

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE CONSTANTINE 1**

**FACULTE DES SCIENCES DE LA TECHNOLOGIE  
DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE**

N° d'ordre :.....  
Série :.....

**THESE**

Présentée pour obtenir le diplôme

**DOCTORAT EN SCIENCES**

**OPTION**

Composants Electroniques

Par

**Djallel MAHDI**

**ETUDE DES PARAMETRES PHYSIQUES QUI  
GOUVERNENT LA RESOLUTION EN PROFONDEUR  
EN MICROSONDE IONIQUE**

**Devant le Jury :**

<b>Président:</b>	<b>Mr. Abdelmadjid BENGHALIA</b>	Prof.	Univ. Constantine 1
<b>Rapporteur:</b>	<b>Mr. Abdelhafid CHAABI</b>	Prof.	Univ. Constantine 1
<b>Examineurs:</b>	<b>Mr. Mohamed BOUCHEMAT</b>	Prof.	Univ. Constantine 1
	<b>Mr. Ramdane MAHAMDI</b>	Prof.	Univ. Batna
	<b>Mr. Zohir DIBI</b>	Prof.	Univ. Batna

Cette thèse a été proposée par feu le Professeur **M. BERRABAH**

**Année 2013**

## REMERCIEMENTS

Mes profonds et sincères remerciements à **Dieu Miséricordieux**, qui m'a donné la force et la volonté pour réaliser cette thèse.

Je tiens à exprimer la reconnaissance et la gratitude que j'ai envers Mme. **M. BERRABAH**, Professeur à l'université de Constantine 1, pour m'avoir proposé ce sujet de thèse.

Elle n'est pas là pour voir le résultat de son travail, mais elle n'est pas absente dans nos coeurs.

Je tiens à exprimer mes profonds remerciements à Mr. **A. CHAABI**, Professeur à l'université de Constantine 1, pour m'avoir accepté de continuer ce travail, pour son soutien moral et pour ses conseils tout au long de cette étude, ainsi que la confiance qu'il m'a accordé.

J'adresse toute ma gratitude à Mr. **A. BENGHALIA**, Professeur à l'université de Constantine 1, et je le remercie pour l'honneur qu'il m'a accordé, en acceptant de présider le jury de cette thèse.

Mes vifs remerciements à Mr. **M. BOUCHEMAT**, Professeur à l'université de Constantine 1, qui m'a fait l'honneur d'accepter de juger mon travail.

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

Je remercie également Mr. **Z. DIBI**, Professeur à l'université de Batna, d'avoir examiné mon travail et accepté de faire partie du jury.

En fin, je remercie tous ceux qui ont contribué, de près ou de loin à l'élaboration de cette thèse.

# **SOMMAIRE**

## SOMMAIRE

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

### CHAPITRE 1 : PRINCIPE ET DESCRIPTION DE L'ANALYSE PAR SIMS

1. INTRODUCTION	3
2. PRINCIPE DE L'ANALYSE SIMS	3
3. DESCRIPTION DU MICRO-ANALYSEUR IONIQUE CAMECA IMS3F	4
3.1 Les sources d'ions	6
3.2 La colonne primaire	7
3.3 La colonne secondaire	7
3.3.1 Le prisme électrostatique	8
3.3.2 Le secteur magnétique	9
3.4 Le système de détection des ions secondaires	9
4. TYPES ET MODES DE FONCTIONNEMENT DE L'ANALYSEUR SIMS	10
4.1 Mode spectre	10
4.2 Mode image	11
4.3 Mode profil	11
5. INFLUENCE DES PARAMETRES PHYSIQUES SUR LE SIGNAL SIMS EN PROFONDEUR	12
5.1 Influence du rendement de pulvérisation sur le signal SIMS	13
5.1.1 Limitation de la non linéarité temps – profondeur de nature fondamental	13
5.1.2 Limitation de la non linéarité temps – profondeur de nature expérimental	14
5.2 Influence de la transmission et le taux d'ionisation sur le signal SIMS	15
5.3 Influence de la concentration sur le signal SIMS	16
6. CONCLUSION	19

### CHAPITRE 2 : THEORIE ELEMENTAIRE DES CASCADES DE COLLISIONS IMPLIQUEES AU SIMS

1. INTRODUCTION	20
2. PHENOMENES PHYSIQUES ASSOCIES A L'ANALYSE SIMS	20

2.1 Processus de rugosité	20
2.2 Processus de pulvérisation	21
2.3 Processus du mixage collisionnel	22
2.3.1 Le mixage par choc direct	22
2.3.2 Le mixage par cascades	22
2.3.3 Quantification du mixage collisionnel	23
3. DESCRIPTION THEORIQUE DES CASCADES DE COLLISIONS	23
3.1 Etude mécanique d'une collision binaire	24
3.1.1 Paramètre d'impact d'une collision binaire	26
3.1.2 Potentiel d'interaction interatomique	29
a) Potentiels Classiques	30
b) Potentiel Universel ZBL	32
3.1.3 Section efficace différentielle d'une collision binaire	34
3.1.4 Perte d'énergie d'une collision binaire	35
3.2 Structure des cascades de collisions et grandeurs associées	36
3.2.1 Profondeur de pénétration et dispersion d'ions	37
4. CONCLUSION	40

### CHAPITRE 3 : GRANDEURS ASSOCIEES AUX CASCADES DE COLLISIONS EN PRESENCE DU MIXAGE COLLISIONNEL

1. INTRODUCTION	41
2. SIGNIFICATION PHYSIQUE DU PROBLEME	41
3. DESCRIPTION DU MODELE	42
4. RESULTATS ET DISCUSSIONS	49
5. CONCLUSION	54

### CHAPITRE 4 : L'INFLUENCE DES GRANDEURS PHYSIQUES SUR LA RESOLUTION EN PROFONDEUR

1. INTRODUCTION	55
2. FONCTION DE RESOLUTION EN PROFONDEUR	55

3. RESOLUTION EN PROFONDEUR	56
3.1 Estimation de la résolution en profondeur à partir d'une interface	56
3.2 Estimation de la résolution en profondeur à partir d'un delta-dopage	57
3.3 Estimation de la résolution en profondeur à partir de l'expérience	59
4. ÉTAT DE L'ART DE LA FONCTION DE RESOLUTION ET LA RESOLUTION EN PROFONDEUR	60
4.1 Mise en équation de la fonction de résolution par le modèle de Dowsett	61
4.2 Mise en équation de la fonction de résolution par le modèle de Hofmann	62
5. MODELISATION DE LA RESOLUTION EN PROFONDEUR	63
6. CONCLUSION	67
CONCLUSION GENERALE	68
REFERENCES	70

# **INTRODUCTION GENERALE**

## INTRODUCTION GENERALE

La technique de l'analyse de la spectromètre de masse d'ion secondaire dite 'SIMS' en terme d'anglais Sepectrometrie Ion Mass Secondary, est employée dans diverses applications [1-6], particulier dans le domaine science des matériaux et la microélectronique. Elle s'est imposée comme la technique de caractérisation des composants électroniques [7], inévitable pour caractériser les jonctions, grâce à sa sensibilité et sa grande résolution en profondeur.

La technique de spectrométrie de masse atteint aujourd'hui ses limites techniques [8]. Une faible résolution en profondeur apparaît dans le cas de l'analyse des jonctions abruptes [9] et des monocouches ultra peu profondes [7] elle devient insuffisante pour les caractériser, de même que pour certaines structures qui exigent une haute résolution. A nos jours la nanotechnologie demande une très haute résolution [10], exige ainsi une amélioration de la résolution en profondeur qui passe par la compréhension des phénomènes physiques intervenants lors de cette analyse.

La résolution en profondeur est un paramètre essentiel de toute méthode d'analyse en profondeur, y compris cette analyse, elle quantifie l'aspect distorsion du profil réel au profil mesuré, de sorte qu'il devient nécessaire de l'améliorer. C'est en grande partie des recherches une question d'utilisation de la résolution optimisée.

La détection des particules atomiques dans cette analyse est basée plutôt sur leurs interactions avec les ions, où, en général une partie de l'énergie d'un ion est déposée, libérant les particules secondaires et apportant des informations de la constitution de la matière.

Le profil SIMS de concentration en profondeur est obtenu pendant une période d'analyse de la longueur d'échantillon. Les avantages de la pulvérisation pour l'analyse en profondeur sont importants et constituent le principe de cette analyse. Une zone mixée et pulvérisée est créée, influant sur la résolution en profondeur et induit d'autres effets (pulvérisation différentielle, rugosité et effets de matrice). La structure peut être détruite et de nouveaux états chimiques peuvent être formés. La difficulté réside dans le fait de savoir si tel processus est majeur ou non, s'il est couplé de manière significative ou non avec un autre mécanisme.

Le résultat de la mesure du profil réel (initial) est influé directement par le phénomène du mixage collisionnel qui en résulte une distorsion du signal mesuré. Le profil capturé donne une image de la matière pulvérisée auquel s'ajoute le mixage collisionnel, ce qui nous suggère qu'on peut identifier celui-ci. Cependant, le mixage atomique joue un rôle extrêmement important au cour de la pulvérisation, modifiant et donnant le profil de concentration. Il s'agit donc d'essayer de reconstituer le profil de concentration réel de l'échantillon avant le

bombardement. L'évaluation des données de reconstitution du profil a besoin d'étude plus profonde et raffinée des mécanismes physiques fondamentaux, afin de trouver la fonction de résolution en profondeur (Depth Resolution Function, DRF) responsable de la déviation de la forme du profil mesuré.

En effet, notre objectif est de rechercher les différents paramètres modélisant ces phénomènes physiques mis en jeu et gouvernent la résolution en profondeur. L'utilisation de la théorie du transport sert à identifier ces paramètres physiques.

A partir de cette problématique nous présentons globalement, les différents problèmes résolus dans cette thèse, étayés comme suit:

Le premier chapitre de ce travail décrit les principaux organes de l'analyseur ionique, puis les mécanismes intervenants dans ces organes. Ce chapitre, décrit l'aspect physique de la mesure des profils SIMS, permettra ainsi de cerner les particularités des problèmes qui se traduiront dans les chapitres qui suivent.

Le deuxième chapitre donne une vue d'ensemble des cascades de collisions qui constituent le principe de l'analyse par SIMS, en s'appuyant sur des théories de phénomènes de transports basées sur l'équation linéaire de Boltzman. Ce chapitre présente les données de base de la reconstitution d'informations par les théories qui existent, déterminant ainsi les potentiels d'interactions et les sections efficaces pour aboutir enfin aux paramètres physiques modélisant le ralentissement des ions.

Le troisième chapitre par la suite, sera consacré au noyau de notre travail et identifié les grandeurs physiques associées aux pénétrations des ions dans la cible. Dans ce chapitre nous avons développé un calcul théorique, donnant le parcours moyen projeté et la dispersion des ions qui seront manipulés par des variables d'entrées de bases, tels que l'énergie d'ion, la forme du mixage collisionnel et la dose d'irradiation. En donnant une nouvelle formule, qui regroupe plusieurs paramètres influant directement la résolution en profondeur.

Ce résultat nous a permis d'ouvrir une nouvelle fenêtre de recherche, qui sera développée en détail dans le chapitre quatre. Ce dernier chapitre enchaîne l'étude éventuelle des paramètres physiques avec celle de la résolution en profondeur. Il sera porté sur la description et l'évaluation de la résolution en profondeur à partir des différentes doses d'irradiation et la nature ion-cible.

Enfin, on achève notre travail par une conclusion qui résume le travail accompli, en montrant la possibilité de remplacer les quantités supposées analytiques utilisées dans ce travail par d'autres quantités expérimentales. Nous récapitulons finalement par un bilan de travail réalisé et les perspectives dans ce domaine.

# **CHAPITRE 1**

## **PRINCIPE ET DESCRIPTION DE L'ANALYSE PAR SIMS**

## 1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre nous aborderons, d'une manière succincte, les principes de base de l'analyse par SIMS, nous présentons ainsi plus précisément, les éléments de base qui composent un analyseur SIMS. Pour chacun de ces éléments nous mettrons en avance le principe et les caractéristiques nécessaires au fonctionnement. Ainsi il faut comprendre tout d'abord quels sont les mécanismes physiques impliqués dans les éléments de la chaîne d'analyse, pour qu'on puisse identifier le bruit de celle-ci et déterminer la résolution.

