

Remerciements

Remerciements

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.

Je tiens à exprimer ma plus grande gratitude à Ms. R. Labbani, professeur à l'université Constantine 1, qui a encadré ce travail. Je suis très reconnaissant pour la sympathie, la modestie, la patience, les nombreux conseils et la confiance qu'elle m'a manifestée pendant la réalisation de ce mémoire. Sa compétence scientifique, sa disponibilité et les nombreuses discussions ont permis de mener à terme ce mémoire.

Je tiens à exprimer ma gratitude à : Professeur. N. Mebarki (Directeur du laboratoire (LPMPS)), Mr. C. Benazzouz, Alger (Directeur de recherche (CRNA) pour la réalisation des échantillons et les analyses RBS), Professeur E. Kotai, Hongrie (de nous avoir fourni le logiciel RBX) et Pr.T. Laoui, Arabie Saoudite (pour les mesures de micro-dureté).

Je remercie honnêtement et énormément Monsieur S. Boudjadar, professeur à l'université Constantine 1, qui a accepté d'être président de jury.

J'exprime toute ma reconnaissance à Monsieur A. Tolia, professeur à l'université Constantine 1, qui m'a fait l'honneur de juger ce travail en acceptant d'en être l'examineur.

Enfin, une gratitude et une confession privilégiées sont transmises à ma famille, mes amis et mes collègues pour leur soutien, leur encouragement et leur motivation.

Sommaire

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

Chapitre I : Notions Générales sur les interactions ion-matière

I. Introduction	3
II. Principe	3
III. Avantages et inconvénients de l'implantation ionique	4
III.1. Avantages.....	4
III.2. Inconvénients.....	4
IV. Description d'un implanteur ionique.....	5
IV.1. Source des ions.....	5
IV.2. Système d'analyse magnétique.....	5
IV.3. Tube d'accélération.....	5
IV.4. Focalisation et balayage x, y.....	6
IV.5. Mesure du courant ionique.....	6
V. Interaction ion-matière.....	8
V.1. Potentiel interatomique d'interaction.....	9
V.1.1. Types des fonctions d'écran	10
V.1.1.1. Modèle classique.....	10
V.1.1.2. Modèle Quantique.....	13
V.2. Mécanismes d'interaction ion-matière.....	14
V.2.1. Matériau amorphe.....	14

V.2.1.1. Pouvoir d'arrêt nucléaire.....	14
V.2.1.2. Pouvoir d'arrêt électronique.....	18
V.2.1.2.1. Régime basse énergie.....	18
V.2.1.2.2. Régime haute énergie.....	20
V.2.2. Matériau cristallin.....	21
V.2.2.1. Canalisation.....	21
V.2.2.2. Distribution des ions canalisés.....	22
V.2.2.3. Réduction de la canalisation.....	23
VI. Distribution des ions implantés.....	24
VI.1. Introduction.....	24
VI.2. Distribution gaussienne.....	24
VI.2.1. Moments de la distribution gaussienne	25
VI.2.2. Profil de la concentration	27
VI.3. Distribution de Pearson IV.....	28
VI.3.1. Moments de la distribution de Pearson IV	28
VI.3.2. Profil de la concentration	28
VII. Endommagements causés par l'implantation ionique.....	29
VII.1. Défauts et cascade des collisions.....	29
VII.2. Nombre des défauts ponctuels.....	30
VII.3. Dose critique d'amorphisation.....	31

VIII. Recuit thermique.....	33
IX. Conclusion partielle.....	34

Chapitre II : Notions générales sur les techniques de caractérisation RBS et micro-dureté

I. Spectrométrie de Rétrodiffusion Rutherford (RBS)	35
I.1. Introduction.....	35
I.2. Principe.....	35
I.3. Avantages et inconvénients.....	35
I.3.1. Avantages	35
I.3.2. Inconvénients.....	36
I.4. Instrumentation.....	36
I.5. Concepts principaux de RBS.....	37
I.5.1. Facteur cinématique.....	37
I.5.2. Section efficace de la rétrodiffusion.....	39
I.5.3. Perte d'énergie.....	41
I.5.3.1. Différence d'énergie en approximation de la surface.....	42
I.5.3.2. Résolution de la profondeur.....	43
I.6. Hauteur du spectre d'énergie.....	43
I.7. Profil de la concentration.....	44
I.8. Détermination des paramètres d'implantation ionique par RBS.....	45

I.8.1. Introduction	45
I.8.2. Dose des dopants implantés.....	46
I.8.3. Concentration maximale.....	46
I.8.4. Parcours projeté R_p	46
I.8.5. Ecart du parcours projeté ΔR_p	47
I.9. Spectrométrie de rétrodiffusion Rutherford en canalisation RBS/C.....	48
I.9.1. Introduction.....	48
I.9.2. Principe de RBS/C.....	48
I.9.3. Paramètres typiques de la technique RBS/C.....	50
I.9.4. Applications essentielles	51
I.9.5. Concepts de la canalisation en RBS.....	51
I.9.5.1. Demi-angle axial $\psi_{1/2}$	51
I.9.5.1.1. Calcul du Demi-angle axial $\psi_{1/2}$	52
I.9.5.2. Rendement minimal χ_{min}	53
I.9.5.2.1. Calcul du rendement minimal.....	53
I.9.6. Epaisseur de la couche amorphe.....	54
I.9.7. Profil de la concentration du désordre	54
I.9.7.1. Fraction des particules décanalisées	55
I.9.7.2. Fraction totale des particules rétrodiffusées.....	56
I.9.7.3. Concentration du désordre en surface.....	56

I.9.7.4. Concentration du désordre dans le cas général	57
I.9.8. Fraction des impuretés substitutionnelles.....	57
I.9.9. Parcours maximal des ions canalisés.....	58
II. Micro-dureté	60
II.1. Introduction	60
II.2. Méthode de Vickers.....	61
II.2.1. Principe	61
II.2.2. Dureté de Vickers aux normes internationales	63
II.2.3. Avantages et inconvénients	64
II.2.3.1. Avantages	64
II.2.3.2. Inconvénients	65
II.3. Méthode de Knoop	65
II.3.1. Principe	65
II.3.2. Forces recommandées	68
II.3.3. Avantages et inconvénients.....	68
II.3.3.1. Avantages.....	68
II.3.3.2. Inconvénients	69
II.4. Amélioration de la mesure	69
II.5. Comparaison entre les méthodes Vickers et Knoop.....	69
III. Conclusion partielle.....	71

Chapitre III : Le code de simulation RBX

I. Introduction	72
II. Bases théoriques du programme RBX.....	72
II.1. Géométrie de la diffusion.....	72
II.2. Rendement.....	73
II.3. Section efficace de la rétrodiffusion.....	75
II.4. Facteur de la section efficace d'arrêt	76
II.5. Rendement au canal.....	77
II.6. Ecart en énergie	78
III. Synthèse du spectre	78
IV. Simulation du spectre RBS expérimental	80
V. Simulation du profil de la concentration	81
V.1. Approximation de la surface.....	82
V.2. Comparaison entre deux éléments	83
VI. Simulation du profil de défauts	84
VII. Analyse du spectre.....	84
VIII. Conclusion partielle	84

Chapitre IV : Caractérisation et simulation RBX des spectres expérimentaux RBS

I. Introduction	85
II. Etude des échantillons avant traitement thermique	85
II.1. Conditions expérimentales mises en œuvre.....	85
II.2. Etalonnage expérimental du détecteur	85
II.3. Section efficace de la diffusion élastique.....	87
II.4. Section efficace d'arrêt	87
II.5. Simulation et analyse des spectres RBS en mode random et canalisé.....	88
II.5.1. Echantillon vierge en mode canalisé	88
II.5.2. Echantillon implanté non recuit en mode random.....	89
II.5.2.1. Données et paramètres obtenus à partir du spectre RBS expérimental.....	90
II.5.2.2. Profil de la concentration des ions d'antimoine	93
II.5.3. Echantillon implanté non recuit et analysé en mode canalisé	94
II.5.3.1. Profil de la concentration de défauts	95
III. Etude des échantillons après traitement thermique.....	97
III.1. Simulation et analyse du spectre RBS/C	97
III.2. Simulation du profil de défauts après recuit thermique.....	98
III.3. Comportement des ions d'antimoine.....	98
IV. Conclusion partielle.....	99

Chapitre V : Caractérisation des propriétés mécaniques des échantillons

I. Introduction	100
II. Calcul de la dureté moyenne de Knoop et sa déviation standard.....	100
II.1. Silicium vierge Si(111)	100
II.2. Silicium Si(111) implanté à $5 \text{ E}15 \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 120 KeV	101
II.3. Silicium Si(111) implanté à $5 \text{ E}15 \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 120 KeV et recuit à 900 °C pendant 30 minutes sous vide	102
II.4. Silicium implanté à $1.5 \text{ E}16 \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 100 KeV et non recuit.....	103
II.5. Silicium implanté à $1.5 \text{ E}16 \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 100 KeV et recuit sous vide ($3 \times 10^{-6} \text{ torr}$) à 900 °C pendant 30 minutes.....	104
III. Discussion des résultats	105
III.1. Silicium vierge Si(111)	105
III.2. Silicium Si(111) implanté à $5 \text{ E}15 \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 120 KeV	105
III.3. Silicium Si(111) implanté à $5 \text{ E}15 \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 120 KeV et recuit à 900 °C pendant 30 minutes sous vide	105
III.4. Silicium implanté à $1.5 \text{ E}16 \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 100 KeV et non recuit.....	106
III.5. Silicium implanté à $1.5 \text{ E}16 \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 100 KeV et recuit sous vide ($3 \times 10^{-6} \text{ torr}$) à 900 °C pendant 30 minutes	106
IV. Conclusion partielle.....	106
<i>Conclusion générale.....</i>	107
<i>Annexe : La simulation par le code SRIM.....</i>	<i>109</i>
<i>Références.....</i>	<i>112</i>

Introduction générale

Introduction générale

Aux débuts de la microélectronique, la méthode dominante utilisée pour l'introduction des dopants dans les plaquettes semi-conductrices fût la diffusion. Cependant, celle-ci n'a pas pu répondre aux besoins croissants de l'industrie car les jonctions obtenues étaient assez profondes. Les progrès de la recherche scientifique ont permis l'apparition d'une nouvelle technique dite Implantation Ionique. Cette dernière a été brevetée en 1954 par William Shockley mais elle n'a été mise en œuvre que dix ans plus tard. Elle a été adoptée vu les avantages importants qu'elle présentait, par rapport à la diffusion, tels que le choix des espèces dopantes avec sélection de la charge, le réglage de l'énergie d'accélération et de la direction du faisceau d'ions ainsi que la maîtrise de la profondeur de pénétration du dopant dans la cible. Cependant, cette méthode est souvent accompagnée par des endommagements dans la cible nécessitant des recuits thermiques pour leur guérison.

Ce mémoire de Magister est considéré comme une contribution au travail de recherche de l'équipe 'rayonnements et applications' du laboratoire 'physique atomique et subatomique' de 'l'Université Constantine 1'. Il consiste à dépouiller les résultats ayant été obtenus par les membres de cette équipe. Dans le cadre de ce travail, on se propose d'étudier les propriétés résultant de l'implantation des ions d'antimoine ou d'arsenic dans les cibles de Si(111). En particulier, les analyses effectuées par spectroscopie de rétrodiffusion Rutherford (Rutherford Backscattering Spectroscopy, RBS), en modes random et canalisé, seront exploitées. De plus, les mesures de la micro-dureté des spécimens seront également investiguées.

Ce mémoire de Magister est constitué des chapitres suivants :

Dans le premier chapitre, les concepts théoriques de l'implantation ionique et des interactions ion-matière seront étudiés.

Dans le deuxième chapitre, on passera en revue les principes théoriques des techniques de caractérisation RBS et micro-dureté.

Le troisième chapitre sera consacré à une description détaillée du logiciel RBX mis en œuvre pour la simulation des spectres RBS expérimentaux

Le quatrième chapitre sera consacré à la discussion des résultats RBS obtenus sur les échantillons élaborés.

Dans le cinquième chapitre, on abordera la discussion des résultats de micro-dureté.

Par la suite, une conclusion générale de ce travail sera donnée et les points essentiels seront soulevés. Aussi, nous proposerons les perspectives possibles pour ce travail.

Enfin une annexe sera proposée pour donner quelques détails concernant le code de la simulation SRIM 2013.

Chapitre I

Notions Générales sur les interactions ion-matière

I. Introduction

Les matériaux semi-conducteurs dopés par l'implantation ionique ont connu un progrès technologique rapide notamment dans l'industrie des circuits intégrés. Le dopage d'un semi-conducteur consiste à introduire des atomes impuretés (d'une espèce désirée) dans des sites substitutionnels du matériau car les impuretés en positions interstitielles sont électriquement inactives. Les éléments les plus utilisés pour le dopage du silicium sont le bore, le gallium ou l'indium pour rendre la cible du type p et le phosphore, l'antimoine ou l'arsenic pour avoir le type n. Les deux derniers éléments cités sont particulièrement intéressants à la fabrication des composants aux jonctions superficielles comme les transistors MOSFET et les diodes LED en optoélectronique [1,2,3,4].

II. Principe

Un faisceau de dopants ionisés est accéléré, par l'application d'un champ électrique, à une énergie suffisante au bombardement uniforme de la surface d'un film. Les ions primaires ont une dose comprise entre 10^9 et 10^{18} *ions cm⁻²* et un courant variant de 1 A à quelques centaines de milliampères. Ils pénètrent dans l'échantillon en perdant de leurs énergie via des collisions nucléaires et électroniques jusqu'à ils deviennent finalement implantés à une profondeur prédéterminée [2,5]. Généralement, les profondeurs typiques des espèces implantées sont de quelques nanomètres à un micromètre. Une conséquence accompagnant souvent ce processus se manifeste par le déplacement d'un nombre important d'atomes hôtes de leurs sites [6,7].

III. Avantages et inconvénients de l'implantation ionique

Ci-dessous, nous exposons les avantages et les inconvénients du processus d'implantation ionique dans les matériaux.

III.1. Avantages

Les principaux avantages sont [8,9,10,11] :

- Technique simple et rapide
- Technique de surface (profondeur limitée).
- Processus propre, net, sec et appliqué sous vide.
- C'est un traitement athermique.
- Dose totale des ions implantés est facilement mesurée.
- Uniformité de la concentration des impuretés sur le film.
- Distribution du profil des dopants est précisément contrôlée.
- Pas de surépaisseur ni de risque de la délamination (pas de variation dimensionnelle).
- Elle est indépendante de la pureté des matériaux à implanter car les ions sont séparés magnétiquement.
- Possibilité d'implanter à travers une couche mince passive (SiO_2, Si_3N_4).

III.2. Inconvénients

Les principaux inconvénients sont [7,8,9,10] :

- Epaisseur du masque, couche d'oxyde, augmente à cause des défauts créés.
- Distribution latérale du profil de dopants sous le bord du masque.
- Production de défauts dans la cible jusqu'à que cette dernière devienne amorphe.
- Pulvérisation du film.
- Possibilité de canalisation des ions dans la cible.
- Recuit systématique, des films implantés, à haute température pour la guérison des défauts d'irradiation.

IV. Description d'un implanteur ionique

Il se compose principalement d'une chambre d'ionisation, système d'analyse de la masse, un tube d'accélération, des lentilles électromagnétiques, un système de scan électrostatique et une chambre de la cible [12,13], (Fig.1).

IV.1. Source des ions

Elle contient essentiellement un récipient clos dans lequel la matière à ioniser est introduite sous la forme d'un gaz pur ou de composés moléculaires gazeux. Il est également possible d'introduire des liquides ou des solides vaporisés au préalable dans un four près de la chambre d'extinction à une pression approximativement égale à 10^{-3} torr et une température entre 300 et 700 °C [12]. Par exemple, l'ionisation des gaz d'arsine AsH_3 , de phosphine PH_3 et du trifluorure de bore BF_3 donne des ions d'arsenic As^+ , de phosphore P^+ et de bore B^+ respectivement, tandis que les ions l'antimoine Sb^+ proviennent de l'oxyde d'antimoine Sb_2O_3 qui est une source solide [14]. Un filament chauffé maintient le déchargement électrique du gaz ou de la vapeur contenant les éléments désirés. L'application d'un voltage de 10 à 30 KV permet d'extraire les ions du gaz et de les pré-accélérer vers l'aimant d'analyse [2,12].

IV.2. Système d'analyse magnétique

Un aimant d'analyse dévie à 90° les trajectoires des ions accélérés et les sépare selon leurs masses atomiques, et seulement les ions sélectionnés franchissent l'ouverture de la sortie et entrent dans le tube d'accélération. La résolution moyenne d'un aimant est $M_1/\Delta M_1 \approx 100$ ce qui signifie qu'il peut faire différencier entre la masse 100 et celle 101 [2,12].

IV.3. Tube d'accélération

Dans le tube, les ions sont accélérés à une énergie qui varie de 0.5 à 500 KeV par l'utilisation d'électrodes rondes (jusqu'à 20 électrodes) sous un vide qui peut arriver jusqu'à 10^{-6} torr pour se débarrasser des éléments résiduels [2,15].

IV.4. Focalisation et balayage x, y

Après l'accélération électrostatique, des lentilles électromagnétiques refocalisent le faisceau divergé sortant avant son passage aux pastilles du scan électrostatique où les ions subissent une déflexion horizontale, x , suivie d'une autre verticale, y , pour assurer une uniformité du faisceau incident sur la surface de l'échantillon [10,12].

IV.5. Mesure du courant ionique

La méthode la plus répandue pour la mesure du courant des ions est l'utilisation des cages de Faraday. Elles sont électriquement isolées et dans lesquelles les ions du faisceau sont collectés. La charge est mesurée via un résistor, calibré de 10^{10} à $10^{12} \Omega$, dans un circuit électronique approprié. Quand un faisceau ionique percute un métal électriquement isolé, ce dernier gagne une petite charge nette tandis que les ions deviennent neutralisés. Le métal peut être déchargé pour mesurer un petit courant équivalent au nombre des ions percutant l'échantillon. Pour un faisceau ionique continu, un courant des ions I et une aire mesurée A , le nombre des ions par unité d'aire (pendant un temps t) est donné par [2] :

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

Où :

$\Phi(\text{ions}/\text{cm}^2)$: Dose implantée mesurée.

A : Aire implantée en cm^2 .

I : Courant du faisceau en ampère.

$q = n e$: Charge portée par un ion à un état de la charge n et e est la charge élémentaire en coulomb.

t : Durée entière de l'implantation en seconde.

L'erreur introduite pendant la mesure du courant ionique net (I_m) en raison de l'influence des électrons secondaires et des ions secondaires est corrigée via l'utilisation d'une cage à une électrode électro-statiquement négative (appelée l'antiparasite cylindrique) ou une cage à écran magnétique (nommée l'antiparasite magnétique). Cette cage permet de supprimer (antiparasiter) le courant des électrons secondaires (I_{es}^-) et celui des ions secondaires chargés négativement (I_{is}^-). Des cages ayant un coefficient bas de la pulvérisation doivent être installées afin de minimiser le courant des ions secondaires chargés positivement (I_{is}^+). En finalité, on écrit [2] :

$$I_m = I_i^+ + I_{es}^- + I_{is}^- - I_{is}^+ \quad (2)$$

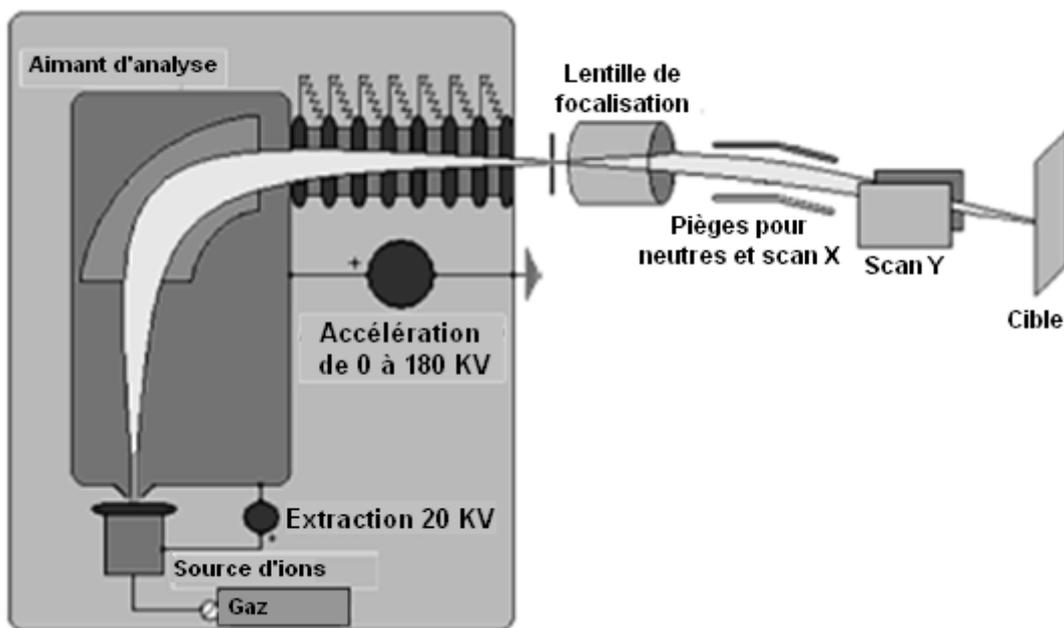


Figure 1 : Schéma simplifié d'implanteur ionique [12].

V. Interaction ion-matière

Les ions primaires énergétiques interagissent avec les atomes des matériaux cibles (noyaux et électrons) par des collisions où un transfert d'énergie a lieu. A chaque collision, on note un ralentissement des ions (pénétrant la cible) et également une déviation de la trajectoire. Ces collisions se manifestent par les processus d'arrêt des projectiles, leurs parcours et leurs distributions dans le solide. D'autre part, elles sont à l'origine de l'endommagement de la cible comme le déplacement des atomes du réseau, l'excitation électronique et la production des phonons [2,16,17], (Fig.2).

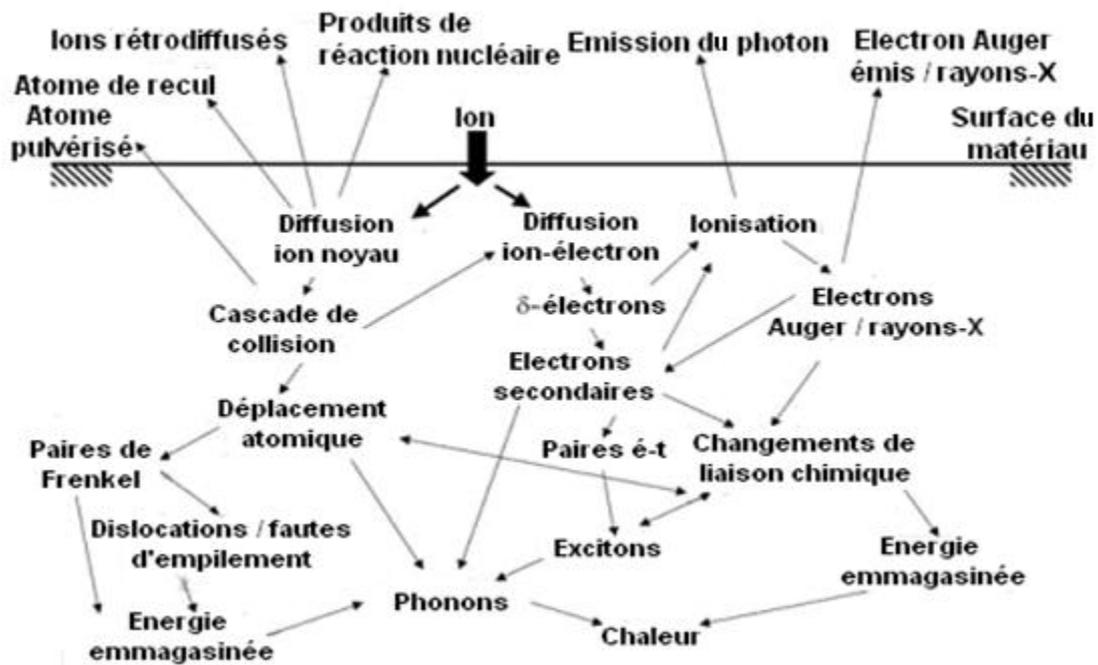


Figure 2 : Représentation schématique des différents phénomènes ayant lieu par interaction ion-matière [17].

V.1. Potentiel interatomique d'interaction

La connaissance du potentiel interatomique est un facteur crucial, par l'étude des interactions ion-solide, car il permet de déterminer le taux de la perte d'énergie des ions qui pénètrent le matériau. 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 l'espacement entre deux atomes voisins et a_0 rayon de Bohr ($a_0 = 0.53 \text{ \AA}$), trois cas peuvent être envisagés [14].

- $r \gg r_0$

A ces distances interatomiques relativement élevées, le potentiel interatomique est proche de zéro. Cependant, lorsque deux atomes s'approchent de sorte que les niveaux externes (la valence) se chevauchent, des interactions attractives apparaissent par le potentiel de Lennard-Jones [14]. Il s'exprime par [18] :

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (3)$$

D'où :

ϵ : Profondeur du puits du potentiel au minimum de $V(r)$.

σ : Séparation entre particules à $V(r) = 0$.

- $r \ll a_0$:

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 [14,19] :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \quad (4)$$

- $a_0 < r < r_0$:

A ces distances intermédiaires, une énergie potentielle positive se produit avec une force répulsive entre les deux atomes. Les contributions majeures à ce potentiel sont : la répulsion électrostatique entre les deux noyaux positivement chargés et l'énergie requise quand le processus de chevauchement des électrons augmente.

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 est alors un potentiel coulombien écranté qui s'écrit [14,19,20] :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \chi(r) \quad (5)$$

Où $\chi(r)$ est la fonction d'écran.

En réalité, la fonction d'écran tend vers zéro pour les distances interatomiques longues contrairement aux distances courtes où elle tend vers l'unité.

V.1.1. Types des fonctions d'écran

Le développement de la fonction d'écran exige un modèle atomique comme un point du départ.

V.1.1.1. Modèle classique

Les modèles statistiques sont les plus simples, ils permettent de calculer facilement la distribution de la charge des atomes en collision. 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 des informations sur la structure de la coquille électronique [14,20]. 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 [20].

Les expressions des fonctions d'écran utilisées pour le calcul de la distribution de charge (collision entre deux atomes) sont citées ci- dessous :

- **Fonction de Thomas-Fermi**

La fonction d'écran de Thomas-Fermi ne peut pas être résolue analytiquement, mais il existe des formes approximatives suggérées. La forme la plus récente et la plus connue est appelée l'asymptotique de Sommerfeld [14,20], elle est exprimée par :

$$\chi_{TF}(x) = \left(1 + \left(\frac{x}{\alpha}\right)^\lambda\right)^{-\frac{3}{\lambda}} \quad (6)$$

Où :

$$\lambda = 0.8034 \text{ et } \alpha = 12^{2/3}$$

$$x = r/a_{TF}$$

Tel que :

$$a_{TF}(a_{Lindhard}) = \frac{0.8853 a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (7)$$

$$\text{Pour un atome singulier : } a_{TF} = \frac{0.8853 a_0}{Z^{1/3}}$$

Toutefois, on note qu'il existe deux autres formes plus simples et plus approximatives proposées par Lindhard et al. [14], il s'agit de :

$$\chi_{TF}(r) = 1 - \frac{r}{(3 + r^2)^{1/2}} \quad (8)$$

$$\chi_{TF}(r) = 1 - \frac{1}{2r} \quad (9)$$

- **Fonction de Bohr**

La forme la plus simple est donnée par la relation ci-dessous [20] :

$$\chi_{Bohr}(x) = \exp(-x) \tag{10}$$

Tel que :

❖ $x = r/a_{Bohr}$ pour l'utilisation de l'atome de Bohr (modèle atomique de Bohr).

Où

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

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

a_0 : Rayon de Bohr pour un atome singulier.

❖ $x = r/a_{TF}$ pour l'utilisation de l'atome de Thomas-Fermi

- **Fonction de Molière**

Elle est valable pour les grandes valeurs de x , elle a la forme suivante [20] :

$$\chi_M(x) = [0.35 \exp(-0.3x)] + [5.5 \exp(-1.2x)] + [0.1 \exp(-6.0x)] \tag{11}$$

- **Fonction de Lenz-Jensen**

Elle est exprimée par la forme fonctionnelle suivante [20] :

$$\begin{aligned} \chi_{LJ}(x) = & [0.7466 \exp(-1.038x)] + [0.2433 \exp(-0.387x)] \\ & + [0.01018 \exp(-0.206x)] \end{aligned} \quad (12)$$

On note que les expressions des fonctions d'écran données précédemment sont valables pour deux atomes en collision. Dans le cas d'un atome singulier, il suffit de remplacer le rayon d'écran a_{TF} (pour deux atomes) par celui d'un seul atome.

