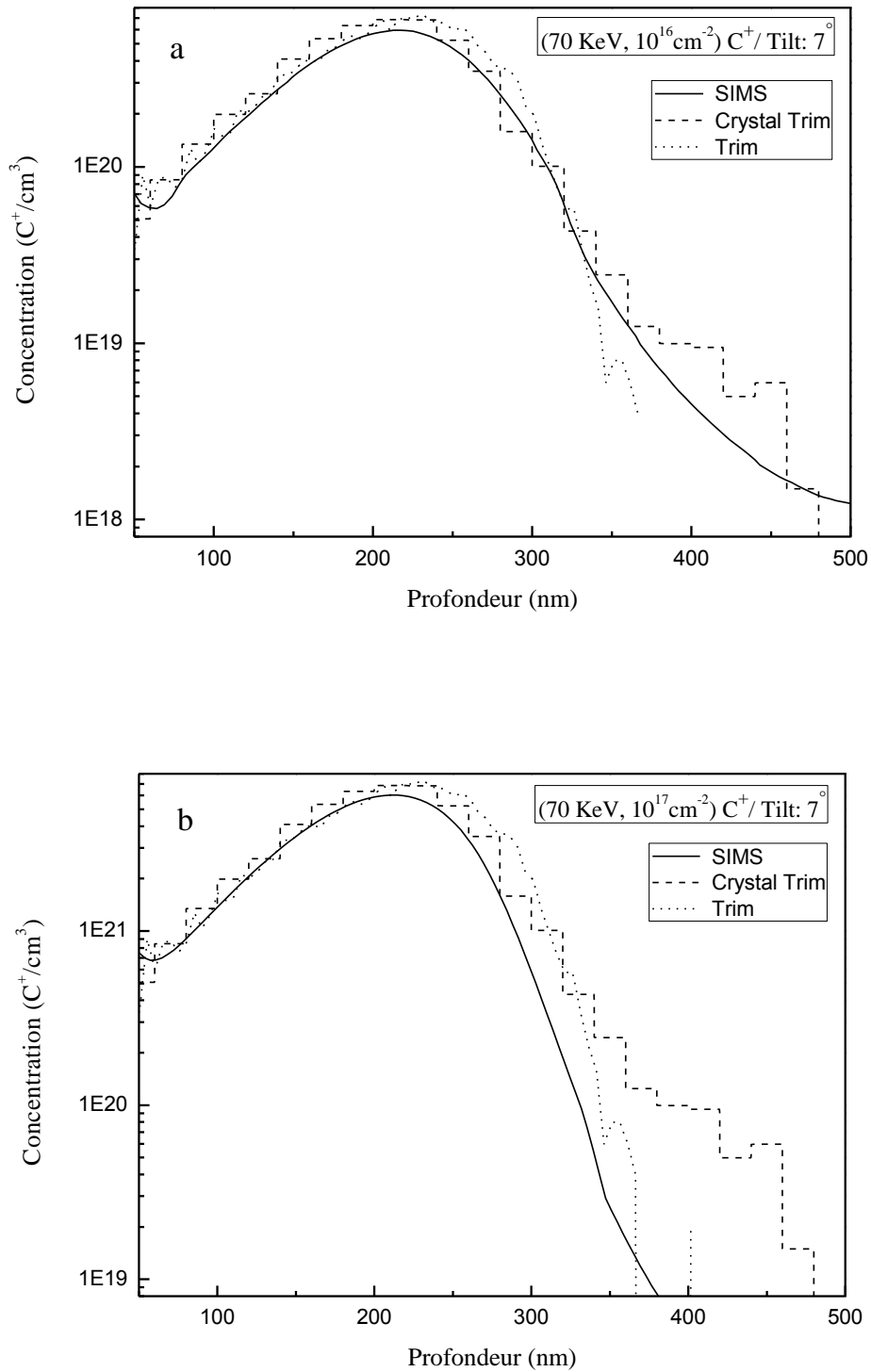


Fig. 4-5 Comparaison des Profils, théoriques et expérimentaux, en échelle logarithmique de concentration de carbone implanté avec une dose de  $10^{16}$  C<sup>+</sup>cm<sup>-2</sup> (a) et  $10^{17}$  C<sup>+</sup>cm<sup>-2</sup> (b) dans des substrats Si(100).



### 4-3 Spectroscopie Raman

#### 4-3-1 Etude de l'échantillon référence (non implanté)

Sur la figure (4-6), on représente le spectre Raman d'un échantillon de référence (i.e. Si(100) non implanté et non recuit). Ce spectre est caractérisé par trois pics principaux : un grand pic pointu autour de  $520\text{ cm}^{-1}$ , un large pic autour de  $970\text{ cm}^{-1}$  et un pic (moins intense par rapport aux deux premiers) situé à environs  $302\text{ cm}^{-1}$ . Les pics de  $520\text{ cm}^{-1}$  et  $302\text{ cm}^{-1}$  correspondent au mode vibrationnel du premier ordre des liaisons (Si-Si) du substrat cristallin Si tandis que celui du  $970\text{ cm}^{-1}$  correspond au second ordre [93].

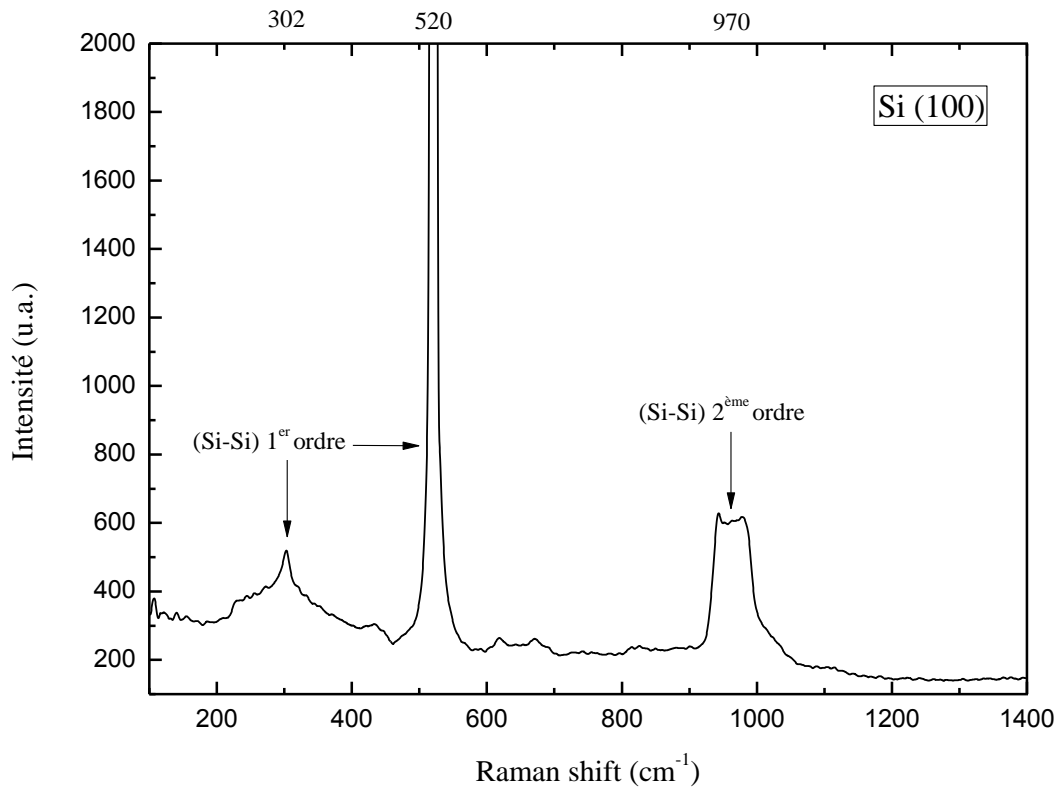


Fig. 4-6 Spectre Raman d'un échantillon vierge Si(100) non implanté et non recuit.

### 4-3-2 Etude des échantillons implantés et non recuits

L'impact de l'implantation ionique sur la structure cristalline des cibles peut être étudié par l'analyse Raman. Pour cela, on a analysé deux échantillons implantés avec les doses  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et non traités thermiquement. La figure (4-7) montre bien que les spectres Raman sont sensiblement modifiés par le processus de l'implantation.

Dans le cas de la dose  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ , les deux pics de  $302 \text{ cm}^{-1}$  et  $970 \text{ cm}^{-2}$  ont presque disparus et l'intensité du pic de  $520 \text{ cm}^{-2}$  a diminué considérablement (soit  $\sim 1/10$  de l'intensité initiale). Ce résultat est dû à la modification des liaisons Si-Si (amorphisation) causée par l'implantation. En outre, la présence du pic de  $520 \text{ cm}^{-2}$  indique que la zone implantée n'a pas été totalement amorphisée mais elle a été très endommagée. Ces résultats sont en accord avec la littérature [93, 94].

Dans le cas de la dose  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ , les trois pics caractéristiques des liaisons Si-Si sont complètement disparus. Ceci signifie qu'à cette dose d'implantation, la zone implantée est totalement amorphisée. Autrement dit, une dégradation très forte de l'échantillon original a eu lieu. En effet, l'amorphisation apparaît après qu'une densité de défauts critique ait été accumulée dans les zones de collisions qui étaient préalablement cristallines. On note que la diminution d'intensité et la disparition des pics (dans les deux cas cités ci-dessus) sont traduits par l'absorption de la lumière dans la partie endommagée de la cible. Ceci a également été reporté dans la littérature [8]. En mesurant l'intensité du pic avant et après implantation, on peut estimer le taux d'endommagement provoqué par l'implantation ionique. En effet, on peut l'estimer approximativement via l'équation suivante [8]:

$$D = \frac{I_0 - I}{I_0} = \frac{\Delta I}{I_0}$$

Où  $I_0$ : intensité du spectre Raman de l'échantillon référence (non implanté),

$I$ : intensité du spectre Raman de l'échantillon après qu'il ait été implanté.

Si la cible est très peu endommagée, on a  $I \sim I_0$  d'où  $\frac{\Delta I}{I_0} \rightarrow 0$ .

Quand le réseau est complètement détruit, on a  $\frac{\Delta I}{I_0} \rightarrow \frac{I_0}{I_0} \cong 1$ .

En appliquant cette règle pour le pic observé à  $520 \text{ cm}^{-2}$ , on peut calculer approximativement le taux d'amorphisation correspondant à la dose  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ . Soit:

$$D_{E16} = \frac{13660 - 1475}{13660} = 0.892 = 89.2 \%$$

D'autre part, après recuit thermique,  $\frac{\Delta I}{I_0}$  doit tendre vers 0 indiquant qu'il existe très peu de dommages résiduels ou n'existe plus si le rapport est égal à 1.

Dans l'intervalle ( $250 \text{ cm}^{-1} - 520 \text{ cm}^{-1}$ ) des deux spectres correspondant aux  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  (fig. 4-7), l'allure des courbes obtenues est similaire à celle d'un composant amorphe/nanocristallin de silicium reportée dans la littérature [95]. L'amorphisation est alors caractérisée par deux larges pics situés à  $470 \text{ cm}^{-1}$  et  $480 \text{ cm}^{-1}$  pour les doses  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  respectivement. Ceci est en accord avec les travaux reportés dans la littérature [95-97]. Par ailleurs, dans cette partie du spectre, le signal de fond est décalé vers le haut par rapport à celui de la référence (i.e. cible vierge Si(100)). Ceci révèle encore la présence de différents défauts cristallins suite à l'implantation ionique [1].