En effet, on doit chercher et trouver les paramètres influençables aux résultats pour nous permettre de remédier le facteur de dégradation de la résolution en profondeur, que l'on peut cependant caractériser par des modèles mathématiques, qui sera induit particulièrement par des processus physiques.

## 2. PRINCIPE DE L'ANALYSE SIMS

La spectrométrie de Masse des Ions Secondaire (SIMS) est basée sur le fait d'éjection des espèces atomiques ou moléculaires de la surface d'un solide sous le bombardement de particules lourdes, typiquement un faisceau d'ions ou atomes neutres. C'est une analyse élémentaire ou isotopique, c'est à dire que l'identification d'un atome du solide via sa masse.

Le principe de l'analyse par SIMS est simple: un faisceau de quelque keV bombarde sous vide l'échantillon à analyser; ce bombardement induit une émission de diverses particules (électrons, photons, atomes et molécules neutres ou ionisés); les ions secondaires sont accélérés, analysés en masse et détectés. En effet, il s'agit là d'une méthode très sensible; ces ions sont triés suivant leur masse; on peut donc analyser tous les éléments de la classification périodique, de l'Hydrogène à l'Uranium, sans distinction.

La spectrométrie de masse des ions secondaire est par nature une méthode destructive; car l'échantillon est progressivement consommé, un atome pulvérisé et interrogé qu'une seule fois, contrairement à ce qui se passe dans les autres méthodes spectroscopiques [7] dans lesquelles il peut être excité et se désexciter en émettant le rayonnement ou la particule analysée autant de fois que l'on veut, ou tout au moins jusqu'à un seuil de dommages d'irradiation. La détection des ions ne s'accompagne ni de rayonnement parasites, ni d'un fond continu.

A partir de là, deux remarques s'imposent a priori :

- Il s'agit d'une méthode destructive car l'échantillon est pulvérisé.
- C'est une méthode d'analyse physico-chimique directe puisque l'on détecte directement les constituants de la cible.

Enfin, la méthode SIMS est une méthode d'analyse localisée ; il est ordinaire de considérer le phénomène d'émission d'ions secondaires comme résultat d'un processus de pulvérisation associé à un processus d'ionisation. Dans la mesure où il n'y a pas une corrélation mutuelle de ces deux processus, on peut formellement représenter l'intensité de n'importe quelle espèce ionique, atome ou molécule, sous la forme:

$$\text{Intensité} = \text{Processus de pulvérisation} \times \text{Processus d'ionisation}$$

### **3. DESCRIPTION DU MICRO-ANALYSEUR IONIQUE CAMECA IMS3F**

L'instrument que nous avons projeté la lumière ci dessous pour l'étudier, est le micro-analyseur ionique IMS3F/4f de CAMECA.

Le schéma de principe [11] est représenté sur la figure (1-1).

Les sous-ensembles principaux constituant l'analyseur ainsi que les trajets empruntés par les projectiles primaires et les ions secondaires sont illustrés sur la vue d'ensemble figure (1-1).

Les principaux constituants de l'analyseur SIMS sont:

- La source d'ions
- La colonne primaire
- L'enceinte échantillon
- La colonne secondaire
  - Plaque de transfert dynamique
  - Lentilles de transfert
  - Le spectromètre de masse
    - Analyseur électrostatique
    - Analyseur magnétique
- Détecteur (système de détection des ions secondaires)

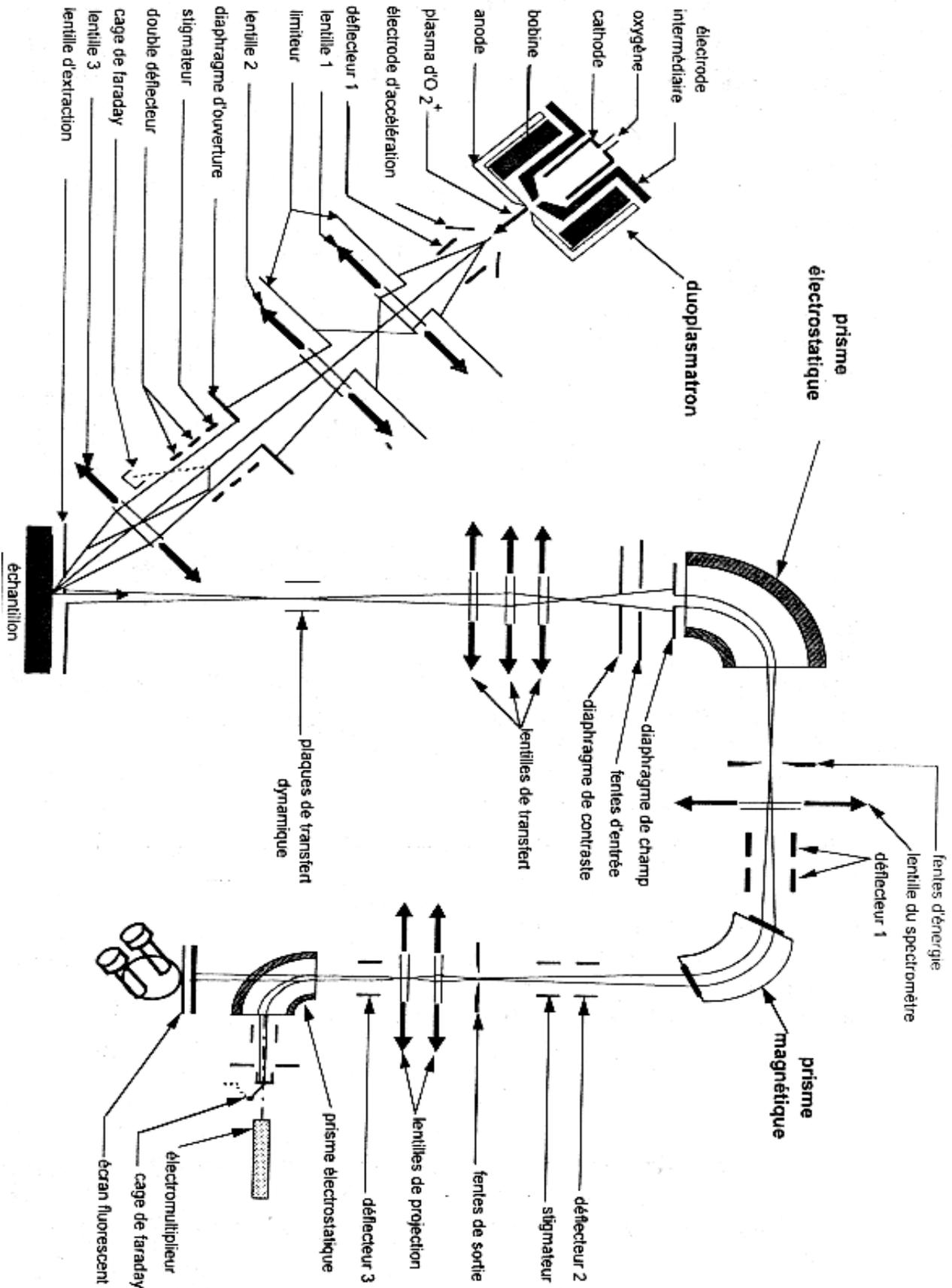


Figure (1-1) : L'Analyseur Ionique CAMECA IMS3/4f [11]

### 3.1 Les sources d'ions

Le duoplasmatron est une source d'ions capable d'émettre des ions positifs ou négatifs, à cathode froide, par exemple  $\text{Ar}^+$ ,  $\text{O}_2^+$ ,  $\text{O}^+$ ,  $\text{O}^-$ ,  $\text{O}_2^-$ . Il fait parti de la famille des sources à plasma. Son principe de fonctionnement est le suivant (Figure (1-2)):

Un gaz est introduit à basse pression à l'intérieur de la cathode creuse par l'intermédiaire d'une fuite réglable. Un plasma est produit par un arc entretenu entre la cathode creuse et l'anode qui est porté à quelques centaines de volt ( $\approx 300\text{V}$ ) par rapport à la cathode. La décharge est maintenue au voisinage de l'axe par une électrode intermédiaire conique laissée à un potentiel flottant.

Un champ magnétique créé entre cette électrode et l'anode par une bobine confine le plasma au niveau du trou d'extraction qui est percé dans l'anode ( $\phi = 400\mu\text{m}$ ). Dans ce plasma, les ions positifs occupent le centre de ce plasma alors que les ions négatifs se trouvent plutôt à la périphérie.

Une partie de ce plasma passe cette ouverture et se détend dans la cuvette d'expansion en raison de la différence de pression qui existe entre l'intérieur du duoplasmatron ( $5 \cdot 10^{-2}$  Torr) et l'enceinte du canon ( $10^{-7}$  Torr). Les ions de ce plasma sont extraits par un champ électrique qui est produit par une électrode d'extraction. La polarité de ce champ dépend évidemment du signe désiré des ions primaires.

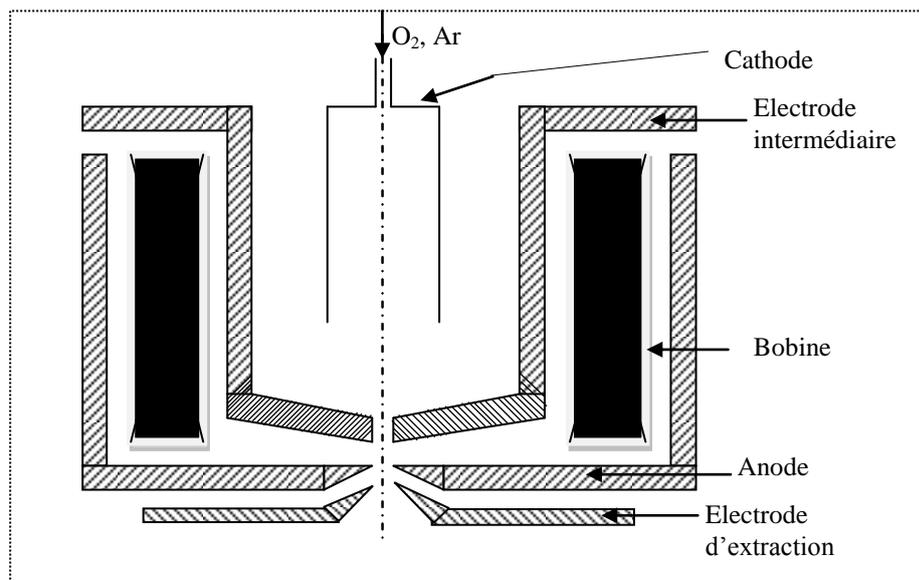


Figure (1-2) : Schéma représentatif du Duoplasmatron

### 3.2 La colonne primaire

A la sortie de la source un filtrage magnétique assure la pureté du faisceau d'ions. La colonne contient un système d'optique ionique composé de lentilles électrostatiques et de déflecteurs, afin de focaliser, positionner et balayer le faisceau sur l'échantillon. Elles doivent entre autre :

- Assurer la focalisation sur l'échantillon d'une sonde ionique dont le diamètre est ajustable entre  $\approx 1$  et  $200\mu\text{m}$ .
- Balayer cette sonde ionique primaire suivant un carré de coté variable sur l'échantillon de manière à assurer une érosion plane de celui-ci.
- Contrôler l'énergie des ions primaires bombardant l'échantillon.
- Contrôler la vitesse d'érosion de l'échantillon, c'est-à-dire en dernière analyse, ajuster la densité de courant effective des ions primaires qui pulvérisent la surface de la cible.
- Positionner le cratère d'érosion au centre de l'aire analysée, cette dernière étant fixée par la position de la lentille à immersion et des diaphragmes de champ de la colonne secondaire.
- Assurer la pureté des ions primaires utilisés en les filtrant en masse par un prisme magnétique.
- L'axe optique de la colonne primaire fait un angle  $\alpha$  avec la normale de l'échantillon.

Cependant, la présence d'un champ électrique relativement élevé près de l'échantillon a pour conséquence de faire varier l'incidence effective des ions primaires sur l'échantillon. Cet angle d'incidence dépend donc de l'énergie d'accélération des ions primaires ainsi que du sens du champ électrique imposé par la collecte des ions secondaires.

Le champ électrique qui courbe les trajectoires des ions primaires introduit aussi de l'astigmatisme sur la sonde. Le stigmatiseur situé avant le double déviateur corrige ce défaut.