V.1.1.2. Modèle Quantique

A l'encontre des fonctions précédentes, il y a un autre type des fonctions d'écran qui repose sur le modèle atomique quantique de Hartree-Fock. Il est adéquat pour les paires atomiques arbitraires. L'utilisation des distributions des charges basées sur ce modèle crée des changements importants dans les détails du potentiel d'interaction. 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 atomiques [14]. Le calcul du potentiel total d'interaction a permis de produire la fonction d'écran universelle, $\chi_u(x)$, qui s'écrit [14] :

$$\chi_u(x) = 0.1818 e^{-3.2x} + 0.5099 e^{-0.9432x} + 0.2802 e^{-0.4028x} + 0.02817 e^{-0.2016x} \quad (13)$$

Tel que :

$$x = r/a_u$$

a_u : Paramètre d'écran proposé par ZBL, sa formule est [14] :

$$a_u = \frac{0.8853a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \quad (14)$$

V.2. Mécanismes d'interaction ion-matière

V.2.1. Matériau amorphe

Pendant le ralentissement d'ion dans un matériau, l'ion projectile délivre son énergie aux atomes de l'échantillon ciblé selon deux voies de la perte d'énergie, nommées élastiques et inélastiques. Dans le cadre de la théorie LSS (Lindhard, Scharff et Schiott) qui s'intéresse aux interactions des ions avec les matériaux amorphes, on suppose l'absence de l'effet de la canalisation, de la diffusion et des interactions avec les défauts. La perte d'énergie par collisions élastiques est appelée le pouvoir d'arrêt nucléaire $(dE/dx)_n$. En plus, une autre perte provient des collisions inélastiques avec les électrons dans la cible, c'est le pouvoir d'arrêt électronique $(dE/dx)_e$ [2].

L'approximation que ces deux pertes d'énergie peuvent être traitées indépendamment où la perte totale d'énergie par unité de la longueur est donnée par la somme de ces deux contributions [21] :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{tot} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE}{dx}\right)_n \quad (15)$$

V.2.1.1. Pouvoir d'arrêt nucléaire

- Cas du potentiel de Thomas-Fermi (LSS)

Le pouvoir d'arrêt nucléaire peut être dérivé d'un potentiel coulombien écranté qui est originalement donné par Lindhard, Scharff et Schiott pour calculer le parcours des ions dans le solide (Fig.3). Le pouvoir d'arrêt nucléaire s'écrit [22] :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = -N S_n(E) = -N \int_{T_{min}}^{T_{max}} T \frac{d\sigma(E)}{dT} dT \quad (16)$$

Tel que :

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

N : Densité atomique volumique.

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.

La forme de $\sigma(E)$, dépend de la fonction du potentiel entre l'ion et l'atome cible. L'énergie minimale transférée pour déplacer un atome de son site dans le réseau est souvent de 20 à 30 eV.

Dans la plupart des cas, une énergie non dimensionnelle (énergie réduite), ϵ , et un parcours sans dimension, δ , remplaçant l'énergie dimensionnelle E et le parcours dimensionnel x sont utilisés [22].

$$\epsilon = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{a_L}{Z_1 Z_2 e^2} E \quad (17)$$

$$\delta = x N M_2 4\pi a_L^2 \frac{M_1}{(M_1 + M_2)^2} \quad (18)$$

a_L : Rayon d'écrantage de Lindhard pour l'interaction de Thomas-Fermi (a_{TF}) (éq.7).

Donc, l'énergie réduite s'écrit [22] :

$$\epsilon = \frac{32.53 M_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}}{(M_1 + M_2) Z_1 Z_2} E (KeV) \quad (19)$$

Où

M_1 : Masse du projectile.

M_2 : Masse d'atome cible.

$E(KeV)$: Energie du projectile en KeV.

La relation entre la section efficace d'arrêt dimensionnelle, $S_n(E)$, et non dimensionnelle, $S_n(\epsilon)$, est donnée par [22] :

$$S_n(E) = \frac{Z_1 Z_2 M_1}{M_1 + M_2} 4\pi e^2 a_L S_n(\epsilon) \quad (20)$$

Donc :

$$S_n(E)(eVcm^2) = 8.462 \cdot 10^{-15} \frac{Z_1 Z_2 M_1}{(M_1 + M_2) (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} S_n(\epsilon) \quad (21)$$

Donc, le pouvoir d'arrêt nucléaire est [22] :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n (eVnm^{-1}) = 509.6 \frac{\rho Z_1 Z_2 M_1}{M_2 (M_1 + M_2) (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} S_n(\epsilon) \quad (22)$$

Où :

ρ : Densité massique ($g\ cm^{-3}$)

Une expression analytique simple pour $S_n(\epsilon)$ basée sur un potentiel appelé krypton-carbone Kr-C a été proposée par Wilson et al. [22] :

$$S_n(\epsilon) = \frac{0.5 \ln(1 + \epsilon)}{\epsilon + 0.10718 \epsilon^{0.37544}} \quad (23)$$

Notons que la fonction d'écran appropriée au potentiel Kr-C s'exprime par [22] :

$$\chi_{Kr-C}(x) = 0.190945 e^{-0.131825 x} + 0.473674 e^{-0.63717 x} + 0.335381 e^{-1.919249 x} \quad (24)$$

Tel que :

$$x = r/a_L$$

- **Cas du potentiel universel**

Le calcul demeure celui utilisé dans le cadre de la théorie LSS mais l'interaction de Thomas-Fermi est remplacée par celle de ZBL. Les résultats obtenus en utilisant le potentiel universel ZBL sont plus précis et l'intervalle de l'énergie réduite, ϵ , est plus large que celui de Thomas-Fermi (utilisé dans la théorie LSS) [19]. La figure (3) représente la comparaison entre la section efficace d'arrêt nucléaire calculée par le modèle ZBL et celles calculées par des autres modèles classiques.

L'énergie réduite de ZBL est [4] :

$$\epsilon = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{a_u}{Z_1 Z_2 e^2} E \quad (25)$$

Ainsi,

$$\epsilon = \frac{32530 M_2}{(M_1 + M_2) Z_1 Z_2 (Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} E(eV) \quad (26)$$

La section efficace d'arrêt nucléaire universel de ZBL d'un ion d'énergie E_0 dans le système du laboratoire (où l'atome cible est en repos c'est-à-dire pas de recul) est donnée par [19,23] :

$$S_n(E_0)(eVcm^2/atome) = \frac{8.462 \cdot 10^{-15} Z_1 Z_2 M_1}{(M_1 + M_2) (Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} S_n(\epsilon) \quad (27)$$

Tel que :

$$S_n(\epsilon) = \frac{0.5 \ln(1+1.1383 \epsilon)}{\epsilon + 0.01321 \epsilon^{0.2116} + 0.19539 \epsilon^{0.5}}, \text{ Si } \epsilon \leq 30 \quad (28)$$

$$S_n(\epsilon) = \frac{\ln(\epsilon)}{2 \epsilon}, \text{ Si } \epsilon > 30 \quad (29)$$

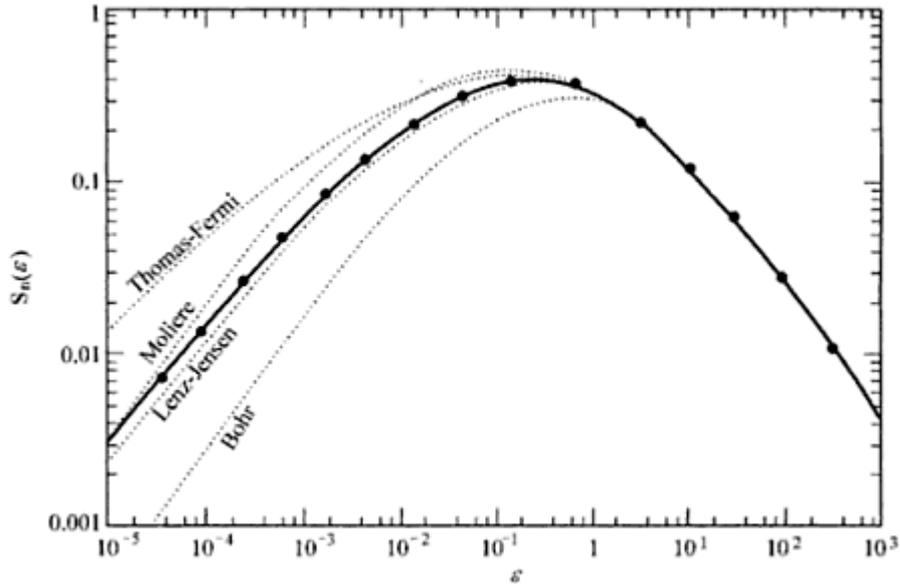


Figure 3: Comparaison entre la section efficace d'arrêt nucléaire calculée par le modèle ZBL (courbe continue) et celles calculées par autres modèles classiques [19].

La section efficace d'arrêt nucléaire est identique pour toutes les fonctions d'écrans si $\epsilon > 10$, mais il y a une différence remarquable pour les valeurs inférieures à 10.

V.2.1.2. Pouvoir d'arrêt électronique

Le calcul théorique du pouvoir d'arrêt électronique est plus compliqué que celui nucléaire. Son approche est conçue comme une collision binaire entre un ion et un électron de la cible solide [24].

Il existe deux régimes d'arrêt électronique [19] :

V.2.1.2.1. Régime basse énergie

Le pouvoir d'arrêt électronique peut être décrit par le modèle de Firsov ou celui de Lindhard-Scharff-Schiott (LSS). Dans cette gamme d'énergie, les électrons internes de la cible participent moins à l'arrêt électronique et la probabilité de la neutralisation augmente [19,22, 24].

- **Modèle de Firsov**

La description théorique du pouvoir d'arrêt électronique est basée sur un modèle géométrique d'échange des moments entre le projectile et l'atome pendant la pénétration dans le nuage électronique [24].

- **Modèle LSS**

Le milieu dans lequel se produit l'interaction est décrit comme un gaz des électrons libres ou un plasma [16,23]. La section efficace d'arrêt électronique s'écrit [19,22] :

$$S_e(E)_{LSS} = \frac{3.83 \cdot 10^{-15} Z_1^{7/6} Z_2}{(Z^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2} M_1^{1/2}} E(KeV)^{1/2} (eVcm^2) \quad (30)$$

Le pouvoir d'arrêt électronique s'écrit [22] :

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = 231.6 \rho(gcm^{-3}) \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{M_2 M_1^{1/2}} E(KeV)^{1/2} (eVnm^{-1}) \quad (31)$$

ρ : Densité massique de la cible (gcm^{-3}).

En notation réduite (forme indimensionnelle), on utilise la même conversion appliquée pour la perte nucléaire [22] :

$$S_e(E) = \frac{Z_1 Z_2 M_1}{M_1 + M_2} 4\pi e^2 a_L S_e(\epsilon) \quad (32)$$

Donc [19,22] :

$$S_e(\epsilon) = \frac{Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} \left(1 + \frac{M_2}{M_1}\right)^{3/2}}{12.6 (Z^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} M_2^{1/2}} \epsilon^{1/2} = K \epsilon^{1/2} \quad (33)$$

Avec K de l'ordre de 0.1 à 0.2.

V.2.1.2.2. Régime haute énergie

Le problème est traité par la théorie de Bethe-Bloch. La section efficace d'arrêt électronique s'exprime comme [19] :

$$S_e(\epsilon) = \frac{4\pi e^4 Z_1^2 Z_2}{m_e v^2} L(v) \quad (34)$$

Avec :

$$L(v) = \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right) - \ln\left(1 - \frac{v^2}{C^2}\right) - \frac{v^2}{C^2} - \frac{C}{Z_2} - \frac{\gamma}{2} \quad (35)$$

I : Energie moyenne d'excitation, pour la plupart des éléments $I \cong 10 Z_2 \text{ eV}$.

En absence des corrections concernant la vitesse relativiste et la structure électronique, on obtient [19]:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = NS_e(\epsilon) = \frac{4\pi e^4 Z_1^2 NZ_2}{m_e v^2} \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right) \quad (36)$$

Lorsque NZ_2 est en nm^{-1} et I est en eV , $\left(\frac{dE}{dx}\right)_e$ est donnée en eVnm^{-1} .

V.2.2. Matériau cristallin

V.2.2.1. 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 qui est défini comme l'angle maximal des projectiles incidents pour qu'ils demeurent dans la trajectoire du canal (Fig.4). Cet angle, typiquement moins de 5° dépend de l'énergie du projectile, de son espèce et du substrat. Une estimation raisonnable de l'angle critique auquel la canalisation se produit peut être obtenue théoriquement par l'approximation de Lindhard (1965) [14]. Selon ce dernier, un potentiel transversal écranté (généralement sous la forme de Thomas-Fermi) décrit la collision entre l'ion et les atomes constituant le canal. Ce modèle classique de la collision est uniquement valable pour : de petits angles de la diffusion, des collisions fortement corrélées, des collisions élastiques entre deux corps et la perfection du cristal. La perte d'énergie, principalement électronique, est plus basse ce qui donne un parcours plus long que ceux des ions non canalisés [2]. Les ions qui subissent un arrêt électronique élevé produisent un pic élevé de la canalisation [25].

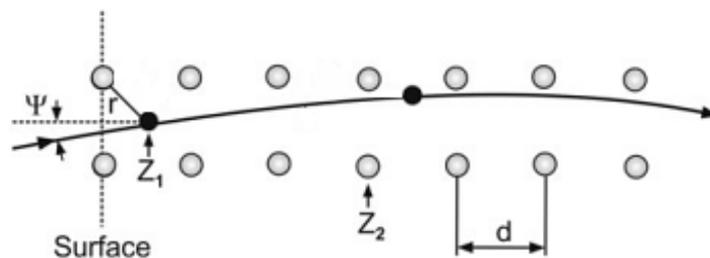


Figure 4 : Représentation schématique de la trajectoire d'un ion canalisé [2].

L'expression de l'angle critique axial qui est préférée pour des ions lourds aux énergies en kilo-électron volt s'écrit comme [14] :

$$\psi_c = \left(\psi_1 \frac{a_{TF}}{d} \right)^{1/2} \quad (37)$$

Où l'angle caractéristique, ψ_1 , est [14] :

$$\psi_1 = \left(\frac{2Z_1Z_2e^2}{E d} \right)^{1/2} \quad (38)$$

Tel que :

a_{TF} : Rayon d'écran de Thomas-Fermi.

E : Energie des particules incidentes.

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

La canalisation planaire signifie que les ions énergétiques sont conduits par des plans atomiques du réseau, l'expression de l'angle critique dans ce cas est [2]:

$$\psi_p = \left(\frac{\pi Z_1Z_2e^2Nd_pCa_{TF}}{E} \right)^{1/2} \quad (39)$$

Tel que :

N : Densité atomique de la cible.

d_p : Distance interplanaire.

C : Constante de Lindhard qui égale approximativement $3^{0.5}$.

V.2.2.2. Distribution des ions canalisés

La distribution des ions canalisés dépend de la préparation de la surface, la température du substrat, l'alignement du faisceau et du désordre produit dès le processus de l'implantation lui-même. Les ions canalisés pénètrent plus profondément dans la cible que ceux non canalisés formant une distribution gaussienne caractérisée par le parcours projeté (R_p) et la déviation standard (ΔR_p) (Fig.5) [14].

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

$$N(x) = \exp(-x/\lambda_c) \quad (40)$$

Tel que :

λ_c : Parcours maximal des ions canalisés.

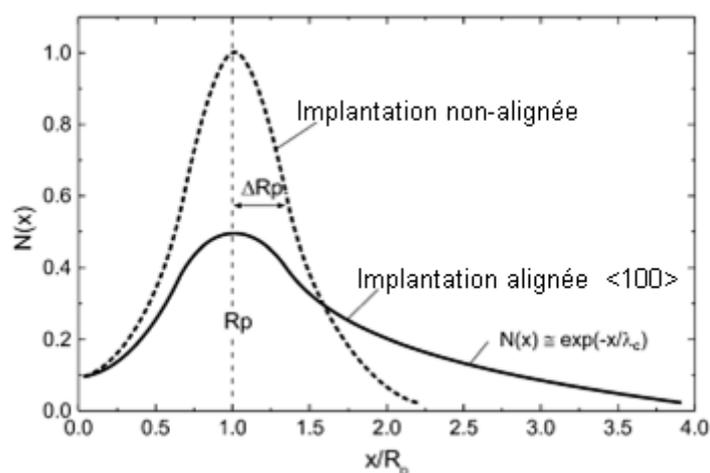


Figure 5 : Distribution des ions d'As (100 KeV) implantés dans Si. La courbe continue traduit l'implantation canalisée le long de l'axe $\langle 100 \rangle$ et la courbe pointillée pour l'implantation non alignée [2].

V.2.2.3. Réduction de la canalisation

La procédure la plus connue pour minimiser la canalisation est de tilter (désorienter) la surface du cristal, par rapport à la direction du faisceau ionique incident, généralement par 7° de sorte que le réseau semble dense à cette orientation. Néanmoins, les atomes restent alignés par un groupe de plans hautement symétriques ce qui laisse produire une canalisation planaire comme le cas de silicium par exemple. Donc, les cristaux doivent aussi être orientés à une direction azimutale (rotation) appropriée pour obturer les canaux planaires [2].

VI. Distribution des ions implantés

VI.1. Introduction

Une des plus importantes considérations dans la description des interactions ion-matière est la distribution des ions implantés en profondeur. Des travaux expérimentaux et théoriques ont été consacrés pour maîtriser les processus de la perte d'énergie qui gouvernent cette distribution. Par exemple, pour des ions mono-énergétiques à des doses modérées dans un substrat amorphe, on obtient approximativement une distribution typique de forme gaussienne. Celle-ci est caractérisée par le parcours projeté (R_p) la déviation standard (ΔR_p) et la déviation latérale (ΔR) [26]. Ces paramètres peuvent être prévus (calculés) pour tout ion et substrat via la théorie LSS [25]. Cependant, les cibles cristallines ne conduisent pas à des profils gaussiens surtout si le faisceau ionique est incident le long d'un axe cristallographique majeur (canalisation). Des déviations considérables se produisent par rapport à la distribution gaussienne et une forme asymétrique décrite par la distribution de Pearson IV est obtenue [27].

VI.2. Distribution gaussienne

Sur la figure ci-dessous, on représente un profil de concentration $N(x)$ de forme gaussienne. Les paramètres R_p et ΔR_p sont également représentés. D'après la littérature [28], ces deux quantités sont dépendantes des valeurs des masses M_1 et M_2 du projectile et de la cible respectivement (Fig.7).

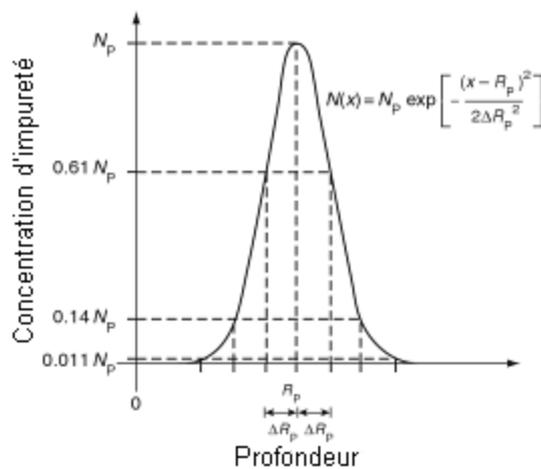


Figure 6 : Représentation de la distribution gaussienne symétrique d'un profil d'ions implantés [28].

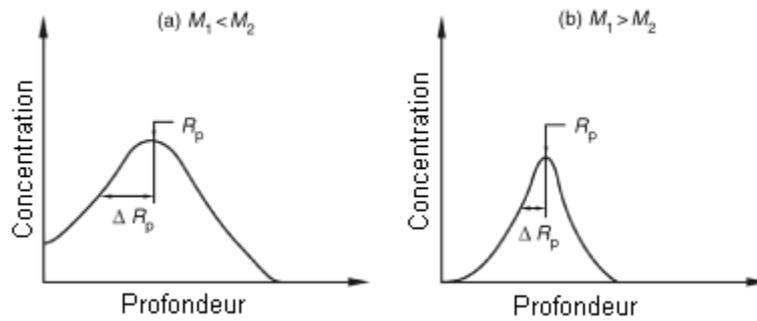


Figure 7 : Distribution en profondeur des ions implantés dans une cible amorphe pour $M_1 < M_2$ et $M_1 > M_2$ [28].

VI.2.1. Moments de la distribution gaussienne

Comme mentionné précédemment, la distribution gaussienne possède une forme symétrique qui est caractérisée par les moments suivants:

- **Parcours des ions implantés**

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 $(S_n(E), S_e(E))$ [29]:

$$R = \frac{1}{N} \int_0^{E_0} \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)} \quad (41)$$

Où N est la densité de la cible solide.

- **Parcours projeté**

La projection du parcours des ions implantés sur la direction de l'orientation du faisceau ionique (Fig.8) est appelée le parcours projeté (R_p). Sa formule générale s'écrit [30,31] :

$$R_p = \frac{1}{\phi} \int_0^+ x N(x) dx \quad (42)$$

Où :

$N(x)$: Concentration des ions implantés au point x .

ϕ : Dose des ions implantés (également appelée le facteur de la normalisation). Elle s'exprime par [14,30] :

$$\phi = \int_-^+ N(x) dx \quad (43)$$

Une expression analytique approximative du paramètre R_p a été proposée par Lindhard et al. (1963) [14,19] :

$$R_p \approx \frac{R}{1 + (M_2/3M_1)} \quad (44)$$

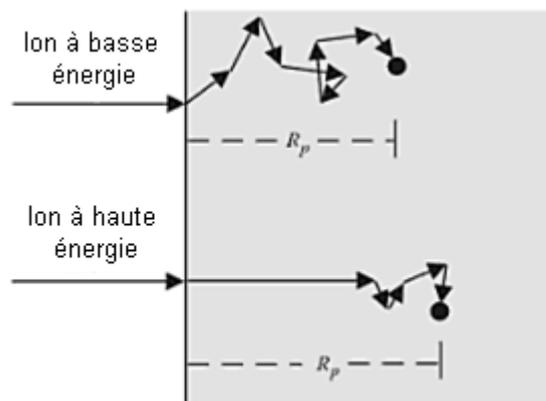


Figure 8 : Illustration du parcours général et du parcours projeté R_p des ions implantés dans une cible [6].

- **Déviatiun standard (stragglin)**

La formule générale de l'écart au parcours projeté est donnée par [30,31] :

$$\Delta R_p^2 = \frac{1}{\emptyset} \int_0^+ (x - R_p) N(x) dx \quad (45)$$

L'écart projeté des ions peut également être approximé en matière du parcours projeté et les masses M_1 et M_2 caractérisant les ions implantés et les atomes de la cible respectivement. D'après Lindhard et Scharff [2], la déviatiun standard s'exprime par :

$$\Delta R_p \cong \frac{2R_p}{3} \frac{\sqrt{M_1 M_2}}{M_1 + M_2} \quad (46)$$

- **Déviatiun latérale ΔR**

C'est l'écart du parcours projeté sur le plan perpendiculaire à la direction d'incidence, il s'écrit [31] :

$$\Delta R^2 = \frac{1}{\emptyset} \int_0^+ y^2 N(y) dy \quad (47)$$

Où :

$N(y)$: Concentration des ions implantés sur la direction y perpendiculaire à celle x .

VI.2.2. Profil de la concentration

La distribution des ions implantés dans milieu considéré amorphe s'écrit comme [32] :

$$N(x) = N_{max} \exp \left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2} \right] \quad (48)$$

Il est également possible de donner une distribution selon les deux directions perpendiculaires x et y via l'expression suivante [25] :

$$N(x, y) = N_{max} \exp \left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2} \right] \exp \left[-\frac{y^2}{2\Delta R^2} \right] \quad (49)$$

Où le maximum du profil de la concentration (pour $x = R_p$) est donné par [2,14] :

$$N_{max} = N(R_p) = \frac{\emptyset}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p} = \frac{0.4 \emptyset}{\Delta R_p} \quad (50)$$

VI.3. Distribution de Pearson IV

VI.3.1. Moments de la distribution de Pearson IV

Le parcours projeté (R_p) et la déviation standard (ΔR_p) demeurent eux-mêmes mentionnés précédemment, la distribution de Pearson IV est aussi caractérisée par [27] :

- **Obliquité γ (Skewness)**

Elle caractérise l'asymétrie de la distribution (c'est-à-dire le positionnement du sommet de la courbe par rapport à R_p), elle estimée par la relation [27,31] :

$$\gamma = \frac{1}{\Delta R_p^3} \int_0^+ (x - R_p)^3 N(x) dx \quad (51)$$

- **Ecrasement du pic β (kurtosis)**

Son expression est donnée par [27,31] :

$$\beta = \frac{1}{\Delta R_p^4} \int_0^+ (x - R_p)^4 N(x) dx \quad (52)$$

On note que pour $\gamma \approx 0$ et $\beta \approx 3$, la forme du profil de la concentration est gaussienne.

VI.3.2. Profil de la concentration

La concentration d'un dopant dans la cible est donnée par [27] :

$$N(x) = C \left[1 + \left(\frac{x - \lambda}{a} \right)^2 \right]^{-m} \exp \left[-v \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{x - \lambda}{a} \right) \right] \quad (53)$$

Où :

C : Constante de la normalisation (dose implantée) obtenue par la formule (43).

En pratique, les moments, R_p , ΔR_p^2 , γ et β sont connus et les paramètres recherchés sont [27] :

$$r = 2(m - 1) = \frac{6(\beta - \gamma^2 - 1)}{2\beta - 3\gamma^2 - 6} \quad (54)$$

$$v = -\frac{r(r - 2)\gamma}{\sqrt{16(r - 1) - \gamma^2(r - 2)^2}} \quad (55)$$

$$a = \frac{\Delta R_p}{4} \sqrt{16(r - 1) - \gamma^2(r - 2)^2} \quad (56)$$

$$\lambda = R_p - \frac{1}{4}(r - 2)\gamma \Delta R_p \quad (57)$$

VII. Endommagements causés par l'implantation ionique

VII.1. Défauts et cascade des collisions

Comme l'ion incident est ralenti dès sa pénétration dans la cible, il fait des séries de collisions avec les atomes hôtes. Si ces atomes du réseau reçoivent une énergie supérieure à l'énergie du seuil du déplacement (par collision nucléaire) et qui est à l'ordre de 20 à 50 eV ils seront reculés de leurs sites. Des lacunes seront créées pour former des défauts simples (appelés les paires de Frenkel) ou des défauts plus compliqués. 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. Lorsque le transfert d'énergie est relativement grand, ces atomes déplacés (défauts) peuvent causer à leur tour des déplacements d'autres atomes pour former une cascade des reculs. Pour des énergies de projectiles suffisamment élevées ($E_0 > \text{quelques } KeV$), la distance entre les atomes du premier recul PKA (primry knock-on atoms) est appréciable et chacun d'eux peut être considéré par entamer une sou-cascade indépendante. A chaque sou-cascade, certains atomes de la cible reçoivent une énergie suffisante pour qu'ils soient éjectés de leurs sites, dans réseau, en formant des reculs secondaires. Ceux-ci continuent le même processus aussi longtemps que l'énergie est encore suffisante. Une fois l'énergie ne permet pas de faire les sou-cascades, elle est dissipée comme une chaleur au réseau [2,32].

A la lumière de cette notion de cascade de collisions, les programmes de simulation de Monté Carlo (collisions binaires indépendantes) ont été élaborés pour étudier les déplacements atomiques. Quand l'énergie devient inférieure à quelques centaines d'électron-volts, l'approximation de collisions binaires ne s'applique plus. Les déplacements atomiques sont alors produits par des collisions de remplacement auxquelles un atome remplace de ses voisins au lieu de reculer loin de son site initial. C'est la conception de la simulation de la dynamique moléculaire. En comparaison avec la distribution des ions implantés, le maximum de la distribution des défauts en profondeur est toujours décalé vers la surface [2,32].

Sur la figure ci-dessous, on voit que les ions lourds pénètrent moins que les ions légers mais ils créent plus de défauts locaux [33].

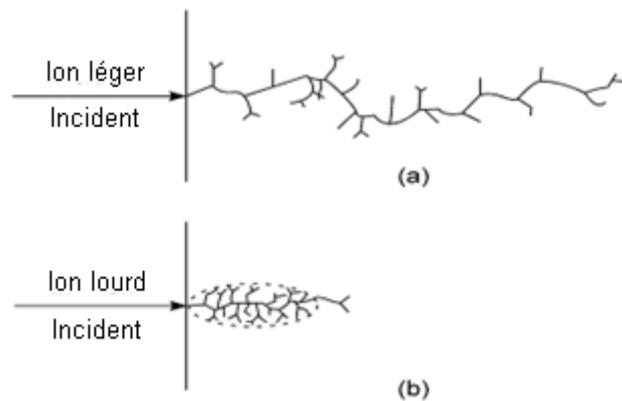


Figure 9 : Schématisation des endommagements causés par ion léger (a) et ion lourd (b) avec la même énergie [33].