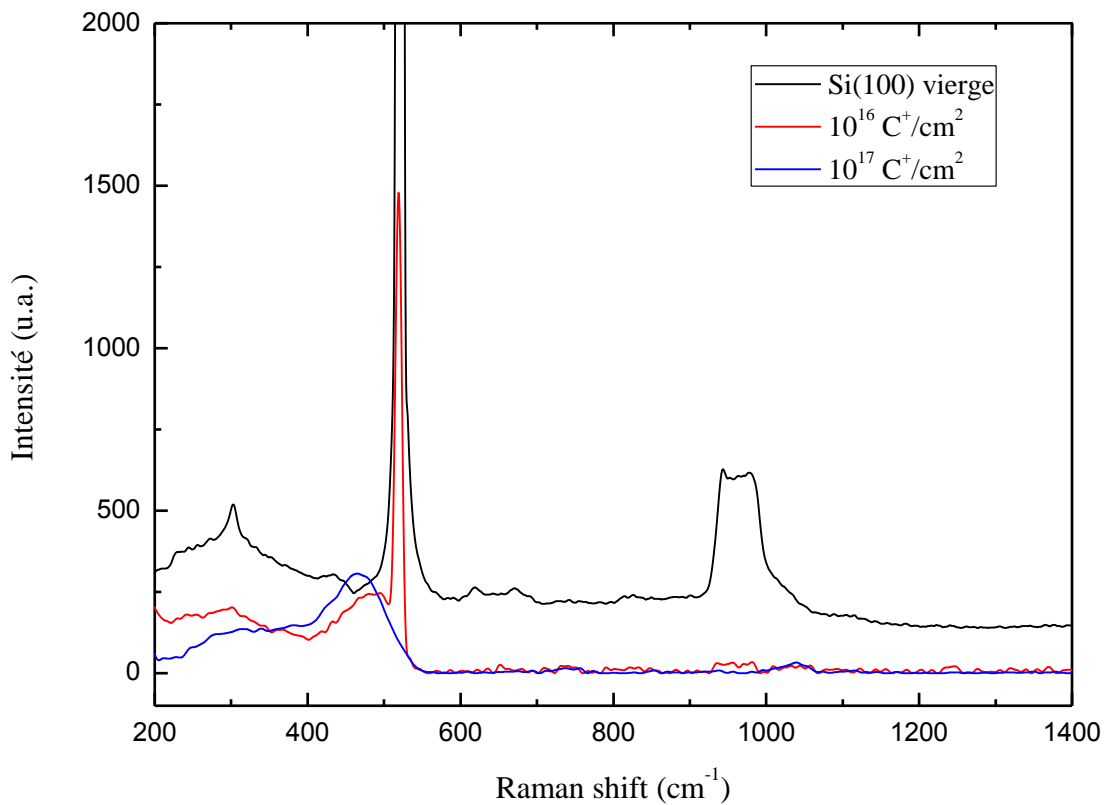


Fig.4-7 Spectres Raman de trois cibles différentes : vierge, implantée à  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ .

### 4-3-3 Etude des échantillons implantés et recuits thermiquement

Le recuit thermique des cibles implantées est une étape cruciale dans l'élaboration des échantillons car il permet de guérir les différents défauts créés par l'implantation.

Dans ce contexte, la spectroscopie Raman représente un outil intéressant d'étude de l'évolution de la recristallisation des échantillons en fonction des températures et des temps de maintien.

La figure (4-8) représente les spectres Raman correspondant à plusieurs échantillons implantés avec la dose  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et traités à différentes températures : 875 °C, 1000 °C et 1250 °C pour un temps de maintien d'une heure.

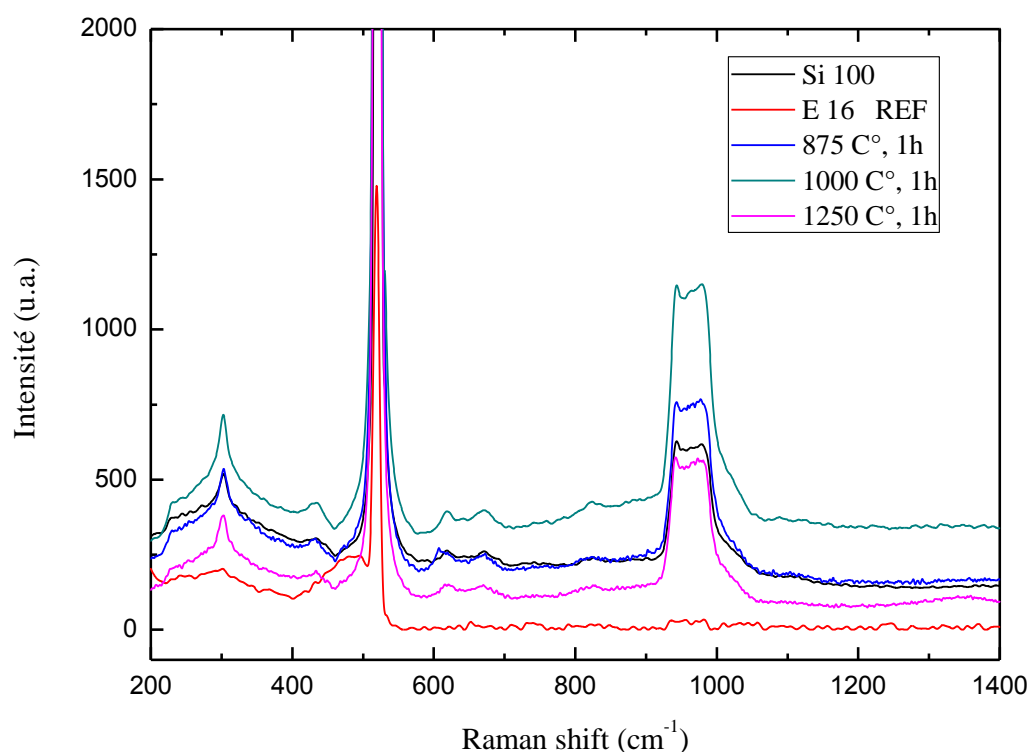


Fig.4-8 Spectres Raman de différentes cibles implantées avec une dose de  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et recuits à différentes températures pour un temps de maintien d'une heure.

D'après la figure ci-dessus, nous pouvons constater une forte augmentation de l'intensité des pics cristallins. En effet, on note une convergence vers les valeurs des intensités de ces mêmes pics avant implantation. En outre, on peut aussi voir qu'au fur et à mesure que la température augmente, le décalage vers le haut signalé dans la section précédente et observé dans l'intervalle ( $250 \text{ cm}^{-1} - 520 \text{ cm}^{-1}$ ), a considérablement diminué. On note également que le large pic situé à  $480 \text{ cm}^{-1}$  et caractéristique de l'amorphisation, a disparu à partir de la

température de 875 °C. Par rapport à l'ensemble des traitements effectués, l'allure du spectre correspondant à la température la plus élevée (i.e.  $T = 1250\text{ C}^\circ$ ) est identique à celle de la cible vierge. Ceci montre qu'à cette température, la recristallisation est presque parfaite (Fig.4-9).

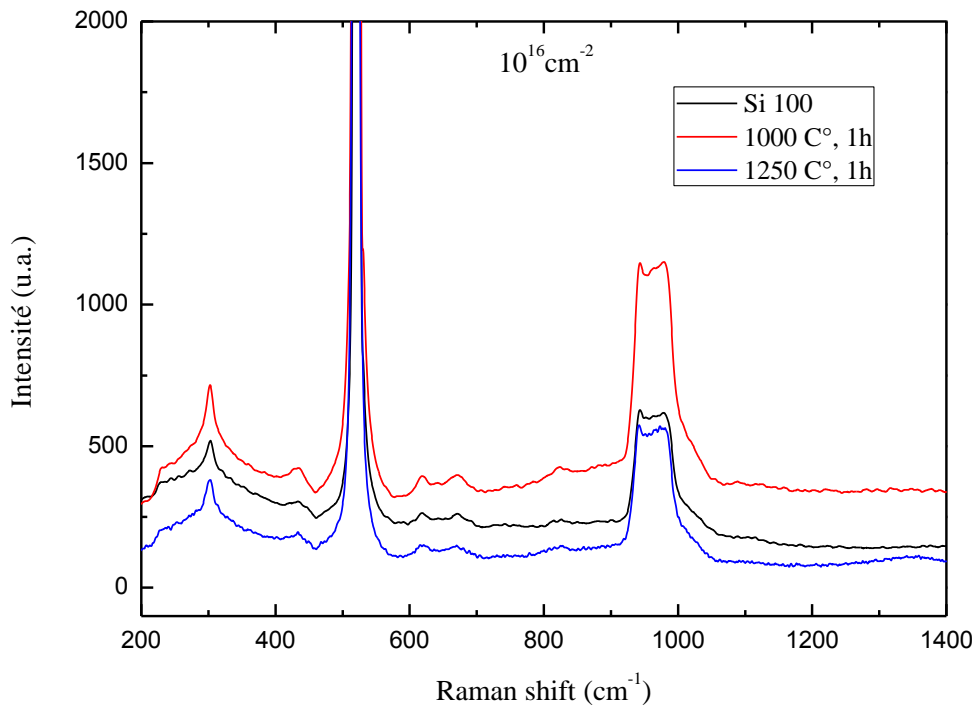


Fig.4-9 Comparaison de trois spectres Raman pour des cibles : vierge, implantées à la dose  $10^{16}\text{ C}^+\text{ cm}^{-2}$  et traitées à  $1000\text{ C}^\circ/1\text{h}$  et  $1250\text{ C}^\circ/1\text{h}$ .

Pour la dose  $10^{17}\text{ C}^+\text{ cm}^{-2}$ , les spectres Raman des cibles traitées avec les mêmes températures sont représentés sur la figure (4-10). La recristallisation est traduite par la récupération des pics caractéristiques (situés à  $302\text{ cm}^{-1}$ ,  $520\text{ cm}^{-1}$  et  $970\text{ cm}^{-1}$ ) avec des intensités relativement inférieures à celle de la dose  $10^{16}\text{ C}^+\text{ cm}^{-2}$  notamment pour les pics de  $302\text{ cm}^{-1}$ . En outre, comme le cas précédent, il y'a eu disparition du pic large, caractéristique de l'amorphisation, à  $475\text{ cm}^{-1}$  ce qui témoigne de la recristallisation des cibles implantées. L'élargissement du pic à  $520\text{ cm}^{-1}$ , qui correspond au recuit de  $1000\text{ C}^\circ$  (fig.4-11), montre qu'à cette température, il existe encore des défauts dans le cristal. Ce n'est qu'à  $T = 1250\text{ C}^\circ$  que la forme du pic est presque similaire à celle de la cible vierge. Cela est dû au fait que l'endommagement des zones implantées est plus grand dans le cas de la dose  $10^{17}\text{ C}^+\text{ cm}^{-2}$ .

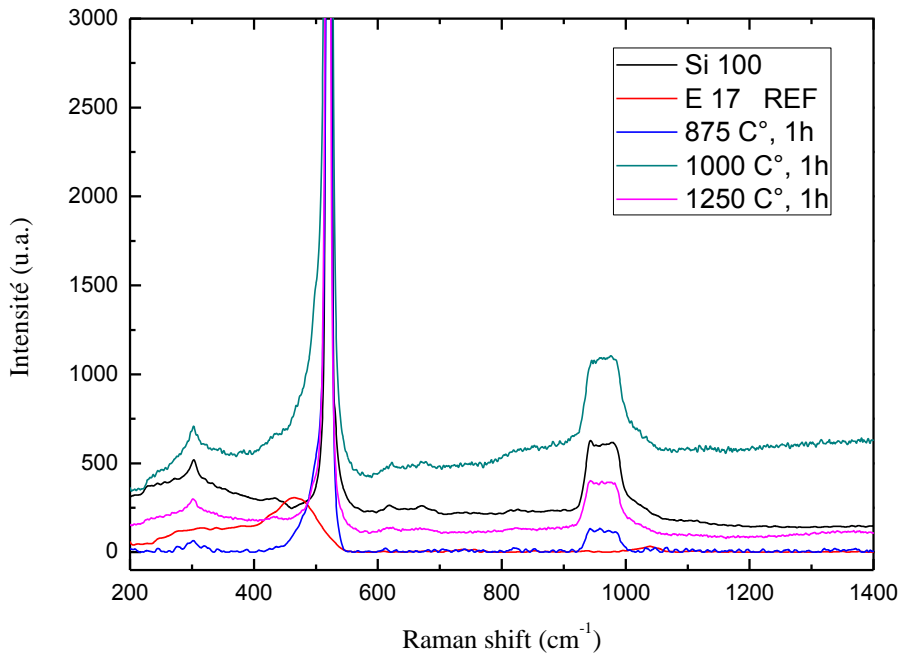


Fig.4-10 Spectres Raman de différentes cibles implantées avec une dose de  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et recuites à différentes températures pour un temps de maintien d'une heure.

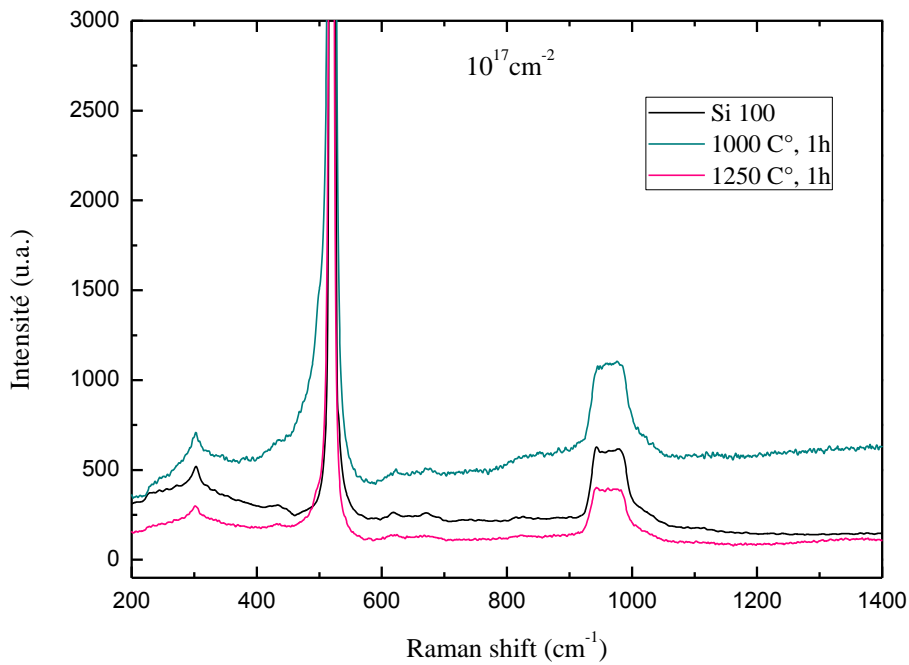


Fig.4-11 Comparaison de trois spectres Raman pour les cibles : vierge, implantée à  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et traitées à 1000 °C/1h et 1250 °C/1h.