### 3.3 La colonne secondaire

La colonne secondaire correspond à la partie de l'analyseur assurant le tri des ions secondaires extraits de l'échantillon avant leur détection et comptage. Elle permet le transport de l'image ionique de la surface de l'échantillon depuis ce dernier jusqu'aux détecteurs. Après la lentille à immersion une optique de transfert à trois électrodes améliore le rendement de la

collecte des ions et définit la grandeur de l'image analysée. Des plaques de transfert dynamique permettent d'optimiser la collection des ions secondaires dans le cratère.

Le spectromètre de masse est constitué d'un prisme électrostatique quart de sphère et d'un prisme magnétique.

### 3.3.1 Le prisme électrostatique

Il trie les ions selon leur énergie. Le cross-over à l'entrée du secteur électrostatique (au niveau du diaphragme de contraste) est dit 'multi-masses' et 'multi-énergies'. Il est transformé en cross-over dispersé en énergie après passage dans le champ électrostatique. A la sortie de ce secteur, on peut discriminer les ions moléculaires des ions polyatomiques. En effet, les énergies de ces deux types d'ions ont une distribution différente : les ions monoatomiques ont une distribution large en fonction de l'énergie, alors que celle des ions moléculaires est étroite. En choisissant une certaine bande d'énergie au moyen d'une fente mécanique, on peut ainsi filtrer les ions désirés (figure (1-3)).

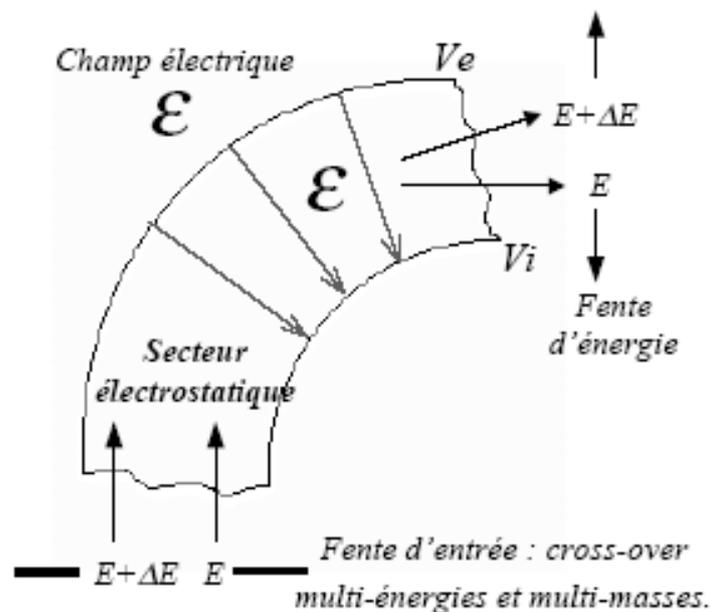


Figure (1-3) : Schéma de la dispersion en énergie des ions par le secteur électrostatique, indépendamment de leur masse [12].

### 3.3.2 Le secteur magnétique

Cette partie du spectromètre assure le filtrage en masse des ions sortis du secteur électrostatique. Ils sont soumis à un champ magnétique  $B$ , et prennent donc une trajectoire circulaire dont le rayon de courbure  $s$  s'exprime en fonction de la tension de sortie  $V$  du prisme électrostatique et du rapport masse/charge de l'espèce concernée (figure (1-4)):

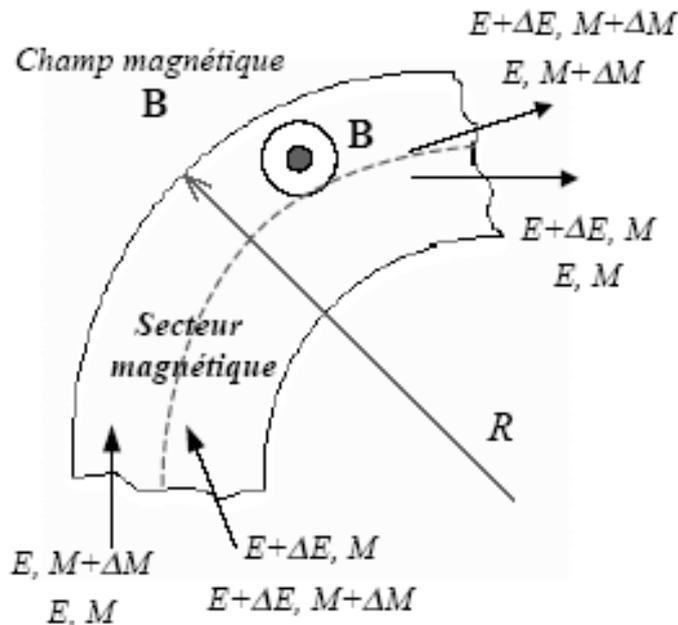


Figure (1-4) : Schéma de la dispersion en masse des ions par le secteur magnétique[12].

En faisant varier la valeur du champ magnétique  $B$ , on sélectionne une masse  $M/q$  donnée qui sera transmise via le diaphragme de sortie du spectromètre au cross-over du système optique. Plus cette fente est fermée, plus le pouvoir de séparation en masse est grand. Bien que la résolution en masse accessible en SIMS soit excellente, elle nécessite un réglage très fin afin de pouvoir distinguer deux espèces ioniques différentes.

### 3.4 Le système de détection des ions secondaires

Il est constitué de deux parties, une cage de Faraday pour les forts courants ioniques (en coups par seconde), et un multiplicateur d'électrons pour les faibles intensités. Ce dernier est constitué d'une succession d'électrodes appelées dynodes, connectées le long d'un fil résistif relié d'une part à une haute tension et d'autre part à la masse. Le potentiel des dynodes varie graduellement tout au long de la chaîne. Quand une particule (ion, électron,...) frappe la

1ère dynode, elle produit des électrons secondaires. Ceux-ci sont multipliés et accélérés par la dynode suivante bombardée à son tour. Il s'ensuit alors une cascade d'électrons secondaires contrôlée par la tension d'accélération appliquée. Chaque cascade comptabilisée correspond à un coup, donc à un ion incident.

L'avantage du multiplicateur d'électrons réside dans le fait qu'il a un très faible bruit de fond, ce qui permet d'avoir de très bonnes sensibilités. Ce mode de détection, est appelé mode comptage. Un autre type de dynode existe et utilise un mode d'amplification continue du courant détecté (la dynode est alors un canal continu).

Le mode comptage implique une excellente résolution temporelle, afin de distinguer deux ions successifs très proches dans le temps arrivant sur le détecteur.

La cage de Faraday est, elle, une électrode qui mesure directement le courant lorsqu'un faisceau de particules chargées la bombarde. Sa forme particulière permet de piéger au maximum les électrons secondaires afin d'établir et mesurer un courant continu à travers d'une résistance.

## **4. TYPES ET MODES DE FONCTIONNEMENT DE L'ANALYSEUR SIMS**

Il existe deux types d'analyse [13]:

Le premier type statique, moyennant une densité de flux de projectiles faible, l'analyse ionique est susceptible de fournir une analyse de surface de qualité ; ce type particulier où la consommation d'une monocouche est très lente ( $10^{-5}$  à  $10^{-3}$  couche par seconde) est appelé SIMS statique.

Le deuxième type dynamique, l'exploration du solide en profondeur implique des vitesses d'érosion typiques de l'ordre de  $10^{-1}$  à 10 couches/s ; ce mode est appelé SIMS dynamique. Le SIMS dynamique, avec secteur magnétique combine en effet presque tous les aspects souhaitables.

L'appareille SIMS fonctionne aux choix de trois modes :

### **4.1 Mode spectre**

Comme les ions secondaires ont une profondeur d'échappement faible on peut déterminer la composition superficielle de l'échantillon en traçant un spectre de masse (Nombre d'ions comptés en un temps donné en fonction du nombre de masse M/e).

## 4.2 Mode image

On peut aussi obtenir des images de répartition latérale des éléments sur une surface en fonctionnant en microsonde ionique (analogue au microscope électronique à balayage) ou en microscope ionique (analogue au microscope optique).

L'échantillon est bombardé par un faisceau d'ions provoque l'émission ionique secondaire. Chaque point de la surface devient donc une source d'ions secondaires caractéristiques des éléments ou isotopes qui s'y trouvent. Une optique ionique secondaire focalise sur un point  $A'$ , de manière stigmatique et achromatique, tous les ions issus d'un point  $A''$  de l'objet après un filtrage en masse ( $M/e$ ) et en énergie. Le transport de l'image est globale, contrairement à l'image obtenue sur un instrument de type micro-sonde (ou microscope ionique à balayage) où celle-ci est reconstituée à partir d'une synchronisation entre le balayage du faisceau primaire et le faisceau électronique d'un tube cathodique associé au détecteur d'ions secondaires. L'image ionique finale peut être agrandie et transformée en une image électronique équivalente qui peut être observée sur un écran fluorescent ou fixée sur un film photographique. On visualise alors la cartographie des différents types d'atomes présents sur la surface instantanée de l'échantillon. A ce mode image est associé un mode comptage. L'ensemble des ions secondaires est alors envoyé sur un détecteur d'ions adapté : un multiplicateur d'électrons pour faibles courants ioniques relayé par un cylindre de Faraday dans le domaine des forts courants ioniques.

## 4.3 Mode profil

Dans le cas d'une analyse en profondeur, on recueille le nombre d'ions à un instant  $t$  donné, correspondant à une profondeur  $z$ , et on dresse ainsi une courbe appelée profil en profondeur pour une espèce donnée dans une matrice donnée, par exemple le bore dans le silicium.

Dans le cas idéal, l'érosion se ferait couche par couche, et chacune des espèces serait quantifiée correctement à partir de son emplacement original d'un bout à l'autre de l'analyse. En outre, comme la pulvérisation érode la surface, en suivant le nombre d'ions d'une certaine masse en fonction du temps on peut reconstituer un profil de distribution en profondeur de l'élément correspondant si l'on connaît la vitesse d'érosion. Les signaux des éléments constituant l'échantillon, sont capturés ou enregistrés. Il est ensuite possible de convertir cette information en profils de concentration en fonction de la profondeur pour ces éléments. Le

profil en profondeur de concentration est donc un découpage plan par plan de l'échantillon pour donner la distribution en profondeur d'une espèce donnée.

A partir de ces trois mode, le mode profil qui nous intéressera dans ce travail.

## 5. INFLUENCE DES PARAMETRES PHYSIQUES SUR LE SIGNAL SIMS EN PROFONDEUR

Revenons au mode de fonctionnement profil, sous bombardement par le faisceau primaire, l'échantillon se voit pulvérisé et la surface analysée située à des profondeurs croissantes avec le temps. On peut remonter au profil de concentration en fonction de profondeur. Le profil capturé (signal mesuré) constitue la matière pulvérisée après le bombardement, malheureusement les phénomènes physiques intervenant lors de cette analyse perturbent la constitution initiale de la structure à analyser.

En effet le profil mesuré n'est pas une image réelle du profil original existant réellement dans l'échantillon avant la pulvérisation.

Donc les limitations de type instrumentale et de type fondamentale masquent l'interprétation de profils en profondeur.

La quantification des profils SIMS est conditionnée théoriquement par des paramètres propres à la mesure, parmi eux le rendement de pulvérisation. Il paraît donc primordial de connaître l'équation théorique qui relie la concentration d'un élément donné au signal SIMS.

L'équation SIMS de base est donnée par [12]:

$$I_k^+ = I_p \eta_k \tau_k^+ Y_T C_k^S \quad (1)$$

$I_k^+$ : L'intensité ionique d'ions positifs détectée de l'élément  $k$

$I_p$ : L'intensité primaire

$\eta_k$ : Facteur de transmission

$\tau_k^+$ : Taux d'ionisation de l'élément  $k$

$Y_T$ : Rendement de pulvérisation dépendant éventuellement de la concentration de surface de l'élément  $k$ .

$C_k^S$ : La concentration de surface de l'élément  $k$

L'équation (1) représente une conversion d'un signal exprimé en coups par seconde en une concentration exprimée en atomes par  $\text{cm}^3$ .