VII.2. Nombre des défauts ponctuels

Le nombre moyen d'atomes déplacés dans une cascade produite par un atome du premier recul est dit la fonction des défauts. Celle-ci a été proposée par Kinchin et Pease (1955). La cascade est supposée être créée par des séries de collisions binaires élastiques (i.e. l'arrêt électronique et n'importe quel effet de la structure du cristal sont négligés). Un atome du réseau recevant une énergie moins que celle du seuil du déplacement E_d n'est pas déplacé ; ceux recevant une énergie entre E_d et $2E_d$ sont déplacés mais ils ne peuvent pas produire des déplacements supplémentaires.

La prise en compte de l'arrêt électronique et des interactions atomiques permet de donner la fonction modifiée de défauts de Kinchin-Pease qui s'écrit comme [1,19] :

$$N_d(E) = \begin{cases} 0 & 0 < E < E_d \\ 1 & E_d \leq E < \frac{2E_d}{\xi} \\ \frac{\xi v(E)}{2E_d} & \frac{2E_d}{\xi} \leq E < \end{cases} \quad (58)$$

Tel que :

$\xi \cong 0.8$: Facteur d'interaction atomique, il dépend faiblement de la forme du potentiel écranté.

$v(E)$: Energie totale déposée, elle est de 20 à 30 % moins de la section efficace d'arrêt nucléaire (à cause de la perte électronique).

VII.3. Dose critique d'amorphisation

Elle est approximativement estimée par la formule suivante qui suppose que tous les atomes de la cible sont déplacés [2]:

$$\Phi_a = \frac{2 E_d N_t}{(dE/dx)_n} \quad (59)$$

Tel que :

N_t : Densité atomique de la cible.

E_d : Energie du seuil du déplacement.

$(dE/dx)_n$: Perte d'énergie par unité de la longueur à une collision nucléaire.

Toutefois, on note une sous-estimation de cette dose à cause des effets d'annihilation (recuit) pendant l'implantation comme par exemple la diffusion des lacunes à l'extérieur et les collisions avec les atomes déjà déplacés [2].

Le tableau suivant donne des résultats calculés des doses d'amorphisation pour des ions implantés dans le silicium à l'ambiante.

Ion	Masse molaire atomique (g.mol⁻¹)	Dose critique d'amorphisation (ions cm⁻²)
B	11	8.10^{16}
Al	27	$\geq 5.10^{14}$
P	31	6.10^{14}
Ga	70	2.10^{14}
As	75	2.10^{14}
Sb	122	1.10^{14}
In	204	1.10^{14}
Bi	209	5.10^{13}

Tableau 1 : Dose critique d'amorphisation des ions communs dans le silicium à la température ambiante [2].

VIII. Recuit thermique

L'objectif principal du recuit thermique, d'un matériau endommagé par implantation ionique, est l'activation électrique des dopants et la guérison des défauts.

Le recuit thermique conventionnel est un traitement qui a été initialement appliqué autour de 450 °C. Comme il a été insuffisant pour permettre l'activation électrique des dopants et la guérison complètes des défauts, une augmentation de la température de 650 à 1200 °C a été appliquée [34].

La recroissance des défauts se fait par épitaxie en phase solide (EPS) où une couche amorphe se recristallise épitaxialement, l'interface amorphe/cristal bouge vers la surface, sur un substrat monocristallin à une température inférieure du point de la fusion. Dans le cas du silicium, la croissance EPS devient perceptible à partir de 500 °C . La vitesse de la croissance EPS diffère significativement selon l'orientation du substrat, sa température (Fig.10) et les impuretés présentes dans l'échantillon [35].

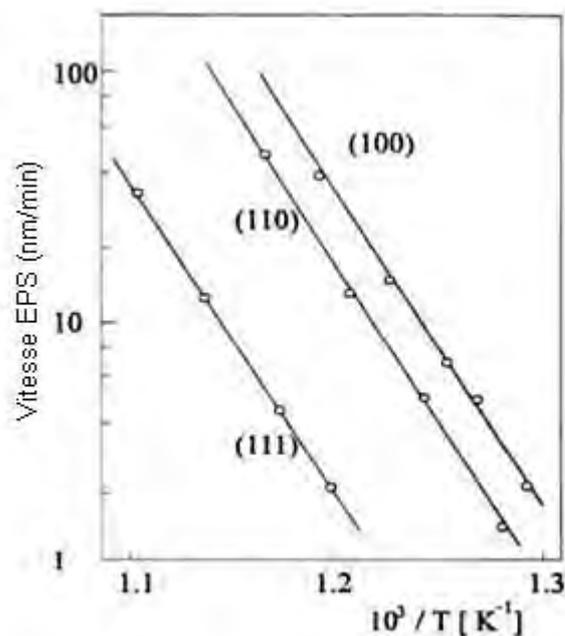


Figure 10 : Dépendance des vitesses d'EPS avec la température pour les orientations (100), (110) et (111) d'un substrat de silicium [35].

IX. Conclusion partielle

L'implantation ionique est un processus précis et rapide, il permet d'introduire des ions désirés dans une cible solide. La description de la collision (élastique ou inélastique) du projectile avec l'atome cible repose sur le potentiel d'interaction. Le déplacement des atomes du matériau cible cause des endommagements dans ce matériau qui sera traité thermiquement pour la guérison des défauts et l'activation électrique des dopants.

Chapitre II

Notions générales sur les techniques de caractérisation RBS et micro-dureté

I. Spectrométrie de Rétrodiffusion Rutherford (RBS)

I.1. Introduction

C'est une technique d'analyse surfacique des matériaux [36]. Cette méthode repose sur la détection des particules chargées positivement et qui sont rétrodiffusées élastiquement par les noyaux constitutifs du matériau à analyser. Elle permet, en principe, de séparer les éléments en fonction de leurs masses et de déterminer leurs distributions [37].

I.2. Principe

L'échantillon est bombardé par un faisceau ionique d'hydrogène ou d'hélium. Par la suite, une rétrodiffusion des ions, pénétrant la cible, a lieu à cause des collisions élastiques avec les atomes du spécimen. La mesure d'énergie des particules rétrodiffusées et la répartition de ces dernières permet d'obtenir un spectre RBS [37].

I.3. Avantages et inconvénients

Cette technique de caractérisation possède des avantages et des inconvénients [38] :

I.3.1. Avantages

- Non destructive et rapide.
- Utile pour étudier la cristallinité des matériaux.
- Mesure de l'épaisseur des couches minces.
- Connaissance de la stœchiométrie, la nature, la quantité, la distribution en profondeur des éléments dans un échantillon et les profils de la diffusion.
- Etude du contact matériau-matériau.
- Analyse des échantillons soit conducteurs ou isolants.
- Possibilité d'analyser des plaquettes complète jusqu'à 300 *mm*.

I.3.2. Inconvénients

- Sensitivité non sévère à des éléments légers comme B, C, N et O dans la présence des éléments lourds.
- Difficulté de distinguer entre un signal d'une masse légère à la surface et celui d'une masse lourde située en profondeur.
- Aire analysée réduite (2 mm au diamètre).

I.4. Instrumentation

Un système RBS se compose d'une chambre évacuée (source des ions) contenant un générateur des ions d'hélium ou de protons, un accélérateur, un analyseur magnétique, un collimateur, une chambre d'échantillon, un détecteur et un système de l'amplification et de la sauvegarde (Fig.11).

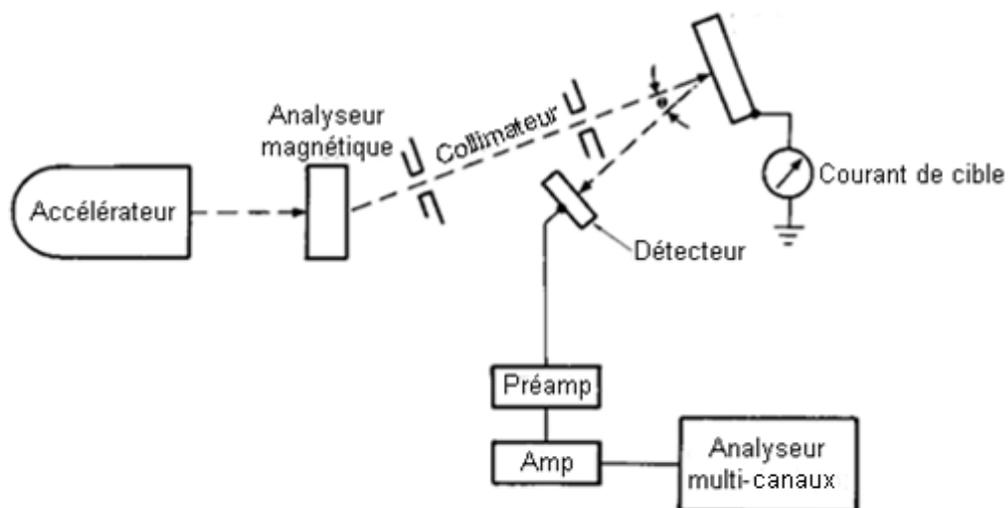


Figure 11 : Schéma du dispositif expérimental RBS [39].

I.5. Concepts principaux de RBS

I.5.1. Facteur cinématique

Lorsqu'une particule de masse M_1 et d'énergie cinétique $E_0 = \frac{1}{2} M_1 v_0^2$ fait des collisions élastiques avec les atomes stationnaires de la cible M_2 , un transfert d'énergie vers ces atomes a lieu (Fig.12). La collision entre deux particules isolées reste élastique si l'énergie du projectile est très grande en comparaison avec l'énergie de liaison des atomes de la cible [36]. L'application des principes de la conservation d'énergie et d'impulsion permet de calculer le facteur cinématique dont la masse d'atome cible est déterminée.

On écrit [40]:

$$\frac{1}{2} M_1 v_0^2 = \frac{1}{2} M_1 v_1^2 + \frac{1}{2} M_2 v_2^2 \quad (60)$$

$$M_1 v_0 = M_1 v_1 \cos \theta + M_2 v_2 \cos \emptyset \quad (61)$$

$$0 = M_1 v_1 \sin \theta - M_2 v_2 \sin \emptyset \quad (62)$$

Où :

v_0 : Vitesse initiale du projectile.

v_1 : Vitesse du projectile après la collision élastique.

v_2 : Vitesse d'atome cible après la collision élastique.

θ : Angle de la rétrodiffusion du projectile.

\emptyset : Angle du recul d'atome cible.

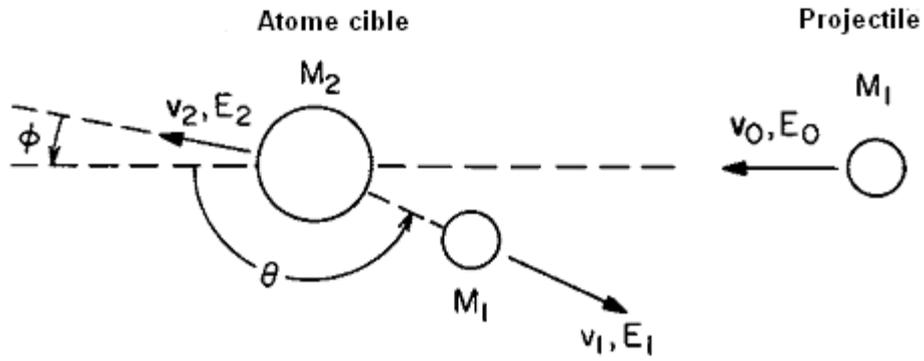


Figure 12 : Schéma représentant une collision élastique entre un projectile de masse M_1 et un atome cible de masse M_2 au repos [39].

En absence de recul, le rapport entre les vitesses de la particule est [40] :

$$\frac{v_1}{v_0} = \left[\frac{\pm(M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2} + M_1 \cos \theta}{M_1 + M_2} \right]^2 \quad (63)$$

On prend le signe (+) pour $M_1 < M_2$.

D'où

$$\frac{E_1}{E_0} = \left[\frac{(M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2} + M_1 \cos \theta}{M_1 + M_2} \right]^2 \quad (64)$$

Ce rapport est appelé le facteur cinématique K.

$$K = \left[\frac{(M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2} + M_1 \cos \theta}{M_1 + M_2} \right]^2 \quad (65)$$

I.5.2. Section efficace de la rétrodiffusion

La probabilité de la rétrodiffusion d'un ion pénétrant un spécimen est en général décrite par la section efficace de la rétrodiffusion d'un atome cible. La notion de la section efficace différentielle de la rétrodiffusion est donnée par [41] :

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} d\Omega = \frac{n_{sc,d\Omega}}{(Nt) n_{inc}} \quad (66)$$

Où :

$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} d\Omega$: Section efficace différentielle de la rétrodiffusion.

$n_{sc,d\Omega}$: Nombre des particules rétrodiffusées dans un angle solide différentiel $d\Omega$ par unité du temps

n_{inc} : Nombre des particules incidentes sur la cible par unité du temps.

(Nt) : Densité de la cible en cm^{-2} .

La section efficace différentielle de rétrodiffusion Rutherford peut être calculée par le modèle classique d'une force unique négligeant ainsi l'effet d'écran (entre deux charges positives). La force de répulsion F est donnée par la relation [36] :

$$F = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r^2} \quad (67)$$

La section efficace de la rétrodiffusion dérivée par Rutherford est [40] :

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4 E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \quad (68)$$

Où :

E : Energie du projectile juste avant la rétrodiffusion.

Z_1 : Numéro atomique du projectile.

Z_2 : Numéro atomique de l'atome cible.

θ : Angle de la rétrodiffusion.

La section efficace totale de la rétrodiffusion est la somme des sections efficaces différentielles sur tous les angles différentielles de la rétrodiffusion $d\Omega$, on écrit [40] :

$$\sigma = \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) d\Omega \quad (69)$$

La section efficace totale de rétrodiffusion Rutherford est [36]:

$$\sigma_{tot}(\theta) = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\theta} \frac{\left[\cos\theta + \left(1 - \frac{M_1^2}{M_2^2} \sin^2\theta\right)^{1/2}\right]^2}{\left[1 - \frac{M_1^2}{M_2^2} \sin^2\theta\right]^{1/2}} \quad (70)$$

Tel que [42] :

$$\left(\frac{e^2}{E}\right)^2 = 2.073 \cdot 10^{-26} \text{ cm}^2 = 0.02073 \text{ barns pour } E = 1 \text{ MeV}.$$

I.5.3. Perte d'énergie

Quand les projectiles légers pénètrent un matériau solide, ils perdent leur énergie à travers des interactions électroniques qui provoquent des excitations et des ionisations des atomes de la cible, le rayon du noyau atomique est très petit par rapport aux dimensions atomiques ce qui aboutit à la négligence des interactions nucléaires [40].

Nous supposons que la perte d'énergie $\frac{dE}{dx}$, par unité de la profondeur, causée par chaque atome est constante le long de la distance parcourue.

L'énergie totale perdue pendant le parcours à l'entrée s'écrit [40] :

$$\Delta E_{in} = \int_0^{t/\cos\theta_1} \frac{dE}{dx} dx \cong \frac{dE}{dx} |_{in} \frac{t}{\cos\theta_1} \quad (71)$$

L'énergie totale perdue pendant le parcours à la sortie s'écrit [40] :

$$\Delta E_{out} = \int_0^{t/\cos\theta_2} \frac{dE}{dx} dx \cong \frac{dE}{dx} |_{out} \frac{t}{\cos\theta_2} \quad (72)$$

La différence d'énergie d'un signal approprié à un film de profondeur t s'écrit [40] :

$$\Delta E = KE_0 - E_1(t) = t \left[\frac{K}{\cos\theta_1} \frac{dE}{dx} |_{in} + \frac{1}{\cos\theta_2} \frac{dE}{dx} |_{out} \right] \quad (73)$$

$$\text{Si } \varepsilon = \frac{1}{N} \frac{dE}{dx}$$

On écrit :

$$\Delta E = Nt \left[\frac{K}{\cos\theta_1} \varepsilon(E) + \frac{1}{\cos\theta_2} \varepsilon(kE) \right] = Nt [\varepsilon] \quad (74)$$

D'où :

N : Densité atomique de la cible.

t : Epaisseur qui correspond la différence d'énergie ΔE .

θ_1 : Angle d'incidence.

θ_2 : Angle de sortie.

ε : Section efficace d'arrêt.

$[\varepsilon]$: Facteur de la section efficace d'arrêt.

I.5.3.1. Différence d'énergie en approximation de la surface

Pour les couches de très faible épaisseur, la variation relative de l'énergie le long du trajet parcourue est très faible. La section efficace d'arrêt et la section efficace de la rétrodiffusion sont prises à E_0 et on écrit [39] :

$$\Delta E = Nt \left[\frac{K}{\cos \theta_1} \varepsilon(E_0) + \frac{1}{\cos \theta_2} \varepsilon(kE_0) \right] = Nt[\varepsilon_0] \quad (75)$$

Un fit polynomial des sections efficace d'arrêt semi-empirique $\varepsilon(E_0)$ et $\varepsilon(kE_0)$ pour l'hélium H_e est évalué par les deux relations suivantes [39] :

$$\varepsilon(E_0) = A_0 + A_1 E_0 + A_2 E_0^2 + A_3 E_0^3 + A_4 E_0^4 + A_5 E_0^5 \quad (76)$$

$$\varepsilon(kE_0) = A_0 + A_1 (kE_0) + A_2 (kE_0)^2 + A_3 (kE_0)^3 + A_4 (kE_0)^4 + A_5 (kE_0)^5 \quad (77)$$

Les valeurs des coefficients A_0, A_1, A_2, A_3, A_4 et A_5 sont tabulées par J.F. Ziegler et W.K. Chu. Ces coefficients sont donnés en $10^{-15} \text{ eV cm}^2/\text{atome}$ tandis que l'énergie E_0 est prise en MeV .

Pour le silicium on a :

A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5
57.97	56.59	-77.66	36.41	-7.624	0.5995

Tableau 2 : Valeurs des coefficients $A_0 - A_5$ en $10^{-15} \text{ eV cm}^2/\text{atome}$ utilisées pour le calcul de la section efficace d'arrêt pour le silicium [39].

I.5.3.2. Résolution de la profondeur

La relation de la résolution de la profondeur δt et celle d'énergie δE est extraite de l'équation (73), elle s'écrit comme [40] :

$$\delta t = \frac{\delta E}{\frac{K}{\cos \theta_1} \frac{dE}{dx}|_{in} + \frac{1}{\cos \theta_2} \frac{dE}{dx}|_{out}} \quad (78)$$

Deux facteurs interviennent à la résolution de la profondeur : la résolution d'énergie δE et l'angle de la rétrodiffusion θ .

I.6. Hauteur du spectre d'énergie

L'échantillon est divisé en sous couches d'épaisseurs Δx_i de sorte que la largeur d'énergie (ξ) reste constante (largeur du canal). La hauteur du spectre pour une sous couche d'épaisseur Δx_i est donnée par [39] :

$$H_i = \sigma(E_i) \Omega Q N \Delta x_i / \cos \theta_1 \quad (79)$$

D'où :

$\sigma(E_i)$: Section efficace de la rétrodiffusion dans la sous couche i .

Ω : Angle solide du détecteur.

Q : Nombre des particules incidentes.

N : Densité de la cible.

Pour l'approximation d'énergie en surface, la hauteur s'écrit [39] :

$$H_0 = \sigma(E_0) \Omega Q \frac{\xi}{[\varepsilon_0] \cos \theta_1} \quad (80)$$

I.7. Profil de la concentration

L'expression de la concentration en profondeur d'une impureté Imp dans une matrice M est inspirée de l'expression (80), elle s'écrit [39] :

$$N_{Imp}(x) = N_M \frac{H_{Imp}(E_{1,n}^{out}) \sigma_M(E_0) [\varepsilon(E_n^{in})]_{Imp}^M \varepsilon_M(E_{1,n}^{out})}{H_M(E_0) \sigma_{Imp}(E_n^{in}) [\varepsilon(E_0)]_M^M \varepsilon_M(K_{Imp} E_n^{in})} \quad (81)$$

Tel que la sous couche n se trouve au point x .

Pour le calcul des facteurs qui se trouvent dans l'expression (81), on se sert des programmes pour simuler le profil de la concentration.

I.8. Détermination des paramètres d'implantation ionique par RBS

I.8.1. Introduction

La première application de la spectrométrie de rétrodiffusion Rutherford fut l'investigation des processus de l'implantation ionique [39].

Dans l'exemple, ci-dessous, on représente un spectre RBS d'une cible de silicium implantée à l'arsenic élucide les résultats qui peuvent être retirés du signal pour récolter des informations sur l'échantillon dopé [40], pour élucider les résultats qui peuvent être obtenus de ce signal.

Les expressions sont prises en approximation de l'énergie en surface et les valeurs de la section efficace d'arrêt et la section efficace de la rétrodiffusion sont tabulés.

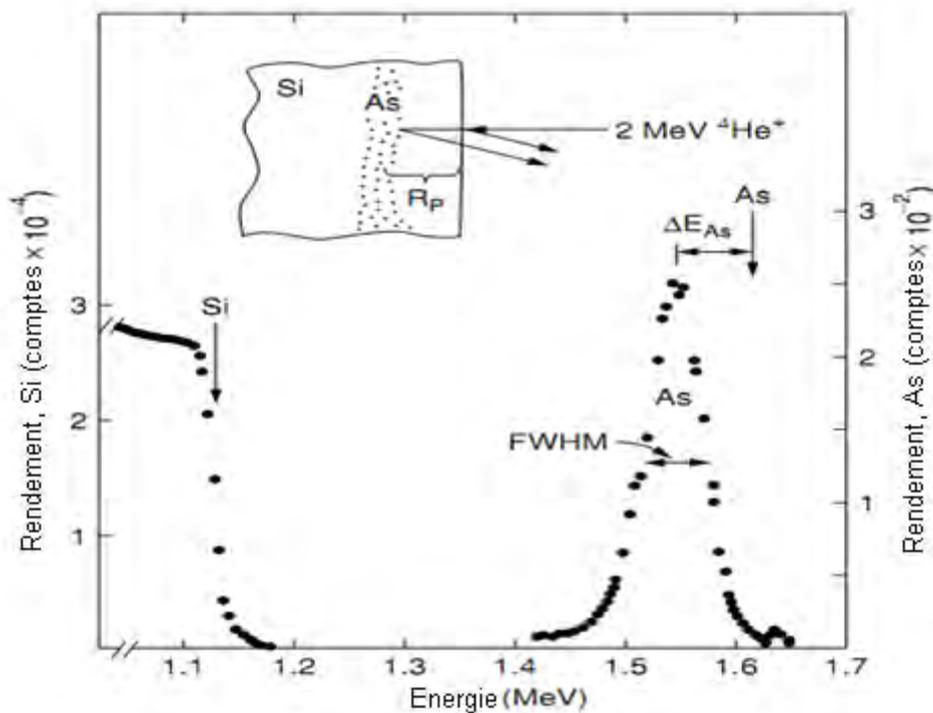


Figure 13 : Spectre d'énergie des ions de He (2 MeV) rétrodiffusés d'un cristal de silicium dopé par l'arsenic à une dose de $1.2 \cdot 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ et à une énergie de 250 KeV [40].

I.8.2. Dose des dopants implantés

La dose d'implantation des dopants d'arsenic distribués en surface de la cible de silicium est calculée par l'expression suivante [39] :

$$(N_{As} \Delta x) = \frac{A_{As} \sigma_{Si}(E_0) \xi}{H_{Si} \sigma_{As}(E_0) [\epsilon_0]_{Si}} \quad (82)$$

I.8.3. Concentration maximale

La concentration maximale, en cm^{-3} , des dopants est estimée de la hauteur des deux signaux de l'arsenic et du silicium. Son expression est donnée par [39].

$$\frac{N_{As}}{N_{Si}} = \frac{H_{As} \sigma_{Si}(E_0) [\epsilon_0]_{As}^{Si}}{H_{Si} \sigma_{As}(E_0) [\epsilon_0]_{Si}} \quad (83)$$

I.8.4. Parcours projeté R_p

Si la distribution des ions implantés est gaussienne, on utilise le parcours projeté et la déviation standard pour décrire le profil de la profondeur, le parcours projeté s'écrit [39] :

$$R_p = \frac{\Delta E}{N_{Si} [\epsilon_0]_{As}^{Si}} \quad (84)$$

I.8.5. Ecart du parcours projeté ΔR_p

C'est la déviation standard de la distribution en profondeur, elle est reliée à la largeur complète à mi-hauteur ($FWHM$) par l'expression [39] :

$$\Delta R_p = \frac{FWHM_{corrig}}{2.355 N_{Si}[\varepsilon_0]_{As}^{Si}} \quad (85)$$

On peut écrire [39] :

$$FWHM_{corrig} = \sqrt{FWHM_{As}^2 - FWHM_{Sys}^2 - FWHM_{Z_1}^2} \quad (86)$$

Tel que :

$FWHM_{As}$: Largeur complète à mi hauteur mesurée du signal de As.

$FWHM_{Sys}$: $FWHM$ de la résolution du système, il s'écrit comme [39] :

$$FWHM_{Sys} = |E(0.88 H_{Si,0}) - E(0.12 H_{Si,0})| \quad (87)$$

$FWHM_{Z_1}$: $FWHM$ d'écart d'énergie des ions de H_e dans le silicium, il s'écrit comme [39] :

$$FWHM_{Z_1}^2 = 2.355^2 4\pi (Z_1 e^2)^2 Z_2 N_{Si} R_p = 2.355^2 \frac{Z}{B} \quad (88)$$

Tel que [42] :

$$e^2 = 1.44 \cdot 10^{-13} \text{ MeVcm}$$

I.9. Spectrométrie de rétrodiffusion Rutherford en canalisation RBS/C

I.9.1. Introduction

La combinaison de la spectrométrie de rétrodiffusion Rutherford avec la canalisation est une technique essentielle dans la caractérisation des matériaux. Lorsqu'un faisceau ionique est aligné avec un axe cristallographique majeur (Fig.14), le nombre des particules rétrodiffusées baisse par rapport, au mode random, à cause de la diminution de la probabilité de rétrodiffusion. Il est impossible d'effectuer une canalisation dans un matériau amorphe pour des raisons liées à sa structure.

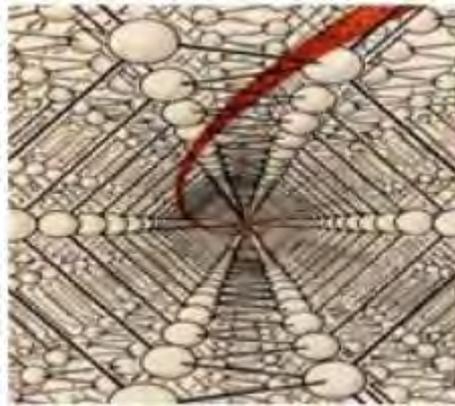


Figure 14 : Canalisation dans un cristal.

I.9.2. Principe de RBS/C

Les particules énergétiques alignées le long d'un canal, formé d'une chaîne atomique, subissent un potentiel coulombien continu le long de ce canal (Fig.15). Lorsque les ions sont à une distance assez loin des noyaux des atomes de l'axe cristallographique, plus de 0.01 nm [40], ils s'écartent d'un angle très petit par rapport à l'orientation initiale. En fait, cet écart a un impact insuffisant sur la trajectoire qui demeure canalisée ce qui réduit le facteur de la rétrodiffusion des ions (Fig.16).

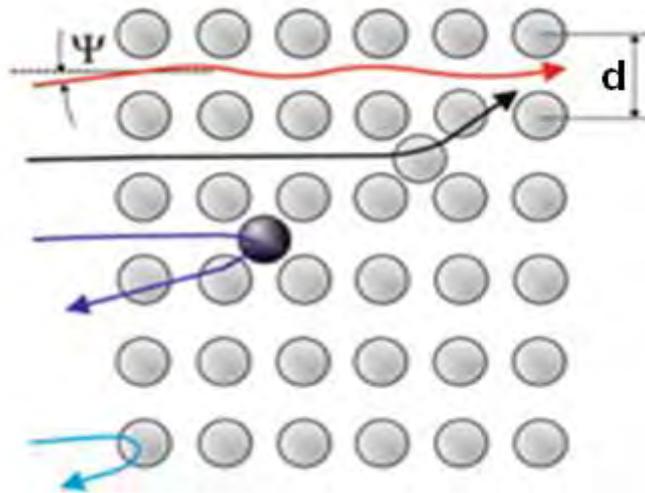


Figure 15 : Illustration schématique de RBS/C [2].