## 4-4 Essais de dureté

### 4 4-1 protocoles de mesure

Les tests de la micro – dureté ont été réalisés sur les faces polies des substrats de silicium Si(100). L’essai utilisé est celui de VICKERS avec une charge de 0.05 Kgf soit 0.49 N pour un temps de maintien égal à 10s. Trois échancrures ont été prises et enregistrées pour chaque essai. Un exemple typique d’une mesure est illustré sur la figure ci-dessous.



Fig.4-11 images d’une mesure de dureté pour une cible Si(100) implantée avec une dose de  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et sans recuit. Les lignes croisées qui entourent l’échancrure servent à déterminer ses dimensions.

Le calcul des valeurs moyennes de dureté, correspondant aux différents échantillons, est récapitulé dans le tableau (4-3).

Echantillon	Test 1	Test 2	Test 3	Dureté (HV)	Dureté (GPa)
Si(100)	1215	1077	1161	1151 ± 69.5	11.29 ± 0.68
10 <sup>16</sup> C <sup>+</sup> cm <sup>-2</sup> non recuit	1062	1035	1012	1036 ± 25	10.16 ± 0.25
10 <sup>16</sup> C <sup>+</sup> cm <sup>-2</sup> 875°C, 1h	1127	1172	1100	1133 ± 36.4	11.11 ± 0.36
10 <sup>16</sup> C <sup>+</sup> cm <sup>-2</sup> 1000°C, 1h	1176	1134	1100	1137 ± 38.1	11.15 ± 0.38
10 <sup>16</sup> C <sup>+</sup> cm <sup>-2</sup> 1250°C, 1h	1203	1118	1143	1155 ± 43.7	11.33 ± 0.43
10 <sup>16</sup> C <sup>+</sup> cm <sup>-2</sup> 1250°C, 3h	1222	1245	1178	1215 ± 34	11.92 ± 0.34
10 <sup>17</sup> C <sup>+</sup> cm <sup>-2</sup> non recuit	1007	1006	1023	1012 ± 9.5	9.92 ± 0.10
10 <sup>17</sup> C <sup>+</sup> cm <sup>-2</sup> 875°C, 1h	1019	990	1047	1019 ± 28.3	9.99 ± 0.28
10 <sup>17</sup> C <sup>+</sup> cm <sup>-2</sup> 1000°C, 1h	1213	1265	1247	1242 ± 26.4	12.18 ± 0.26
10 <sup>17</sup> C <sup>+</sup> cm <sup>-2</sup> 1250°C, 1h	1154	1223	1141	1173 ± 44.07	11.50 ± 0.44
10 <sup>17</sup> C <sup>+</sup> cm <sup>-2</sup> 1250°C, 3h	1206	1175	1106	1162 ± 51.2	11.40 ± 0.51

Tableau 4-3 Valeurs moyennes et déviations standards de la dureté Vickers mesurées pour différents échantillons élaborés.

L'unité de mesure de dureté donnée par le micro - duromètre Vickers (fig. 4-11) est en HV (Vickers hardness). Pour la convertir en GPa, il suffit de la multiplier par 0.009807 [98].



#### 4-4-2 Effet de l'implantation ionique sur la dureté

D'après le tableau (4-3), la dureté des échantillons diminue en augmentant la dose d'implantation. Elle passe de 11.29 GPa dans le cas d'un échantillon vierge (non-implanté) à 10.16 GPa pour une cible implantée avec une dose de  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ . Par la suite, elle diminue encore jusqu'à 9.92 GPa pour la dose  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  (Fig. 4-11). La diminution de la dureté est due à l'amorphisation des cibles par l'implantation. En effet, le monocristal Si(100) possède une dureté supérieure à celle des cibles amorphes et puisque le taux d'amorphisation augmente avec la dose d'implantation (résultat confirmé par les spectres Raman de la section précédente) donc la dureté diminue au fur et à mesure que la dose augmente.

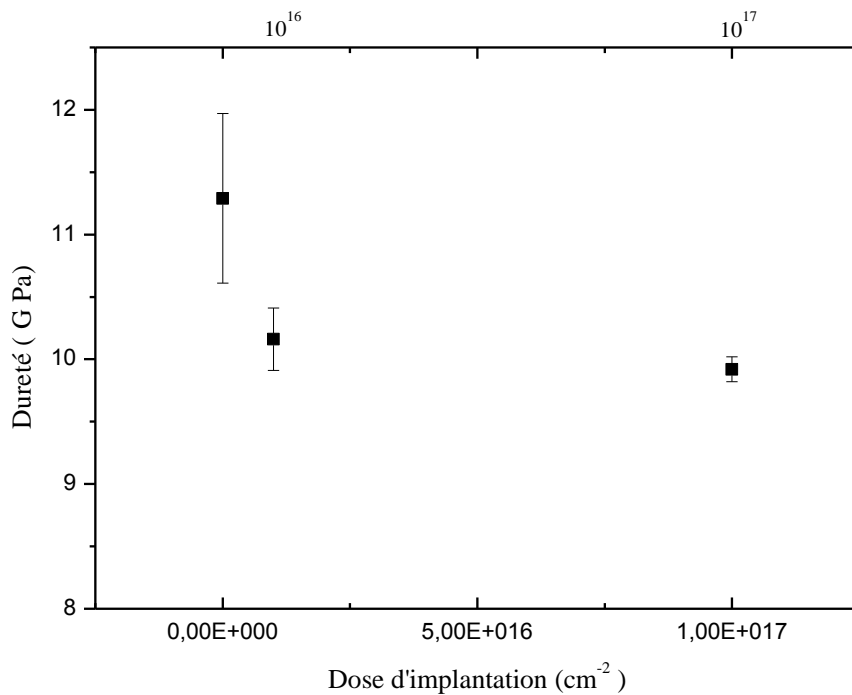


Fig.4-11 Comparaison de la dureté pour trois cibles différentes : vierge, implantée avec la dose  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et implantée avec la dose  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ .

#### 4-4-3 Effet des recuits post-implantation

La figure (4-12) représente les différentes valeurs de duretés mesurées pour des cibles implantées avec les doses ( $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ ,  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ ) et traitées à différentes températures ( $875^\circ\text{C}$ ,  $1000^\circ\text{C}$  et  $1250^\circ\text{C}$ ) pour un temps de maintien d'une heure. A partir de cette figure, on peut constater une hausse de la dureté au point qu'elle dépasse la dureté de silicium monocristallin vierge (tableau 4-3). Ceci était prévisible car généralement le recuit augmente la valeur de la dureté de surface [99]. Cependant, on peut voir que dans le cas de la dose  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$ , le recuit à  $875^\circ\text{C}$  n'optimise pas la dureté (tableau 4-3). Par contre, cette température est suffisante pour une optimisation acceptable de la dureté dans le cas de la dose  $10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . Ce résultat est logique puisque l'amorphisation due à la dose  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  est plus grande et cela nécessite des températures plus élevées pour une recristallisation meilleure des cibles.

En outre, on peut constater que le recuit à  $1000^\circ\text{C}$  des cibles implantées à  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  a donnée des valeurs de dureté plus grandes par rapport à celles des cibles traitées à  $1250^\circ\text{C}$ . Ce résultat peut être expliqué par l'augmentation du nombre de poly- cristaux (de silicium) formés lors du traitement à des températures plus élevées. Ce qui a pour effet d'augmenter la concentration des joints de grains et de diminuer par la suite la dureté de la cible.

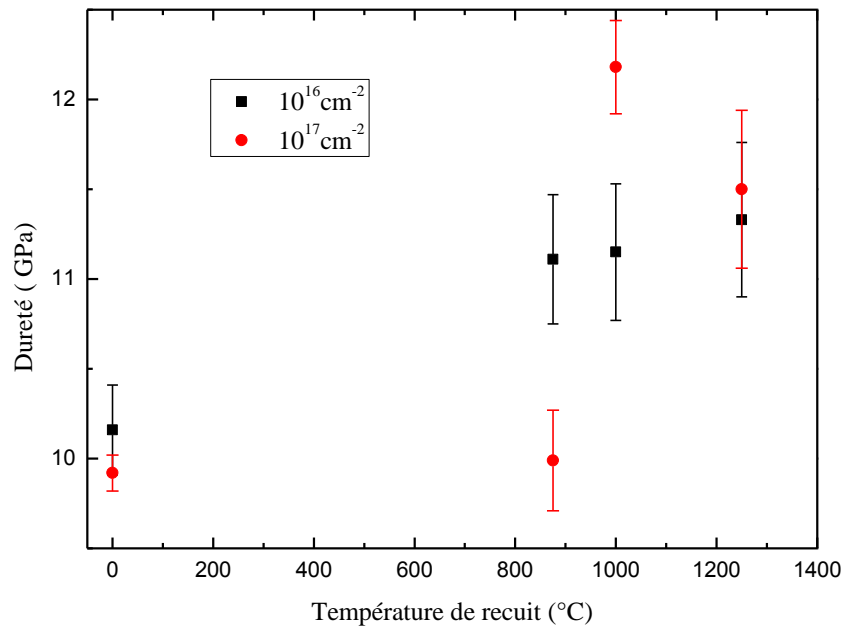


Fig.4-12 Comparaison des valeurs de la dureté pour des cibles implantées à  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et traitées à différentes températures ( $875^\circ\text{C}$ ,  $1000^\circ\text{C}$  et  $1250^\circ\text{C}$ ) pendant une heure.

#### **4-5 Conclusion partielle**

L'analyse des échantillons par la technique SIMS nous a permis d'obtenir plusieurs résultats concernant les allures de distributions des atomes de carbones dans les substrats de silicium. Nous avons également pu déterminer les valeurs des différents paramètres caractéristiques de l'implantation ionique. D'autre part, nous avons pu étudier l'endommagement des cibles implantées et la recristallisation de ces dernières, par recuit thermique, en utilisant la spectroscopie Raman. Enfin, les tests de dureté réalisés (essais de Vickers) nous ont permis d'étudier l'influence de l'implantation ionique sur les propriétés mécaniques des cibles implantées.

## *Conclusion générale*

## Conclusion générale

L'objet de cette thèse a été l'étude, théorique et expérimentale, de l'implantation des ions de carbone dans des cibles mono-cristallines de silicium Si(100). L'élaboration des échantillons a été réalisée en utilisant une énergie d'implantation de 70 keV avec deux doses d'implantation  $1 \times 10^{16}$  C<sup>+</sup>/cm<sup>2</sup> et  $1 \times 10^{17}$  C<sup>+</sup>/cm<sup>2</sup> pour un tilt de 7°. Les cibles implantées ont été traitées thermiquement, sous atmosphère d'argon, à différentes températures (875 °C, 1000°C et 1250°C) avec des temps de maintien variant d'une heure à 3 heures.

La simulation des interactions des ions implantés avec les atomes cibles a été effectuée en utilisant les deux codes TRIM et Crystal-TRIM. Cette étude nous a permis de prévoir les allures et les profondeurs des profils de distribution (des ions implantés) ainsi que l'effet de différents paramètres. Les profils de distribution simulés possédaient des allures quasi-gaussiennes et étaient en accord avec les résultats obtenus par SIMS. Nous avons Aussi étudié l'effet de différents paramètres sur la redistribution des dégâts d'irradiation.

Dans le cas de l'étude de l'effet du tilt d'implantation, les profils de distribution pour un angle de 0° n'étaient pas gaussiens à cause de l'effet de canalisation. Par conséquent, il était fortement recommandé d'éviter le tilt 0° pour l'élaboration des couches enterrées et homogènes du carbure de silicium SiC.

L'étude de l'effet de l'orientation du substrat a montré que la redistribution du carbone pour l'orientation <100> était légèrement plus profonde par rapport à la direction <111>.