La première tâche d'une analyse SIMS est d'obtenir le profil de concentration mesuré, suivant la profondeur  $r$  érodée. La concentration atomique d'un élément  $i$  donné de deux façons différentes :

soit la densité atomique exprimée en atomes par unité de volume, notée  $N_i(r)$

soit la fraction atomique souvent exprimée en pourcentage, notée  $C_i(r)$ .

Cette quantification des profils SIMS (intensité en concentration) se décompose donc en deux sous-étapes :

Conversion du temps d'érosion  $t$  en profondeur  $r$ .

Conversion du courant ionique secondaire en concentration.

## 5.1 Influence du rendement de pulvérisation sur le signal SIMS

Notons que l'équation SIMS est liée directement au rendement de pulvérisation à tout instant et c'est un paramètre très sensible aux paramètres d'entrées des conditions d'analyses expérimentales. Il intervient aussi indirectement, lors de la conversion temps-profondeur par le biais de la vitesse d'érosion.

Lors de la conversion temps-profondeur érodée, il apparaît qu'une simple relation de proportionnalité entre  $t$  et  $z$  suffit pour déterminer l'échelle des profondeurs :

$$z = Vt \quad (2)$$

avec  $V$  vitesse d'érosion constante

Une vitesse d'érosion invariante avec la profondeur est possible seulement si le rendement total de pulvérisation demeure constant tout au long du profil :

Pour des alliages homogènes dans lesquels les constituants ont un rendement de pulvérisation élémentaire égal.

Ou pour une matrice uniforme avec des concentrations très faibles d'éléments étrangers (semi-conducteur dopé).

### 5.1.1 Limitation de la non linéarité temps – profondeur de nature fondamentale

La vitesse d'érosion peut changer suivant l'implantation des ions primaires qui influe le changement de la concentration des espèces en présence sous la surface instantanée.

Dans le cas d'un alliage où les constituants possèdent des rendements de pulvérisation élémentaires différents, la surface de l'échantillon tend à s'enrichir, au cours du temps, en l'espèce de plus faible rendement.

Ces modifications de composition superficielle conduisent à faire varier la vitesse d'érosion de façon continue et induisent le phénomène physique qui s'appelle la rugosité, provoquant par conséquent des distorsions des profils (non linéarité de la profondeur érodée).

### 5.1.2 Limitation de la non linéarité temps – profondeur de nature expérimental

La contamination en surface ou aux interfaces (souvent oxydation) peut changer notablement le rendement de pulvérisation, donc la vitesse d'érosion [13].

A l'échelle macroscopique la notion de vitesse d'érosion suppose un fond de cratère plan mais ce ne l'est pas le cas à l'échelle atomique.

Par conséquent on définit la vitesse d'érosion moyenne instantanée :

$$V = \frac{d\langle Z \rangle}{dt} \quad (3)$$

Donc :

$$z(t) = \int_0^t V(t) dt \quad (4)$$

La vitesse d'érosion moyenne  $V$ , qu'on peut supposer constante dans un matériau homogène une fois passé l'abrasion des premières monocouches, est liée à la densité de flux effective des ions primaires.

La vitesse d'érosion est estimée classiquement par la relation suivante :

$$V = \frac{Y_{tot} J_p}{N_0} \quad (5)$$

Pour un matériau homogène la vitesse d'érosion moyenne, dépend des paramètres suivants :

$J_p$ : Densité de flux des ions primaires (dose /second) (ions/cm<sup>2</sup>/s)

$Y_{tot}$ : Rendement total de pulvérisation

$N_0$ : Densité atomique de la cible

Les travaux de Hofmann et Zalar [14] ont montré qu'une structure multicouches de Ni et de Cr, d'épaisseur constante (115 Å) pouvait être considérablement déformée à cause de la dépendance de la vitesse d'érosion avec la composition.

Ces auteurs proposent une dépendance linéaire de la vitesse avec la composition superficielle instantanée suivant la relation [14]:

$$V(t) = C_A(t)V_A + C_B(t)V_B \quad (6)$$

Avec  $C_A(t)$  et  $C_B(t)$  fractions atomiques des éléments  $A$  et  $B$  à l'instant  $t$ .

$V_A$  et  $V_B$  vitesse d'érosion dans les matériaux purs.

Cette loi empirique se justifie en considérant que dans la zone interfaciale, l'érosion conduit grossièrement à la présence d'îlots de matière  $A$  de fraction apparente  $C_A$  sur un fond de matière  $B$  en train de se découvrir (fraction atomique apparente  $C_B$ ).

On remonte à  $C_A(t)$  et  $C_B(t)$  à partir des signaux obtenus  $I_A(t)$  et  $I_B(t)$  à l'instant  $t$  on peut alors corriger l'axe des profondeurs du profil mesuré.

## 5.2 Influence de la transmission et le taux d'ionisation sur le signal SIMS

Le facteur de transmission  $\eta_k$  est un paramètre d'origine instrumental qui caractérise le nombre d'ions effectivement détectés par rapport au nombre d'ions créés à la sortie de l'échantillon.

Le taux d'ionisation  $\tau_k^+$  est un paramètre contrôlé par la physique de l'ionisation des espèces secondaires. Par conséquent, le produit de ces deux paramètres donne ce qu'on appelle le rendement utile. Il indique le nombre d'atomes pulvérisés, dans un état de charge et d'agrégat donné, qui atteignent le détecteur rapporté au nombre initial d'atomes pulvérisés émis par la cible (dans la même aire analysée). Ce paramètre associé à une espèce atomique donnée et issue d'une matrice déterminée est un paramètre clef permettant de prévoir la sensibilité d'une analyse SIMS.

Rappelons que  $\tau_k^{+u}$  dépend largement de l'élément à analyser, de sa polarité, de sa matrice et de la nature des projectiles utilisés pour éroder l'échantillon [15]:

$$\tau_k^{+u} = \eta_k \tau_k^+ = \frac{N_{\text{det}}}{N_{\text{pulv}}} \quad (7)$$

Dans la mesure où la transmission  $\eta_k$  de l'instrument intervient de manière importante, les valeurs du rendement utile peuvent être utilisées pour comparer les performances de différents

instruments, étant entendu que la nature des éléments envisagés, la matrice et les ions primaires utilisés sont identiques.

En effet l'implantation des impuretés permet de bien contrôler la dose (exprimée en atomes/cm<sup>2</sup>) introduite dans l'échantillon. Par conséquent, pour une aire analysée donnée, on connaît parfaitement la quantité totale d'atomes pulvérisée  $N_{pulv}$ , si on réalise un profil en profondeur suffisamment profond dans l'échantillon :

$$N_{pulv} = Dose * Aire\ analysée \quad (8)$$

D'autre part, en intégrant le profil en profondeur de l'espèce suspect depuis la surface jusqu'à la profondeur finale d'érosion, on détermine facilement la totalité des ions secondaires récoltés sur le détecteur, soit :

$$N_{det} = \int_0^{\infty} I(z) dz = \int_0^{\infty} I(t) dt \quad (9)$$

Le rendement utile associé à l'espèce envisagée s'en déduit aisément d'après l'équation (7). Cette méthode [15] a été utilisée pour la détermination de  $\tau_k^{+u}$  pour les impuretés dans du Silicium.

Une autre configuration possible pour la mesure de  $\tau_k^{+u}$ , dans le cas de constituants de matrice, est une couche sandwich, de densité atomique constante  $n_0$  (exprimer en atomes/cm<sup>3</sup>) et d'épaisseur  $a$  connues. Dans ce cas, on a : Dose =  $n_0 \cdot a$

La suite des calculs conduisant à  $\tau_k^{+u}$  est alors identique à celle utilisée pour des échantillons implantés.

### 5.3 Influence de la concentration sur le signal SIMS

Les ions secondaires émis constituent l'information recherchée. Une partie provient des ions incidents, et l'autre de l'échantillon. En d'autre terme il s'agit de distinguer (lors de la détection) entre un ion pulvérisé et émis à un instant  $t$  et un autre ion pulvérisé plutôt et émis au même instant  $t$ .

Puisque l'échantillon est progressivement érodé, la surface est instantanée. Des atomes initialement situés à la même profondeur pourront être soit éjectés de la surface, soit repoussés vers l'intérieur de la cible. Sous l'effet du bombardement des ions, on obtiendra une redistribution des espèces atomiques sous la surface de l'échantillon  $C_k^S$ . De sorte que l'on va

analyser non pas le profil réel de concentration mais le profil où les atomes ont été redistribués par le mixage collisionnel.

Le profil capturé donne une image de la matière pulvérisée auquel s'ajoute le mixage, ce qui nous suggère que le mixage modifie carrément la concentration en surface  $C_k^S$ , par conséquent l'analyse. Sachant que les autres paramètres décrit précédemment dans l'équation SIMS de base, entrent dans les conditions expérimentales d'analyse et ne modifie pas l'aspect réel du profil à analyser.

Toute la difficulté dans la reproduction d'un profil de concentration en profondeur réside donc dans la dégradation du profil réel causée par le mécanisme du mixage collisionnel, qui est directement lié aux paramètres des conditions expérimentales.

L'exemple ci-dessous montre la dégradation de la résolution en profondeur dans le cas de l'analyse des jonctions abruptes. Sur une marche de concentration descendante, l'effet le plus remarquable du mixage collisionnel est la décroissance exponentielle visible sur le profil expérimental.

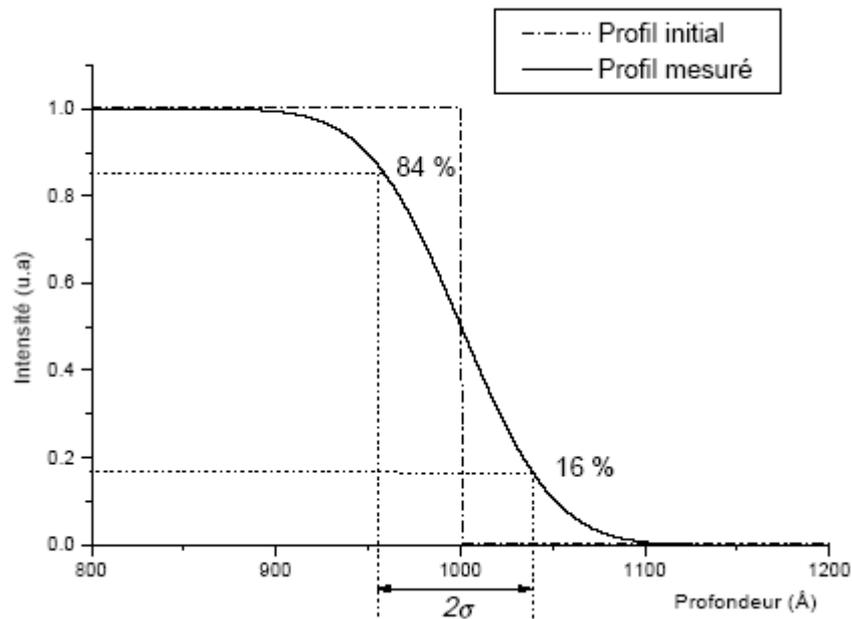


Figure (1-5) : Schéma du résultat de la mesure d'une interface abrupte par SIMS [11].

Cette décroissance handicape gravement l'analyse de telles marches car elle occulte d'éventuels détails utiles.

Le front descendant peut être également décrit dans certains cas par une fonction exponentielle décroissante [11]:

$$N(r) = A'e^{-r/\lambda_d} \quad (10)$$

$A'$  représente l'amplitude relative et  $\lambda_d$  représente la distance nécessaire pour que le signal décroisse d'un facteur  $e$ .

$\lambda_d$  augmente avec la profondeur de pénétration  $R$  des ions primaires dans la cible.

Le coefficient de linéarité entre  $\lambda_d$  et  $R$  est très dépendant de la nature des ions primaires ainsi que des éléments constituant de l'échantillon [16-17].

La profondeur de pénétration  $R$ , est directement impliquée dans le mixage collisionnel [18], a été calculé par la relation suivante, donnée par Dupuy et al [18]:

$$R = 50.46E_0^{0.665} \cos(\theta) \quad (11)$$

Notons ici que  $E_0$  est l'énergie d'impact par ion incident oxygène, et non pas par ion  $O_2^+$ . Cette relation n'est valable que pour  $R > 30 \text{ \AA}$  environ,  $\theta$  est l'angle d'incidence entre le faisceau d'ions et la surface de la cible.