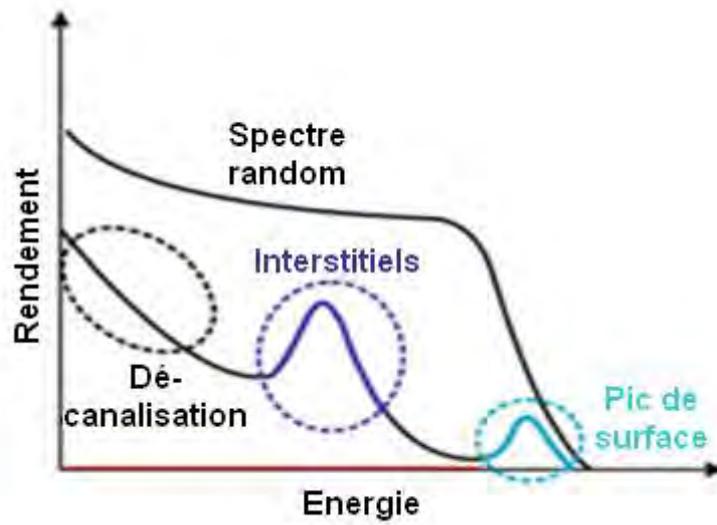


Figure 16 : Spectre RBS/C en comparaison avec un autre random [2].

I.9.3. Paramètres typiques de la technique RBS/C

Certaines caractéristiques fondamentales concernant le faisceau ionique, la manipulation de l'échantillon et d'autres considérations sont élucidées dans le tableau ci-dessous :

Faisceau Ionique	Espèce d'ion : He ou H Energie d'ion : 1-3 MeV Courant de faisceau : 1-50 nA Collimation : $< 0.05^\circ$ Taille de faisceau : 1 mm au diamètre
Manipulation d'échantillon	Résolution angulaire (goniomètre): $< 0.05^\circ$ Limites rotationnelles : minimum de $\pm 90^\circ$ à chaque axe de rotation -
Autres Considérations	Angle de rétrodiffusion proche de 180° Profondeur atteinte : 1-10 μm Résolution en profondeur : 1-10 nm Résolution latérale : 1mm Duré d'analyse : 3-30 min Analyseur multicanaux : mode MCS (Multichannel Scale).

Tableau 3 : Regroupement des paramètres typiques de RBS/C [43].

I.9.4. Applications essentielles

La canalisation est largement appliquée dans le domaine des sciences des matériaux, elle permet d'étudier [40,43] :

- Transformations des phases comme les martensitiques.
- Croissance épitaxiale d'une couche amorphe.
- Distribution de désordre dans un cristal endommagé.
- Composition et l'épaisseur de la couche amorphe en surface.
- Localisation des impuretés dans le cristal.

I.9.5. Concepts de la canalisation en RBS

Tout ce qui suit va concerner la canalisation axiale car la canalisation planaire n'est pas extensivement utilisée pour évaluer le profil du désordre et déterminer les impuretés en substitution.

I.9.5.1. Demi-angle axial $\psi_{1/2}$

Dans un cristal parfait, l'angle auquel le rendement est égal à la moitié de la somme des deux rendements en surface obtenus en mode random H et en canalisé H_A , $\frac{H+H_A}{2}$, est dit demi-angle axial $\psi_{1/2}$. Il représente l'angle critique de la canalisation axiale [39,44], (Fig.17).

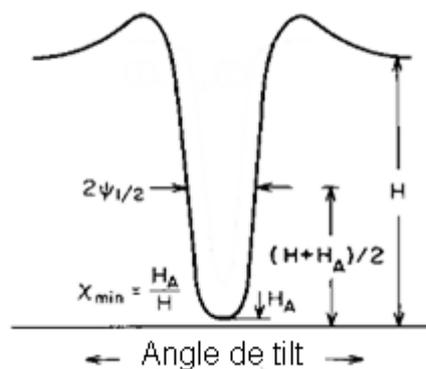


Figure 17 : Profil du rendement angulaire mesuré aux régions proches de la surface [39].

I.9.5.1.1. Calcul du Demi-angle axial $\psi_{1/2}$

Les valeurs de l'angle critique $\psi_{1/2}$ sont estimées approximativement par le modèle continu de Lindhard (1965) ou calculées avec plus de précision par la procédure de Barrett (1971).

➤ Formule de Lindhard

Lindhard introduisit l'angle caractéristique ψ_1 pour décrire le cas dans lequel la distance (la plus proche d'une particule d'énergie E au centre d'un axe atomique d'espacement d) est approximativement égale au rayon d'écran de Thomas-Fermi a_{TF} [39].

$$\psi_1(\text{degr}) = (2 Z_1 Z_2 e^2 / E d)^{1/2} \quad (89)$$

L'angle critique s'écrit [44]:

$$\psi_{1/2}(\text{degr}) = \alpha \psi_1 \quad (90)$$

Où :

Z_1 : Nombre atomique du projectile.

Z_2 : Nombre atomique de la cible.

α : Valeur entre 0.8 et 1.2, elle dépend de l'amplitude vibrationnelle des atomes du réseau.

➤ Formule de Barrett

Barrett donna une formule semi-empirique valable seulement aux énergies non relativistes [43].

$$\psi_{\frac{1}{2}}(\text{degr}) = 0.8 F_A(x) \psi_1 \quad (91)$$

Tel que :

$$x = 1.2 u_1 / a$$

a : Rayon d'écran de Thomas-Fermi.

u_1 : Amplitude de la vibration thermique à une seule dimension.

Les valeurs de $F_A(x)$ peuvent être obtenues via la figure ci-dessous :

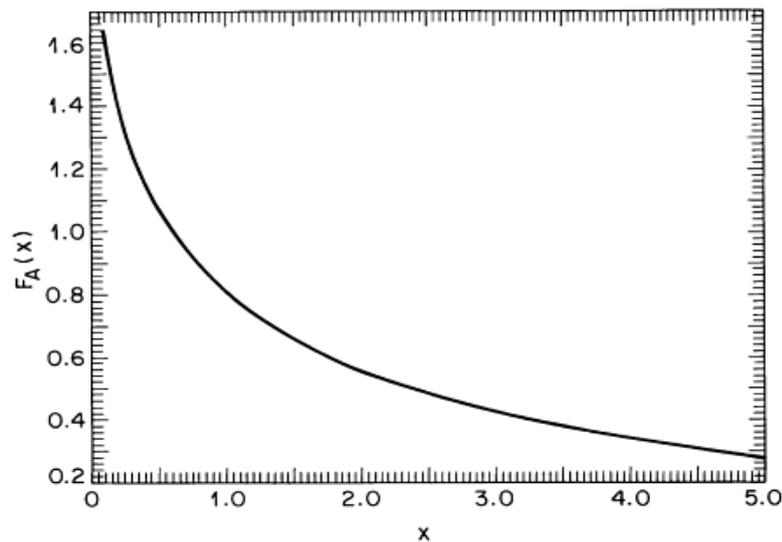


Figure 18 : Valeurs de $F_A(x)$ en fonction de x [43].

I.9.5.2. Rendement minimal χ_{min}

Dans un cristal parfait, le rapport entre la hauteur du spectre, en mode aligné, en surface H_A et la hauteur du spectre, en mode random, en surface H est dit le rendement minimal [39].

$$\chi_{min} = H_A / H \quad (92)$$

I.9.5.2.1. Calcul du rendement minimal

Selon la formule de Lindhard, il s'écrit [39] :

$$\chi_{min} = Nd\pi (2 u_1 + a^2) \quad (93)$$

Tel que :

N : Densité atomique de la cible.

Selon la formule de Barrett, il s'écrit [43] :

$$\chi_{min} = 18.8 N d u_1 (1 + \dots)^{1/2} \quad (94)$$

Tel que :

$$= 126 u_1 / \psi_{1/2} d$$

I.9.6. Epaisseur de la couche amorphe

Soit un spectre RBS en mode canalisé d'un cristal qui contient un désordre causé par l'implantation ionique. La mesure de la largeur complète à mi-hauteur de l'énergie de rétrodiffusion (FWHM) en surface (pour le signal des atomes de la matrice) permet d'estimer l'épaisseur (Δx), de la couche amorphe, via l'expression [39] :

$$\text{FWHM} = \Delta E = \Delta x N_M [\varepsilon_0]_M^M \quad (95)$$

L'indice M représente les atomes de la matrice.

I.9.7. Profil de la concentration du désordre

Les défauts dans un cristal sont supposés aléatoirement distribués et le rendement de rétrodiffusion augmente quand les ions atteignent une région défectueuse. En effet, les ions rétrodiffusés proviennent de deux contributions : l'une est la rétrodiffusion directe des ions dès qu'ils entrent en collision avec les défauts ; l'autre est due à la déflexion des projectiles en raison de l'interaction ion-atome. Ce défaut conduit à la possibilité de rétrodiffuser les projectiles déviés par n'importe quel atome dans la cible. Il s'agit d'un rendement aléatoire et on dit que les ions sont décanalisés, (Fig.19).

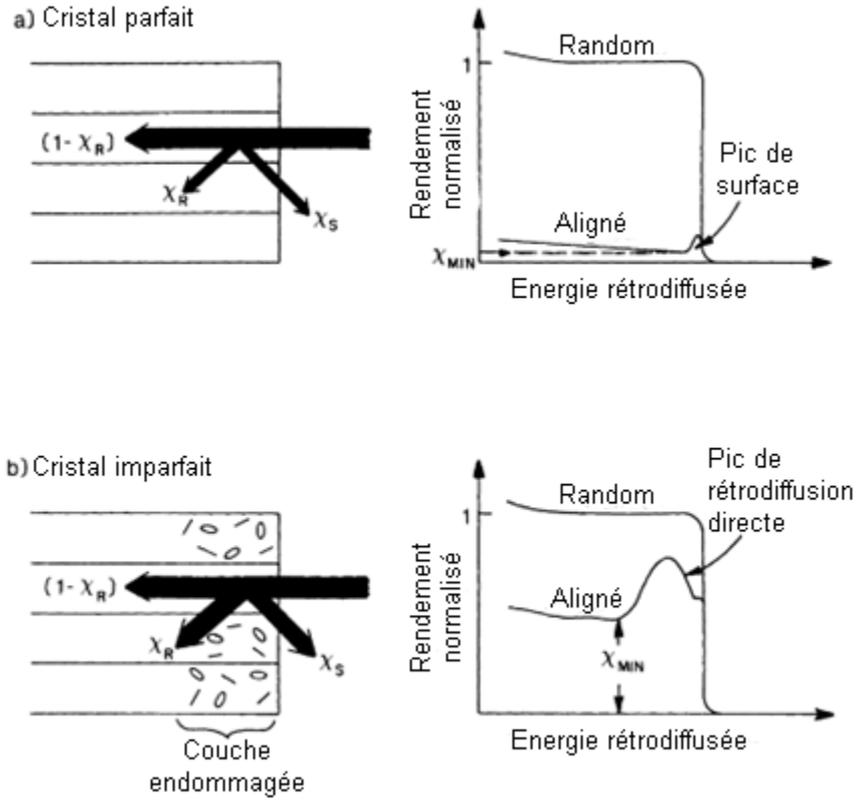


Figure 19 : Illustration de la canalisation, la décanalisation et la rétrodiffusion directe dans un cristal parfait (a) et imparfait (b) [43].

1.9.7.1. Fraction des particules décanalisées

Elle est approximée par l'expression suivante [39,43] :

$$\chi_R(x) = \chi_V(x) + [1 - \chi_V(x)]P(x, \tilde{\theta}_C) \quad (96)$$

Tel que :

$\chi_V(x)$: Rendement minimal du cristal vierge.

$1 - \chi_V(x)$: Fraction canalisée dans un cristal vierge.

$P(x, \tilde{\theta}_C)$: Probabilité de rétrodiffusion à un angle critique $\tilde{\theta}_C$ dans le système du centre de masse par un défaut situé à un point x . Cette probabilité est proportionnelle avec le nombre de défauts. Elle est proche de zéro pour les couches surfaciques.

On écrit [43] :

$$P(x, \tilde{\theta}_C) = 1 - \exp\left(-\int_0^x \sigma_{Dc} N_D(\tilde{x}) d\tilde{x}\right) \quad (97)$$

I.9.7.2. Fraction totale des particules rétrodiffusées

Elle regroupe la rétrodiffusion directe et la décanalisation dans un cristal endommagé, elle s'écrit [43]:

$$\chi_D(x) = \chi_R(x) + [1 - \chi_R(x)] f N_D(x)/N \quad (98)$$

Tel que :

$[1 - \chi_R(x)]$: Fraction non décanalisée.

f : Probabilité de la rétrodiffusion directe, elle égale à 1 en surface.

$N_D(x)$: Densité des défauts (désordre).

N : Densité atomique de la cible.

I.9.7.3. Concentration du désordre en surface

La canalisation est proportionnelle avec le nombre de défauts dans le cristal. Quant à la densité de défauts, elle est minimale en surface ce qui nous mène à dire que le rendement comprend en majorité des rétrodiffusions directes. La fraction totale des particules rétrodiffusées dans les couches peu profondes, dans un cristal contenant des défauts, s'écrit [39] :

$$\chi_D(0) = \chi_V(0) + [1 - \chi_V(0)] N_D(0)/N \quad (99)$$

Tel que :

$\chi_V(0) = \frac{H(0)_{align}}{H(0)_{random}}$: Rendement minimal en surface d'un cristal vierge, $\chi_R(0) = \chi_V(0)$

pour $P(x, \tilde{\theta}_C) = 0$.

Ainsi, la concentration du désordre en surface est [1,39] :

$$N_D(0) = N [\chi_D(0) - \chi_V(0)] / [1 - \chi_V(0)] \quad (100)$$

I.9.7.4. Concentration du désordre dans le cas général

La simplification de l'expression $\chi_D(x)$ en mettant $f = 1$ permet de déduire l'expression générale de la concentration du désordre [43] :

$$N_D(x) = N [\chi_D(x) - \chi_R(x)] / [1 - \chi_R(x)] \quad (101)$$

La détermination précise de la distribution de défauts en profondeur exige une estimation réelle de la contribution de la décanalisation $\chi_R(x)$. L'application alternative des deux équations de $\chi_R(x)$ et $N_D(x)$ aboutit à calculer la concentration à chaque point de l'épaisseur de la couche amorphe [43].

I.9.8. Fraction des impuretés substitutionnelles

Les signaux des impuretés et des atomes de la matrice permettent d'estimer la fraction des impuretés en sites substitutionnels dans le cristal de la matrice. On l'obtient via l'expression suivante [43] :

$$S = \frac{1 - \chi_{imp}}{1 - \chi_{matrice}} \quad (102)$$

Tel que :

χ_{imp} et $\chi_{matrice}$ sont les rapports des rendements aligné et random pour les impuretés et les atomes de la matrice respectivement.

I.9.9. Parcours maximal des ions canalisés

Lorsqu'un ion pénètre dans la partie centrale d'un canal axial ou planaire à un indice bas, l'arrêt nucléaire sera considérablement réduit (Fig.20). Tenant compte que l'arrêt des ions canalisés est principalement déterminé par l'interaction électronique et que cet arrêt ($S_e(E)$) est considéré proportionnel avec l'énergie ($E^{1/2}$) dans le régime de Lindhard-scharff. On a [26]:

$$R_{max} = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{dE}{S_e(E)} = \frac{2E}{NS_e(E)} = A E^{1/2} \quad (103)$$

Tel que :

A : Constante.

Les parcours des projectiles avec une énergie (E) de 50 à 150 KeV, le long des directions cristallographiques principales dans un cristal, peuvent excéder leurs parcours dans une cible amorphe avec un facteur de 2 à 50.

Il y a une autre expression du parcours maximal proposée par Fichtner et al. pour les ions bien canalisés, elle s'écrit comme [30] :

$$R_{max} = \frac{d\sqrt{E}}{nA} (1 + Bb_{max})^5 \quad (104)$$

Tel que :

d : Distance atomique.

E : Energie d'ion.

n : Nombre des atomes projetés dans l'aire normale à la direction de la canalisation.

b_{max} : Distance maximale de collision.

$A(eV^{1/2})$ et $B(cm^{-1})$: Deux constantes dépendant du système par exemple (Pour Ag dans Si, $A = 2.90 eV^{1/2}$ et $B = 1.2 \cdot 10^{10} m^{-1}$).

Le calcul du parcours maximal à partir d'un spectre RBS/C s'obtient via la relation (74), on écrit [39] :

$$\Delta E = N R_{max} \left[\frac{K}{\cos \theta_1} \varepsilon(E) + \frac{1}{\cos \theta_2} \varepsilon(kE) \right] = N R_{max} [\varepsilon] \quad (105)$$

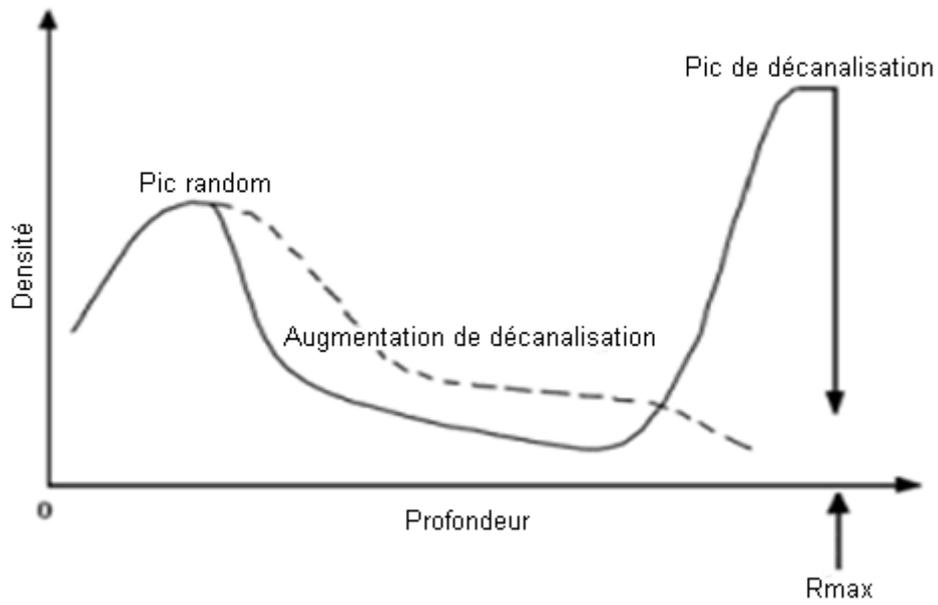


Figure 20 : Distribution des ions implantés le long de la direction de la canalisation [29].

II. Micro-dureté

II.1. Introduction

La mesure de la dureté est une technique simple et utile pour caractériser les propriétés mécaniques des matériaux [45]. Elle est définie en sciences des matériaux comme la résistance d'un spécimen à la pénétration d'un autre matériau. La dureté d'un matériau est reliée à sa force, sa ductilité, sa résistance à l'usure et à la fatigue, ce lien de la dureté avec les propriétés mécaniques rend la technique un moyen commun pour le contrôle de la qualité industrielle des matériaux. Par conséquent, la dureté est une caractéristique, non une propriété fondamentale. Les données de la dureté mesurée sont des valeurs dépendant du système. Pour cela, le test de la dureté nécessite une combinaison des matériaux références et des machines de calibration certifiées afin d'établir et de maintenir des échelles internationales uniformes [46].

Ils existent différents tests statiques pour la mesure de la dureté. Par exemple, les techniques Brinell et Rockwell sont utilisées pour la mesure de la macro-dureté, Vickers et Knoop pour la micro-dureté et Berkovich pour la nano-dureté. Les éléments pénétrateurs sont en général des balles, des cônes ou des pyramides fabriquées d'un matériau qui est plus dur que l'échantillon [45,47]. Le terme de la micro-dureté réfère à la mesure de la dureté dans des régions très locales d'un matériau comme les phases microstructurales ou les couches en surface [48]. Ainsi, le pénétrateur joue le rôle d'une microsonde mécanique où on suggère que l'extension de la formation de fissures soit minimale [49]. Dans les tests de Vickers et Knoop, l'empreinte est généralement inférieure à $19\ \mu\text{m}$ en profondeur [50]. Dans ce qui suit, nous allons décrire les méthodes de Vickers et Knoop qui sont destinées à la mesure de la micro-dureté.

II.2. Méthode de Vickers

II.2.1. Principe

Un élément pénétrateur, en diamant de forme de pyramide droite à base carrée formant un angle de 136° entre les faces opposées, est forcé dans la surface du spécimen pendant une durée généralement de 10 à 15 secondes (Fig.21). Il en résulte une échancrure considérée similaire à la forme d'élément pénétrateur. Les poids utilisés varient de 1 à 100 *Kg* pour les mesures de la macro-dureté contrairement à la micro-dureté où l'intervalle des poids est de 1 à 10^3 *g* [48]. L'angle entre l'axe de la pyramide et l'axe du porte-pénétrateur n'excède pas 0.5° , et le rayon de la pointe doit être inférieur à 500 *nm* pour les micro-mesures [47]. Après l'enlèvement du poids appliqué, la mesure de la longueur des diagonaux (d_1 et d_2) et de l'aire projetée de l'empreinte est réalisée par un microscope spécifique. L'utilisation de la longueur moyenne du diagonal, dans la formule générale de la dureté, permet de minimiser l'erreur du calcul [48]. La profondeur de l'échancrure de Vickers est généralement égale à 1/7 de la dimension du diagonal [51] qui est typiquement moins de 0.5 *mm* [52]. Sa mesure est réalisée en millimètre pour une macro-échancrure tandis qu'elle est prise en micromètre pour les essais de la micro-dureté.

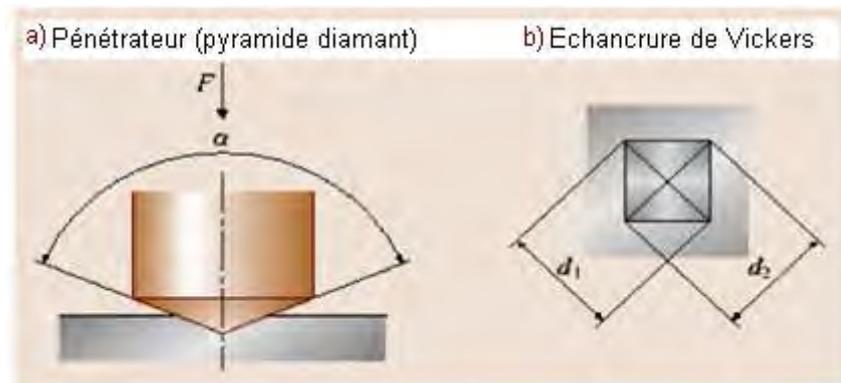


Figure 21: Principe de test de la dureté de Vickers [46].

La formule de Vickers est le rapport obtenu par la division du poids appliqué sur l'aire projetée de l'impression. Elle est valable aussi bien pour le calcul de la macro-dureté que la micro-dureté

$$HV = P/A \quad (106)$$

L'aire projetée de l'impression, A , est exprimée en fonction de la longueur moyenne du diagonal d et l'angle du pénétrateur, ainsi [48]:

$$HV = 2P \sin(136/2) d^2 \quad (107)$$

D'où

$$HV = 1.854 P/d^2 \quad (108)$$

Où :

HV : Dureté de Vickers.

P : Poids du pénétrateur exprimé en kilogramme.

d : Longueur du diagonal de l'aire projetée de l'impression.

La formule de Vickers en fonction de la profondeur de la pénétration, t , s'écrit [49] :

$$HV = 37.83 \cdot 10^{-3} P/t^2 \quad (109)$$

La formule précédente peut être réécrite en fonction de la force (F) exprimée en newton (N) où la longueur (d) est prise en mètre, nous avons [53] :

$$F = P g \quad (110)$$

Tel que

$g = 9.80665 \text{ m s}^{-2}$: Accélération de la gravitation terrestre.

$$HV = 0.189 F/d^2 \quad (111)$$

Pour illustration, on représente sur la figure (22), la micrographie de deux empreintes de Vickers ainsi que les déformations obtenues dans le cas de l'acier [51].

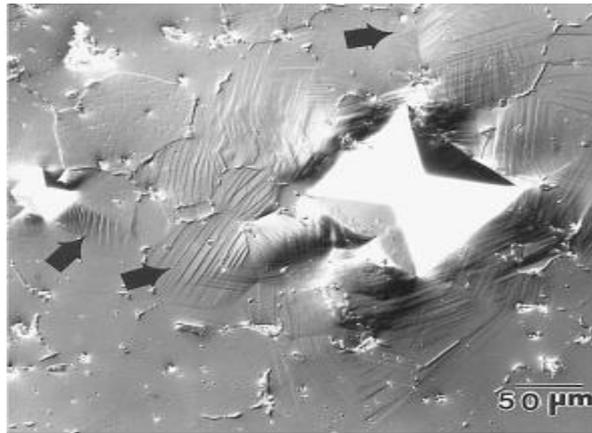


Figure 22 : Micrographie de deux empreintes de Vickers ainsi que les déformations autour d'elles (cas d'acier) [51].

II.2.2. Dureté de Vickers aux normes internationales

Les normes ISO (International Organization for Standardization) répartissent le test de la dureté de Vickers en trois intervalles selon la force appliquée aux matériaux métalliques. Cependant, les normes ASTM International (American Society for Testing and Materials) répartissent le test de Vickers en deux intervalles uniquement [46].

Dans les tableaux (4,5), on regroupe les caractéristiques des codes ISO 6507-1 (dureté de Vickers chez ISO), ASTM E 92 (macro-dureté de Vickers et Knoop chez ASTM) et ASTM E 384 (micro-dureté de Vickers et Knoop chez ASTM).

ISO		
Intervalle de Vickers (ISO 6507-1)	Intervalle de force du test $F(N)$	Intervalle de dureté
Dureté à grande force	$F \geq 49.03$	$HV \geq 5$
Dureté à une faible force	$1.961 \leq F < 49.03$	$0.2 \leq HV < 5$
Micro-dureté de Vickers	$0.09807 \leq F < 1.961$	$0.01 \leq HV < 0.2$

Tableau 4 : Représentation des intervalles du test de la dureté de Vickers chez ISO [46].

ASTM International		
Intervalle de Vickers	Intervalle de force du test $F(N)$	Intervalle de dureté
Dureté de Vickers (ASTM E 92)	$9.807 \leq F < 1177$	$1 \leq HV < 120$
Micro-dureté de Vickers (ASTM E 384)	$0.0098 \leq F < 9.807$	$0.001 \leq HV < 1$

Tableau 5 : Représentation des intervalles de test de la dureté de Vickers aux normes ASTM International [46].

Le test de la dureté de Vickers est spécifié en ISO pour les longueurs du diagonal de 0.02 à 1.40 mm tandis que ASTM International est utilisée pour les diagonaux inférieurs de 0.02 mm [46].

II.2.3. Avantages et inconvénients

II.2.3.1. Avantages

Les avantages de la méthode de Vickers sont [46,54] :

- Large application de la méthode (spécimen dur ou mou).
- Possibilité de mesurer la dureté des surfaces, des couches minces, des petites pièces, des tubes minces à paroi, des revêtements minces et durs et des micro-constituants individuels.
- Mesure de la dureté près des bords.
- Dans la plupart des cas, la petite échancrure n'a pas d'influence sur la fonction ou l'apparence des matériaux ou produits examinés.
- Valeur de la dureté habituellement indépendante de la force exercée ($HV \geq 0.2$)
- Fiabilité de la mesure même dans le cas d'extension limitée de l'échantillon par rapport à la direction de la force appliquée.
- Mesures peuvent être converties en termes de valeurs de contrainte.

II.2.3.2. Inconvénients

Les inconvénients de la méthode de Vickers sont [46,54] :

- Nécessité d'un grand effort pour la préparation des surfaces adéquates au test (moulage et polissage).
- Durée du test est relativement longue à cause de la mesure des deux longueurs diagonales.
- Réalisation des pointes en diamant est très coûteuse.
- Pointe en diamant est sensible aux endommagements en raison de sa finesse.
- Dans le cas d'échancrure relativement petite, la valeur de la dureté dépend des déviations du pénétrateur et également de la préparation des surfaces.
- Très sensible aux effets de vibrations surtout dans le domaine de micro-dureté.

II.3. Méthode de Knoop

II.3.1. Principe

L'élément pénétrant de Knoop est en forme de pyramide en diamant à base rhombique allongée, avec deux angles différents dans les faces opposées (l'angle longitudinal, $172^{\circ} 30'$ (172.5°), et l'angle transversal, 130°). Cette pyramide possède deux diagonaux qui diffèrent clairement en longueurs. Le diagonal long est sept fois supérieur au diagonal court (Fig.23). L'application d'une force perpendiculaire pendant un temps de 10 à 15 secondes au pénétrateur produit une échancrure de dimension varie de 10 à 100 μm dans le spécimen [48,52]. Seulement l'empreinte résultant du diagonal long est exigée à être mesurée par un microscope spécifique après l'enlèvement du pénétrateur [49].

Pour illustration, on représente sur la figure (24) la micrographie de l'empreinte de Knoop.