En outre, la présence d'une couche d'oxyde (SiO<sub>2</sub>) n'influe pas sur la forme quasi-gaussienne des distributions. Cependant, plus l'épaisseur du SiO<sub>2</sub> augmentait plus les courbes se décalaient légèrement vers la surface. En revanche, la couche SiO<sub>2</sub> délimitait le phénomène de canalisation des ions dans le cas du tilt 0° et le nombre des ions canalisés diminuait avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche d'oxyde natif (SiO<sub>2</sub>).

La caractérisation expérimentale des échantillons élaborés a été effectuée par trois techniques ; SIMS, RAMAN et micro-dureté Vickers.

Les mesures SIMS nous ont permis de tracer les profils expérimentaux de redistribution des ions implantés. L'allure de ces profils était quasi-gaussienne et les valeurs obtenues des paramètres ( $R_p = 209$  nm,  $\Delta R_p = 64$  nm) étaient très proches de celles obtenues par simulation. Les résultats obtenus confirmaient la fiabilité des codes utilisés.

En outre, les profils SIMS des cibles traitées thermiquement montraient que la direction de diffusion des atomes de carbone dépendait de la dose d'implantation. Dans le cas de la dose  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ , le carbone diffusait vers la surface. Par contre, dans le cas de la dose  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ , la diffusion était concentrée autour d'une valeur moyenne  $R_0 \cong 198 \text{ nm}$ .

L'analyse des échantillons par spectroscopie Raman a été très utile pour l'étude de l'endommagement et de la recristallisation des cibles implantées. En effet, les spectres Raman des échantillons implantés et non traités ont montré qu'il y'a eu une amorphisation quasi-générale des cibles soit  $\sim 89.2 \%$  et  $\sim 100\%$  pour les doses  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  respectivement. Ce résultat montre que le taux d'endommagement augmentait avec la dose d'implantation. Le recuit post implantation a permis de rétablir la recristallisation des cibles. En effet, dans le cas de la dose  $10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ , une recristallisation optimale a été observée à partir de  $875^\circ\text{C}$ . À  $T=1250^\circ\text{C}$ , la recristallisation était parfaite. Pour la dose  $10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ , on a trouvé que le recuit à  $T=875^\circ\text{C}$  n'était pas suffisant pour avoir une recristallisation optimale et il fallait donc choisir des températures supérieures à  $1000^\circ\text{C}$  pour améliorer la recristallisation.

Enfin, l'essai de micro-dureté Vickers nous a permis d'avoir une idée sur l'effet de l'implantation et du recuit thermique sur la dureté des substrats implantés. En effet, la dureté diminuait considérablement après l'implantation ionique à cause de l'amorphisation des zones implantées. Après les recuits thermiques, on a pu constater une hausse de la dureté au point qu'elle dépassait la dureté de silicium monocristallin vierge. Ceci était prévisible car la recristallisation augmentait la valeur de la dureté de surface.

*Annexe*

*Travaux scientifiques publiés*

Special issue of the International Conference on Computational and Experimental Science and Engineering (ICCESSEN 2014)

## Simulation of Carbon Ions Interactions with Monocrystalline Silicon Targets

A. BOUGUERRA AND R. LABBANI\*

Laboratoire de Physique Mathématique et Subatomique, Département de Physique, Faculté des Sciences Exactes, Université Constantine 1, Route de Ain El Bey, 25000 Constantine, Algeria

In this work, several phenomena related to carbon ion implantation into Si(100) targets were simulated. The investigation was performed using Crystal-TRIM code (crystal-transport and range of ions in matter) under different conditions. In particular, we simulated the carbon profiles with respect to: (i) ions beam (energy, dose, orientation); (ii) substrate (temperature, crystallographic orientation). Two particular cases were taken into account: (i) implantation of 80 keV  $C^+$  to a fluence of  $2.7 \times 10^{17}$  ion/cm<sup>2</sup> at room temperature; (ii) implantation of 40 keV  $C^+$  to a fluence of  $6.5 \times 10^{17}$  ion/cm<sup>2</sup> at substrate temperature of 400 °C. For both cases, we used a tilt angle of 7°. Several results were obtained and compared with the Rutherford backscattering spectroscopy and elastic recoil detection analysis results provided by literature.

DOI: 10.12693/APhysPolA.128.B-67

PACS: 78.20.Bh, 85.40.Ry

### 1. Introduction

Carbon ion implantation into silicon wafers is one of interest preparation techniques of silicon carbide which is a promising material in electronic industry. This is due to its important properties: high thermal conductivity, wide band gap, and high breakdown electric field. Consequently, it is highly attractive for devices working at high-temperature, high power, and high resistance [1].

Crystal-TRIM code is an interesting tool to study ion-material interactions [2]. It is especially designed to study ion implantation into monocrystalline substrates of Si, Ge, or diamond. It is able to predict various phenomena such as: depth profiles of ions and damage in targets, nuclear and electronic energy deposition and channelling phenomena of ions in case of different crystallographic directions.

### 2. Theory of Crystal-TRIM code

#### 2.1. Assumptions

Several assumptions are taken into account to study theoretically the binary collision in Crystal-TRIM code. It is based on several assumptions [3]. In particular, (i) the target composition is supposed unchanged by ion implantation, (ii) the velocity of target atoms is equal to zero prior to the collision with projectile, (iii) the motion of recoiled target atoms is not considered.

#### 2.2. Inter-atomic potential

In case of very small distances between the nuclei, the repulsive interaction is supposed to be essentially

Coulombic. At greater distances, the repulsive potential  $V(r)$  can be obtained by multiplying the Coulombic repulsion with a screening function  $\varphi(r/a)$  [4]:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \varphi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (1)$$

where  $r$  is the interaction distance and  $a$  is computed by

$$a = \frac{0.8854a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}}. \quad (2)$$

$Z_1$ ,  $Z_2$  are the atomic numbers of the projectile and the target, respectively. The quantity  $a$  is the universal screening length,  $a_0$  is the Bohr atomic radius ( $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ ) and  $e$  is the charge of the electron ( $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ ). We note that the universal potential  $V(r)$  is reported to be a precise approximation for many projectile target cases [4].

#### 2.3. Damage accumulation

If  $T_n$  is the transferred energy from the projectile to the primary-knock-on atom, this quantity is further transferred to secondary recoils by collision cascade. In the collision projectile target atom, the nuclear energy deposition is estimated by [3]:

$$E_n = \frac{T_n}{1 + k_d g(\epsilon_d)}, \quad (3)$$

where

$$k_d = 0.1334 \left( Z_2^{2/3} / m_2^{1/2} \right), \quad (4)$$

$$g(\epsilon_d) = \epsilon_d + 0.4\epsilon_d^{3/4} + 3.4\epsilon_d^{1/6}, \quad (5)$$

$$\epsilon_d = 0.01 \left( T_n / Z_2^{3/2} \right). \quad (6)$$

$T_n$  and  $m_2$  are the nuclear energy loss and target atom mass, respectively.

The electronic energy deposition is given by [3]:

$$E_{el} = \Delta E_{el} + T_n - E_n. \quad (7)$$

\*corresponding author; e-mail: labbanire@gmail.com



According to  $E_n$  values, the number of displacements  $N_d$  is computed using the "modified" Kinchin-Pease model [5]:

$$N_d = 1 \text{ if } E_d \leq E_n < 2.5E_d,$$

$$N_d = 0.4(E_n/E_d) \text{ if } E_n \geq 2.5E_d. \quad (8)$$

For instance, the displacement energy  $E_d$  used for silicon target is about 15 eV [6].

For a depth interval ( $x, x + \Delta x$ ) of the silicon target, the probability  $dp_d$  that a carbon pseudo-projectile displaces a target atom from its atomic site is given by [6]:

$$dp_d = \frac{1}{n} \left( \frac{N_d D_0}{\Delta x N} \right) (1 - p_d), \quad (9)$$

where  $n$  is the atomic density of the target,  $D_0$  is the implantation dose of  $C^+$  and  $N$  is the total number of pseudo-projectiles considered in the simulation.

By integration of Eq. (9), the probability of atomic displacement is estimated by [6]:

$$p_d = 1 - \exp\left(-\frac{1}{n} \frac{N_d D_0'}{\Delta x}\right), \quad (10)$$

where  $D_0' \leq D_0$  [6]. During ions implantation, various types of defects are created (vacancies, dislocations, and local amorphous regions).

### 3. Results and discussion

#### 3.1. Influence of ions beam parameters on carbon depth profiles

In Fig. 1, we report the Crystal-TRIM simulation results obtained for different implantation energies. It is clear that carbon range profiles are Gaussian-like distribution which is logical since the simulation was run for a tilt of  $7^\circ$ . In other words, the target is seen as amorphous with respect to carbon ions beam. Also, we can note that the values of mean projected range ( $R_p$ ) and straggling ( $\Delta R_p$ ) increases and curves become deeper by increasing implantation energies. This is due to the fact that higher energies allow the ions beam to penetrate deeper in the substrate.

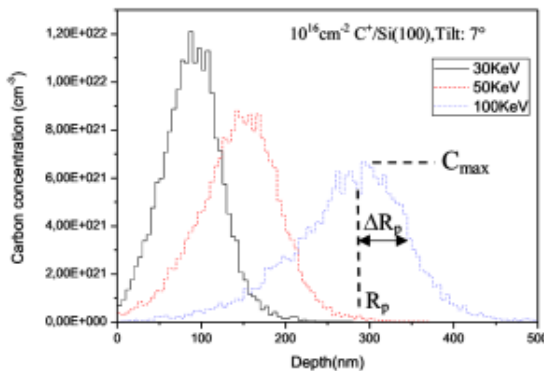


Fig. 1. Crystal-TRIM simulation results for depth profiles of carbon ions with different implantation energies.

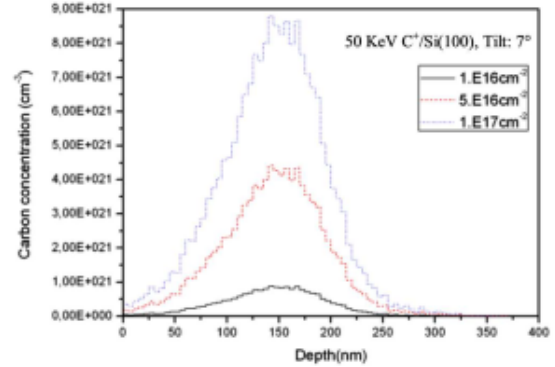


Fig. 2. Crystal-TRIM results corresponding to carbon depth profiles versus different implantation doses.

Concerning the effect of implantation dose, the simulation has also provided Gaussian-like distribution. Indeed, the variation of carbon range versus three different implantation doses ( $1 \times 10^{16}$ ,  $5 \times 10^{16}$  and  $1 \times 10^{17}$   $\text{cm}^{-2}$ ) is shown in Fig. 2. We note that the three curves have the same values of the projected range ( $R_p$ ) and the standard deviation ( $\Delta R_p$ ) (i.e.  $R_p = 146$  nm and  $\Delta R_p = 50$  nm, respectively) but exhibit different values of  $C_{\text{max}}^+$  concentration. This is logical since different doses have been used.

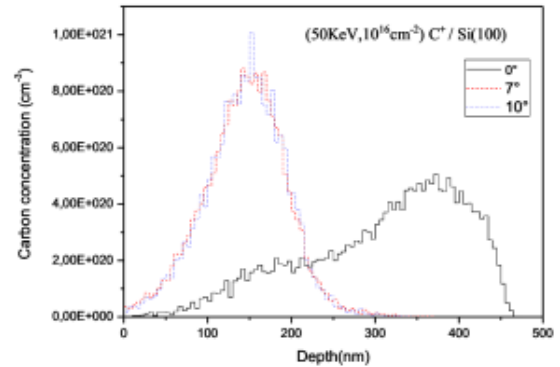


Fig. 3. Crystal-TRIM results corresponding to carbon depth profiles with different implantation tilt angles.

Concerning the tilt angle effect, Crystal-TRIM predictions have indicated a huge carbon atoms canalisation for the case of  $0^\circ$ . As shown in Fig. 3, the shape of the range profile for  $0^\circ$  tilt is not a Gaussian-like distribution which is due to channelling effect, whereas for  $7^\circ$  and  $10^\circ$  tilt, the curves are similar ( $R_p = 147$  nm;  $\Delta R_p = 48$  nm). Therefore it is recommended to avoid the  $0^\circ$  tilt for homogeneous layers SiC elaboration.

#### 3.2. Influence of temperature and crystallographic orientation of substrate on carbon depth profiles

Crystal-TRIM code has a greater advantage with regard to other codes because it takes into account the

effects of temperature and crystallographic orientation of the substrate. In Fig. 4, three different substrate temperatures (25 °C, 200 °C and 400 °C) have been selected. The simulation was run for two implantation energies (50 keV and 80 keV) where we note that depth profiles distribution does not depend on the temperature of substrates.  $R_p$  is approximately equal to 145 nm and 222 nm for 50 keV and 80 keV energies, respectively, whereas the standard deviation is estimated to be about 48 nm and 62 nm for the same energies.