La dépendance de  $R$  en fonction de l'énergie et l'angle d'incidence peut être déterminée à partir de simulations de collisions par la méthode de Monte Carlo, par exemple au moyen du logiciel TRIM (TRansport of Ion in Matter) développé par Ziegler et Biersack. Elle est de la forme [19]:

$$R(A^\circ) = AE_0^n \cos(\theta) \quad (12)$$

Sachant que la profondeur moyenne de pénétration  $\langle R \rangle$  est reliée au parcours moyen projeté  $\langle R_p \rangle$  dans la direction d'incidence du faisceau d'ion  $\theta$  par la relation [20]:

$$\langle R \rangle = \langle R_p \rangle \cos(\theta) \quad (13)$$

Notons que la profondeur de pénétration est égale au parcours moyen projeté lorsque le faisceau d'ion soit normal à la surface.

A partir de ces travaux présentés, le mixage collisionnel peut être estimé ou modélisé à partir du parcours moyen projeté. Il sera alors nécessaire donc de développer un calcul spécifique de ce paramètre qui apparaît très essentiel.

## 6. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à la description de l'appareillage SIMS. En effet l'aspect qui nous intéressera dans ce travail, est l'analyse en profondeur de l'échantillon. Cette description nous a permis d'identifier les sources du problème de dégradation de la résolution en profondeur qui est notre objectif.

Plusieurs travaux montrent [16-19], [21] que la résolution en profondeur est reliée directement à la profondeur de pénétration (parcours moyen projeté) paramètre très essentiel au résultat de l'étude de la pénétration des ions dans la cible, bien que cette étude constitue le principe physique de l'analyse par SIMS. Il est clair, à partir des paramètres présentés, que la recherche de l'influence du mixage collisionnel sur le parcours moyen projeté, est primordiale. La dépendance directe de la résolution en profondeur avec le parcours moyen projeté explique la nécessité de l'étude raffinée du parcours moyen projeté, qui sera développé en détail dans les chapitres qui suivent. Toutefois, les effets des paramètres de faisceau d'ions (énergie, angle d'incidence, la dose, ...) sur le parcours moyen projeté et la nature de la cible sont complexes.

## **CHAPITRE 2**

# **THEORIE ELEMENTAIRE DES CASCADES DE COLLISIONS IMPLIQUEES AU SIMS**

## 1. INTRODUCTION

Les particules atomiques impliquées dans l'analyse SIMS sont trop petites pour être observées visuellement. La détection de ces particules est basée plutôt sur leurs interactions avec les ions, où, en général une partie est mélangée puis pulvérisée, signalant leurs présences en des profondeurs déterminées et leurs natures. Ce chapitre est consacré à la description théorique de l'interaction des ions avec la matière et à ses diverses conséquences.

Dans ce chapitre nous allons donner une vue d'ensemble des cascades de collisions en s'appuyant sur des théories de phénomènes de transports basées sur l'équation linéaire de Boltzman. Dans ce contexte, le modèle choisi des cascades de collisions donne une vision principale en l'interaction ion-matière et les différentes grandeurs qui le caractérisent, ces dernières contrôlent la résolution en profondeur.

## 2. PHENOMENES PHYSIQUES ASSOCIES A L'ANALYSE SIMS

Rappelons que cette technique consiste à bombarder sous vide la surface à analyser avec des ions énergétiques. Ces ions pénètrent dans le matériau et perdent leur énergie par des collisions avec les noyaux. Certains atomes de la cible peuvent acquérir suffisamment d'énergie pour être éjectés. Parmi les atomes éjectés, certains sont ionisés, ce sont les ions secondaires que l'on peut détecter avec un séparateur de masse.

Lorsqu'on analyse un solide en SIMS, on sonde celui-ci suivant des profondeurs de plus en plus grandes à cause du processus d'érosion, de nombreux mécanismes inhérents à la mesure et non contrôlés viennent se greffer au processus d'analyse. On peut citer par ordre d'importance: le mixage collisionnel, la pulvérisation et la rugosité.

La vision des cascades de collisions est fondamentale dans l'étude de l'interaction de particules lourdes-solide car elles contrôlent non seulement le phénomène de pulvérisation mais aussi le mixage collisionnel suite à la pénétration de l'ion incident.

### 2.1 Processus de rugosité

La rugosité est le changement de la surface topographique de l'échantillon due à l'érosion de la surface par les ions énergétiques (figure (2-1)). Son origine est physico-chimique et elle peut être de l'ordre du nanomètre ou du micromètre. Celle-ci peut être de plus en plus importante avec la profondeur d'érosion. La sonde ionique voit alors non pas une couche atomique parallèle à la surface de l'échantillon, mais plusieurs couches en même

temps [12], indépendamment du mixage collisionnel, dont l'effet est à additionner à celui de la rugosité.

Les rugosités entraînent une variation du taux d'ionisation et de la vitesse d'érosion. En ce qui concerne le processus d'ionisation il est généralement admis que celui-ci a lieu en dehors du solide, à l'intérieur des quelques premiers Angstrom.

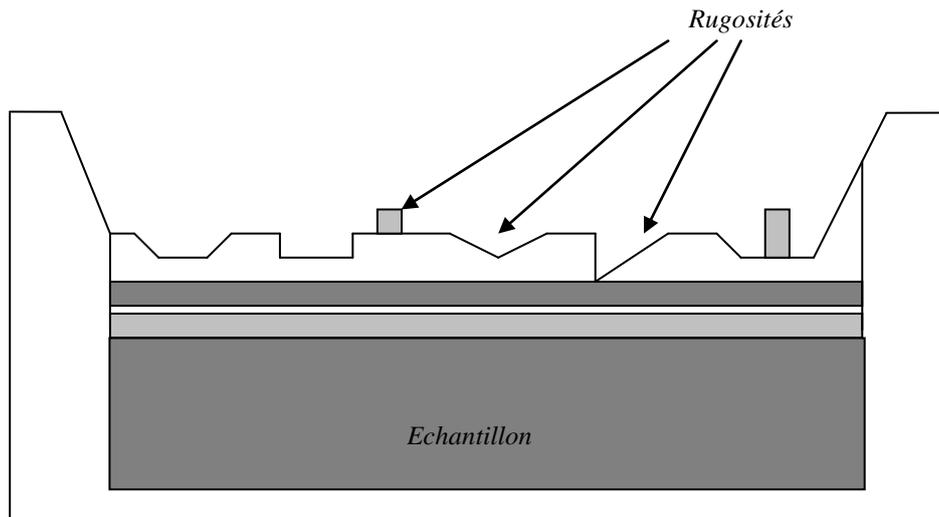


Figure (2-1): Apparition de la rugosité au fond du cratère

## 2.2 Processus de pulvérisation

Nous avons vu que le principe du SIMS est d'éroder progressivement la surface d'un échantillon afin d'en analyser les espèces présentes, pulvérisées en partie sous forme d'ions.

On appelle pulvérisation le phénomène d'éjection d'atomes (ou de molécules) chargés ou neutres de la surface d'un solide sous l'action de particules lourdes (chargées ou neutres).

Ce phénomène se conçoit bien à partir de la notion de cascade de déplacements. Si cette cascade se développe près de la surface, elle peut conduire à l'éjection d'atomes du milieu cible [22].

Le comportement de pulvérisation d'un grand nombre de solides monoatomiques amorphes bombardés par des ions de quelques keV peut être prédit de façon satisfaisante par le modèle des cascades de collisions linéaire. La quantification de ce phénomène se fait par le rendement de pulvérisation, qui est défini comme la quantité du matériau enlevée par ion incident (atome/ion, gram/ion)[23].

## **2.3 Processus du mixage collisionnel**

Le mixage collisionnel est la conséquence directe du transfert de l'énergie cinétique des ions primaires aux atomes de la cible. Il en résulte une nouvelle distribution locale des espèces. C'est le phénomène le plus problématique dans l'analyse SIMS. Il est indissociable de la mesure elle-même et plusieurs développements [24-26] visent à le minimiser.

En effet l'énergie cinétique des ions incidents est, au moment de l'impact, transférée à l'intérieur de la cible sous forme de déplacements d'atomes. On divise généralement le phénomène en deux processus distincts :

### **2.3.1 Le mixage par choc direct**

Il concerne uniquement le premier choc d'atomes incidents avec un atome de la cible. Ces chocs sont très énergétiques et fortement anisotropes : les atomes frappés par les chocs directs sont très projetés de préférence vers l'intérieur du matériau [27].

### **2.3.2 Le mixage par cascades**

C'est la succession de chocs entre les atomes de la cible, initiée par le premier choc direct.

Il concerne les chocs entre atomes de la cible. Ces chocs sont très nettement moins énergétiques que les précédents mais largement plus nombreux [27]. Un seul atome incident provoquera ainsi un nombre considérable de chocs par cascades (figure (2-2)), jusqu'à ce que l'énergie transférable d'un atome à un autre devienne inférieure à l'énergie de déplacement des atomes de la cible, qui est d'environ 25 eV.

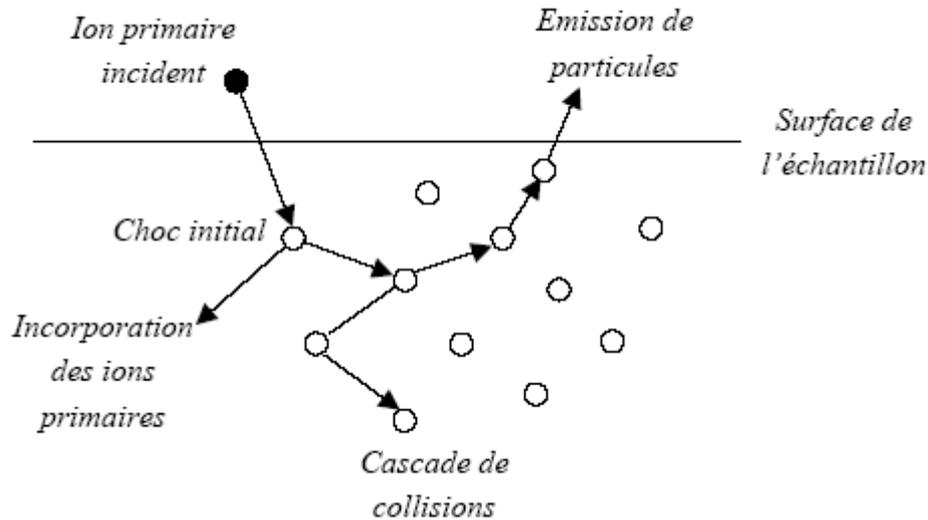


Figure (2-2): Principe du mixage collisionnel [12]

Les derniers atomes de la cascade de collisions reçoivent une énergie inférieure à l'énergie de déplacement des atomes. L'énergie cinétique en excès est alors dissipée sous forme de phonons [11]. De plus, un caractère isotropique se développe au fil de la cascade.

### 2.3.3 Quantification du mixage collisionnel

Le profil interne au sein d'un solide constitue un paramètre quantitatif qui décrit la densité des éléments et leur composition à l'intérieur de l'échantillon.

Le mixage collisionnel est quantifié par l'évolution (le changement) du profil interne :

- a) Pour un échantillon monoatomique, on peut dire que le mixage collisionnel est quantifié par le changement de densité atomique.
- b) Pour un échantillon composé de plusieurs éléments, le mixage collisionnel est quantifié par le changement de phase et de densité de cette phase, par rapport à l'état initial.

## 3. DESCRIPTION THEORIQUE DES CASCADES DE COLLISIONS

On appelle cascade de collisions l'avalanche des chocs qui se déclenche dans un solide à la suite de la pénétration d'un ion énergétique. Le processus de collisions en cascade se manifeste dès que l'énergie de l'ion primaire est grande devant l'énergie de cohésion des atomes du solide [28].

Dans un milieu dense, ordonné ou non, on s'attend donc à un certain déterminisme des cascades, fixé par le premier impact de l'ion primaire sur un atome cible. En fait l'agitation thermique, l'interpénétration des cascades et les défauts créés sont autant de facteurs qui confèrent aux processus collisionnels un caractère irrégulier.

La vision obtenue de la cascade de collision en quelques secondes après le déclenchement de la cascade, c'est-à-dire bien longtemps après qu'elle se soit éteinte (rappelons que sa durée est de l'ordre de  $10^{-12}$  -  $10^{-14}$  s) [28], c'est donc un état mort de la cascade que l'on observe et qui n'évolue pratiquement pas dans le temps.