Les tests de la micro-dureté sont pris à des poids légers permettant des mesures très localisées (100 m^2) [53].

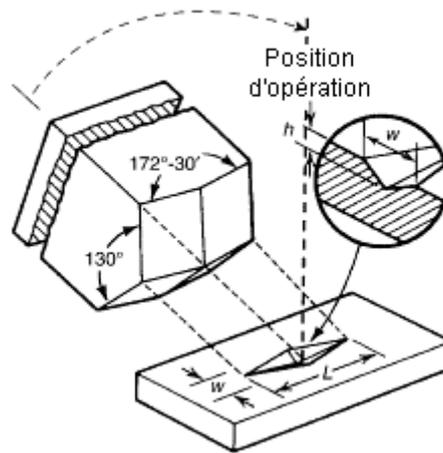


Figure 23 : Principe du test de la dureté par la méthode de Knoop [54].

La formule de la dureté de Knoop s'exprime par [54] :

$$HK = \frac{P}{A} = P/CL^2 \quad (112)$$

Où :

P : Poids appliqué en kilogramme.

A : Aire projetée de l'empreinte.

L : Longueur du diagonal long.

C : Constante de l'élément pénétrateur reliant l'aire projetée de l'empreinte au carré de la longueur du diagonal long.

La constante, C , est exprimée par [55]:

$$C = \frac{\tan \frac{\beta}{2}}{2 \tan \frac{\alpha}{2}} \quad (113)$$

pour $\beta = 130$ et $\alpha = 172.5$, $C = 0.07028$

Où :

α : Angle longitudinal

β : Angle transversal

Ainsi,

$$HK = 14.229 P/d^2 \quad (114)$$

La formule de Knoop donnée en fonction de la force exercée, en newton, s'écrit [55] :

$$HK = 1.451 F/d^2 \quad (115)$$

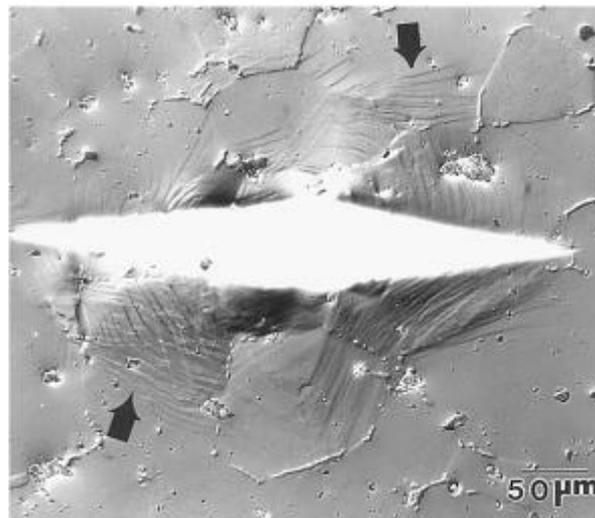


Figure 24 : Micrographie montre l'empreinte de Knoop et les déformations autour d'elle dans l'acier [51].

II.3.2. Forces recommandées

Elles sont élucidées dans le tableau ci-dessous :

Force exercée en newton $F(N)$	Valeur de la micro-dureté de Knoop HK
0.09807	0.01
0.1961	0.02
0.2452	0.025
0.4903	0.05
0.9807	0.1
1.961	0.2
2.942	0.3
4.903	0.5
9.807	1

Tableau 6 : Forces recommandées en essai de Knoop [55].

II.3.3. Avantages et Inconvénients

II.3.3.1. Avantages

Les avantages de la méthode de Knoop sont [46] :

- Elle est pratiquement convenable aux pièces étroites comme les cordes en raison de la grande longueur de l'un des deux diagonaux.
- Elle est plus adéquate aux films minces (ou les revêtements) que le test de Vickers car la profondeur de l'échancrure est quatre fois plus petite pour la même longueur du diagonal.
- Elle est convenable aux matériaux fragiles à cause de la tendance faible à la fissuration.
- Elle est convenable à l'étude de l'anisotropie des matériaux parce que l'essai de Knoop dépend de la direction sélectionnée du diagonal long dans chaque cas.
- Dans la plupart des cas, la petite échancrure n'a pas un effet sur la fonction ou l'apparence des matériaux et les produits testés.
- Pratiquement, pas de limite pour l'application de cette méthode.

II.3.3.2. Inconvénients

Les inconvénients de la méthode de Knoop sont [46] :

- Nécessité d'avoir une surface suffisamment fine.
- Temps de test est relativement long en raison de la mesure du diagonal long.
- Dépendance remarquable de la dureté en fonction de la force exercée.
- Pointe du pénétrateur possédant une sensibilité à l'endommagement.
- Appareillage coûteux du test de la surface pour arriver à des empreintes symétriques.
- Mesure de longueur du diagonal est plus difficile que celle de Vickers.

II.4. Amélioration de la mesure

Le diagonal de l'empreinte est généralement mesuré par un microscope spécifique après l'enlèvement du poids. La formation des fissures dans les matériaux fragiles complique la localisation précise des bords de l'empreinte ce qui influe la valeur mesurée du diagonal. L'utilisation de la mesure de la profondeur durant l'action du poids est récemment devenue très répandue. La variation de la profondeur après qu'on retire le poids appliqué donne des informations sur la reprise élastique de l'impression [49].

II.5. Comparaison entre les méthodes Vickers et Knoop

Chacune des deux méthodes possède quelques avantages par rapport à l'autre (les figures (25,26)) [54] :

- Seulement une longueur sera mesurée chez l'essai de Knoop tandis que chez Vickers les deux diagonaux seront mesurés.
- Pénétrateur de Vickers pénètre plus profondément que celui de Knoop.
- Pénétrateur de Vickers est moins sensible aux différences minutieuses en surface que celui de Knoop, parce que sa pénétration est relativement plus profonde.
- Comme l'échancrure de Knoop un diagonal plus long que ce celui de Vickers, elle est moins sensible aux erreurs mesurées.

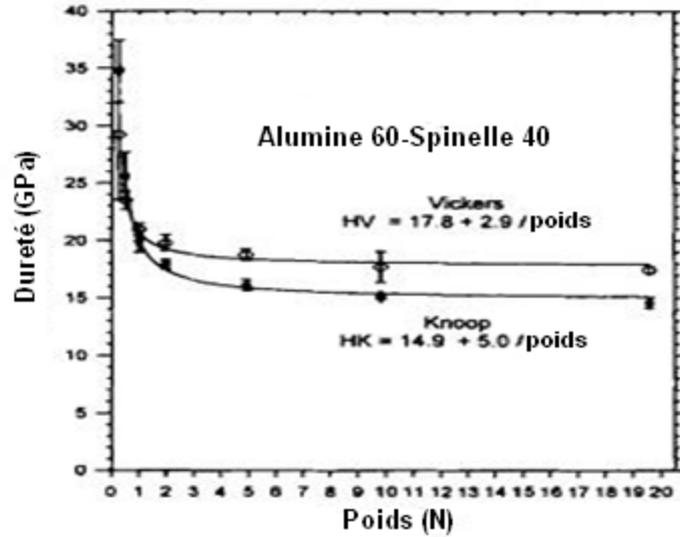


Figure 25 : Dureté de Vickers et Knoop en fonction de la force appliquée pour l'alumine 60-spinelle 40 [56].

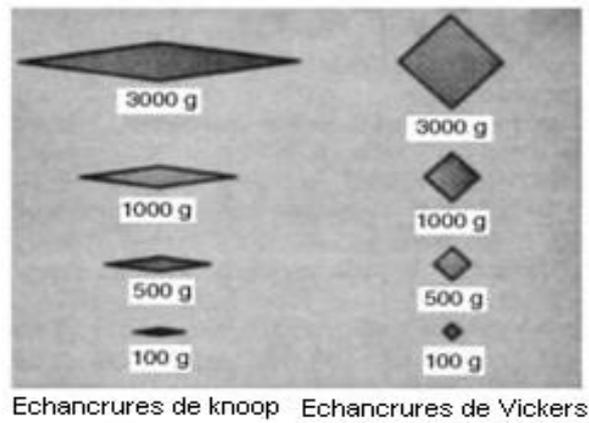


Figure 26 : Comparaison entre les empreintes produites par les pénétrateurs de Knoop et Vickers dans le même métal et pour le même poids [54].

III. Conclusion partielle

Les techniques utilisées pour l'investigation des échantillons sont la spectrométrie de rétrodiffusion Rutherford (RBS) et la mesure de la micro-dureté de Knoop. La première méthode (RBS) repose sur la détection des particules d'hydrogène ou d'hélium chargées positivement et qui sont rétrodiffusées élastiquement par les noyaux constitutifs du matériau à analyser. Nous pouvons déterminer les éléments constituant la cible, leurs distributions, la dose implantée et l'épaisseur de la couche amorphe. Quant au test de Knoop de la micro-dureté, il permet d'étudier la micro-dureté en surface du spécimen.

Chapitre III

Le code de simulation RBX

I. Introduction

La première version du code RBX a été développée par Endre Kótai en 1984 à l'institut de recherche pour les particules et la physique nucléaire, Hongrie. Il a été écrit sur un petit ordinateur et son langage de programmation était le Delphi. Il permet de simuler et d'analyser les spectres expérimentaux RBS (Random et aligné). En 1989, il a été modifié pour traiter la rétrodiffusion non-Rutherford et ERDA (Electron Recoil Detection Analysis). Plus tard, il a été adapté pour la simulation des spectres Forward scattering et NRA (Nuclear Reaction Analysis). Ce programme peut contrôler l'analyseur multicanaux (MCA) de Canberra ou Norland, démarrer et arrêter le MCA, utiliser n'importe quelle combinaison particule-cible et lire les données des spectres mesurés. Il se caractérise par un temps très rapide de la simulation, une résolution du détecteur simulée par une convolution du spectre idéal avec un fit gaussien, une énergie de bombardement comprise entre 100 KeV et 10 MeV et une calibration linéaire d'énergie. Ce code peut seulement générer les spectres de rétrodiffusion des échantillons aux couches et éléments multiples. Plusieurs fonctions de fit sont construites dans ce programme, par exemple la section efficace peut être linéaire, polynomiale,... [57].

La version 5.0 (2008) fonctionne sous Windows® 98, ME ou Windows® NT 4.0, Windows 2000, XP, Vista et Windows 7.

II. Bases théoriques du programme RBX

II.1. Géométrie de la diffusion

On considère que les événements de la diffusion se produisent dans une petite tranche de la cible d'épaisseur δx à une profondeur donnée x . Les particules arrivant à la surface frontale possèdent une énergie après la rétrodiffusion E_1 et KE_1 . Quand elles sortent de la cible l'énergie devient E_{out} . La différence entre E_0 , E_1 , KE_1 et E_{out} est due à la perte d'énergie pendant l'entrée et la sortie [57]. Nous avons (Fig.27) :

θ : Angle de la détection.

α : Angle entre la direction du faisceau et la normale à la surface.

β : Angle entre la direction des particules sortant et la normale à la surface.

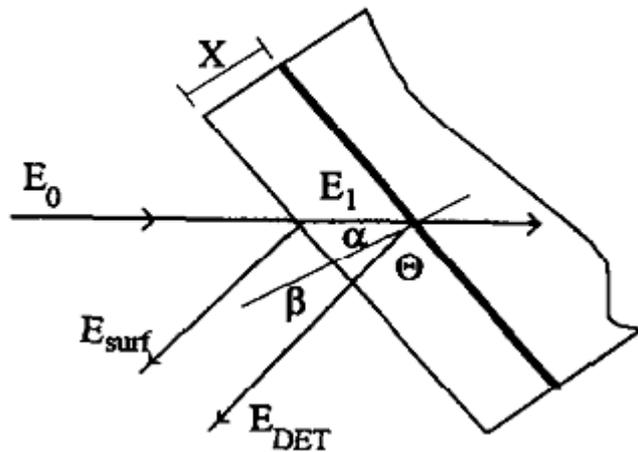


Figure 27 : Illustration de la rétrodiffusion des ions d'une cible solide [57].

II.2. Rendement

On prend en compte la contribution des isotopes dans chaque sous couche de l'échantillon et on néglige les fluctuations statistiques dues à la résolution instrumentale du système et à l'écart d'énergie des particules. Ainsi, la couche de l'élément numéro i se situant entre E_i^F et E_i^B (Fig.28) est divisée en des sous-couches d'épaisseur δx . Si la largeur d'énergie de la sous couche de l'élément numéro i est égale à la largeur du canal δE , le rendement détecté dans cette sous couche est [57] :

$$H_i(E) = \int_x^{x+\delta x} d\hat{x} Q \int d \frac{d\sigma_i(E(\hat{x}),\theta)}{d} \frac{n_i(\hat{x})}{n_{total}(\hat{x})} \frac{\delta E}{\cos\alpha} \frac{1}{[\varepsilon(E(\hat{x}))]} \prod_{j = \text{numéro de sous couche}} \frac{\varepsilon_j(E_{in})}{\varepsilon_j(E_{out})} \quad (116)$$

Où :

$n_i(\hat{x})$: Concentration de l'élément numéro i à la profondeur \hat{x} .

$n_{total}(\hat{x})$: Concentration totale des éléments à la profondeur \hat{x} .

Q : Nombre des particules incidentes.

d : Angle solide différentielle de la rétrodiffusion.

$d\sigma_i(E(\hat{x}), \theta)$: Section efficace de la rétrodiffusion de l'élément numéro i .

$[\varepsilon(E(\hat{x}))]$: Facteur de la section efficace d'arrêt.

$\varepsilon_j(E_{in})$: Section efficace d'arrêt de la sous couche numéro j dès l'entrée.

$\varepsilon_j(E_{out})$: Section efficace d'arrêt de la sous couche numéro j dès la sortie.

Après l'intégration, on a [57] :

$$H_i(E) = Q \sigma(E_i) \frac{n_i}{n_{total}} \frac{\delta E}{\cos\alpha} \frac{1}{[\varepsilon(E)]_i} \prod_{j=layers} \frac{\varepsilon_j(E_{in})}{\varepsilon_j(E_{out})} \quad (117)$$

Et l'aire du signal d'élément numéro i est [57]:

$$A_i = Q \sigma(E_i) n_i \frac{n_i}{\cos\alpha} \quad (118)$$

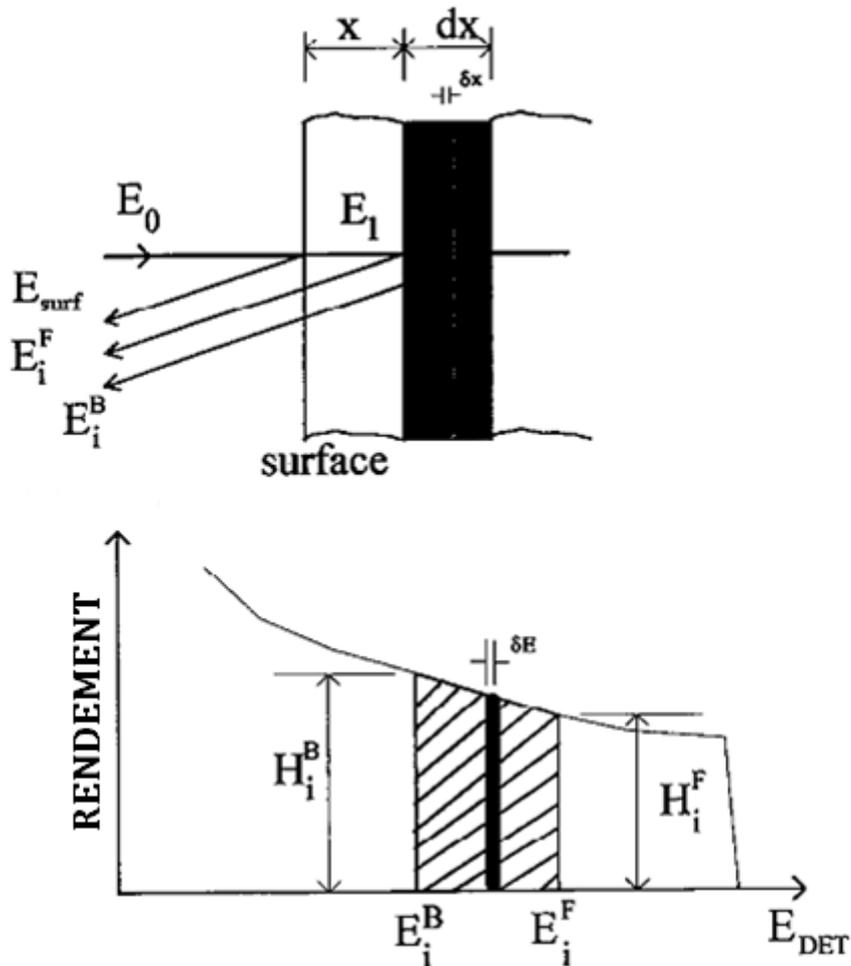


Figure 28 : Concept appliqué pour estimer la hauteur du spectre [57].

II.3. Section efficace de la rétrodiffusion

Dans les méthodes Standard RBS, il est supposé que la section efficace différentielle de rétrodiffusion est celle de Rutherford. Cette supposition est valable dans l'intervalle 800 – 2400 KeV pour H_e et 50 – 700 KeV pour H . Dans le cas des ions d'hélium, les atomes légers possèdent certaines résonances au dessus de cette énergie mais la déviation de la section efficace de Rutherford peut être négligée à partir de 4 MeV. Pour des ions d'hydrogène ayant une énergie supérieure à quelques centaines de KeV, la section efficace des éléments diffère de celle de Rutherford. Par conséquent, la section efficace en fonction de l'énergie, ne peut pas être décrite par une fonction analytique générale et pour tous les éléments [57].

Pour les faibles énergies avec un numéro atomique d'élément élevé des, l'effet d'écran se manifeste et réduit la valeur de la section efficace de Rutherford. L'Ecuyer, Davies et Matsunami donnèrent une équation analytique au facteur de correction qui est dû à l'écrantage. Ainsi [57] :

$$\frac{d\sigma(E)}{d} = \left(\frac{d\sigma(E)}{d} \right)_{Ruth}^{lab} \left[1 - \frac{0.049Z_1Z_2^{\frac{4}{3}}}{E_{CM}[KeV]} \right] \quad (119)$$

Où :

E_{CM} : Energie d'ion dans le système de centre de masse (i.e. présence du recul).

La méthode la plus facile pour évaluer la section efficace non-Rutherford est l'utilisation des valeurs tabulées.

La version 5.0 applique aussi la correction de H.H.Andersen [58].

Pour les mesures RBS et ERDA, l'angle solide du détecteur est relativement petit. Ainsi, l'intégration de la section efficace sur l'angle de détection est remplacée par la valeur moyenne de la section efficace au centre du détecteur.

II.4. Facteur de la section efficace d'arrêt

Selon Chu et al., le facteur de la section efficace d'arrêt de l'élément numéro i est défini par [57]:

$$[\varepsilon(E)]_i = K_i\varepsilon(E) + \varepsilon(K_iE) \quad (120)$$

Les valeurs ε sont calculées, d'une part, en utilisant la formule d'arrêt de Ziegler pour les ions d'hélium, et d'autre part, on applique la méthode du calcul de Ziegler, Biersack et Littmark pour l'hydrogène et les ions lourds. Pour les matériaux composés, la règle de Bragg est utilisée. Dans la version 5.0, il existe des bases de données de ZBL et de la canalisation.

II.5. Rendement au canal

Le code RBX crée un analyseur multicanaux virtuel et fait la sommation des rendements des différents éléments dans les différentes sous couches. La première étape du calcul est de déterminer l'énergie des ions pénétrant au début et au bout des sous couches E_{ion}^F et E_{ion}^B (face, back).

La deuxième étape consiste à calculer l'énergie détectée de la particule rétrodiffusée E_{det}^F et E_{det}^B et le rendement à ces énergies en utilisant la formule (116). Le comptage du rendement de la sous couche entre E_{det}^F et E_{det}^B est basé sur la supposition que l'énergie des ions pénétrant et le facteur d'arrêt varient linéairement dans cette couche mince. Ainsi, le rendement au canal numéro j est exprimé par [57]:

$$H_j = \frac{\sigma(E_{ion}^F - e_j)(h^F + y_j)}{[\varepsilon]^F + p_j} \quad (121)$$

Où :

$h^F = \frac{H^F[\varepsilon]^F}{\sigma^F}$: Rendement normalisé au début de la sous couche (face).

e_j : Pente de la variation d'énergie d'ion pénétrant pour le canal numéro j .

y_j : Rendement normalisé pour le canal numéro j .

p_j : Facteur d'arrêt pour le canal numéro j .

Pour des résonances nucléaires faibles, $\sigma(E)$ est remplacée par sa valeur intégrée sur la couche mince. Cette supposition est valable uniquement pour des épaisseurs minces.

La largeur maximale de ces sous couches dépend du pouvoir d'arrêt au parcours d'entrée et de sortie dans cette sous couche. Si le parcours d'ion dépasse la largeur maximale, le programme coupe automatiquement cette couche mince à des largeurs égales ou inférieures de cette valeur.

II.6. Ecart en énergie

Le code RBX calcule l'écart en énergie en utilisant la théorie de Bohr et l'écart géométrique. La déviation standard de Bohr de la perte d'énergie dans une sous couche est donnée par [57] :

$$\sigma_B^2 = 4\pi (Z_i e^2)^2 Z_2 \sum_{j=1}^{l \text{ ments}} N_j t \quad (122)$$

Z_i : Numéro atomique du projectile numéro i .

Z_2 : Numéro atomique de la cible.

N_j : Concentration des éléments numéro j dans cette sous couche.

t : Epaisseur de la sous couche.

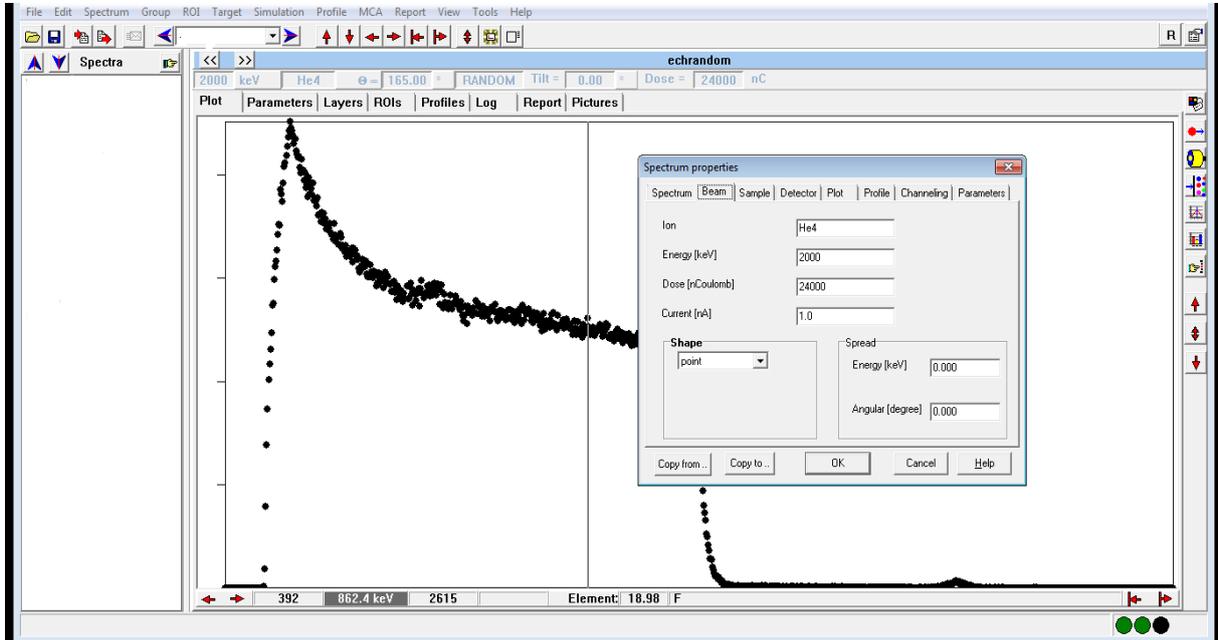
La version 5.0 utilise également l'écart d'énergie de Chu, Yang et Tschalär [58].

Le calcul d'effet d'écart géométrique en fonction de la profondeur est basé sur les calculs de Szilagyí. Il est supposé que tous ces écarts ainsi que la résolution du détecteur sont gaussiens.

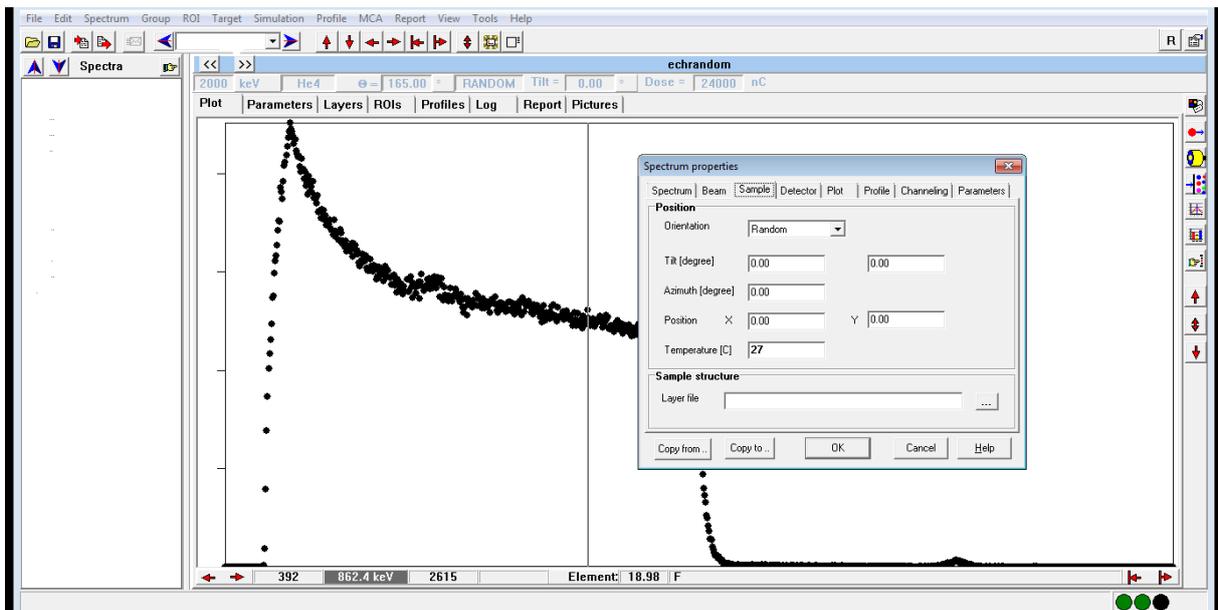
III. Synthèse du spectre

Un spectre RBS est affiché comme le rendement des particules rétrodiffusées (ou normalisé) en fonction de l'énergie E (ou numéro du canal). La première étape avant le calcul est d'introduire les paramètres suivants [57] :

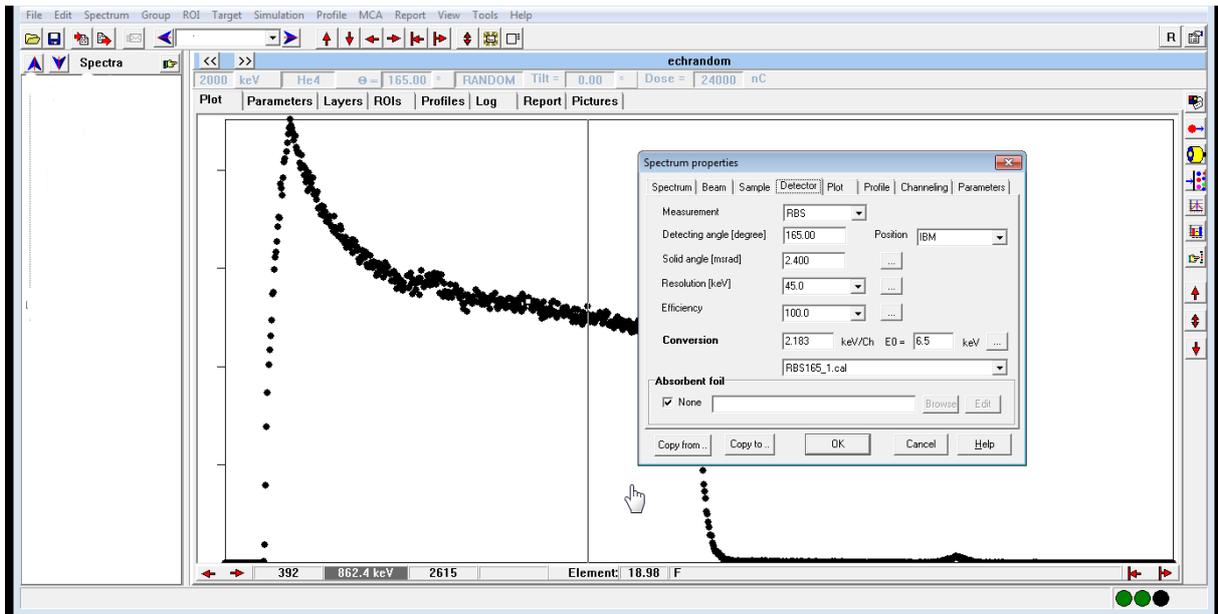
- **Faisceau ionique** : l'espèce du projectile, son énergie initiale en KeV , nombre des particules incidentes en nC et le courant ionique en nA .