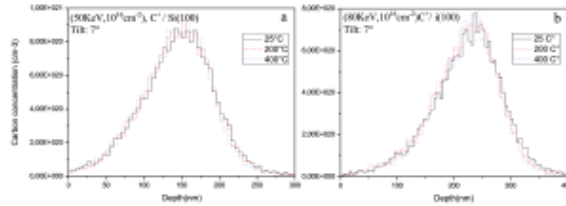


Fig. 4. Crystal-TRIM simulation results for carbon depth profiles, with different substrate temperatures, for 50 keV (a) and 80 keV (b) implantation energies.

The effect of substrate crystallographic orientation has also been studied in this work. In Fig. 5,  $\langle 100 \rangle$  and  $\langle 111 \rangle$  orientations have been selected because they are generally used for compound fabrication. As it can be seen,  $\langle 100 \rangle$  orientation yields slightly deeper carbon profile with respect to  $\langle 111 \rangle$ . This is logical since along  $\langle 100 \rangle$  direction, less substrate atoms number is knocked-on with regard to  $\langle 111 \rangle$  case.

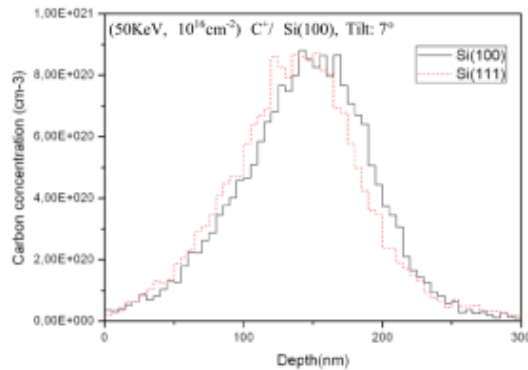


Fig. 5. Crystal-TRIM simulation results for depth profiles of carbon atoms implanted in Si (100) and Si (111) substrates.

### 3.3. Simulation of damage profile

As shown in Fig. 6, we note that the projected range of damage  $R_d$  (Fig. 6a) was lower than the projected range of carbon atoms  $R_p$  (Fig. 6b) which is in agreement with literature [7].

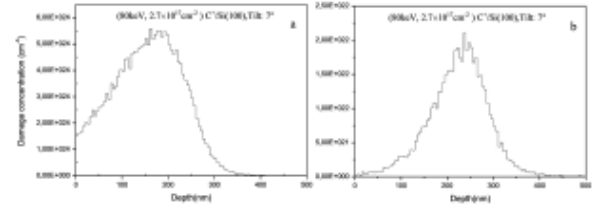


Fig. 6. Crystal-TRIM simulation results for damage concentration profile (a) and carbon atoms concentration profile (b).

### 3.4. Comparison of experimental and theoretical results

In this section, we have performed comparison between the simulated and experimental results which have been provided in literature [8]. Two particular cases have been selected: (i) implantation of 80 keV  $C^+$  to a fluence of  $2.7 \times 10^{17}$  ion/cm<sup>2</sup> at room temperature, (ii) implantation of 40 keV  $C^+$  to a fluence of  $6.5 \times 10^{17}$  ion/cm<sup>2</sup> at substrate temperature of 400 °C.

TABLE

Method	Depth <sub>max</sub> [nm]	$R_p$ [nm]	$\Delta R_p$ [nm]
80 keV $C^+$ into Si(100)			
Crystal-TRIM	250	226	64
ERDA	243	245	85
RBS	260	260	76
40 keV $C^+$ into Si(100) at 400 °C			
Crystal-TRIM	120	116	42
ERDA	131	127	55
RBS	150	150	59

Depth<sub>max</sub>: the depth corresponding to  $C_{max}$ ,

$R_p$ : the projected range,

$\Delta R_p$ : the projected range straggling.

According to Table I, it is clear that Crystal-TRIM code is an accurate program for ion implantation prediction. Indeed, the simulated results (corresponding to  $R_p$ ,  $\Delta R_p$  and depth<sub>max</sub>) are in good agreement with the experiment [8]. Moreover, it is clear that elastic recoil detection analysis (ERDA) measurements are closer to Crystal-TRIM results than the Rutherford backscattering spectroscopy (RBS) data. This is due to the characteristics of the two methods. Indeed, the depth resolution for ERDA technique is reported to be about 10 to 20 nm [9], whereas for RBS analysis, the depth resolution is reported to be generally around 63 nm [2]. This means that ERDA measurements are more accurate than RBS.

## 4. Conclusion

In this work, we have performed a simulation study of several parameters corresponding to carbon ion implan-

tation into silicon targets. It was found that the values of mean projected range ( $R_p$ ) and straggling ( $\Delta R_p$ ) depended on implantation energies and substrates orientation. Moreover, these values were not influenced by implantation dose and substrate temperature. Furthermore, the shape of carbon depth profiles was a Gaussian-like distribution with the exception of  $0^\circ$  tilt (i.e. ions beam perpendicular to substrate) which was due to channelling effect. The comparison between our simulated results and those provided in literature confirmed the accuracy of the Crystal-TRIM code.

#### Acknowledgments

The authors would like to thank Dr. M. Posselt, from the Institute of Ion Beam Physics and Materials (Germany), for providing the Crystal-TRIM program.

#### References

- [1] H. Morkoc, S. Strite, G.B. Gao, M.E. Lin, M. Burns, *J. Appl. Phys.* **76**, 1363 (1994).
- [2] M. Posselt I, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **90**, 373 (1994).
- [3] M. Posselt, *Radiat. Eff. Def. Solids* **130–131**, 87 (1994).
- [4] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Pergamon Press, New York 1985.
- [5] P. Sigmund, *Rad. Efl.* **14**, 114 (1969).
- [6] M. Posselt, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **102**, 167 (1995).
- [7] H. Boudhov, J.P. de Souza, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **122**, 293 (1997).
- [8] S. Intarasiri, T. Kamwanna, A. Hallen, L.D. Yu, M.S. Janson, C. Thongleumd, G. Possnert, S. Singkarat, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **249**, 859 (2006).
- [9] *ERDA*, Haute Ecole Arc Ingénierie, Neuchâtel 1999.

## SIMULATION OF CARBON ION PLANTATION IN SILICON TARGETS

Reçu le 01/09/2008 – Accepté le 23/06/2009

### Résumé

Dans ce travail, plusieurs phénomènes liés à l'implantation ionique du carbone, dans des cibles amorphes de silicium, ont été simulés. L'étude est réalisée par le code TRIM ou SRIM pour une dose de  $2.7 \times 10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et une énergie de 80 keV. Plusieurs quantités (le parcours projeté ( $R_p$ ), la déviation standard ( $\Delta R_p$ ), etc.), caractérisant l'implantation ionique, ont été obtenues et comparées avec la littérature. D'autre part, les défauts d'irradiation (lacunes et phonons) dans les cibles ont été prédits. Concernant la redistribution des ions  $\text{C}^+$ , une bonne corrélation entre la simulation et la littérature a été révélée. Cependant, on doit noter que l'influence de certains facteurs (la température du recuit, l'orientation cristallographique du substrat, etc.) sur les phénomènes étudiés ne peut pas être prévue par le code utilisé.

**Mots clés:** carbone ; silicium ; implantation ionique ; simulation.

### Abstract

In this work, several phenomena related to carbon ion implantation, in amorphous silicon targets, were simulated. The investigation was performed using the TRIM code for a dose of  $2.7 \times 10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  and an energy of 80 keV. Several quantities (the projected range ( $R_p$ ), the standard deviation ( $\Delta R_p$ ), etc.), characterizing the ion implantation, were obtained and compared with literature. On the other hand, the radiation damage (vacancies and phonons) in the substrates was also predicted. Concerning the redistribution of  $\text{C}^+$  ions, a good correlation between the simulation and literature has been revealed. However, we note that the investigation of the effect of some factors (annealing temperature, crystallographic orientation of the targets, etc.) on the studied phenomena is not possible by the TRIM code.

**Keywords:** carbon; silicon; ion implantation; simulation.

**R. LABBANI\***  
**A. BOUGUERRA\*\***

\* Laboratoire (LCMI),  
Département. de Physique,  
Université Mentouri- Constantine  
Algérie,

\*\* Département SETI, Centre  
universitaire de Khenchela,  
Algérie,

### ملخص

في هذا العمل قمنا بمحاكاة عدة تفاعلات خاصة بالزرع الأيوني للكربون داخل مساند من السليسيوم غير المتبلور. تمت الدراسة على التوالي. تحصلنا على عدة قيم 80 keV و  $2.7 \times 10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  من أجل جرعة و طاقة تساويان TRIM بواسطة البرنامج و قارناها مع المراجع المتوفرة. من جهة أخرى تنبأنا بالعيوب خاصة بالزرع اليوني) الخ  $\Delta R_p$ , الانحراف,  $R_p$  المسار ( تحصلنا على توافق جيد بين المحاكات و  $\text{C}^+$  (الفجوات و الفونونات) الناتجة عن الزرع الأيوني للكربون. بالنسبة لتوزيع أيونات الخ) غير ممكن باستعمال , التوجه البلوري للمساند, المراجع. لكن يجب القول بأن تأثير بعض العناصر (درجة حرارة المعالجة TRIM البرنامج .

**كلمات مفتاحية:** كربون ; سليسيوم ; زرع أيوني ; محاكاة.



**SIMULATION OF CARBON ION PLANTATION IN SILICON TARGETS**

**I – INTRODUCTION**

Ion implantation is a technique widely employed to introduce dopants, in semiconductor substrates, for the fabrication of integrated microcircuits [1]. This is due to the fact that this process is able to provide excellent spatial and dose control. Actually, this method is used in different domains because it leads to the modification of the materials surfaces [2]. The range profiles and the stopping of energetic ions in the targets have been largely investigated by researchers. They have used several theoretical approaches and many sophisticated experimental techniques. Indeed, when energetic ions penetrate in the solid, many target atoms are knocked off their initial positions which generate many interstitials and vacancies in the substrate lattice. Moreover, actually, the ion implantation is employed to produce shallow layers which present a good continuous transition in depth. As an application of this effect in microelectronics industry, the researchers use the impl layers as buried conductors or shallow pn-junctions. instance, many studies are oriented to synthesize embe silicon carbide in silicon specimens using high doses of c: ions [3,4]. The silicon carbide has attracted many int because of its attractive properties at extreme conditio temperature, power and radiation [5,6]. In this work, we the carbon ion implantation in silicon targets. The investig is performed by simulation using the upgraded 1 (TRansport of Ions in Matter) [7] version, SRIM (Stopping & Range of Ions in Matter) [8]. Our investigation is emphasized on the prediction of carbon concentration-depth profiles, energy loss of ions and radiation damage

**2- Implantation technique**

When energetic ions are introduced into a target, electronic and/or nuclear collisions are generated between the incident ions and the target atoms. According to the ions energy, several phenomena may occur [9]: backscattering of ions, emission of light and/or secondary electrons, formation of aggregates, emission of secondary ions and the implantation of ions (Fig. 1, left).

Concerning the redistribution (n(x)) of the ions in the target, the simplest approximation is the Gaussian distribution [10]

which is described by the two moments ( $R_p$  and  $\Delta R_p$ ) and given by the function:

$$n(x) = n_0 \exp\left(\frac{-(x - R_p)^2}{2 (\Delta R_p)^2}\right)$$

$$n_0 = \frac{\phi}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p}$$

where  $\phi$  is the ion dose per unit area,  $R_p$  and  $\Delta R_p$  are the projected range (average depth from the surface) and the standard deviation (half width at half maximum) respectively (Fig. 1, right).

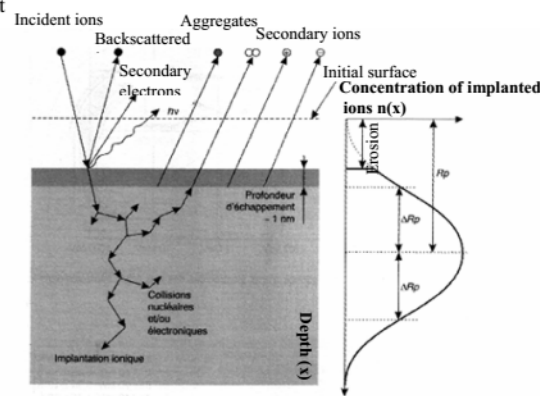


Figure 1: Scheme of the different phenomena occurring during the interaction of incident ions with a target (left).