Avant de tirer toute conclusion et interprétation des phénomènes mis en jeu par la cascade des collisions, il faut bien examiner la formulation des principes physiques utilisés.

Dans les premières simulations [28], les collisions, décrites dans un modèle atomique de sphère dure, s'apparentaient à celles des boules de billard. Par la suite, un potentiel d'interaction atomique, aussi réaliste que possible, a été introduit. C'est encore l'approche la plus pratiquée. D'autres travaux [29-31] utilisent la méthode de Monté Carlo basée toujours sur les cascades de collision (collision binaire).

Si l'on garde à l'esprit que la pénétration des ions et des dommages créés en SIMS sont calculables à partir d'une suite de collisions binaires. A partir de là, on peut étudier ce processus physique d'un point de vue de la théorie de la mécanique classique.

Le terme binaire implique que chaque collision n'a lieu qu'entre deux partenaires à la fois que l'on peut considérer comme isolés du reste de la colonie, au moins pendant le choc.

Comme il est de règle dans tout système isolé, le terme élastique indique que la quantité de mouvement et l'énergie cinétique sont conservées au cours d'une collision. Bien entendu, des processus collisionnels inélastiques dans lesquels des électrons sont expulsés des atomes au cours des collisions existent. Ces processus se manifestent, par exemple, par des émissions de photons X ou d'électrons Auger. Comme ils n'abondent cependant qu'un faible pourcentage de l'énergie moyenne disponible dans une cascade de collisions à faible énergie d'ions, nous n'en tiendrons pas compte.

### 3.1 Etude mécanique d'une collision binaire

Considérons un atome de masse  $M_1$ , d'énergie cinétique  $E$ , animé d'une vitesse  $V_1$ , qui entre en interaction avec un atome cible de masse  $M_2$  initialement au repos, par l'intermédiaire d'un potentiel central  $U(r)$ , le projectile est dévié de sa trajectoire rectiligne initiale et la particule cible est mis en mouvement, emportant avec elle une énergie  $T$ . Les paramètres de la collision

binaire sont décrits par les figures suivantes représentant le choc dans le référentiel du laboratoire et dans le référentiel du centre de masse respectivement (figures (2-3) et (2-4)).

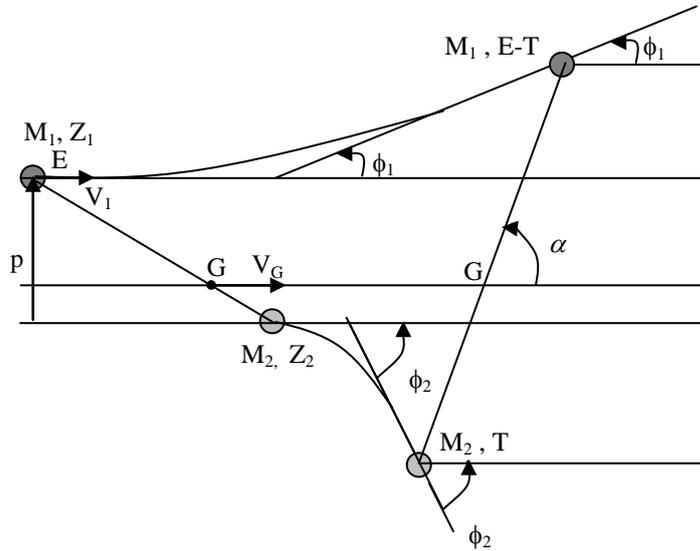


Figure (2-3): Représentation d'une collision binaire dans le référentiel lié au laboratoire

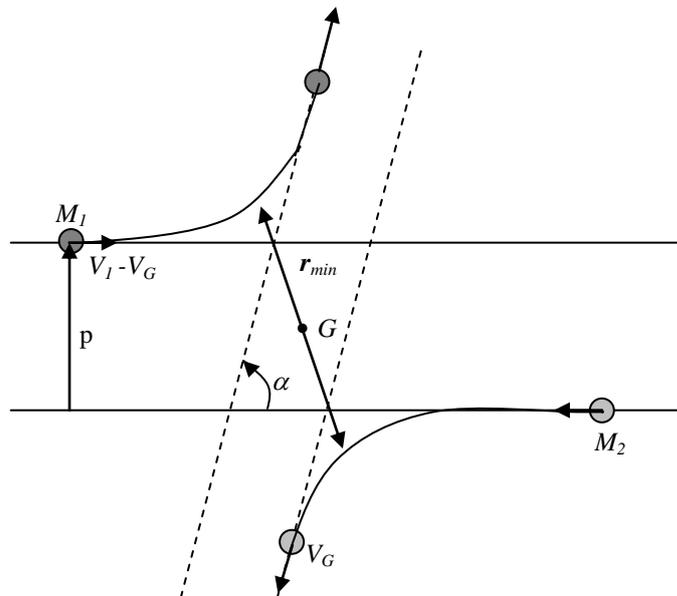


Figure (2-4): Représentation d'une collision binaire dans le référentiel du centre de masse

### 3.1.1 Paramètre d'impact d'une collision binaire

Toutes les grandeurs cinématiques et dynamiques d'une collision entre deux atomes sont fixées par deux paramètres qui sont l'énergie initiale  $E$  et le paramètre d'impact  $p$  c'est-à-dire la distance entre la particule initialement au repos et la direction de vitesse de l'ion incident. Le diagramme cinématique de Landau de la collision conduit aux équations suivantes (figure 2-3)) [20], [32]:

$$\cos\phi_1 = \frac{M_1 - M_2 \cos\alpha}{(M_1^2 + M_2^2 + 2M_1M_2 \cos\alpha)^{1/2}} \quad (14)$$

$$\phi_2 = \frac{\pi - \alpha}{2} \quad (15)$$

$$T = T_m \sin^2 \frac{\alpha}{2} \quad (16)$$

$\alpha$  est l'angle de diffusion formé par la droite qui joint les deux atomes avec  $V_G$ .

$T_m$  est l'énergie maximale transmise dans une collision de plein fouet, c'est-à-dire à paramètre d'impact nul. L'angle de diffusion a dans ce cas pour valeur  $\alpha = \pi$ .

Alors:

$$T_m = \gamma E \quad (17)$$

avec

$$\gamma = 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (18)$$

Il est intéressant d'exprimer  $\phi_1$  et  $\phi_2$  en fonction de l'énergie transmise [32]  $T$  :

$$\cos\phi_1 = \left(1 - \frac{T}{E}\right)^{1/2} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{M_2}{M_1}\right) \frac{T}{E} \left(1 - \frac{T}{E}\right)^{-1/2} \quad (19)$$

$$\cos\phi_2 = \left(\frac{T}{\gamma E}\right)^{1/2} \quad (20)$$

Certains auteurs utilisent les notions de masse et d'énergie réduites [20], [33-34] travaillent dans le référentiel centre de masse. Du fait de la symétrie sphérique du potentiel d'interaction l'étude du mouvement de deux particules se ramène à celle du mouvement d'une particule

fictive de masse  $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ , appelée masse réduite, qui se déplace dans un champ électrique central  $U(r)$  (figure (2-5)).

Le mouvement est alors défini dans le plan d'incidence par la variable  $r$ , distance des deux particules, et un angle  $\Phi$ . L'angle  $\Phi_{limite}$  atteint lorsque la particule mobile prend sa trajectoire asymptotique rectiligne, alors l'angle de diffusion  $\alpha$  est déterminé par :  $\alpha = \pi - \Phi_{limite}$ .  
 $p$  paramètre d'impact,  $\alpha$  l'angle de diffusion,  $r_m$  distance minimale d'approche.

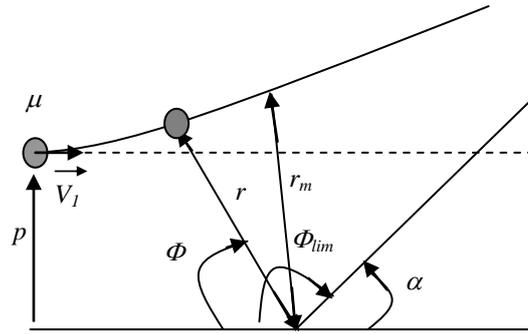


Figure (2-5): Représentation du mouvement d'une particule de masse réduite dans un champ de force centrale [20]

L'équation dynamique de la collision, exprimée dans le repère du centre de masse, s'écrit [20], [32]:

$$E_r = \frac{1}{2} \mu \left[ \left( \frac{d}{dt} r \right)^2 + r^2 \left( \frac{d}{dt} \Phi \right)^2 \right] + U(r) \quad (21)$$

$E_r = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E$  est l'énergie réduite de la particule fictive.

Le moment cinétique du mouvement, s'écrit [20]:

$$p \mu V_1 = \mu r^2 \frac{d}{dt} \Phi \quad (22)$$

En combinant les deux équations (21) et (22), on obtient :

$$\frac{d}{dt} r(t) = V_1 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E_r} - \left(\frac{p}{r}\right)^2} \quad (23)$$

D'après l'équation (22), on trouve :

$$\frac{d}{dt} \Phi(t) = V_1 \frac{p}{r^2} \quad (24)$$

En utilisant l'équation (23) pour trouver la distance minimale d'approche  $r_m$  correspondant à

$\frac{d}{dt} r = 0$ , soit :

$$r_m = p \frac{1}{(1 - U(r_m) / E_r)^{1/2}} \quad (25)$$

On obtient facilement la relation  $\Phi(r)$ , en divisant l'équation (23) par l'équation (24) qui donne :

$$\frac{d\Phi}{dr} = \frac{p}{r^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E_r} - \left(\frac{p}{r}\right)^2}} \quad (26)$$

On peut déduire l'expression de  $\alpha$  par l'intégration de l'équation (26) [20], [32] :

$$\alpha = \pi - 2p \int_{r_m}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E_r} - \left(\frac{p}{r}\right)^2}} \quad (27)$$

Cette expression porte le nom d'intégrale de diffusion et dépend du potentiel d'interaction interatomique et contient les deux paramètres qui caractérisent une collision à savoir le paramètre d'impact  $p$  et l'énergie initiale  $E$ .

La détermination du potentiel d'interaction interatomique contrôle la précision de la cinématique d'une collision binaire ainsi que les pertes d'énergies engendrées.

### 3.1.2 Potentiel d'interaction interatomique

Appelons  $U(r)$  le potentiel d'interaction des deux atomes. Ce potentiel, qui ne dépend que de la distance  $r$  des deux particules, est faiblement attractif à grande distance et très fortement répulsif à courte distance (Figure (2-6)).

Il est connu que le potentiel d'interaction  $U(r)$  entre deux atomes séparés par une distance  $r$  est approximativement sphérique et se présente sous la forme schématique illustrée par la figure suivante [20]:

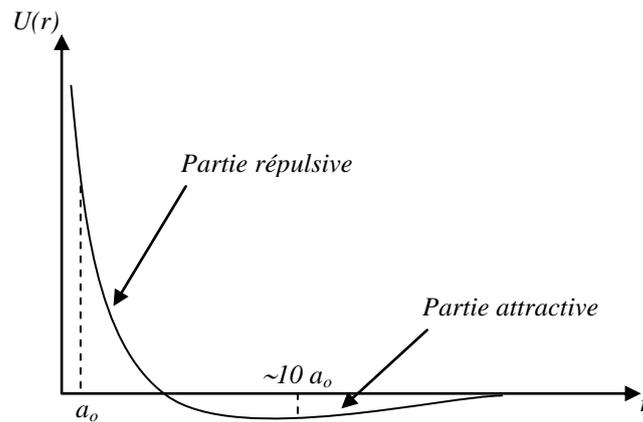


Figure (2-6): Forme schématique du potentiel interatomique

Le minimum du potentiel  $U(r)$  se situe vers des distances de l'ordre de  $10a_0$  alors que les collisions en SIMS impliquent des distances d'approche de l'ordre de  $a_0$  car l'énergie du projectile est beaucoup plus grande que l'énergie de liaison de projectile-atome cible.