- **Cible** : l'orientation de la cible (random ou canalisée), le tilt et sa température en $^{\circ}C$.



- **Détecteur** : type de la mesure (RBS, ERDA, FORWARD ou NRA), l'angle de détection en degré, l'angle solide en *msrad*, la résolution du détecteur en *KeV*, la géométrie IBM ou CORNELL et les constantes d'étalonnage qui sont considérées linéaires.



IV. Simulation du spectre RBS expérimental

Le code RBX considère la cible comme une gamme de sous couches superposées où chacune d'elle possède une composition uniforme.

Les paramètres d'entrée de chaque sous couche (*sublayer*) sont :

- L'épaisseur soit a en \AA ou d en cm^{-2}
- La composition de la sous couche

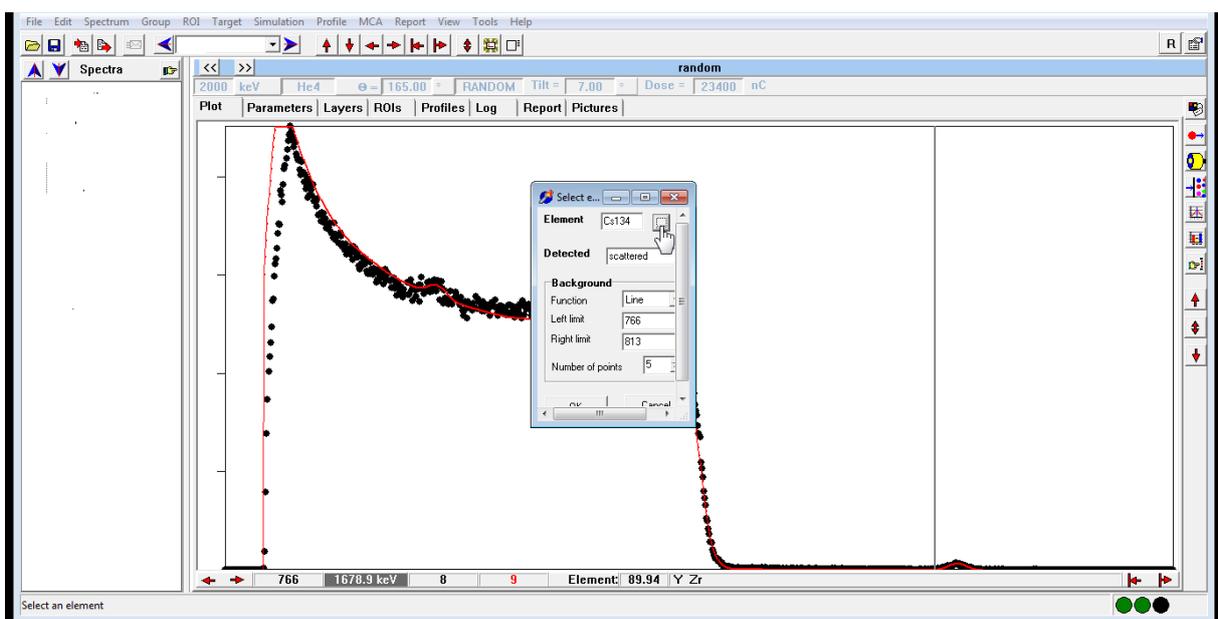
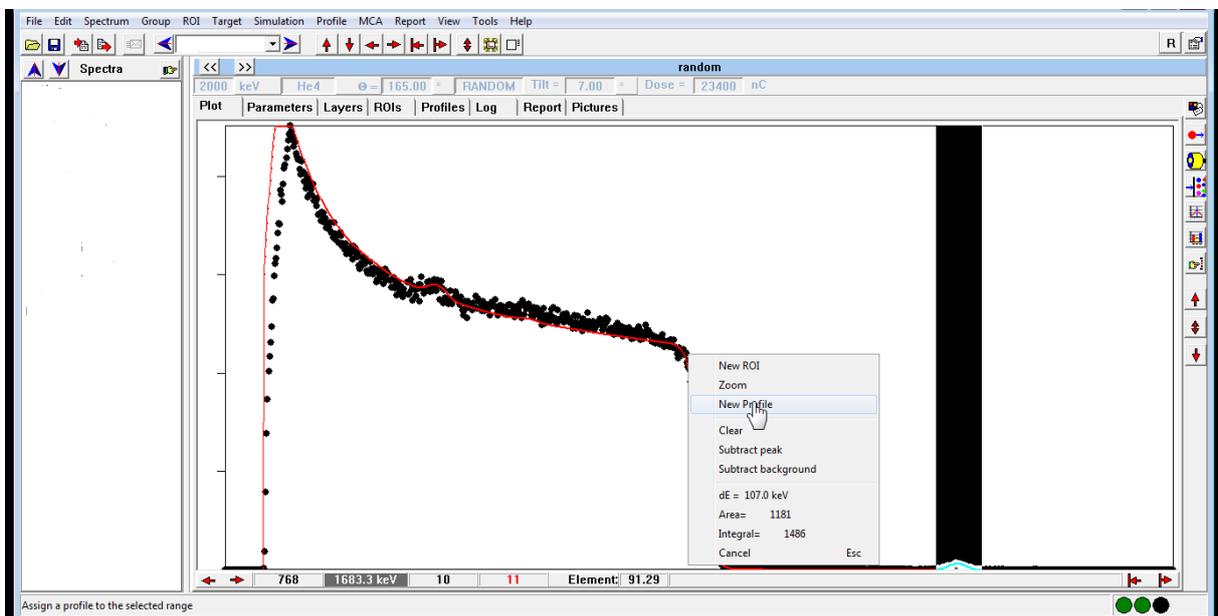
Si on choisit l'épaisseur en d , il faut ajouter la densité de cette sous couche $n(\text{cm}^{-3})$

Pour la canalisation, on ajoute également l'orientation de la sous couche o , le type du cristal c , et la distance atomique r . Lorsqu'il y a des défauts, on ajoute par exemple le mot *points* pour désigner les défauts ponctuels puis la concentration.

Parfois, on doit ajouter des facteurs d'activation à l'option type du cristal c pour obtenir une bonne coïncidence. Ces facteurs servent à activer le pic de la surface, le rendement minimal du spectre canalisé et la décanalisation.

V. Simulation du profil de la concentration

Après l'obtention du spectre simulé, on détermine l'intervalle d'énergie *ROI* (Range Of Interest) sur le spectre et d'élément visé. Le programme affiche la concentration en fonction de la profondeur selon la méthode de calcul choisie. Les étapes sont illustrées ci-dessous :



V.1. Approximation de la surface

Elle est très simple et rapide, mais elle est seulement appréciable en surface des couches minces où le changement de la section efficace et au pouvoir d'arrêt peuvent être négligés. On écrit [57]:

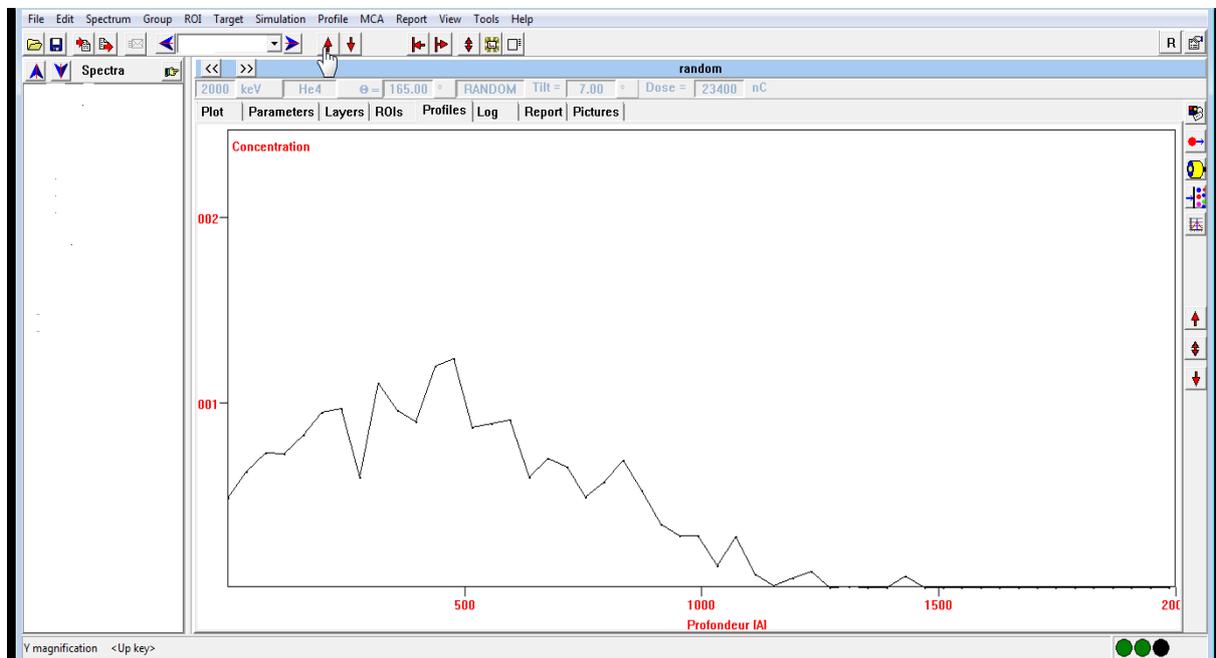
$$n_i(x) = \frac{H_i[\varepsilon(E_0)]_i}{Q\sigma_i(E_0)\delta E} \quad (123)$$

Où

H_i : Rendement d'élément numéro i mesuré après l'élimination du bruit de fond.

δE : Largeur d'énergie du canal.

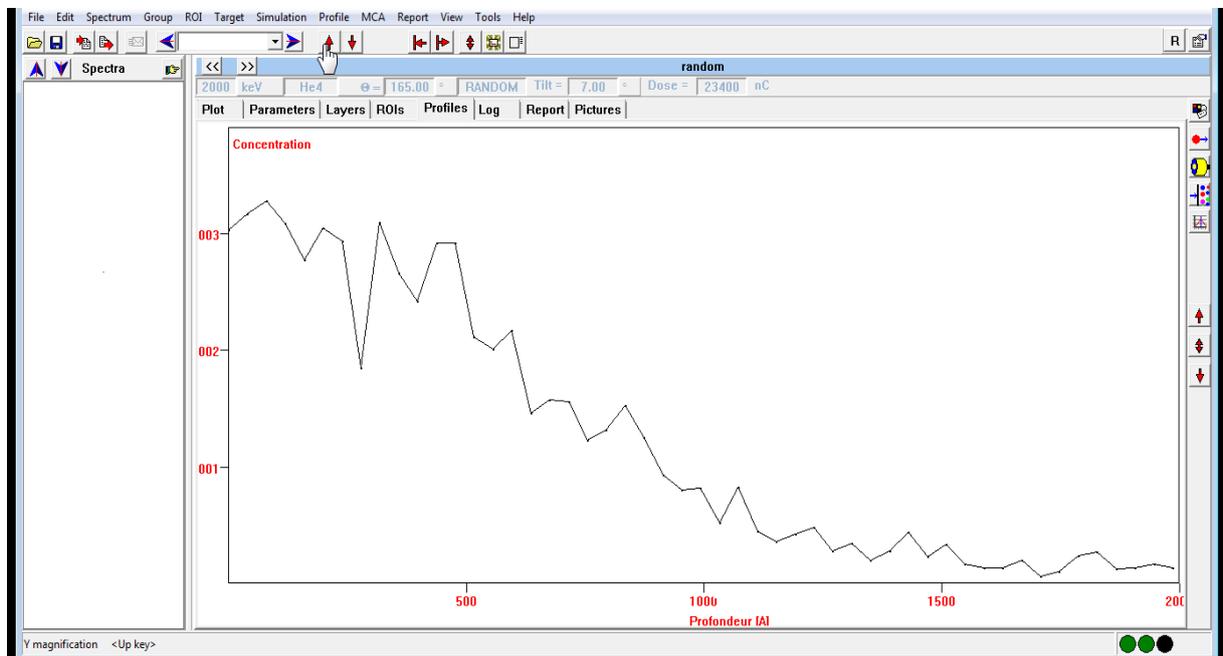
Notant que $n_i(x)$ est affichée par RBX comme une fraction entre la concentration volumique de cet élément et la concentration volumique totale de l'échantillon cible. Pour une faible dose d'un dopant dans une cible, on prend seulement la densité de cette cible par exemple un film mince de silicium.



V.2. Comparaison entre deux éléments

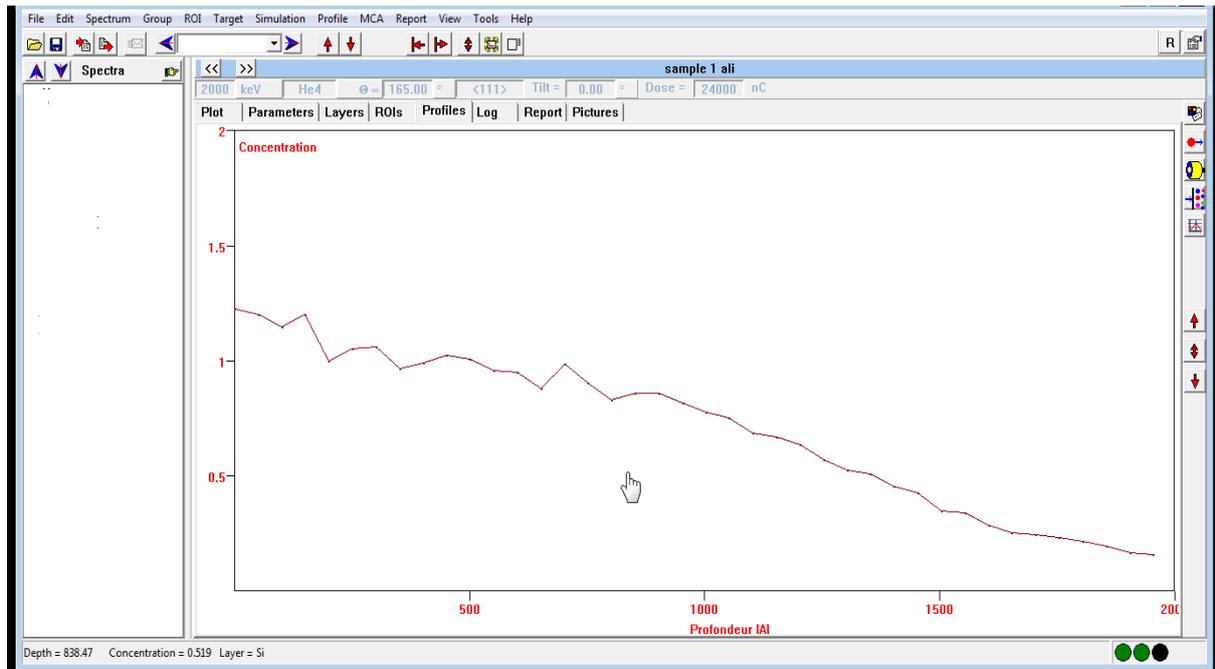
Pour effectuer une comparaison entre deux éléments, on établit un calcul de la concentration relative des deux éléments à partir de leurs rendements. On écrit [57]:

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{H_1 [\varepsilon(E_0)]_1 \sigma_2(E_0)}{H_2 [\varepsilon(E_0)]_2 \sigma_1(E_0)} \quad (124)$$



VI. Simulation du profil de défauts

Pour simuler le profil de défauts, on doit sélectionner simultanément, un spectre simulé en mode canalisé, un spectre simulé en mode random et un spectre vierge simulé en mode aligné. Par la suite, on doit choisir le type de défauts que l'on désire simuler.



VII. Analyse du spectre

L'objectif d'analyser un spectre est d'obtenir toutes les informations disponibles sur l'échantillon à savoir.

Identification des éléments de la surface, calcul et affichage du profil d'un élément donné, calcul de la densité (cm^{-2}) d'un élément en surface, calcul d'énergie des ions pénétrant avant la diffusion, calcul de l'énergie d'un canal et calcul d'aire ou l'intégral d'un pic [57].

VIII. Conclusion partielle

Le code de simulation RBX permet de simuler les spectres expérimentaux RBS obtenus en mode random ou canalisé. Il peut donner les profils simulés de la concentration de dopants et de défauts.

Chapitre IV

Caractérisation et simulation RBX des spectres expérimentaux RBS

I. Introduction

Dans ce chapitre, nous allons traiter les résultats expérimentaux RBS qui nous ont été fournis dans le cadre de la collaboration de notre équipe de recherche avec le centre de recherche nucléaire d'Alger (CRNA). Les détails des analyses sont mentionnés dans le paragraphe II.1. Les échantillons sont des couches minces de silicium Si(111) implantés par des ions d'antimoine à une énergie de 120 KeV pour une dose de $1 \times 10^{15} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-2}$. Par la suite, un traitement thermique sous vide ($P \approx 10^{-6} \text{ torr}$) a été effectué pour activer le dopant guérir les dégâts induits par l'implantation ionique. Le traitement des spectres RBS se fera par simulation en utilisant le code RBX qui nous a été fourni par son éditeur Pr. A. Kotai, Hongrie. Les valeurs obtenues de R_p et ΔR_p seront comparées avec celles données par simulation SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter). Nous commençons par les spécimens non traités thermiquement puis nous aborderons les échantillons recuits.

II. Etude des échantillons avant traitement thermique

II.1. Conditions expérimentales mises en œuvre

L'analyse des échantillons de silicium ($M_2 = 28.086 \text{ uma}$) dopés par des ions d'antimoine ($M_2 = 121.75 \text{ uma}$) est effectuée dans un appareil RBS dont l'accélérateur est de type Van de Graff produisant des ions d'hélium ($M_1 = 4.003 \text{ uma}$) d'énergie de 2 MeV avec un courant de 100 nA. L'angle d'incidence θ_1 est égal à 0° et l'angle de sortie θ_2 est égal à 15° . Ceci induit un angle de détection θ égal à 165° pour une géométrie IBM (les faisceaux incident, sortant et la normale à la surface du film sont dans le même plan). L'angle solide du détecteur à barrière de surface, Ω , est pris à 2.4 msr. Sa résolution est égale à 50 KeV, la largeur du canal ξ est 2.183 KeV et la distance entre l'échantillon et le détecteur est 10 cm.

II.2. Etalonnage expérimental du détecteur

La calibration d'énergie est déterminée par le réglage à l'amplificateur. Les constantes de conversion a_0 et a_1 sont mesurées à partir du spectre RBS expérimental via deux méthodes en utilisant l'expression suivante [59,60] :

$$E = a_0 + a_1 C$$

Où :

E : Energie des projectiles rétrodiffusés.

a_0 : Energie par canal.

a_1 : Energie lorsque le numéro du canal est égale à zéro.

C : Numéro du canal.

- Le choix de deux positions du canal C_A et C_B à mi-hauteur correspondant à deux éléments connus A et B respectivement dont l'énergie d'incidence est E_0 . Souvent, ces deux éléments convenables peuvent être trouvés à la couche surfacique dans la plupart des échantillons étudiés.

$$E_A = K_A E_0 = a_0 + a_1 C_A$$

$$E_B = K_B E_0 = a_0 + a_1 C_B$$

- Le choix de deux positions du canal C_1 et C_2 à mi-hauteur pour un seul élément dans les deux spectres RBS obtenus pour deux énergies incidentes différentes E_1 et E_2 respectivement.

$$E = K E_1 = a_0 + a_1 C_1$$

$$E = K E_2 = a_0 + a_1 C_2$$

L'obtention d'une bonne précision implique que les masses des éléments A et B ou les énergies E_1 et E_2 doivent être choisies en prenant une différence remarquable entre eux.

Les constantes de la conversion correspondant à nos spectres RBS, pour des impuretés d'antimoine implantées dans le silicium, sont :

$$a_0 = 6.50 \text{ KeV}$$

$$a_1 = 2.18 \text{ KeV /Canal}$$

$$C_{Si} = 513$$

$$C_{Sb} = 800$$

II.3. Section efficace de la diffusion élastique

Les valeurs de la section efficace de la rétrodiffusion des atomes de silicium et d'antimoine fournies par RBX pour des projectiles d'hélium accélérés à une énergie $E_0 = 2000 \text{ KeV}$ et détectés à un angle $\theta = 165^\circ$ sont figurées dans le tableau suivant.

$\sigma_{Si}(E_0)$	$\sigma_{Sb}(E_0)$
$0.252 \times 10^{-24} \text{ cm}^2/\text{ster}$	$3.481 \times 10^{-24} \text{ cm}^2/\text{ster}$

Tableau 7 : Valeurs de la section efficace de la rétrodiffusion fournies par RBX à l'énergie $E_0 = 2000 \text{ KeV}$.

II.4. Section efficace d'arrêt

Notre cas consiste en des projectiles d'hélium accélérés à une énergie $E_0 = 2000 \text{ KeV}$ et une cible solide de silicium contenant une concentration élémentaire d'antimoine ($Si1 Sb0$).

Les deux tableaux suivants élucident les valeurs de la section efficace d'arrêt d'antimoine et de silicium fournies par RBX.

$\varepsilon(E_0)^{SiSb}$	$\varepsilon(K_{Sb}E_0)^{SiSb}$	$[\varepsilon_0]_{Sb}^{SiSb}$
$47.1 \times 10^{-15} \text{ eVcm}^2$	$50.20 \times 10^{-15} \text{ eVcm}^2$	$93.26 \times 10^{-15} \text{ eVcm}^2$

Tableau 8 : Valeurs de la section efficace d'arrêt d'antimoine fournies par RBX.

$\varepsilon(E_0)^{SiSb}$	$\varepsilon(K_{Si}E_0)^{SiSb}$	$[\varepsilon_0]_{Si}^{SiSb}$
$47.1 \times 10^{-15} \text{ eVcm}^2$	$59.0 \times 10^{-15} \text{ eVcm}^2$	$87.61 \times 10^{-15} \text{ eVcm}^2$

Tableau 9 : Valeurs de la section efficace d'arrêt de silicium fournies par RBX.

II.5. Simulation et analyse des spectres RBS en mode random et canalisé

II.5.1. Echantillon vierge en mode canalisé

La figure (29) représente la superposition des spectres RBS/C d'échantillon Si(111) vierge (...) et simulé par RBX (—) en mode canalisé. Un petit décalage en surface est observé (de 1072 à 11190 KeV), qui est dû à l'erreur systématique des énergies mesurées des ions rétrodiffusés via ce mode aligné. De plus, une légère contamination est observée à 1526.1 KeV qui est probablement le cobalt ou le nickel. Ces deux derniers sont parmi les éléments lourds qui contaminent généralement le silicium [61,62].

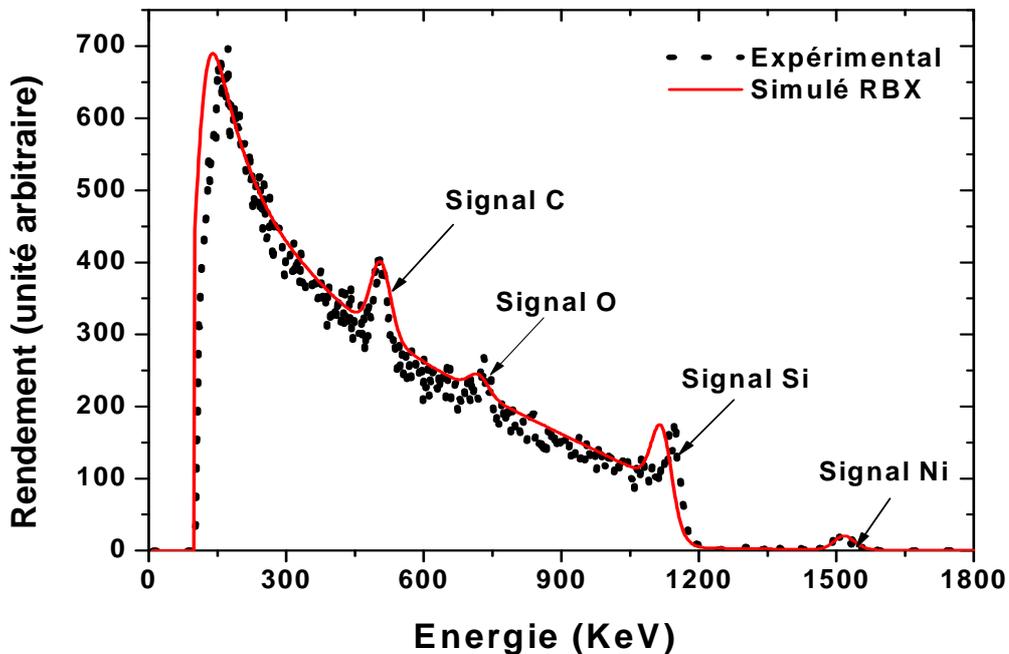


Figure 29 : Superposition des spectres RBS/C d'échantillon Si(111) vierge (...) et simulé par RBX (—) en mode canalisé.

II.5.2. Echantillon implanté non recuit en mode random

D'après la figure (30), le signal du dopant Sb se trouve à 1753.2 KeV (canal 800) et le signal de Silicium Si se trouve à 1126.5 KeV (canal 513). Nous remarquons une bonne superposition des spectres RBS expérimental (...) et obtenu par simulation RBX (—). Le signal des dopants Sb possède une forme gaussienne selon la figure (31).

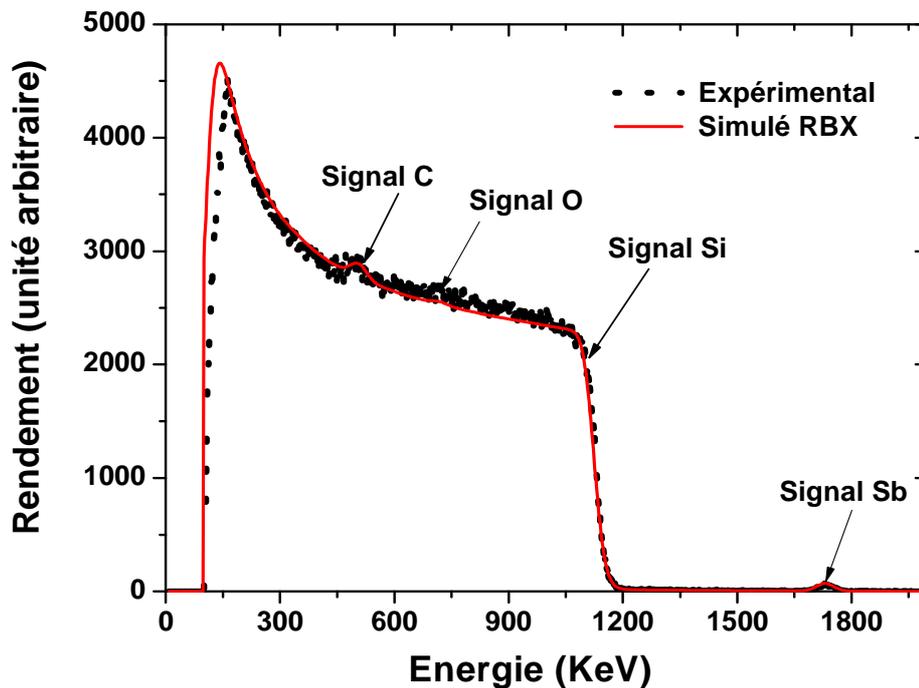


Figure 30 : Superposition des spectres RBS expérimental (...) et obtenu par simulation RBX (—).

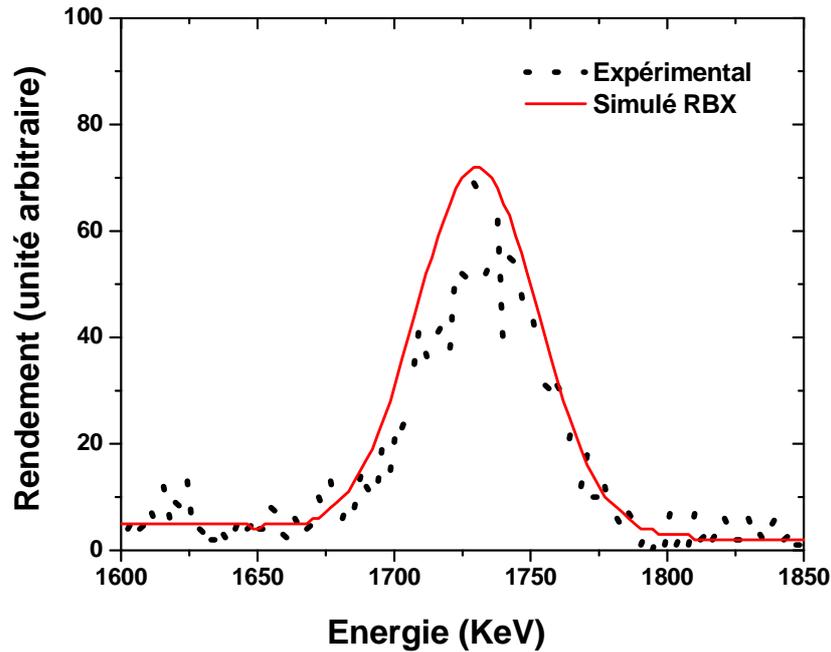


Figure 31: Signal d'antimoine Sb agrandi.