Gaussian redistribution of implanted ions (right) [9, 10]. However, if the redistribution (or profile) of ions deviates from the ideal Gaussian, the approximation of Pearson is used [9]. For such approximation, two parameters (or moments) are added. They are the skewness ( $\gamma$ ) and the kurtosis ( $\beta$ ). We note that  $\gamma$  is a measure of the profile tendency to lean toward or away from the surface. Concerning the  $\beta$  moment, it is the measure of the profile flatness [9].

R. LABBANI et A. BOUGUERRA

### 3- Simulation technique

The SRIM2006 [8] was used to simulate the interactions of carbon ions with silicon targets. It is a group of programs able to compute the stopping and range of ions (10 eV - 2 GeV/amu) into matter using a full quantum mechanical treatment of ion-atom collisions. The calculation is based on statistical algorithms in which it is assumed that the ion and atom have a screened Coulomb collision including interactions between the overlapping electrons shells [11]. In the calculation, it is assumed that the atomic density of the target remains constant during the implantation process. We used incident carbon ions, a silicon target (10000 Å) and “Detailed Calculation with full Damage Cascade” option. In this option, every recoiled atom is followed until its energy drops below the lowest displacement energy of any silicon atom. The values of the displacement energy ( $E_d$ ) (of a silicon atom) and the Si binding energy ( $E_b$ ) are 15 eV and 2 eV respectively. These default values given by SRIM are slightly different with regards to tabulated data [12, 13]. Concerning the number of ions, we used 99999 which is the default value proposed by SRIM. However, in some cases, we used 10000 ions for comparison. For the angle ( $\phi$ ) of implantation, in some cases  $\phi$  was equal to zero (*i.e.* carbon beam perpendicular to the silicon target). In others,  $\phi$  was equal to  $7^\circ$  (which is the geometry generally employed during ion implantation operation). Finally, we note that the computation was performed in a personal computer (PENTIUM P4, having a speed of 3.4 GHZ and a RAM of 2 GO).

### 4- Results and discussion

Figure 2 shows the SRIM predictions of nuclear and electronic stopping powers versus the energy of carbon ions. From this plot, one can see that the transfer energy to the silicon lattice is governed by the electronic collisions.

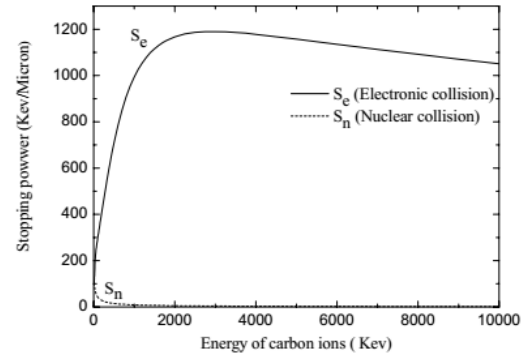


Figure 2: Simulation of the nuclear ( $S_n$ ) and electronic ( $S_e$ ) stopping powers, in a silicon target, for different energies of carbon ion implantation.

In ion implantation, it is crucial to predict the ion implantation parameters such as the range profiles, the projected range  $R_p$  and the standard deviation  $\Delta R_p$ . In figure 3, the distribution of carbon ions in the silicon target (for an energy of 80 keV, a dose of  $2.7 \times 10^{17} \text{ C}^+/\text{cm}^2$  and an angle  $\phi$  of  $7^\circ$ ) is reported. According to this plot, one can notice that the simulated profile has almost a Gaussian form which is in agreement with the experimental study provided in literature [14].

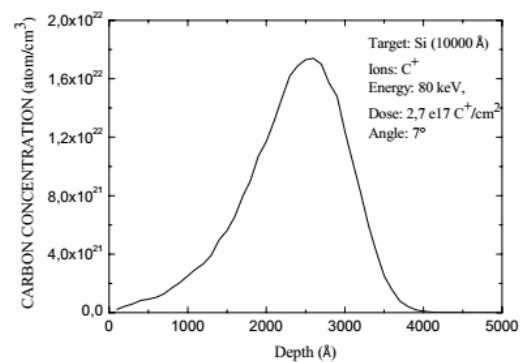


Figure 3: SRIM prediction of carbon ions profile in silicon target.

## SIMULATION OF CARBON ION PLANTATION IN SILICON TARGETS

The energy and dose are equal to 80 keV and  $2.7 \times 10^{17} \text{ C}^+$   $\text{cm}^{-2}$  respectively.

We note that the distribution was obtained for 99999 ions which were supposed to be oriented with an angle  $\varphi$  of  $7^\circ$  with respect to the silicon surface. The parameters extracted from the profile of figure 3 are as follows: the projected range  $R_p = 2295 \text{ \AA}$ , the standard deviation  $\Delta R_p = 655 \text{ \AA}$ , the skewness  $\gamma = -0.588$  and the kurtosis  $\beta = 3.247$ . First of all, we note that the projected range and the standard deviation are slightly inferior to the experimental value provided in literature [14] (*i.e.*  $R_p = 2600 \text{ \AA}$ ,  $\Delta R_p = 760 \text{ \AA}$ ). We attribute the difference to the fact that the simulated profile has not a perfect Gaussian shape. Indeed the negative value of the skewness indicates that the peak is skewed towards the surface [15]. Whereas, the obtained value of the Kurtosis indicates that a small broad tail is present. Besides, we note that the simulation performed for an angle  $\varphi$  of  $0^\circ$  provided comparable results with those corresponding to an angle of  $7^\circ$  (Tab. 1). This is logical since the SRIM code assumes that the targets are amorphous which means that no channelling effects may be detected.

Method	$R_p(\text{\AA})$	$\Delta R_p(\text{\AA})$	$\gamma$	$\beta$
SRIM ( $\varphi = 0^\circ$ )	2309	655	-0.602	3.2711
SRIM ( $\varphi = 7^\circ$ )	2295	655	-0.588	3.2472
Literature [14]	2600	760	.....	.....

Table 1: Characteristic details of the carbon distribution, in silicon targets, determined by SRIM code for 99999 ions in different conditions ( $\varphi = 0^\circ$  &  $\varphi = 7^\circ$ ).

$R_p$ : the projected range,

$\Delta R_p$ : the projected range straggling,

$\gamma$ : the skewness,  $\beta$ : the kurtosis.

Besides, we note that in SRIM code, two parameters related to the substrate are introduced. The first one concerns the displacement energy ( $E_d$ ) and it defines the quantity (in terms of energy) that a recoil must possess to overcome the lattice forces and to move away from its original position [7,8]. The second parameter concerns the lattice binding energy ( $E_b$ ) and it traduces the energy lost (into phonons) by every recoiling target atoms when it leaves its lattice and

recoils in the target [7,8]. The default values of  $E_d$  and  $E_b$ , for semiconductors, which are included in SRIM, are 15 eV and 2 eV respectively. They are slightly different from those given in literature (*i.e.*  $E_d = 13 \text{ eV}$  &  $E_b = 3 \text{ eV}$ ) [14, 15]. In table 2, we report the values of  $R_p$ ,  $\Delta R_p$ ,  $\gamma$  and  $\beta$  obtained by simulation for the default values of  $E_d$  and  $E_b$  and for the values provided in literature [14, 15]. According to the results reported in table 2, we notice that the simulation performed for the default values of  $E_d$  and  $E_b$ , provides identical results with the simulation executed with the values given in literature.

Method	$R_p(\text{\AA})$	$\Delta R_p(\text{\AA})$	$\gamma$	$\beta$
SRIM ( $E_d=15\text{eV}$ , $E_b=2\text{eV}$ )	2292	654	-0.6131	3.2448
SRIM ( $E_d=13\text{eV}$ , $E_b=3\text{eV}$ )	2292	654	-0.6131	3.2448
Literature [14]	2600	760	.....	.....

Table 2: Characteristic details of the carbon distribution, in silicon targets, determined by SRIM code

( $N = 10000$  ions,  $\varphi = 7^\circ$ ) in different conditions

( $E_d = 15\text{eV}$ ,  $E_b = 2\text{e}$  &  $E_d = 13\text{eV}$ ,  $E_b = 3\text{eV}$ ).

Besides, we note that the default number of ions proposed by SRIM is 99999. In our study, we noticed that this required a long simulation time ( $t=600$  minutes) especially if we chose the "Detailed Calculation with full Damage Cascade" option. For this reason, we tried to use a less ions number (*i.e.*  $N=10000$  ions) to make a comparison. First of all, the simulation time was notably decreased ( $t = 60$  minutes). Concerning the values of  $R_p$ ,  $\Delta R_p$ ,  $\gamma$  and  $\beta$  parameters, they are reported, in table3, for both cases. From this table, we can notice that the results are similar which means that it is possible to reduce the number of ions during the simulation by SRIM.

Method	$R_p(\text{\AA})$	$\Delta R_p(\text{\AA})$	$\gamma$	$\beta$
SRIM ( $N=10000$ ions)	2292	654	-0.6131	3.2448
SRIM ( $N=99999$ ions)	2295	655	-0.5880	3.2472
Literature [14 ]	2600	760	.....	.....

Table 3: Characteristic details of the carbon distribution, in silicon targets, determined by

## R. LABBANI et A. BOUGUERRA

SRIM code ( $\varphi = 7^\circ$ ) in different conditions  
( $N=99999$  ions &  $N=10000$  ions).

During the ion implantation in solid targets, many defects are enhanced in the material. In this work, we have used the SRIM program to predict the distribution of phonons (Fig. 4) and vacancies (Fig. 5) generated in the silicon target by the implantation of carbon ions (dose= $2.7 \times 10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ , energy 80 keV). First of all, from these figures, we note that the radiation damage is due to both ions and recoils. But it is clear that the defects (*i.e.* phonons or vacancies) enhanced by recoils are more important than those generated by ions. Moreover, one can notice that the profiles of phonons and vacancies do not exhibit Gaussian forms. Besides, the simulation shows that the defects which are due to ions are localized deeper in the target with regards to those enhanced by recoils. Indeed, from figures 4 & 5, we noticed that the phonons and vacancies which were due to recoils exhibited peaks at approximately 2000 Å under the surface sample. However, in the case of the generation by ions, the peaks (of phonons & vacancies) were observed at  $\sim 2200$  Å which was slightly inferior to the projected range  $R_p$ .

Besides, if we consider the redistribution of figure 4, one can suppose that the target temperature is largely elevated (until the fusion temperature of the substrate). This is not true because no such effect has been reported in literature [14].

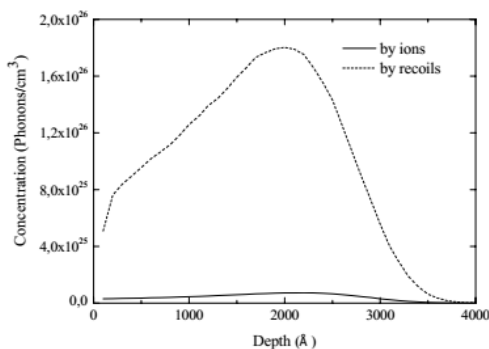


Figure 4: SRIM predictions of phonons profiles generated in silicon target implanted with carbon ions. The dose and

energy were fixed to  $2.7 \times 10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  and 80 keV respectively.

(—) Distribution of phonons generated by ions;

(---) distribution of phonons generated by recoiled atoms.

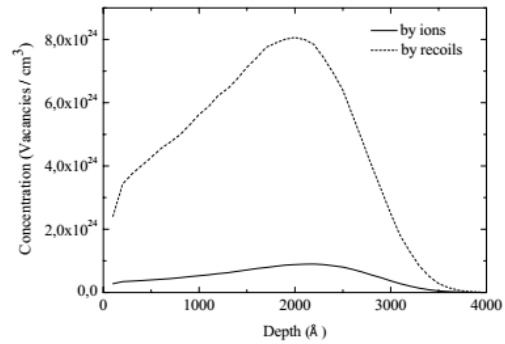


Figure 5: SRIM predictions of vacancies profiles generated in silicon target implanted with carbon ions. The dose and energy were fixed to  $2.7 \times 10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  and 80 keV respectively.

(—) Distribution of vacancies generated by ions;

(---) distribution of vacancies generated by recoiled atoms.

## CONCLUSION

In this work several parameters related to carbon ion implantation, in silicon targets, were studied. The investigation was carried out by simulation, using the program SRIM2006. The redistribution of carbon ions in the target was obtained. It exhibited Gaussian-like distribution. The projected range and the standard deviation were slightly inferior to the experimental values provided in literature [14]. The difference was attributed to the fact that the simulated profile had not a perfect Gaussian shape. Indeed, we found that the peak was skewed towards the surface.

Concerning the defects profiles, the distribution shapes of phonons and vacancies in the target did not exhibit Gaussian forms. We note that the defects generated by



## SIMULATION OF CARBON ION PLANTATION IN SILICON TARGETS

recoils were predominant with regards to those generated by ions.