$U(r)$  est faiblement attractif à longue distance  $r$ , lorsqu'on envoie des ions de quelques keV, dans le solide, cette partie attractive n'a que très peu d'incidence sur le mouvement des projectiles et sera par la suite complètement négligée. On étend cette hypothèse pour les atomes cibles de la cascade de collisions. C'est la partie répulsive qui correspond à des distances d'approche de quelques dixièmes d'Angstrom qui fixe la dureté de la collision.

$U(r)$  est fortement répulsif à très courte distance, l'essentiel de l'interaction étant une répulsion Coulombienne entre les deux noyaux à laquelle s'ajoute l'énergie d'excitation électronique causée par l'interprétation des nuages électroniques (principe de poli). Cependant cette répulsion Coulombienne est écrantée par les nuages électroniques des projectiles et atomes cibles.

### c) Potentiels Classiques

Dans la gamme de très basse énergie (10eV à 200eV) le potentiel de Born-Mayer est valable et ne se présente pas sous la forme d'un potentiel Coulombien écranté [35-36]:

$$U(r) = C_{BM} e^{-r} \quad (28)$$

avec  $C_{BM} = 52(Z_1 Z_2)^{3/4}$  et  $a_{BM} = 0.219$

Dans le domaine répulsif et des énergies supérieures à 200eV, l'énergie potentielle d'interaction est une énergie potentielle Coulombienne modérée par une fonction d'écran (comprise entre 0 et 1). A très courte distance, l'essentiel de l'interaction est une répulsion Coulombienne entre les noyaux, partiellement écrantée par le nuage électronique.

La forme de l'énergie potentielle d'interaction que nous prendrons est [32]:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 q^2}{r} \psi(r/a) \quad (29)$$

Avec :  $q^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} e^2$  et  $e$  la charge d'électron

$Z_1$  et  $Z_2$  sont les numéros atomiques respectifs du projectile et de la cible.

$\psi(r/a)$  est la fonction d'écran qui tempère la répulsion Coulombienne des noyaux, dépend du modèle atomique utilisé, mais la forme identique pour toutes les paires d'atomes  $Z_1$ ,  $Z_2$  et  $a$  est la distance d'écran, un paramètre lié au rayon de Bohr  $a_0$  donné par la relation suivante :

$$a = 0.88 a_0 Z^{-1/2} \quad (30)$$

avec :  $Z^{2/3} = Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}$

On résume les interactions possibles entre deux types d'atomes par un potentiel interatomique universel lesquels les fonctions d'écrans les plus classiques sont ( avec  $x = r/a$ ):

Potentiel de Bohr :

$$\psi_B(x) = e^{-x} \quad (31)$$

Potentiel de Molière (MOL) :

$$\psi_M(x) = 0.35e^{-0.3x} + 5.5e^{-1.2x} + 0.1e^{-6x} \quad (32)$$

Potentiel de Lenz-Jensen (LJ) :

$$\psi_{LJ}(x) = 0.7466e^{-1.038x} + 0.2433e^{-3.876x} + 0.01018e^{-0.206x} \quad (33)$$

Potentiel de Thomas-Fermi (TF):

$$\psi_{TF}(x) \approx \frac{x}{\sqrt{x^2 + 3}} \quad (34)$$

Les distances d'écran qui rentrent dans chacun de ces modèles sont le plus souvent posées à priori plutôt que déduites à partir de considération plus fondamentale. Bohr a suggéré pour son potentiel :

$$a_B = \frac{a_0}{\sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}} \quad (35)$$

avec :  $a_0$  rayon atomique de Bohr

Alors que pour les potentiels (MOL), (LJ) et (TF), Firsov et Lindhard ont successivement proposé les formes suivantes [37]:

$$a_F = \frac{0.8853a_0}{(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}} \quad (36)$$

$$a_L = \frac{0.8853a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (37)$$

Il est toujours possible de conduire les calculs numériques à partir de la courbe exacte  $\psi_{TF}(x)$  mais il est souvent commode d'approximer cette fonction d'écran par une fonction puissance de  $x$  (correspondant à des potentiels en loi puissance inverse  $1/r^s$ ) de la forme (figure(2-7)) [20]:

$$\psi_{TF}(x) = A_m x^{1-1/m} \quad (38)$$

parfois écrite  $\psi_{TF}(x) = \frac{k_s}{s} x^{1-s}$

avec  $s=1/m$  et  $k_s=k_m=(A_m/m)$  où  $A_m$  et  $m$  sont des paramètres ajustables suivant le domaine des distances d'approches considérées (correspondant à un domaine donné d'énergie).

Le paramètre  $m$  fixe donc une loi d'échelle en énergie pour les collisions. La valeur qui convient le mieux à la gamme d'énergie utilisée en SIMS est  $m=1/3$  ou éventuellement  $m=1/4$  pour les collisions moins énergétiques de la cascade de collisions [20],[32].

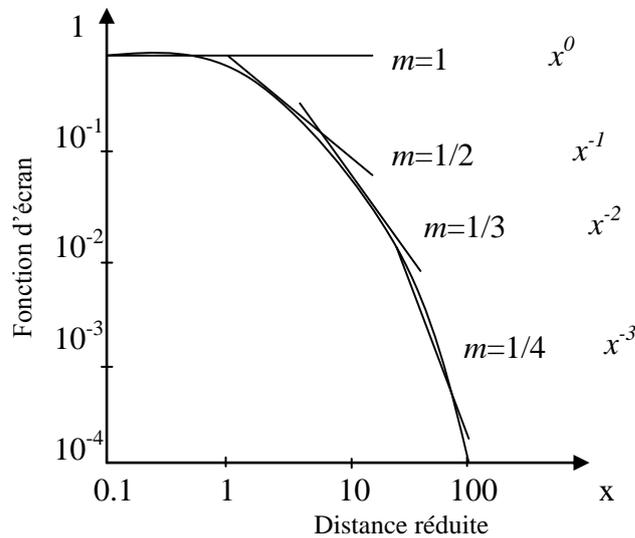


Figure (2-7): Fonction d'écran de Thomas –Fermi approximée par des fonctions puissances de  $x$  [20]

A l'aide de cette approximation en loi puissance, il est possible de calculer analytiquement de nombreuses quantités relatives à la pénétration et aux dommages créés par les ions (exemple l'analyse SIMS). Cette possibilité de manipulation mathématique est une raison du succès du potentiel de Thomas-Fermi, bien que sur le plan physique la validité du potentiel (TF) est limitée à basse énergie.

#### d) Potentiel Universel ZBL

Les potentiels classiques (TF), (LJ) et (MOL) basés sur un modèle statistique de l'atome s'avèrent de prévision limitée lorsqu'ils sont comparés à des modèles plus réalistes de potentiel, cet écart est d'autant plus sensible que les distances d'approche sont élevées ou que les atomes intervenant dans la collision sont légers. Ce désaccord est dû au fait que ces modèles statistiques ignorent la structure en couche pour la distribution électronique des atomes.

Ziegler, Biersack et Littmark [19] ont calculé de manière systématique les distributions de charge (HF) pour tous les atomes ( $Z=1$  à 92 excepté  $Z= 84$  à 91) afin de déduire la fonction

d'écran résultante de l'interpénétration de deux atomes. Ces distributions sont évaluées dans l'état solide, chaque atome du solide est d'abord rendu sphérique. Puis une moyenne sur tous les sites substitutionnels rencontrés dans le cristal est réalisée. Le potentiel interatomique résultant de l'interpénétration de deux atomes sphériques est obtenu alors par [19]:

$$U(r) = U_{nn}(r) + U_{en}(r) + U_{ee}(r) + U_k(r) + U_a(r) \quad (39)$$

Où :  $U_{nn}(r)$  est l'énergie potentielle électrostatique des deux noyaux.

$U_{ee}(r)$  est l'énergie d'interaction électrostatique des deux distributions électroniques associées à chaque atome.

$U_{en}(r)$  est l'énergie d'interaction électrostatique entre chaque noyau et la distribution électronique de l'autre atome.

$U_k(r)$  est l'augmentation d'énergie cinétique des électrons dans le volume de recouvrement des deux atomes engendrée par le principe de Pauli.

$U_a(r)$  est l'augmentation dans l'énergie d'échange de ces électrons.

Les fonctions d'écran calculées en rayon réduit de Lindhard mettent en évidence une dispersion trop élevée pour considérer la forme du potentiel indépendante du couple  $(Z_1, Z_2)$ . Ceci a conduit Ziegler et col [19] à redéfinir une nouvelle longueur d'écran (dite longueur d'écran universelle) qui compacte au mieux les potentiels interatomiques; le meilleur ajustement est obtenu pour :

$$a_u = \frac{0.8853a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \quad (40)$$

Il réduit notablement la dispersion des potentiels interatomiques au-dessus de 2eV.

Finalement, les fonctions d'écran nouvellement réduites ont été ajustées à une série de 4 termes exponentiels pour obtenir une nouvelle fonction d'écran universelle  $\psi_u(x)$ .

$$\psi_u(x) = 0.181e^{-3.1x} + 0.5099e^{-0.0423x} + 0.2802e^{-0.4028x} + 0.0287e^{-0.2016x} \quad (41)$$

Notons que la somme des préfacteurs exponentiels vaut 1 pour  $x = 0$  afin de s'accorder à un potentiel purement Coulombien à haute énergie.

### 3.1.3 Section efficace différentielle d'une collision binaire

Considérons un projectile arrivant avec un paramètre d'impact  $p$  sur un atome cible au repos ; d'après l'intégrale de diffusion, il sera diffusé dans le centre de masse des particules d'un angle  $\alpha(p)$ .

Si le paramètre d'impact  $p$  varie de  $dp$  il en résultera une variation  $d\alpha$  de l'angle de diffusion, en d'autres termes, tous les ions qui arrivent à l'intérieur d'une couronne de rayon  $p$  et de largeur  $dp$  seront diffusés suivant un cône d'angle  $\alpha$  et d'ouverture  $d\alpha$ . Cette couronne a une surface  $|d\sigma| = 2\pi p|dp|$  que l'on appelle section efficace différentielle de collision.

Cette section efficace différentielle de collision a une signification physique et apporte une information de la probabilité d'un événement collisionnel.

On peut l'exprimer en fonction de  $\alpha$  par la relation suivante:

$$|d\sigma| = 2\pi p \left| \frac{dp}{d\alpha} \right| |d\alpha| \quad (42)$$

D'après cette expression le calcul de  $d\sigma$  nécessite l'inversion  $p(\alpha)$  de l'intégrale de diffusion (équation(27)). C'est une opération qui n'est réalisable analytiquement qu'à partir de formes approchées du potentiel d'interaction.

Pour des collisions de basse énergie, la majorité des collisions seront des collisions douces à faibles angles de diffusions  $\alpha$  et à faibles transmissions d'énergies.

L'équation (16) s'approche à l'expression suivante:

$$T \approx T_m \frac{\alpha^2}{4} \quad (43)$$

D'après l'approximation des grands paramètres d'impacts (l'équation (43) et le traitement approché [32] de l'intégrale de diffusion), on donne la section efficace différentielle pour les collisions élastiques (définie par la formule classique de Thomas-Fermi équations(29) et (38)) en fonction de l'énergie transmise  $T$ , soit [32], [34], [38-40]:

$$d\sigma(E, T) = C_m E^{-m} T^{-(1+m)} dT \quad (44)$$

Avec  $C_m$  une constante donnée par :

$$C_m = \frac{\pi}{2} \lambda_m a^2 \left( \frac{M_1}{M_2} \right)^m \left( \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{a} \right)^{2m} \quad (45)$$

$$a = 0.8853 a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2} \quad (46)$$

Rappelons que :

$Z_1$  : le numéro atomique d'ion incident

$Z_2$  : le numéro atomique de l'atome de la cible

$a_0$  : rayon de Bhor ( $a_0 = 0.5 \text{ \AA}$ )

A basse énergie ( $E < 10\text{keV}$ )  $m < 1$ , pour le domaine d'énergie [250, 5000]eV,  $m = 1/3$  qui convient assez bien à cette gamme d'énergie alors  $\lambda_{1/3} = 1.309$  et pour  $m = 1/2$  on a  $\lambda_{1/2} = 0.327$  [32-33], [38].

### 3.1.4 Perte d'énergie d'une collision binaire

Le potentiel interatomique  $U(r)$  étant connu, il est intéressant d'envisager les probabilités pour que la collision, caractérisée par un paramètre d'impact  $p$ , ait lieu avec un angle donné de diffusion  $\alpha$  à  $d\alpha$  près ou ce qui revient au même, pour que la collision donne lieu à un transfert d'énergie à l'atome cible entre  $T$  et  $T+dT$ .