II.5.2.1. Données et paramètres obtenus à partir du spectre RBS expérimental

Les valeurs du facteur de la section efficace d'arrêt [ε_0] sont semi-empiriquement calculées via les deux formules (76) et (77) qui évaluent les sections efficaces d'arrêt $\varepsilon(E_0)$ et $\varepsilon(kE_0)$ (tableau 10). Pour obtenir une bonne précision au calcul de la dose implantée, la concentration maximale et le parcours projeté, on a utilisé les valeurs fournies par RBX (tableaux 8 et 9).

L'analyse de ce spectre random permet d'obtenir :

- **Dose des dopants implantés**

Le calcul semi-empirique de la dose des dopants d'antimoine (éq.82) à partir du spectre expérimental, donne une valeur qui vaut $1.21 \times 10^{15} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-2}$, celle-ci est proche de la valeur utilisée expérimentalement qui est égale à $1 \times 10^{15} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-2}$. Ce qui confirme qu'on a dépassé la dose d'amorphisation qui est égale à $1 \times 10^{14} \text{ ions cm}^{-2}$ pour les ions d'antimoine dans le silicium [2].

- **Concentration maximale**

L'application de deux formules (81) et (83) a permis d'obtenir les deux concentrations qui sont égales à $4.49 \times 10^{19} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-3}$ et $11.486 \times 10^{19} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-3}$ respectivement, tandis que le profil de la concentration simulé par RBX (Fig.32) donne une valeur maximale ($6.96 \times 10^{19} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-3}$). On constate, d'une part, que ces deux valeurs dépassent la solubilité limite d'antimoine dans le silicium à l'équilibre ($2 \times 10^{19} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-3}$ à $1000 \text{ }^\circ\text{C}$) [63]. D'autre part, elles sont du même ordre (10^{19}) mais elles diffèrent un peu de la valeur fournie par le code RBX. En effet, ce dernier applique la formule (123) pour l'approximation de la surface en introduisant des corrections [57].

- **Parcours projeté et déviation standard**

La valeur calculée du parcours projeté des dopants d'antimoine est $R_p = 469.69 \text{ \AA}$, elle convient à celle donnée par *T. Schenkel et al.* pour des ions d'antimoine implantés à un film de silicium pour un tilt de 7° , une énergie de 120 KeV et dose de $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ [64]. La déviation standard selon la formule de Lindhard (éq.46) est $\Delta R_p = 122.27 \text{ \AA}$

La simulation RBX donne également des valeurs assez proches $R_p = 470.00 \text{ \AA}$ et $\Delta R_p = 128.53 \text{ \AA}$. Quant à la simulation SRIM 2013, elle estime ces valeurs à $R_p = 622 \text{ \AA}$ et $\Delta R_p = 156 \text{ \AA}$ qui sont supérieures aux valeurs citées dans la littérature [64] et celles obtenues par RBX, ceci est probablement dû à la différence dans les théories de base de chacune des méthodes.

Le tableau suivant résume les données et les paramètres extraits du spectre expérimental.

Dans le tableau 10, on résume les différents résultats que nous avons pu obtenir à partir du spectre de la figure (30) en utilisant le code RBX.

Données	Paramètres
$A_{Sb} = 1547$	$K_{Si} = 0.5633$
$H_{Si} = 2304$	$K_{Sb} = 0.8767$
$H_{Sb} = 69$	$\varepsilon_0(E_0)^{Si} = 48.61 \times 10^{-15} \text{ eVcm}^2$ $\varepsilon_0(K_{Si}E_0)^{Si} = 63.32 \times 10^{-15} \text{ eVcm}^2$ $[\varepsilon_0]_{Si}^{Si} = 92.942 \times 10^{-15} \text{ eVcm}^2$
$\Delta E_{Sb} = 21.8 \text{ KeV}$	$\varepsilon_0(K_{Sb}E_0)^{Si} = 52.59 \times 10^{-15} \text{ eVcm}^2$ $[\varepsilon_0]_{Sb}^{Si} = 97.06 \times 10^{-15} \text{ eVcm}^2$
$FWHM_{Sb} = 39.3 \text{ KeV}$	$\sigma_{Si}(E_0) = 0.252 \times 10^{-24} \text{ cm}^2/\text{ster}$
$FWHM_{Z_1}^2 = 20.01 \text{ KeV}^2$	$\sigma_{Sb}(E_0) = 3.481 \times 10^{-24} \text{ cm}^2/\text{ster}$
	$N_{Sbmax} = 11.486 \times 10^{19} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-3}$ (éq.83) $N_{Sbmax} = 4.493 \times 10^{19} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-3}$ (éq.81)
	Dose : $(N_{Sb}\Delta x) = 1.211 \times 10^{15} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-2}$
	$R_p = 469.67 \text{ \AA}$ $\Delta R_p = 122.27 \text{ \AA}$ (éq.46)

Tableau 10 : Données et paramètres extraits, du spectre expérimental en mode random, par simulation à l'aide du code RBX.

II.5.2.2. Profil de la concentration des ions d'antimoine

Pour obtenir le profil de concentration des atomes d'antimoine dans la cible de silicium, nous avons utilisé l'approximation en surface.

Le profil simulé est représenté sur la figure 32. Il est clair que la courbe commence de zéro et ceci est probablement dû en raison de la dose d'antimoine élevée, la pulvérisation des atomes de silicium en surface de la cible et l'arrêt des ions par les ions déjà implantés. Cet effet a aussi été observé lors de l'implantation des ions lourds du plomb à 20 KeV pour des doses élevées dans le silicium [65].

Par ailleurs, on remarque une asymétrie du profil où une queue s'étend vers la surface. Ceci suggère que la distribution la plus convenable est celle de Pearson IV qui est, en effet, proche des distributions expérimentales [66]. L'obliquité de la courbe est négative ($\gamma < 0$), ceci est dû à la dose relativement élevée ($1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) et la pulvérisation des atomes de silicium qui se trouvent en surface par les ions lourds d'antimoine, Le coefficient de la pulvérisation est lié au rapport M_1/M_2 , l'énergie E et la température. Sa valeur la plus grande est atteinte lorsque l'énergie correspond au maximum du pouvoir d'arrêt nucléaire [12].

La pulvérisation des atomes d'antimoine est faible. Il est reporté que l'effet de la pulvérisation causant la perte des dopants est négligé pour des doses d'antimoine et d'arsenic inférieures de $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ [67]. Par conséquent, l'augmentation de la dose des dopants d'antimoine dans la cible de silicium va conduire à un arrêt intense des autres ions d'antimoine incidents surtout que la pénétration des ions lourds est souvent non profonde. Cela a été constaté par *Yi-Sheng Lai et al.* [68] lors de l'implantation des ions Sb à une dose ($1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$) dans le silicium Si(100) pour des énergies entre 10 et 70 KeV.

D'autre part, le taux de canalisation des atomes d'antimoine est faible. Ceci est attribué au tilt d'échantillons lors de leur implantation et les endommagements créés par les premiers ions pénétrant la cible. La même chose a été observée par *T. Schenkel et al.* [64] où le taux de canalisation du profil simulé était vraiment faible pour un tilt de 7° , une énergie de 120 KeV et une dose qui valait $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

On note que le décalage de la distribution des dopants vers la surface a également été constaté pour des ions légers à une énergie élevée où la rétrodiffusion vers la surface était importante à cause de la collision nucléaire. C'est le cas du bore implanté dans le silicium pour des énergies élevées [69].

Dans le cas de notre spectre, la profondeur complète de l'antimoine implanté est extraite du profil simulé par le programme RBX, elle est égale à 875 Å. Ce résultat est en accord avec celui calculé empiriquement soit 846.67 Å. Cette profondeur est adéquate à la fabrication des jonctions ultra-superficielles exigeant une valeur inférieure à 1000 Å [70].

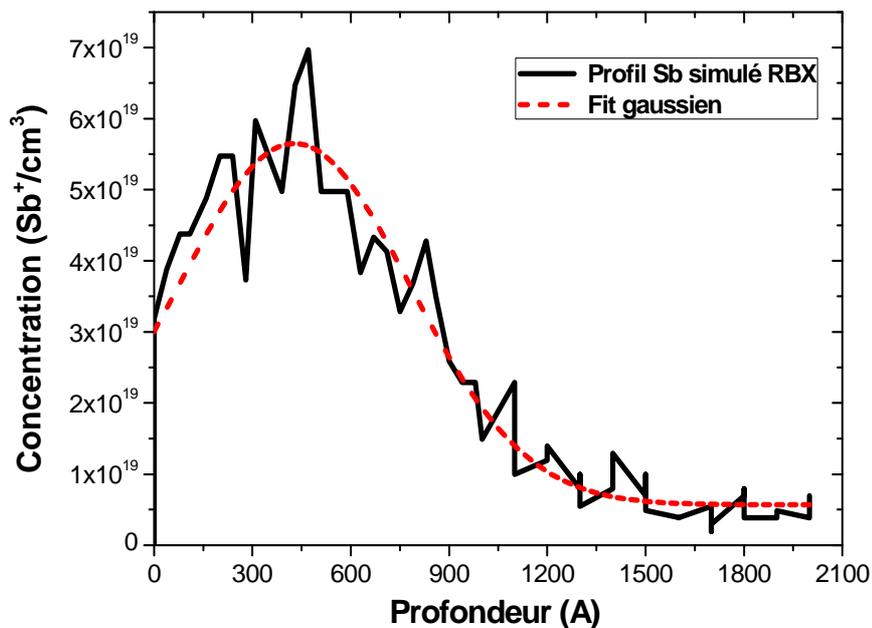


Figure 32 : Superposition du profil de concentration d'antimoine simulé par RBX (—) avec un fit de type gaussien (....).

II.5.3. Echantillon implanté non recuit et analysé en mode canalisé

A partir de la figure, on observe une bonne superposition entre les spectres expérimental (....) et simulé (—) par le code RBX (Fig.33). La comparaison du signal d'antimoine obtenu en mode aligné avec le signal d'antimoine en mode random révèle que la majorité des ions d'antimoine se trouvent en sites interstitiels. Donc, ils sont électriquement inactifs. Ainsi, le signal de silicium élucide un pic de surface élevé, ce dernier prouve que l'endommagement de la cible est causé par l'implantation des ions d'antimoine. L'épaisseur de la couche endommagée est estimée à 1100.83 Å, cette valeur indique que la couche amorphe comprend les ions d'antimoine implantés.

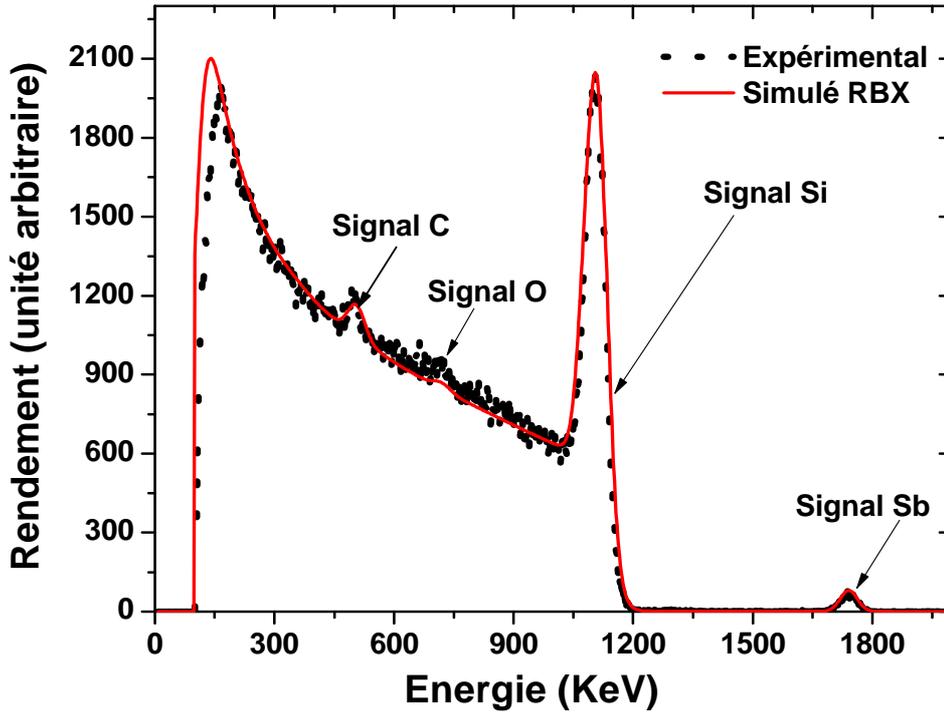


Figure 33 : Superposition des spectres RBS expérimental (...) et simulé (—) pour un échantillon Si(111) implanté ($1 \times 10^{15} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-2}$) et non recuit.

II.5.3.1. Profil de la concentration de défauts

Le profil de la concentration des défauts est simulé à partir du spectre d'échantillon implanté en mode aligné. D'après la figure (34), le parcours projeté des défauts R_D est égal à 151.26 Å. Cette valeur est assez inférieure au parcours projeté des ions implantés. Cela signifie que le maximum de la distribution des défauts est plus proche de la surface que le maximum de la distribution des ions. Cette observation a été reportée pour le bore implanté dans le silicium, en dépit qu'il est léger, à une énergie de 60 KeV où $R_D = 0.8 R_p$ [8]. Une forte concentration du désordre se trouve proche de la surface où elle dépasse la densité de silicium cristallin $N = 4.977 \times 10^{22} \text{ atomes cm}^{-3}$. Elle reste relativement élevée en profondeur où le taux d'amorphisation atteint presque 70 % de la profondeur 1100 Å qui représente approximativement l'épaisseur de la couche amorphe. Par conséquent, il y a une couche amorphe continue ce qui signifie qu'il s'agit d'un dépassement du seuil d'amorphisation dû à cette dose [8].

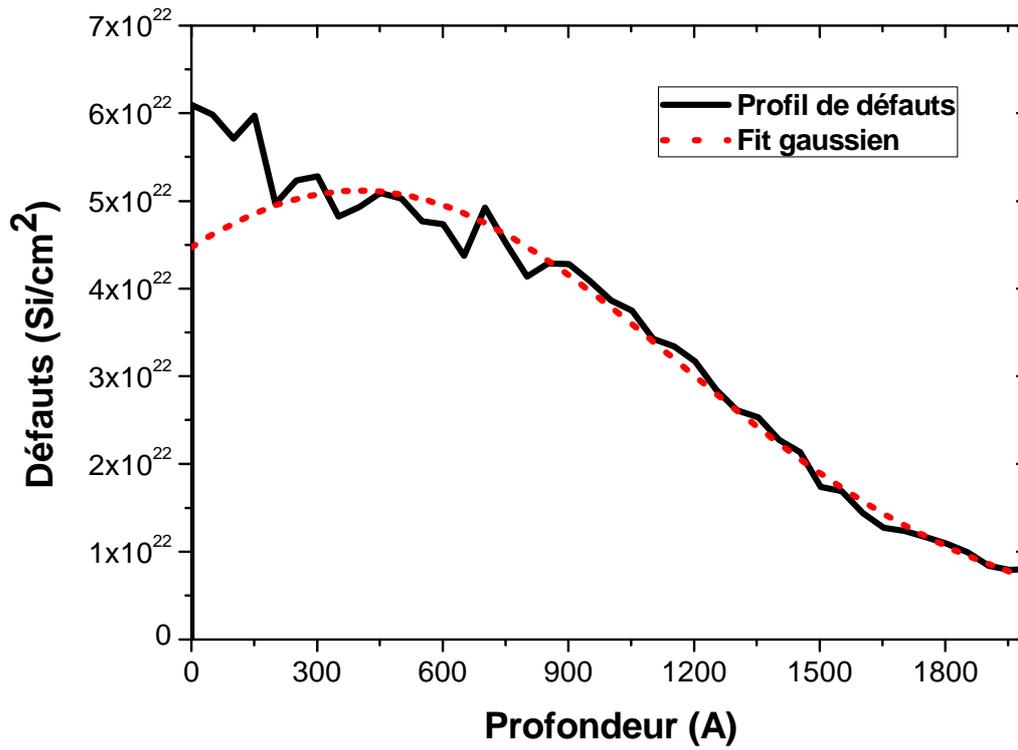


Figure 34 : Superposition du profil de concentration de défauts (Si) simulé par RBX (—) avec un fit de type gaussien (....).

III. Etude des échantillons après traitement thermique

III.1. Simulation et analyse du spectre RBS/C

On rappelle que l'échantillon est une couche mince de silicium Si(111) implantée par une dose d'antimoine $1 \times 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ à une énergie de 120 KeV. Le traitement thermique conventionnel pendant 30 minutes à une température qui est égale à 900 °C a permis une recristallisation par épitaxie en phase solide (EPS). Nous constatons une bonne superposition entre les spectres expérimental (...) et simulé (—).

D'après la figure (35), la profondeur de la couche amorphe est réduite en raison de la recroissance EPS, et la chute considérable du signal des dopants en positions interstitielles.

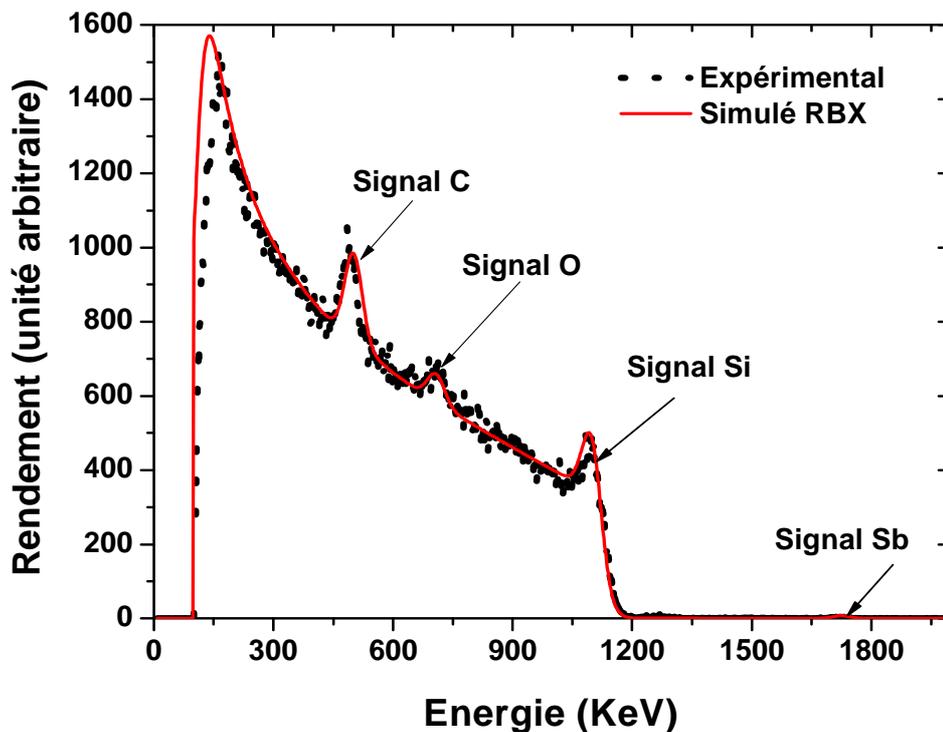


Figure 35 : Superposition des spectres RBS expérimental (...) et simulé (—) pour un échantillon Si(111) implanté ($1 \times 10^{15} \text{ Sb}^+ \text{ cm}^{-2}$) et recuit.

III.2. Simulation du profil de défauts après recuit thermique

Nous constatons que la concentration des défauts a diminué après le traitement thermique. Les défauts restant possèdent un taux inférieur de 20 % et ils se trouvent à une profondeur moins de 550 Å (Fig.36).

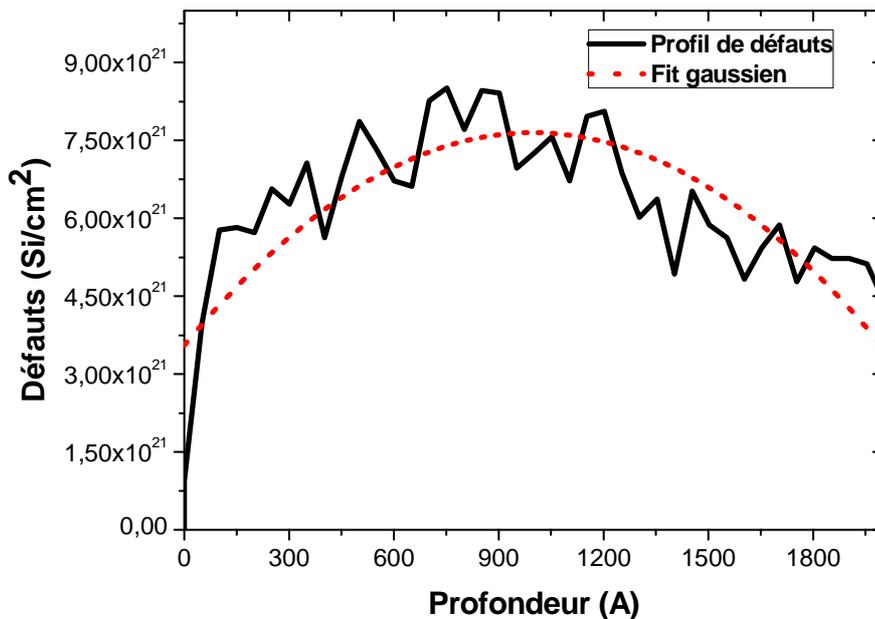


Figure 36 : Superposition du profil de concentration de défauts (Si) simulé par RBX (—) avec un fit de type gaussien (....).

III.3. Comportement des ions d'antimoine

Comme il est connu, l'interface amorphe / cristal avance en surface lors de la recristallisation par épitaxie en phase solide où le désordre s'organise selon l'orientation de la partie cristal. Dès que l'interface arrive à une impureté, cette dernière monte en un site substitutionnel. Ce fait permet de mettre en substitution les dopants interstitiels ce qui explique la chute du signal des ions d'antimoine (Fig.35) et par conséquent leur activation électrique.

En effet, il y a une redistribution des ions d'antimoine à cause de la diffusion et l'oxydation. Selon le spectre simulé en mode canalisé, la profondeur de la couche du dioxyde de silicium a augmenté de 100 Å. Pendant l'oxydation, l'interface silice / silicium bouge de la surface vers la profondeur, des atomes de silicium sont éjectés et poussés vers la région silicium de l'interface en causant une augmentation des défauts (silicium interstitiel et lacunes).

Ce processus s'applique également aux ions d'antimoine où ils sont poussés et ségrégués au bord de silicium à la nouvelle interface SiO_2/Si , ce phénomène est appelé le *snow-plow* [71]. Cet effet est mentionné en littérature pour l'arsenic et l'antimoine dans le silicium [23], le germanium dans la matrice $SiGe$ [72] et le bore pendant la croissance du siliciure de nickel où le bore est poussé vers le silicium à l'interface $NiSi/p - Si$ [73].

La profondeur des ions d'antimoine interstitiels après le recuit a légèrement augmenté en dépit de la concentration qui a diminué. Nous supposons qu'il y a une diffusion interstitielle limitée d'antimoine.

IV. Conclusion partielle

La simulation RBX des spectres RBS correspondant aux échantillons de silicium Si(111) (vierge, implanté non recuit et implanté recuit en modes random ou canalisé) a permis d'évaluer le parcours projeté (R_p) et la déviation standard (ΔR_p), d'obtenir le profil de concentration d'ions d'antimoine et de défauts et d'estimer l'épaisseur de la couche amorphe avant et après le recuit.

Chapitre V

Caractérisation des propriétés mécaniques des échantillons

I. Introduction

Les tests de la micro-dureté sont réalisés sur les deux faces des films de silicium, c'est-à-dire les surfaces polie et non polie. Chaque plaquette de silicium a été déposée sur un support en acier afin de faire la mesure de la dureté. En raison de l'épaisseur faible des échantillons, la dureté de Knoop a été utilisée avec un poids de 50 gf. Cinq échancrures ont été prises et enregistrées pour chaque essai. Les résultats sont exposés dans les tableaux ci-dessous pour chaque échantillon. La dureté moyenne de Knoop peut être calculée à partir de ces cinq mesures.

II. Calcul de la dureté moyenne de Knoop et sa déviation standard

II.1. Silicium vierge Si(111)

Le tableau suivant élucide les cinq valeurs de la dureté de Knoop obtenues pour chaque face d'échantillon.

Numéro Du test	Surface 1 polie (Kg/mm^2)	Surface 2 non polie (Kg/mm^2)
1	1044	1085
2	1020	1129
3	1068	1138
4	1031	1130
5	1060	1145

Tableau 11 : Cinq valeurs de la dureté de Knoop obtenues pour chaque face de l'échantillon.

Le tableau suivant indique la valeur moyenne de Knoop et sa déviation standard qui sont calculées pour les deux faces d'échantillon.

Surface	Valeur Moyenne (Kg/mm^2)	Déviation Standard (Kg/mm^2)
Surface 1	1044.6	19.84
Surface 2	1125.4	23.50

Tableau 12 : Valeur moyenne de la dureté de Knoop et sa déviation standard calculées pour les deux faces de l'échantillon.

II.2. Silicium Si(111) implanté à $5 \text{ E}15 \text{ Sb}^+/\text{cm}^2$ pour 120 KeV

Le tableau suivant élucide les cinq valeurs de la dureté de Knoop obtenues pour chacune des deux faces du spécimen.

Numéro Du test	Surface non dopée (Kg/mm^2)	Surface dopée (Kg/mm^2)
1	1094	969
2	1085	801
3	1035	775
4	1078	857
5	1092	1094

Tableau 13 : Cinq valeurs de la dureté de Knoop obtenues pour chaque face de l'échantillon.

Le tableau suivant indique la valeur moyenne de la dureté de Knoop et sa déviation standard qui sont calculées pour les deux faces de l'échantillon.

Surface	Valeur Moyenne (Kg/mm^2)	Déviation Standard (Kg/mm^2)
Surface non dopée	1076.8	24.71
Surface dopée	899.2	131.97

Tableau 14 : Valeur moyenne de la dureté de Knoop et sa déviation standard calculées pour les deux faces de l'échantillon.

II.3. Silicium Si(111) implanté à $5 \text{ E}15 \text{ Sb}^+/\text{cm}^2$ pour 120 KeV et recuit à $900 \text{ }^\circ\text{C}$ pendant 30 minutes sous vide

Le tableau suivant élucide les cinq valeurs de la dureté de Knoop obtenues pour les deux faces de l'échantillon.

Numéro Du test	Surface non dopée (Kg/mm^2)	Surface dopée (Kg/mm^2)
1	920	1185
2	910	1273
3	1013	1261
4	1060	1230
5	997	1252

Tableau 15 : Cinq valeurs de la dureté de Knoop obtenues pour chaque face de l'échantillon.

Le tableau suivant indique la valeur moyenne de la dureté de Knoop et sa déviation standard qui sont calculées pour les deux faces en question.

Surface	Valeur Moyenne (Kg/mm^2)	Déviati on Standard (Kg/mm^2)
Surface non dopée	980.0	63.79
Surface dopée	1239.8	34.64

Tableau 16 : Valeur moyenne de la dureté de Knoop et sa déviation standard calculées pour les deux faces du spécimen.

II.4. Silicium implanté à $1.5 \text{ E}16 \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 100 KeV et non recuit

Le tableau suivant élucide les cinq valeurs de la dureté de Knoop obtenues seulement pour la surface polie de l'échantillon.

Numéro Du test	Surface polie (Kg/mm^2)	Surface non polie
1	975	Impossible de localiser l'échancrure de Knoop, donc la dureté n'a pas été mesurée.
2	985	
3	1011	
4	1045	
5	1003	

Tableau 17 : Cinq valeurs de la dureté de Knoop obtenues seulement pour la surface polie de l'échantillon.

Le tableau suivant indique la valeur moyenne de la dureté de Knoop et sa déviation standard qui sont seulement calculées pour la face polie du spécimen.

Surface	Valeur Moyenne (Kg/mm^2)	Déviati on Standard (Kg/mm^2)
Surface polie	1003.8	27.07

Tableau 18 : Valeur moyenne de la dureté de Knoop et sa déviation standard calculées seulement pour la surface polie de l'échantillon.