Finally, we note that SRIM code considers only amorphous targets. This means that if one is interested to study the ion implantation in crystalline targets, this should not be possible. Moreover, the SRIM simulates only as-implanted targets. In other words, the temperature effect is not taken into account by the code. Hence in such cases, one should use other codes or propose his own model.

## REFERENCES

- [1] Jenkins, T. E., 1995, *Semiconductor Science: Growth & characterization techniques*, ed. Prentice Hall International (UK) Limited.
- [2] Hargue, C. J. Mc., 1987, The mechanical & tribological properties of ion implanted ceramics, in *Ion beam modification of insulators, Beam modification of materials*, ed. Elsevier, **2**, Amsterdam, 223.
- [3] Katharria, Y. S., Singh, F., Kumar, P., Kanjilal, D., 2007, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **254**, 78–82.
- [4] Müller, G., Krötz, Niemann, E., 1994, *Sens. Actuators*, **A**, **43**, 259.
- [5] Morkoc, H., Strite, S., Gao, G. B., Lin, M. E., Sverdlov, B., Burns, M., 1994, *Journal of Applied Physics*, **76**, 1336.
- [6] Philip G. 2002, Neudeck, Proc. IEEE 90, 1065.
- [7] Ziegler, J. F., Biersack, J. P., Littmark, U., 1985, *The Stopping and Ranges of Ions in Solids*, Pergamon Press, New York.
- [8] SRIM Program. Available from: [www.research.ibm.com/ionbeams/srim/](http://www.research.ibm.com/ionbeams/srim/).
- [9] P.N. Favennec, *L'Implantation Ionique pour la Microélectronique et l'Optique*, Collection Technique et Scientifique des Télécommunications, ENST, Ed. Masson, Paris, (1993).
- [10] S.M. Sze, *Semiconductor Devices, Physics and Technology*, AT and Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey, 1985.
- [11] Ziegler, J. F., Biersack, J. P., and Littmark, U., 1985, *The Stopping and Range of Ions in Solids*, by, Pergamon Press, New York.
- [12] Nastasi, M., Mayer, J. W., Hirvonen, J. K., 1996, *Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications*, Cambridge University Press, New York, 146.
- [13] Nordling, C., Osterman, J., 1987 *Physics Handbook*, Studentlitteratur, Lund, 29.
- [14] Intarasiri, S., Kamwanna, T., Hallén, A., Yu, L. D., Janson, M. S., Thongleum, C., Possnert, G., Singkarat, S., 2006, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **249**, 859–864
- [15] Winterbon, B., 1975, *Ion Implantation Range and Energy Distributions*, vol. **2**, ed. Plenum Press.

## *Références*

- [1] S. Basu, Crystalline Silicon – Properties and Uses, Ed. Intech. (2011).
- [2] B. El-Kareh, Silicon Devices and Process Integration; Deep Submicron and Nano – Scale Technologies. Springer Ed. (2009).
- [3] P. Clarke, Intel enters billion - transistor processor era, EE Times, (2005).
- [4] J. Yoo, K. Min Han, J. Sik Cho. Solar Cell Fabrication Using Two-step Textured Quasi - single Crystalline Silicon by Alkaline and RIE Texturing Processes. Vacuum, **128**, pp.118-122, (2016).
- [5] Pierre. Delhaes, Carbon Science and Technology ; From Energy to Materials, ISTE Ltd, p. 24, (2012).
- [6] T. Kimoto, J. Cooper, Fundamentals of Silicon Carbide Technology; Growth, characterization, Devices and Applications. J.Wiley & Sons Singapore Pte. Ltd. (2014).
- [7] M. Beuve, Modélisation de l'interaction des ions de haute énergie avec la matière inerte, la matière vivante et la matière en mouvement, Mémoire d'habilitation, Université Claude Bernard – LYON 1, (2007).
- [8] S. Blanqué, Optimisation de l'Implantation Ionique et du Recuit Thermique pour SiC, Thèse de Doctorat, Université des Sciences et Techniques -Montpellier II- (2004).
- [9] P. N. Favennec, L'Implantation Ionique pour la Microélectronique et l'Optique, Collection Technique et Scientifique des Télécommunications, ENST, Ed. Masson, (1993).
- [10] site web: [https://www.scei-concours.fr/tipe/TIPE\\_2002/sujets\\_2002/si\\_psi\\_2002.pdf](https://www.scei-concours.fr/tipe/TIPE_2002/sujets_2002/si_psi_2002.pdf)
- [11] site web: <https://indico.in2p3.fr/event/1603/session/3/contribution/8/material/slides/0.pdf>
- [12] site web: [http://metronu.ulb.ac.be/npauly/Pauly/metronu/1\\_1.pdf](http://metronu.ulb.ac.be/npauly/Pauly/metronu/1_1.pdf)
- [13] Guendouz Hassan, Etude de couches minces de silicium implantées à l'antimoine ou l'arsenic, Mémoire de Magister, UNIVERSITE CONSTANTINE 1, (2014).
- [14] M. Nastasi, J. W. Mayer, Ion Implantation and Synthesis of Materials, Springer Verlag Berlin Heidelberg, New York, (2006).
- [15] C. R.Barrett: A.S.Tetelman: W. D. Nix, The Principles of Engineering Materials, Prentice Hall, (1973).
- [16] J. P. Hansen, I.R. McDonald, Theory of Simple Liquids: with Applications to Soft Matter, 4<sup>th</sup> edition, Elsevier Ltd, Poland, (2013).
- [17] J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in solids Pergamon Press, New York, 1985.
- [18] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, Matthias D. Ziegler, SRIM, the Stopping and Range of Ions in Matter, SRIM Co, USA, (2008).

- [19] Lindhard, Scharff, Schiott, Range Concepts and Heavy Ion Ranges, *Mat. Fys. Medd.*, **33**, (1963).
- [20] M. Nastasi, J. W. Mauer, J. K. Huvonen. *Ion-Solid Interaction : "Fundamentals and Application"*, Cambridge University Press, (1995).
- [21] P.L. Grande, F.C. Zawilslak, D. Fink, Range parameters study of medium-heavy ions implanted into light substrates, *Nuclear Instruments And Methods In Physics Research B*, **61**, pp.282-290 (1991).
- [22] N.V. Richardson, S. Holloway, *Dynamics*, Elsevier B.V, Volume 3, 1<sup>st</sup> edition UK, (2008).
- [23] G. Dearnaley, J. H. Freeman, R. S. Nelson and J. Stephen, *Ion Implantation*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, (1973).
- [24] Y. Pauleau, *Materials Surface Processing by Directed Energy Techniques*, Elsevier Ltd., UK, (2006).
- [25] J. H. Warner, *Displacement Damage-induced Electrical and Structural Effects in GaAs*, ProQuest Information and Learning Company, USA, (2008).
- [26] Z. L. Wang, Y. Liu, Z. Zhang, *Handbook of nano-phase and nano-structured materials*, Kluwer Academic/ Plenum publishers New York, (2003).
- [27] J.F. Ziegler, *Ion Implantation Science and Technology*, Academic Press, Inc, USA, (1984).
- [28] H. M. Urbassek, *Handbook of surface Science*, **3**, p.881 North- Holland (2008).
- [29] B. Window and N. Savvidis, Charged particle fluxes from planar magnetron sputtering sources, *Journal of Vacuum Science & Technology A*, **4**, p. 196 (1986).
- [30] W. Brandt, Channeling in Crystals, *Scientific American*, **218**, p. 90 (1968).
- [31] K. Jeena, *Studies on the Channelling of Fast Particles Through Crystals*, Thèse de Phd., Université de Calicut, Inde (2007).
- [32] J.Lindhard J., *Dansk, Vid. Selsk, Mat. Fys. Medd.* **34**,p.14(1965).
- [33] L.C. Feldman, J. W Mayer, *Material Analysis by Ion Channeling*, Academic Press, (1982).
- [34] J. Lindhard V.Nielsen and M. Scharff, *Matematisk-fysiske meddelelser, Danske Videnskabernes Selskab* **36**, p. 10, (1968).
- [35] A. P. Pathak, The effects of defects on charged particle propagation in crystalline solids, *Radiation Effects*, **61**, pp.1-46 (1982).

- [36] B. Schmidt, K. Wetzig, Ion Beams in Materials Processing and Analysis, Springer-Verlag Wien, (2013).
- [37] Y. Corre, P. Jacquot, Procédés IMPLANTECR, 3<sup>ème</sup> Séminaire. Bodycote-Air Liquid-Lyon, (2012).
- [38] site web : [http://www.bodycote.com/~media/Files/B/Bodycote-Plc-hV2/Attachements/News%20and%20Media/FR/FICHE\\_implantation\\_ionique\\_18oct12.pdf](http://www.bodycote.com/~media/Files/B/Bodycote-Plc-hV2/Attachements/News%20and%20Media/FR/FICHE_implantation_ionique_18oct12.pdf)
- [39] C. CHABROL, Implantation ionique, Ed. Techniques de l'ingénieur, **m1219**, p. 3 (1989).
- [40] site web: [http://www.memoireonline.com/12/09/2961/m\\_Etude-des-nano-cavites-en-vue-de-la-realisation-des-materiaux-alternatifs-agra3.html](http://www.memoireonline.com/12/09/2961/m_Etude-des-nano-cavites-en-vue-de-la-realisation-des-materiaux-alternatifs-agra3.html).
- [41] site web: <https://fr.scribd.com/doc/287324491/Diffusion-Implantation-LM>
- [42] A. Baudrant, Implantation ionique et traitements thermiques en technologie de silicium, LAVOISIER, p.143 (2011).
- [43] J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiott, Range Concepts and Heavy Ion Ranges, Matematisk-fysiske Meddelelser, Danske Videnskabernes Selskab, 33(14), 1963.
- [44] M.T. Robinson O.S. Oen, The Channeling of energetic atoms in crystal lattice, applied Physics Letters, **2**, p.30 (1963).
- [45] D. Fink, Fundamentals of Ion-Irradiated Polymers, Springer -Verlag Berlin Heidelberg, Germany, (2004).
- [46] D. Widmann, H. Mader, H. Friedrich, Technology of Integrated Circuits, Springer Science & Business Media, p. 212 (2000).
- [47] P. Bhattacharya, R. Fornari, H. Kamimura, Comprehensive Semiconductor Science and Technology, Elsevier B.V. Italy, (2011).
- [48] M. B. LAZAR, Etude du dopage par implantation ionique d'Aluminium dans le carbure de silicium pour la réalisation de composants de puissance, Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences et Applications de LYON, (2002).
- [49] A. Kenneth. K. Jackson, Processes: Crystal Growth, Diffusion, and Phase Transition in Materials, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, (2010).
- [50] P.N. Favennec, L'implantation Ionique pour la Microélectronique et l'Optique, Ed. Masson (1993).
- [51] D.E. Harrison, Sputtering models A synoptic view, Radiation Effects, **70**, p.1 (1983).
- [52] O. S. Oen and M. T. Robinson, Computer studies of the reflection of light ions from solids, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, **132**, p.647-653 (1976).

- [53] J.P. Biersack & L.G. Hagmark, A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **174**, pp. 257-269 (1980).
- [54] J.P. Biersack & W. Eckstein, Sputtering studies with the Monte Carlo Program TRIM, *Applied Physics A*, **34**, pp. 73- 94 (1984).
- [55] site web : [www.srim.org](http://www.srim.org).
- [56] R. Hellborg, J. Whitlow, Y. Zhang, *Ion Beams in Nanoscience and Technology*, Ed. Springer- Verlag ,Berlin Heidelberg (2009).
- [57] M. Posselt, Radiat. Crystal-trim and its application to investigations on channelling effects during ion implantation, *Radiation Effects and Defects in Solids*, **130–131**, pp. 87- 119 (1994).
- [58] N. Paour, Etude de la Diffusion Intervenant dans la Résolution en Profondeur en Analyse SIMS : Application à L'AlGaAs, Thèse de Doctorat, Université de Grenoble 1 (1997).
- [59] J. P. Biersack, E. Steinbauer and P. Bauer, A particularly fast TRIM version for ion backscattering and high energy ion implantation, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **61**, pp. 77- 82 (1991).
- [60] C. Lehmann, *Interaction of Radiation with Solids and Elementary Defect Production*, North Holland Publishing, Amsterdam, 1977).
- [61] J. P. Biersack, Basic physical aspects of high energy implantation, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **35**, pp. 205-214 (1988).
- [62] M. T. Robinson, *Nuclear Fission Reactors*, British Nuclear Energy Society London, p. 364, (1970).
- [63] M. Posselt, Dynamic simulation of damage accumulation during implantation of  $\text{BF}_2^+$  molecular ions into crystalline silicon, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **102**, pp.167-172 (1995).
- [64] M. B. Lazar, Etude du dopage par implantation ionique d'aluminium dans le carbure de silicium pour la réalisation de composant de puissance, Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon (2002).
- [65] E. D.Ceretti, M. Aucouturier, P. Lehuédé, Spectrométrie de masse d'ions Secondaires (SIMS) Principes et appareillages, *Techniques de l'Ingénieur*. **4**, p.2645 (2014).
- [66] site web : <http://www.sciencefrance.com/techniques/SIMS/SIMS.html>
- [67] [https://fr.wikipedia.org/wiki/Spectrom%C3%A9trie\\_de\\_masse\\_%C3%A0\\_ionisation\\_secondaire](https://fr.wikipedia.org/wiki/Spectrom%C3%A9trie_de_masse_%C3%A0_ionisation_secondaire)
- [68] site web : <http://www.lenntech.fr/francais/data-perio/electronegativite.htm>

- [69] G. Turrell, J. Corset, Raman Microscopy – Developments and Applications – Academic-Press Press, London (1996).
- [70] P. Colombar, Imagerie Raman de matériaux et dispositifs nano/microhétérogènes, Techniques de l'ingénieur, **5v2**, p. 3 (2013).
- [71] S. Zaydoun, Cours de Spectroscopie, Faculté des Sciences, Université Mohammed V, Rabat (2015).
- [72] J. Bostoa, Synthèse de nanostructure de carbure de silicium et étude de leurs propriétés optiques, Thèse de Doctorat. Institut National des Sciences et Applications de LYON (2008).
- [73] J. Barbillat, D. Bougeard, G. Buntinx, M. Delhaye, Spectrométrie Raman, Techniques de l'Ingénieur, **p2 865**, pp. 1-31 (1999).
- [74] V. Le Nader, Approche expérimentale et théorique de la diffusion Raman exaltée : résonance des plasmons de surface et effet de pointe, Ed. HAL (2011).
- [75] <https://www.bruker.com/fr/products/infrared-near-infrared-and-raman-spectroscopy/raman/senterra/learn-more.html>
- [76] D. François, Essais mécaniques des métaux ; Essais de dureté, Techniques de l'ingénieur, **M4160**, pp. 1-17 (2005).
- [77] Marc Blétry, Méthodes de caractérisation, mécanique des matériaux, École Nationale Supérieure des Mines de Paris (2006-2007).
- [78] William F. Gale, Terry, C. Totemeier, Smithells Metals Reference Book, Elsevier, Inc. Netherlands, (2004).
- [79] A. Grous, Applied Metrology for Manufacturing Engineering, Wiley, (2013).
- [80] J. Dossett, E. Howard, Boyer Practical Heat Treating, ASM International, USA (2006).
- [81] Site web: <http://www.metallography.com/ceramics/ceramics.htm>
- [82] H. Czichos, T. Saito, L. Smith, Springer Handbook of Materials Measurement Methods, Springer Science + Business Media, (2006).
- [83] Site web <http://cswipquestions.blogspot.com/2014/08/mechanical-testing-hardness-test.html>
- [84] M. Aboy, I. Sontos, L. Pelaz, Modeling of defects, dopant diffusion and clustering in silicon, Journal of Computational Electronics, **13**, pp 40-58, (2014).
- [85] C. Nordling, J. Osterman, Physics Handbook, Studentlitteratur, Lund, p. 29, (1987).
- [86] S. Intarasiri, T. Kamwanna, RBS and ERDA determinations of depth distributions of high-dose carbon ions implanted in silicon or silicon-carbide synthesis study, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, **249**, pp. 859–864, (2006).
- [87] Winterbon, B., Ion Implantation Range and Energy Distributions, ed. Plenum Press, **2**, (1975).
- [88] Site web : <http://slideplayer.fr/slide/5441299/>

- [89] C. MALHAIRE, Caractérisation et modélisation de microtransducteurs de pression à haute performances intégrés sur silicium, Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences et Applications de Lyon, p.60 (1998).
- [90] H. Boudhov, J.P. de Souza, Damage accumulation during  $11\text{B}^+$ ,  $12\text{C}^+$  and  $14\text{N}^+$  implantation in Si, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, **122**, p. 293- 297 (1997).
- [91] M. Posselt, Computer simulation of ion implantation into crystalline targets, Nuclear instruments and Methods in Physics Research B, **64**, pp. 706-710 (1992).
- [92] Site web: <http://www.sciencefrance.com/techniques/SIMS/SIMS.html>
- [93] S. Intarasiri, A. Halle, J. Lu, J. Jensen, Crystalline quality of 3C-SiC formed by high-fluence  $\text{C}^+$  - implanted Si, Applied Surface Science, **253**, pp. 4836–4842 (2007).
- [94] S. Dey, C. Haitali, A. Pradhan, Raman scattering characterization of Si(100) implanted with mega-electron-volt Sb, Journal of Applied Physics, **87**, pp.1110-1117 (2000).
- [95] J. Cornish , E. Mohamed, R. Abdelaal, Engineering nanocrystals of silicon, Molecular Simulation, **31**, pp. 405–410 (2005).
- [96] W. Li, D. Xia, H. Wang and X. Zhao, Hydrogenated nanocrystalline silicon thin film prepared by RF-PECVD at high pressure, Journal of Non-Crystalline Solids, **356**, pp. 2552-2556 (2010).
- [97] Z.Li, W. Li, Y. Jiang, H. Cai, Raman characterization of the structural evolution in amorphous and partially nanocrystalline hydrogenated silicon thin films prepared by PECVD, Journal of Raman Spectroscopy, **42**, pp. 415- 421, (2011).
- [98] Site web : <http://www.gordonengland.co.uk/hardness/hvconv.htm>
- [99] R.J. Brook, Concise Encyclopedia of Advanced Ceramic Materials, Pergamon Press plc,UK, (1991).



## إسهام في دراسة الغرس الأيوني للكربون في السليسيوم

### ملخص

في هذا العمل ، قمنا بدراسة نظرية و تجريبية للغرس الشاردي للكربون في السليسيوم. تمت نمذجة عدة ظواهر مرتبطة بالغرس الأيوني للكربون، في مساند أحادية البلورة للسليسيوم Si(100)، باستعمال برنامج المحاكاة Trim و Crystal-Trim.

تجريبيا، تم تحضير العينات المدروسة عن طريق غرس للكربون في صفائح من السليسيوم بطاقة غرس مساوية لـ 70 keV مع ميلان للحزمة الأيونية بـ 7° و باستعمال جرعتين للغرس:  $1 \times 10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  و  $1 \times 10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ . الصفائح المغروسة عولجت حراريا بدرجات حرارة مختلفة ( 875 °C ، 1000°C و 1250 °C ). تم تحليل العينات المحضرة باستعمال ثلاث تقنيات: التحليل الطيفي الكتلي للتأين الثانوي (SIMS) ، التحليل الطيفي (RAMAN) واختبار الصلابة (Vickers) .

في الجزء الخاص بالمحاكاة، قمنا بدراسة عدد كبير من الوسائط التي لها صلة بملامح توزيع الأيونات المغروسة. كما قمنا أيضا بدراسة تأثيرات وسائط الغرس الأيوني ( مثل : الطاقة، الجرعة، ميلان الحزمة الأيونية و توجيه المسند) على ملامح توزيع الأيونات. القياسات المنجزة بواسطة تقنية التحليل الطيفي الكتلي للتأين الثانوي (SIMS) سمحت لنا برسم منحنيات التوزيع التجريبية للأيونات المغروسة و مقارنتها بالمنحنيات النظرية المتحصل عليها من برامج المحاكاة المستعملة. كما سمحت لنا هذه القياسات بدراسة انتشار ذرات الكربون خلال المعالجات الحرارية للعينات.

تحليل العينات بواسطة تقنية التحليل الطيفي (RAMAN) سمح لنا بدراسة الضرر الناتج عن الغرس الأيوني و إعادة التبلور للعينات المغروسة بعد معالجتها حراريا. لقد تمكنا بفضل هذه القياسات من تحديد نسب الضرر الذي أصاب البنى البلورية للمناطق المغروسة. كما درسنا تأثير المعالجات الحرارية في إصلاح العيوب البلورية الناشئة عن عملية الغرس. إضافة إلى ذلك، توصلنا إلى إثبات أن العيوب البلورية تزداد كلما زادت جرعة الغرس.

ختاما، اختبار الصلابة (Vickers) ، سمح لنا بدراسة تأثير الغرس الأيوني و المعالجات الحرارية على صلابة العينات المغروسة، حيث وجدنا أن الصلابة تتناقص بصفة ملحوظة بعد عملية الغرس الأيوني و تعود للارتفاع من جديد بعد معالجة العينات حراريا.

الكلمات المفتاحية : الكربون، السليسيوم، الغرس الأيوني، Trim ، Crystal – Trim .

## **Contribution to the study of carbon ion implantation into the silicon**

### **Abstract**

In this work, we studied the ion implantation of carbon in silicon by simulation and experimentally. Several phenomena related to carbon implantation in Si (100) were simulated using two codes: Trim and Crystal Trim.

Experimentally, the samples were prepared by implanting carbon into silicon wafers with an implantation energy of 70 keV C<sup>+</sup> to fluences of  $1 \times 10^{16}$  C<sup>+</sup> cm<sup>-2</sup> and  $1 \times 10^{17}$  C<sup>+</sup> cm<sup>-2</sup> (for a tilt angle of 7°). The implanted wafers were annealed at different temperatures (875 °C, 1000 °C and 1250 °C). The characterization of the samples was performed using three techniques: secondary ion mass spectroscopy (SIMS), Raman spectroscopy and Vickers hardness test.

In the simulation part, we determined several parameters related to the distribution profiles of the implanted ions. We also studied the effect of implantation parameters (such as energy, fluence, tilt angle and orientation of the substrate) on the distribution profiles.

SIMS measurements provided us the experimental distribution profiles of implanted ions. The effect of post-annealing treatment was also studied by this technique.

The analysis by Raman spectroscopy was very useful to study the damage and recrystallization of implanted targets. We were able to determine the rate of damage of the implanted areas. We also studied the effect of thermal annealing on the restoration of defects.

Finally, the Vickers micro-hardness test allowed us to study the effects of implantation and thermal annealing on the hardness of the implanted substrates. The hardness decreased considerably after ion implantation (due to amorphization of the implanted zones) and increased significantly after thermal annealing.

**Keywords:** carbon ; silicon ; ion implantation ; Trim ; Crystal Trim.

## Résumé

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude théorique et expérimentale de l'implantation ionique du carbone dans le silicium. Plusieurs phénomènes liés à l'implantation du carbone, dans des cibles monocristallines de silicium Si(100), ont été simulés en utilisant deux programmes de simulation (Trim et Crystal-Trim).

Expérimentalement, les échantillons étudiés ont été élaborés par implantation du carbone dans des plaquettes de silicium avec une énergie d'implantation de 70 keV, un tilt de 7° et avec deux fluences (doses) d'implantation :  $1 \times 10^{16} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$  et  $1 \times 10^{17} \text{ C}^+ \text{ cm}^{-2}$ . Les plaquettes implantées ont subi un recuit post-implantation à différentes températures (875°C, 1000°C, et 1250°C). La caractérisation des échantillons a été réalisée en utilisant trois techniques ; la spectroscopie de masse à ionisation secondaire (SIMS), la spectroscopie Raman et l'essai de dureté Vickers.

Dans la partie simulation, on a pu déterminer plusieurs paramètres liés aux profils de distribution des ions implantés. On a aussi étudié l'effet des paramètres d'implantation tels que l'énergie, la fluence, le tilt et l'orientation du substrat sur les profils de distribution.

Les mesures SIMS nous ont permis de tracer les profils expérimentaux de distribution des ions implantés et de les comparer avec les résultats de la simulation. On a aussi pu étudier la diffusion des atomes de carbone et l'évolution de leurs distributions durant les recuits thermiques des échantillons.

L'analyse des échantillons par spectroscopie Raman a été très utile dans l'étude de l'endommagement et de la recristallisation des cibles implantées. En effet, Les spectres Raman obtenus nous ont permis de déterminer les taux d'endommagement, des zones implantées, causé par l'irradiation. On a aussi pu voir l'effet des recuits thermiques sur la guérison des défauts créés. En outre, on a trouvé que l'endommagement des structures cristallographiques augmentait avec la fluence du carbone.

Enfin, l'essai de micro-dureté Vickers nous a permis d'investiguer l'effet de l'implantation et du recuit thermique sur la dureté des substrats implantés. En effet, la dureté diminuait considérablement après l'implantation ionique à cause de l'amorphisation des zones implantées. Après les recuits thermiques, elle augmentait significativement.

**Mots clés :** carbone ; silicium ; implantation ionique ; Trim , Crystal-Trim .