II.5. Silicium implanté à $1.5 \text{ E}16 \text{ As}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 100 KeV et recuit sous vide ($3 \times 10^{-6} \text{ torr}$) à $900 \text{ }^\circ\text{C}$ pendant 30 minutes

Le tableau suivant élucide les cinq valeurs de la dureté de Knoop obtenues pour les deux faces de l'échantillon.

Numéro Du test	Surface non dopée (Kg/mm^2)	Surface dopée (Kg/mm^2)
1	980	1480
2	940	1510
3	963	1530
4	971	1493
5	948	1487

Tableau 19 : Cinq valeurs de la dureté de Knoop obtenues pour les deux faces de l'échantillon.

Le tableau suivant indique la valeur moyenne de la dureté de Knoop et sa déviation standard qui sont calculées pour les deux faces.

Surface	Valeur Moyenne (Kg/mm^2)	Déviation Standard (Kg/mm^2)
Surface non dopée	960.4	16.38
Surface dopée	1500.0	20.11

Tableau 20 : Valeur moyenne de la dureté de Knoop et sa déviation standard calculées pour les deux faces de l'échantillon

III. Discussion des résultats

III.1. Silicium vierge Si(111)

La mesure de la dureté de l'échantillon de silicium vierge Si(111) sur les deux faces a révélé qu'elle est différente pour ces deux surfaces. Ceci peut être attribué à la différence de la microstructure des deux parties et précisément la face 2. En effet, pour cette dernière presque toutes les valeurs mesurées dépassent la valeur la dureté de Knoop citée en littérature pour le silicium mono cristallin, c'est-à-dire entre 850 et 1100 Kg/mm^2 [74]. On suppose que la face 2 contient des anomalies à la surface. En revanche, les valeurs de la micro-dureté de la face 1 sont dans l'intervalle mentionné en littérature ce qui signifie que cette face possède une cristallinité surfacique.

III.2. Silicium Si(111) implanté à $5 E15 Sb^+ cm^{-2}$ pour 120 KeV

Les résultats montre que la face non dopée (région brillante) n'est pas affectée par le processus d'implantation car les valeurs sont entre 850 et 1100 Kg/mm^2 [74]. Concernant la surface dopée, il y a une diminution de la dureté sauf pour le cinquième essai. Il est reporté que le dopage augmente généralement la dureté et celle-ci dépend beaucoup de la dose implantée, l'énergie d'implantation et surtout l'endommagement généré dans le substrat. En effet, la dureté de la surface augmente proportionnellement avec la dose implantée jusqu' à un maximum correspondant à une dose critique. A partir de celle-ci, elle commence à diminuer mais elle reste supérieure à la dureté originale de l'échantillon (surface) [49]. Ainsi, on suggère que la dose élevée de l'antimoine implanté a créé une amorphisation énorme de la surface si bien que cette dernière soit devenue très molle à certains points de la surface, d'où ces valeurs non élevées de la dureté.

III.3. Silicium Si(111) implanté à $5 E15 Sb^+/cm^2$ pour 120 KeV et recuit à 900 °C pendant 30 minutes sous vide

Les résultats montrent que la dureté de la surface brillante demeure dans l'intervalle original de silicium monocristallin non dopé. Pour la surface dopée, elle montre une hausse de la dureté au point qu'elle dépasse la dureté de silicium monocristallin vierge. Ceci est prévisible car généralement le recuit augmente la valeur de la dureté de surface [49]. Cette augmentation qui dépend du degré de la guérison de la surface amorphe, elle prend des valeurs élevées au fur et mesure que le temps de recuit s'élève. Il faut noter qu'il y a un moment où elle diminue relativement mais elle reste comme même appréciable [49].

III.4. Silicium implanté à $1.5 \text{ E16 As}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 100 KeV et non recuit

Les résultats montrent que la surface brillante (polie) n'est pas affectée par l'dose élevée de l'implantation ionique.

III.5. Silicium implanté à $1.5 \text{ E16 As}^+ \text{ cm}^{-2}$ pour 100 KeV et recuit sous vide ($3 \times 10^{-6} \text{ torr}$) à $900 \text{ }^\circ\text{C}$ pendant 30 minutes

Les résultats montrent que la surface brillante (polie) n'est pas affectée par l'effet du recuit bien que les valeurs aient relativement diminué à cause du chauffage relatif. Tandis que la surface dopée a atteint une dureté super importante en raison de la guérison considérable de la surface amorphe.

IV. Conclusion partielle

L'arsenic a montré une dureté assez supérieure que celle produite par l'antimoine car la recristallisation de la cible dopée par l'arsenic est meilleure que celle de l'antimoine. En effet, l'amorphisation causée par l'antimoine est élevée par rapport à celle de l'arsenic.

Conclusion générale

Conclusion générale

Le travail présenté a abordé l'étude de l'implantation ionique de l'antimoine ou l'arsenic dans les couches minces de silicium. La spectroscopie de rétrodiffusion Rutherford (RBS) en modes random et aligné a été utilisée pour obtenir des spectres sur les spécimens implantés à l'antimoine. Egalement, un test de la micro-dureté de Knoop a été performé pour des échantillons implantés à l'antimoine ou à l'arsenic.

Expérimentalement, les couches minces analysées par RBS sont de silicium monocristallin Si(111) vierge et implanté à l'antimoine Sb^+ par une dose de $1 \times 10^5 \text{ ions cm}^{-2}$ pour une énergie de 120 KeV. Tandis que le test la micro-dureté de Knoop a été effectué pour des échantillons silicium monocristallin Si(111) implanté à l'antimoine Sb^+ par une dose de $5 \times 10^5 \text{ ions cm}^{-2}$ pour une énergie de 120 KeV ou à l'arsenic As^+ par une dose de $1.5 \times 10^{16} \text{ ions cm}^{-2}$ pour une énergie de 100 KeV. Tous les spécimens implantés ont subis à un traitement thermique à 900 °C sous vide pendant trente minutes.

Les spectres RBS expérimentaux ont été simulés par le code RBX qui nous a permis d'estimer les paramètres désignant l'implantation ionique. Les résultats obtenus étaient en agrément avec ceux trouvés par simulation SRIM 2013 et avec la littérature. Grace aux spectres en mode canalisé, le RBX a permis de donner les profils de la concentration des dopants et des défauts respectivement et aussi d'estimer l'épaisseur de la couche endommagée, Ceux-ci ont permis d'avoir une idée sur l'activation électrique des dopants et la guérison des cibles endommagées. Il est à noter que le programme RBX dispose d'un bon outil permettant une simulation de précision élevée.

Quant au test de micro-dureté de Knoop, nous avons pu découvrir l'effet de l'implantation ionique sur le durcissement de la surface des spécimens implantés qu'il soit avant ou après le recuit thermique.

Nous devons mentionner que les résultats obtenus ont été en bon accord avec ceux cités en littérature.

En perspective, les enjeux sont de doper une concentration très précise à une profondeur infiniment petite et un dégât minimal. Cela s'appuie sur l'utilisation des appareils modernes et de jouer sur des paramètres comme la pureté des cibles à être implantées et son espèce, la nature des dopants et la cible, l'énergie et la dose.

Annexe

La simulation par le code SRIM

I. Introduction

SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) est un programme informatique généré par Ziegler Biersack et Littmark. Il s'appuie sur les méthodes de Monté Carlo et il simule le processus de pénétration et de ralentissement d'un projectile dans un matériau cible [32]. Ce code traite les matériaux cibles amorphes et l'interaction entre la particule incidente et l'atome individuel est décrite par l'approximation des collisions binaires. Cette dernière s'articule sur l'exclusion de deux collisions simultanées avec le même atome cible. D'où, l'absence d'influence du voisinage atomique [26]. Le calcul du pouvoir d'arrêt nucléaire est effectué par la formule donnée par Ziegler Biersack et Littmark (ZBL) (éq.27) dont Le potentiel interatomique écranté utilisé est le potentiel universel (ZBL) [36]. 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, est 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 [20,23]. Pour les vitesses élevées, le pouvoir d'arrêt électronique est calculé par la formule de Bethe (éq.36) [26]. Le pouvoir d'arrêt total est obtenu par simple sommation des deux pouvoirs précédents qui sont considérés indépendants [26].

Le programme SRIM inclut des applications multiples : des tableaux d'arrêt et du parcours des ions, transport des ions dans la matière TRIM et l'application SR-module.

I.1 Tableaux d'arrêt et de parcours

On obtient les valeurs du pouvoir d'arrêt nucléaire, de pouvoir d'arrêt électronique, du parcours projeté, de l'écart au parcours projeté et de la déviation latérale. Ces valeurs sont affichées selon le choix des paramètres d'entrée cités ci-dessous [75].

I.2 TRIM

TRIM (Transport of Ion in Matter) est une répétition successive d'un groupe des programmes nommés SRIM (Stopping and Range of ion in Matter). Il accepte des cibles complexes comprenant jusqu'à 8 couches différentes et il permet le choix des projectiles (énergie, angle d'incidence, dose) et des cibles (les éléments constitutants, l'épaisseur et l'état solide ou gazeux) [75,76]. 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 [75,76]. Le programme peut être mis en pause à n'importe quel moment et repris plus tard car les résultats du calcul peuvent être enregistrés [75].

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'incident 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 [75] :

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 $M_1 \approx M_2$. Sinon (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.

I.3 L'application SR-module

C'est un programme exécutable indépendant qui peut être utilisé pour d'autres applications qui exigent les pouvoirs d'arrêt et les parcours d'ion [75].

II. Calcul des défauts

La simulation des défauts se fait selon le choix de l'option de calcul :

➤ Calcul rapide

Ce choix ignore le calcul des cascades des atomes cibles et limite le calcul aux trajectoires des ions. Il est basé sur la méthode de Kinchin-Pease [75].

➤ Calcul complet

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 [75]. 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 subissant 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 la coupure, le programme revient à nouveau à suivre le mouvement de l'implanté original avec sa nouvelle énergie et direction 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 du déplacement E_d . Autrement 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 [77]

III. 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 lorsque ces deux énergies sont inférieures à l'énergie de seuil du déplacement E_d . Le nombre des phonons créés est déduit de ces énergies produisant des vibrations dans le spécimen [75].

IV. Pulvérisation

L'atome de la cible qui atteint la surface peut quitter le matériau si cet atome dispose de l'énergie et du moment suffisants [3].

Références

- [1] E. Rimini, Ion Implantation: Basics to Devices Fabrication, Kluwer Academic publishers, USA, (1995).
- [2] Bernd Schmidt, Klaus Wetzig, Ion Beams in Materials Processing and Analysis, Springer –Verlag Wien, (2013).
- [3] Xiao-Dong Xiang, Ichiro Takeuchi, Combinatorial Materials Synthesis, Marcel Dekker, Inc. USA, (2003).
- [4] Jeffrey Hamilton Warner, Displacement Damage-induced Electrical and Structural Effects in GaAs, ProQuest Information and Learning Company, USA, (2008).
- [5] I. J. Nagrath, Electronic devices and Circuits, Prentice-Hall of India, New Delhi, (2007).
- [6] Matthew D. McCluskey, Eugene E. Haller, Dopants and Defects in Semiconductors, Taylor & Francis Group, LLC, USA (2012).
- [7] Zhengwei Li, An Introduction to Electronic Materials for Engineers, 2nd edition, World Scientific Publishing Co. Pte.Ltd, Singapore, (2011).
- [8] Badih El-Kareh, Fundamentals of Semiconductor Processing Technologies, Kluwer Academic publishers, USA, (1995).
- [9] W. Dietze, E. Doering, P. Glasow, Technology of Si, Ge, and SiC / Technologie Von Si, Ge und SiC, Springer -Verlag Berlin Heidelberg, Germany, (1984).
- [10] B. Somanathan Nair, S. R. Deepa, Basic Communication and information Engineering, International Publishing House Pvt. Ltd New Delhi, India, (2009).
- [11] Peter Robin Morris, A History of the World Semiconductor Industry, Institution of Electrical Engineers Peter Peregrinus Ltd. UK, (1990).
- [12] Annie Baudrant, Annie Baudrant, Silicon Technologies: Ion Implantation and Thermal Treatment, ISTE Ltd, UK and John Wiley & Sons, Inc.USA, (2011).
- [13] J. P. Colinge, C.A. Colinge, Physics of Semiconductor Devices, Kluwer Academic Publishers, USA, (2002).

- [14] Michael Nastasi, James W. Mayer, Ion Implantation and Synthesis of Materials, Springer Verlag Berlin Heidelberg New York, (2006).
- [15] Emile Knystautas, Engineering Thin Films and Nanostructures with Ion Beams, Taylor & Francis Group LLC USA, (2005).
- [16] K. Siegbahn, Ragnar Hellborg, Electrostatic Accelerators: Fundamentals and Applications, Springer -Verlag Berlin Heidelberg, Netherlands, (2005).
- [17] D. Widmann, H. Mader, H. Friedrich, Technology of Integrated Circuits, Springer -Verlag Berlin Heidelberg, Germany, (2000).
- [18] Jean-Pierre Hansen, I.R. McDonald, Theory of Simple Liquids: with Applications to Soft Matter, 4th edition, Elsevier Ltd, Poland, (2013).
- [19] Zhong Lin Wang, Yi Liu, Ze Zhang, Handbook of nano-phase and nano-structured materials, Kluwer Academic/ Plenum publishers New York, (2003).
- [20] James F. Ziegler, J. P. Biersack, Matthias D. Ziegler, SRIM, the Stopping and Range of Ions in Matter, SRIM Co, USA, (2008).
- [21] N.V. Richardson, S. Holloway, Dynamics, Elsevier B.V, Volume 3, 1st edition UK, (2008).
- [22] Yves Pauleau, Materials Surface Processing by Directed Energy Techniques, Elsevier Ltd, UK, (2006).
- [23] J.F. Ziegler, Ion Implantation Science and Technology, Academic Press, Inc, USA, (1984).
- [24] Gary S. Was, Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys, Springer -Verlag Berlin Heidelberg New York, (2007).
- [25] Ivor Brodie, Julius J. Murray, The Physics of Micro/Nano-Fabrication, Plenum Press New York, (1992).
- [26] Michael Nastasi, Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications, Cambridge University Press, (1996).

- [27] Yoshio Nishi, Robert Doering, Handbook of Semiconductor Manufacturing Technology, Second Edition, Taylor & Francis Group, LLC, USA, (2008).
- [28] Pallab Bhattacharya, Roberto Fornari, Hiroshi Kamimura, Comprehensive Semiconductor Science and Technology, Elsevier B.V. Italy, (2011).
- [29] Liangdeng Yu, Zengliang Yu, T. Vilaithong, Introduction to Ion Beam Biotechnology, (2007).
- [30] Mustafa Sacit Cetiner, Development of an Ion Time-of-flight Spectrometer for Neutron Depth Profiling, a thesis in nuclear engineering for the degree of doctor of Philosophy of the Pennsylvania state university, USA, (2008).
- [31] Dietmar Fink, Fundamentals of Ion-Irradiated Polymers, Springer -Verlag Berlin Heidelberg, Germany, (2004).
- [32] Arvidas Galdikas, Liūdvikas Praniāvichius, Interaction of Ions with Condensed Matter, Nova science publishers, Inc. NewYork, (2000).
- [33] Kenneth A. Jackson Kinetic, Processes: Crystal Growth, Diffusion, and Phase Transitions in Materials, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, (2010).
- [34] Paul Siffert, Eberhard Krimmel, Silicon: Evolution and Future of a Technology, Springer -Verlag Berlin Heidelberg, Germany, (2004).
- [35] E. F. Schubert, Delta-doping of Semiconductors, Cambridge University Press, (1996).
- [36] H. R. Verma, Atomic and Nuclear Analytical Methods, Springer -Verlag Berlin Heidelberg, (2007).
- [37] J. M. Walls, Methods of Surface Analysis: Techniques and Applications, Cambridge University Press, UK, (1989).
- [38] Dieter K. Schroder, Semiconductor Material and Device Characterization, John Wiley & Sons, Inc. USA, (2006).

- [39] Wei-Kan Chu, James W. Mayer Marc-A Nicolet, Backscattering spectrometry Academic Press, Inc. USA, (1978).
- [40] Terry L. Alford, L.C. Feldman, James W. Mayer, Fundamentals of Nanoscale Film Analysis, Springer Science + Business Media, Inc. USA, (2007).
- [41] Richard K. Cooper, Claudio Pellegrini, Modern Analytic Mechanics, Kluwer Academic/Plenum Publishers New York, USA, (1999).
- [42] James W. Mayer, E. Rimini, Ion Beam Handbook for Material Analysis, Academic Press, Inc. USA, (1977).
- [43] R. Curtis Bird, J. S. Williams, Ion Beams for Materials Analysis, Academic Press Australia, (1989).
- [44] Khalid Hossain, A Novel Process for Germanium Silicide Thin Film Synthesis, (2007).
- [45] C. Suryanarayana, Experimental Techniques in Materials and Mechanics, Taylor & Francis Group, LLC, USA, (2011).
- [46] Horst Czichos, Tetsuya Saito, Leslie Smith, Springer Handbook of Materials Measurement Methods, Springer Science + Business Media, (2006).
- [47] Anthony C. Fischer-Cripps, Nano-indentation, (2011).
- [48] William F. Gale, Terry C. Totemeier, Smithells Metals Reference Book, Elsevier, Inc. Netherlands, (2004).
- [49] R.J. Brook, Concise Encyclopedia of Advanced Ceramic Materials, Pergamon Press plc, UK, (1991).
- [50] Phillips' Science of Dental Materials, Elsevier Saunders, China, (2013).
- [51] B. L. Bramfitt, Metallographer's Guide Practice and Procedures for Irons and Steels, ASM International USA (2002).

- [52] Helmi A. Youssef, Hassan A. El-Hofy, Mahmoud H. Ahmed, Manufacturing Technology: Materials, Processes, and Equipment, Taylor & Francis Group, LLC, USA, (2012).
- [53] Ammar Grous, Applied Metrology for Manufacturing Engineering, Wiley, (2013).
- [54] Jon L. Dossett, Howard E. Boyer Practical Heat Treating, ASM International, USA, (2006).
- [55] Horst Czichos, Tetsuya Saito, Leslie E. Smith, Springer Handbook of Metrology and Testing, Springer -Verlag Berlin Heidelberg, (2011).
- [56] Edgar Lara-Curzio, Mich, 28th International Conference on Advanced Ceramics and Composites B, The American Ceramics Society, USA, (2004).
- [57] E. Kotai, Computer methods for analysis and simulation of RBS and ERDA spectra, KFKI Research Institute for Particle and Nuclear Physics, P.O. Box 49, H-1525 Budapest, Hungary, (1994).
- [58] RBX help.
- [59] Zeev B. Alfassi, Instrumental Multi-Element Chemical Analysis, Kluwer Academic Publishers, (1998).
- [60] Aaron Couture, Fluorine-19 (γ) neon-20 and the Stellar Carbon-nitrogen-oxygen Burning Cycle, a dissertation submitted to the graduate school of the university of Notre Dame in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy, USA, (2005).
- [61] Dinesh C. Gupta, George A. Brown, Gate Dielectric Integrity: Material, Process, and Tool, ASTM, (2000).
- [62] C. L. Claeys, High Purity Silicon VI, (2000).
- [63] R. A. Levy, Roland Albert Levy, Microelectronic Materials and Processes, Kluwer Academic publishers, Netherlands, (1989).

- [64] T. Schenkel, J. A. Liddle, and A. Persaud, A. M. Tyryshkin and S. A. Lyon, R. de Sousa and K. B. Whaley, J. Bokor and J. Shangkuan, I. Chakarov, Electrical activation and electron spin coherence of ultralow dose antimony implants in silicon, *APPLIED PHYSICS LETTERS* 88, 112101, (2006).
- [65] Muradin Abubekirovich Kumakhov, Fadeĭ Fadeevich Komarov, *Energy Loss and Ion Ranges in Solids*, Gordon and Breach, Science Publishers, Inc. (1981).
- [66] M.O. Manasreh, *III-Nitride Semiconductors: Electrical, Structural and Defects Properties* Elsevier B.V. Netherlands, (2000).
- [67] kentaro Shibahara , Hiroki Furumoto, Kazuhiko Egusa, Meishuko Koh and Shin Yokoyama, *Dopants Loss Origins Of Low Energy Implanted Arsenic And Antimony For Ultra Shallow Junction Formation*, Hiroshima university Japan, (1998).
- [68] Yi-Sheng Lai, Y. S. Ho, bH. L. Sun, bC. J. Tsai, bT. C. Chen, bY. F. Ko, bF. S. Lee, band W. M. Youb, *Energy Dependence of Radiation Damage in Sb-Implanted Si(100)*, *Journal of The Electrochemical Society*, (2005)
- [69] Nandita Dasgupta, Amitava Dasgupta, *Semiconductors devices: Modeling and Technology* Prenlice-Hall of India Private Limited New Delhi, (2004).
- [70] *IC Fabrication Technology*, urationMcGraw Hill Companies, Inc. New Delhi, India, (2014).
- [71] Yoshio Nishi, Robert Doering, *Handbook of Semiconductor Manufacturing Technology*, Marcel Dekker Inc. USA, (2000).
- [72] K. Maiti, S. K. Ray, N. B. Chakrabarti, *Strained Silicon Heterostructures: Materials and Devices C*, Institution of Electrical Engineers, London, (2001).
- [73] Christoph Johannes Urban, *DC and RF Characterization of NiSi Schottky Barrier MOSFETs with Dopant*, JULICH, (2010).
- [74] Mohamed Gad-el-Hak, *MEMS: Design and Fabrication*, Taylor & Francis Group, LLC, USA, (2006).

[75] www.srim.com

[76] Lucille A. Giannuzzi, F. A. Stevie, Introduction to Focused Ion Beams: Instrumentation, Theory, Springer Science + Business Media, USA, (2005).

[77] Christopher Nebel, Juergen Ristein, Thin-Film Diamond I: (part of the Semiconductors and Semimetals Series), 1st Edition, Elsevier Inc. Netherlands, (2003).

رواسة مسالسي ايليكون ال مطعم قبال ائيمي مون اول الزريخ

لبيخص

فة ذالعمل، ح م ج درليت ال غزسل شارد ل الأوخ، من أ لزروخ، مس اولسل، كفن . فيال ذرست اركذت عمل آل محكاة ال خ جزيب RBS س طت بزوام ال محكاة RBX ق، اسق ساة Knoop ال م ج زيت.

ح جزيب، ال عي ائال م ذرست بلسط RBS ال محكاة بلسط RBX خ مئل فلسل، كفن أا الفبل رة Si(111) ال غز طعم ال سل، كفن أا ذال رة Si(111) ال مطعم بلسط شارد الأوخ، من Sb^{+} ج جزيب ذرًا $10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ م ه أ ج ل طاقتق ذرًا 120 KeV . أم ل ك ال عي ائال م ذرست بلسط الخبار Knoop م ه ج بلسل ك من أا الفبل رة Si(111) ال مطعم بلسط شارد الأوخ، من Sb^{+} ج جزيب ذرًا $5 \times 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ م ه أ ج ل طقت ق ذرًا 120 KeV . م ه جت أ خ ز م ل ك ال خ طعم م بلسط شارد لزروخ As^{+} ج جزيب ذرًا $10^{16} \text{ ions cm}^{-2}$ م ه أ ج ل طاقتق ذرًا 100 KeV . ال مغل جت ل ح زاريت ل عي ائال ح م ج فة الأوخ ل م ذة الك، ه دوقت.

ف، م يخص ج ل، لم س اولسل، كفن فل عي ائال غز مطعمت ح ك ال مطعمت ج جزيب ذرًا $10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ ق ذح م ح م حص ا بلسط جزيب RBS بى ع، ال عش اى آل م ج، فة ح، ال عي ائال مطعمت بلسط الأوخ، من أ لزروخ، ب ج جزيب ذرًا $5 \times 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ أ $1.5 \times 10^{16} \text{ ions cm}^{-2}$ ع ل الخ ل ق ذح م ح حص ا بلسط الخبار Knoop. ك ال عي ائال مطعمت ق ذح ج ل ل اقل ب ع ذال مغل جت ل ح زاريت. ذال الخ ل لأبان ع ه ال ع، بلى ل جت ل ا ح ا ل ك ح ا ث زاعل ق س ا ق س ط ح لم س ي ذ.

محكاة الأ طافل خ جزيب RBS بى ع، ال عش اى آل م ج ب بلسط للزوام ج RBX س م ح ج لى بتقدير السط ل م م ذة لل غزسل ل شارد ذال خ ق. م ا ح أفق م م ج ل ك المق ذم بلسط ال محكاة SRIM 2013 ح ل ك المق ذم ح س ل ب. أضا في ال محكاة أع ط ج ه ح جزيب ال ع. ب.

كل م ائ ال ل ب ال سل، كفن، الأوخ، من، لزروخ، للزرغ ل شارد، ذال محكاة RBX ق ساة Knoop ال م ج زيت.

Study of implanted silicon thin films with antimony or arsenic

Abstract

In this work, the ion implantation of antimony or arsenic in silicon specimens was investigated. This study was based on the simulation of experimental RBS spectra by RBX code and the measurement of Knoop micro-hardness.

Experimentally, the samples which were characterized by RBS and simulated by RBX are the virgin single crystal silicon Si(111) and the doped single crystal silicon Si(111) by antimony ions Sb^+ with a dose of $1 \times 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ for an energy of 120 KeV. Those which were characterized by the Knoop test are, in one hand, the single crystal silicon Si(111) wafers which are doped by antimony ions Sb^+ with a dose of $1 \times 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ for an energy of 120 KeV. On the other hand, they are the other single crystal silicon Si(111) samples which are doped by arsenic ions As^+ with a dose of $1.5 \times 10^{16} \text{ ions cm}^{-2}$ for an energy of 120 KeV. A conventional thermal annealing under vacuum for thirty minutes was applied at 900 °C during 30 minutes

Regarding to the characterization of thin films, the wafers which are un-implanted or implanted by antimony with a dose of $1 \times 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ were analyzed by the RBS technique with both random and channeling mode. The other implanted specimens by antimony or arsenic with doses of $5 \times 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ or $1.5 \times 10^{16} \text{ ions cm}^{-2}$ respectively were analyzed by Knoop micro-hardness test. All the doped samples were characterized before and after the thermal annealing. This characterization revealed the caused damages, their restoration and their influence on the surface hardening.

The RBX simulation of RBS spectra in both random and channeled mode allowed us to estimate the ion implantation parameters, these parameters are agreed with those which were found by SRIM 2013 simulation and those which were calculated empirically. Furthermore, the defect concentration profile has been obtained.

Key words: Silicon, antimony, arsenic, ion implantation, RBS, RBX simulation, Knoop micro-hardness.

Résumé

Dans ce travail, l'implantation ionique d'antimoine ou d'arsenic dans des spécimens de silicium a été étudiée. Cette étude s'est articulée sur la simulation des spectres RBS expérimentaux par le code RBX et la mesure de la micro-dureté de Knoop.

Expérimentalement, les échantillons caractérisés par RBS et simulés par RBX sont le silicium monocristallin vierge Si(111) et le silicium monocristallin Si(111) dopé par les ions d'antimoine Sb^+ à une dose de $1 \times 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ pour une énergie de 120 KeV. Ceux caractérisés par le test de Knoop sont, d'une part, des échantillons de silicium monocristallin Si(111) dopé par l'antimoine Sb^+ à une dose de $5 \times 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ pour une énergie de 120 KeV et d'autre part, des autres échantillons Si(111) dopés par l'arsenic As^+ à une dose de $1.5 \times 10^{16} \text{ ions cm}^{-2}$ pour une énergie de 100 KeV. Un recuit thermique conventionnel sous vide a été effectué à 900 °C pendant 30 minutes.

Quant à la caractérisation des couches minces, qu'elles soient non implantées ou implantées à l'antimoine ($1 \times 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$), elles ont été analysées par la technique RBS en mode random et canalisé. Les autres spécimens implantés à l'antimoine ou l'arsenic par les doses $5 \times 10^{15} \text{ ions cm}^{-2}$ ou $1.5 \times 10^{16} \text{ ions cm}^{-2}$ respectivement, ils ont été analysés par le test de Knoop de la micro-dureté. Tous les échantillons dopés ont été caractérisés avant et après le recuit thermique. Cette caractérisation a dévoilé les dommages causés, leurs guérisons et leurs influences sur la dureté de la surface.

La simulation RBX des spectres RBS en mode random et canalisé nous a permis d'estimer les paramètres désignant l'implantation ionique, ils sont en accord avec ceux trouvés par la simulation SRIM 2013 et ceux calculés empiriquement. De plus, elle a fourni le profil de la concentration de défauts.

Mots clés : Silicium, antimoine, arsenic, implantation ionique, RBS, simulation RBX, micro-dureté de Knoop.