Supposons une particule envoyée au hasard, perpendiculairement à une surface  $S$  où se trouve un seul centre de diffuseur, à partir de là, on peut définir la probabilité  $dP(T)$  pour que cette particule soit diffusée portant l'énergie transmise  $T$  à  $dT$  près par l'expression suivante:

$$dP = \frac{|d\sigma|}{S} \quad (47)$$

Considérons maintenant un milieu solide comportant  $N$  atome/volume répartis de manière désordonnée. La probabilité pour qu'un ion effectue sur une tranche de surface  $S$  et d'épaisseur  $\Delta x$ , une collision avec un atome est caractérisée par une section efficace  $d\sigma$ , est égale à la probabilité  $|d\sigma|/S$  de diffusion sur cet atome, par le nombre  $NS\Delta x$  de centres diffuseurs [20], soit :

$$dP = NS\Delta x \frac{d\sigma}{S} \quad (48)$$

$$dP = N\Delta x d\sigma \quad (49)$$

$$N(x + \Delta x) = \frac{\Delta M}{S\Delta x} \quad (50)$$

$\Delta M$  : le nombre d'atomes compris dans le volume  $S\Delta x$

$N\Delta x$  : le nombre d'atome (atomes/cm<sup>2</sup>) vu par les ions du bombardement

L'énergie transmise au cours d'une collision étant comprise entre 0 et  $T_{max} = \gamma E$ , l'énergie moyenne transmise dans la traversée  $\Delta x$  est :

$$\langle T \rangle = \int_0^{T_{max}} T dP \quad (51)$$

$\gamma$  est décrit par l'équation(18).

La perte d'énergie totale pour un ion est donnée par la somme de la perte d'énergie d'une collision élastique et la perte d'énergie d'une collision inélastique (c'est à dire la somme de la section d'arrêt nucléaire et électronique).

Nous sommes à basse énergie, donc il faut complètement négliger le ralentissement électronique devant le ralentissement nucléaire.

Cette considération et l'utilisation de l'équation (44) sont trop importantes pour la suite du développement car elles autorisent à traiter le problème analytique des cascades de collisions.

### 3.2 Structure des cascades de collisions et grandeurs associées

Une cascade de collisions est une avalanche de chocs entre un nombre croissant de partenaires. Il faut donc éjecter de leur site les atomes du solide, c'est-à-dire créer des lacunes pour entretenir la cascade. Mais comme les atomes sont liés au réseau cristallin, le processus d'éjection requiert un minimum d'énergie. Il en résulte que le nombre d'atomes en mouvement dans une cascade ne peut croître indéfiniment. Il est limité lorsque l'énergie des atomes mobiles devient trop faible pour qu'ils puissent à leur tour éjecter d'autres atomes. Les atomes sont alors forcés à l'immobilité en position d'interstitielle le plus souvent ; parfois sur un site lacunaire.

Finalement, le bilan d'une cascade de collisions est la création d'un certain nombre de défauts ponctuels, lacunes et interstitiels.

Malheureusement les ions primaires frappent la cible en des points de sa surface distribués au hasard, de sorte que les cascades de collisions sont engendrées d'une manière aléatoire. Ce

caractère aléatoire a permis de développer un formalisme analytique d'étude des cascades fondé sur le principe des phénomènes de transport (équation de transport de Boltzman).

L'étude des phénomènes aléatoires invoque un grand nombre de traces permet de mesurer les moments d'ordre 'un', c'est-à-dire les valeurs moyennes et les moments d'ordre 'deux' c'est-à-dire les moyennes quadratiques qui caractérisent les phénomènes de dispersion. Ces grandeurs observables sont attachées à la structure de cascades de collisions.

On définit donc :

L'angle d'incidence  $\theta$  du faisceau d'ion par rapport à la normale à la surface.

Le libre parcours  $\lambda$  de l'ion est la distance parcourue entre deux collisions successives.

Le parcours total  $R_T$  de l'ion, somme des libres parcours depuis son entrée dans le solide jusqu'à son point d'arrêt.

Le parcours projeté  $R_p$  dans la direction incidente, somme des libres parcours projetés dans la direction incidente depuis son entrée dans le solide jusqu'à son point d'arrêt.

La profondeur de pénétration  $R$  définie par le parcours projeté suivant la normale à la surface ( $R = R_p \cos \theta$ ).

Ainsi, pour les moyennes on a : le libre parcours moyen  $\langle \lambda \rangle$ , le parcours moyen projeté  $\langle R_p \rangle$  et la profondeur moyenne de pénétration  $\langle R \rangle$ .

Pour les phénomènes de dispersion on a : la dispersion des parcours projetés  $\langle R_p^2 \rangle$  et la dispersion des profondeurs de pénétration  $\langle R^2 \rangle$  (dispersion des ions).

En effet, ce qui est accessible par l'expérience en analyse en profondeur, c'est la localisation des ions implantés dans le solide, c'est-à-dire la profondeur moyenne de pénétration  $\langle R \rangle$  qui est reliée au parcours moyen projeté  $\langle R_p \rangle$ .

Comme nous avons déjà vu au chapitre précédent, que la profondeur moyenne de pénétration  $\langle R \rangle$  influe directement sur la résolution en profondeur, nous nous intéresserons donc à cette grandeur physique qui représente ainsi le ralentissement des ions dans la matière. De sorte que, on se limite dans ce travail, au bombardement normale à la cible, laquelle la profondeur moyenne de pénétration devienne le parcours moyen projeté (voir l'équation (13)).

### 3.2.1 Profondeur de pénétration et dispersion d'ions

Nous examinons maintenant quelques aspects quantitatifs des cascades de collisions. Au cours d'une collision, un atome cible reçoit de la part du projectile une énergie  $T$ . l'atome cible sera arraché de son site si  $T \geq E_d$ ,  $E_d$  étant l'énergie de déplacement de l'atome cible. Autrement dit, la probabilité d'éjection est 0 si  $T < E_d$  et 1 si  $T \geq E_d$ . Le temps d'une collision

est très court,  $\approx 10^{-15}$  s ; beaucoup plus court que le temps de relaxation du réseau, consécutif au départ de l'atome. Par conséquent, on ne bénéficie pas, dans l'éjection de l'atome, de l'aide apportée par la relaxation du réseau comme dans un processus thermique de création d'une paire de Frenkel (lacune + interstitiel). Il en résulte que  $E_d$  est beaucoup plus grand que l'énergie de formation d'une paire de Frenkel (4-5 eV). Typiquement,  $E_d$  se situe entre 25 et 100 eV selon le matériau [28].

Pour décrire réellement le processus de ralentissement des ions dans la cible et en déduire les grandeurs moyennes qui le caractérisent, particulièrement le parcours moyen projeté, nous allons utiliser l'équation de transport de Boltzman.

Nous présentons la distribution des parcours projetés (distribution des profondeurs de pénétration)  $P(E, R)$  de tel sorte que  $P(E, R)dR$  soit la probabilité pour qu'un ion d'énergie initiale  $E$  soit stoppé après avoir parcouru une longueur  $(R+ dR)$ .

Nous considérons toutes les trajectoires des ions pendant le ralentissement. La gamme de leur distribution est  $P(E, R)$ .

Soit l'équation intégral-différentielle d'après Lindhard et al (l'équation linéaire de Boltzman) [32], [38], [41] décrite pour une incidence d'ions normale à la surface :

$$-\frac{\partial}{\partial R} P(E, R) = N \int d\sigma [P(E, R) - P(E - T, R)] + NS_e(E) \frac{\partial}{\partial E} P(E, R) \quad (52)$$

$S_e(E)$  : Section efficace de ralentissement électronique

$N$  : Densité atomique de la cible.

$d\sigma$  : Section efficace différentielle.

L'équation (52) est homogène, par conséquent un état additionnel est nécessaire pour qu'une solution unique soit obtenue. Evidemment, la distribution doit être normalisée.

$$\int_0^{\infty} P(E, R)dR = 1 \quad (53)$$

Les équations (52) et (53) sont compatibles et suffisantes pour déterminer  $P(E, R)$  dans un milieu ralentisseur homogène.

En prenant des moments spatiaux partout à partir de (52) nous obtenons :

$$n\langle R^{n-1}(E) \rangle = N(\int d\sigma[\langle R^n(E, R) \rangle - \langle R^n(E - T, R) \rangle]) + NS_e(E) \frac{\partial}{\partial E} \langle R^n(E, R) \rangle \quad (54)$$

Or :

$$\langle R^n(E) \rangle = \int_0^\infty R^n P(E, R) dR ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (55)$$

L'ion qui pénètre dans un milieu solide interagit avec des électrons et des noyaux atomiques.

A basse énergie, on pourra donc complètement négliger le ralentissement électronique devant le ralentissement nucléaire dû aux collisions entre atomes (nous négligerons les collisions inélastiques). Ce n'est qu'à très grande vitesse du projectile que le ralentissement électronique devient important.

Ainsi, toutes les grandeurs qui caractérisent la pénétration de l'ion dans le solide sont contrôlées par la section efficace différentielle de ralentissement nucléaire.

L'ensemble des équations (54) a une solution analytique simple pour le ralentissement nucléaire ( $Se(E) = 0$ ) et la section efficace différentielle (44).

Posons [32]:

$$\langle R^n(E) \rangle = A_n \left( \frac{E^{2m}}{NC_m} \right)^n ; \quad A_0=1 ; \quad (56)$$

Le problème revient à déterminer les coefficients  $A_n$ , les équations (54) et (56) donnent

$$nA_{n-1} = A_n \int_0^\gamma \frac{1 - (1 - \tau)^{2mn}}{\tau^{1+m}} d\tau ; \quad \tau=T/E ; \quad (57)$$

avec la présentation de la fonction bêta incomplète

$$B_\gamma(x, y) = \int_0^\gamma \tau^{x-1} (1 - \tau)^{y-1} d\tau \quad (58)$$

$$A_n = A_{n-1} \frac{n}{-\frac{1}{m} \gamma^{-m} - B_\gamma(-m, 1 + 2mn)} \quad (59)$$

À partir de (59) et  $A_0=1$  tous les  $A_n$  peuvent être déterminés récursivement.

Notons que tous les moments sont proportionnels à  $(\frac{E}{NC_m})^{2m}$ . La distribution des parcours des ions  $P(E, R)$  pourrait être reconstituée par les moments  $\langle R^n \rangle$ .

Pour  $n=1$ , observant les équations (56) et (59), nous prenons alors :

$$\langle R(E) \rangle = A_1 \frac{E^{2m}}{NC_m} \quad (60)$$

Où  $\langle R(E) \rangle$  est le parcours moyen projeté appelé dans notre cas la profondeur de pénétration.

Pour  $n=2$ , nous trouvons la dispersion des ions:

$$\langle R^2(E) \rangle = A_2 \left( \frac{E}{NC_m} \right)^2 \quad (61)$$

#### 4. CONCLUSION

D'après la définition des phénomènes précédents servant l'étude, nous avons décrit et déduit les paramètres essentiels qui peuvent traduire ces phénomènes. Dans ce contexte, l'utilisation de la théorie du transport des ions dans la matière permet de modéliser ces grandeurs physiques gouvernant l'analyse SIMS. En outre, des solutions analytiques franches ont été jusqu'ici seulement trouvées pour un milieu ralentisseur homogène. Cela nous a permis de conclure que les formules données par Lindhard et al sont valables dans le cas de l'absence du phénomène du mixage collisionnel, bien que dans notre cas d'étude de la résolution nécessite des solutions plus précises et en présence de ce phénomène.

En effet, nous avons vu que la pulvérisation est modélisée par le taux de pulvérisation, la rugosité contrôlée par l'érosion non homogène de l'échantillon est modélisée par la topographie de la surface. Il nous reste le phénomène le plus redoutable dans cette analyse, le mixage collisionnel qui sera modélisé par l'évolution du profil interne et agira directement sur les grandeurs associées aux cascades de collisions, essentiellement le parcours moyen projeté et la dispersion des ions.

## **CHAPITRE 3**

**GRANDEURS ASSOCIEES AUX  
CASCADES DE COLLISIONS EN  
PRESENCE DU MIXAGE COLLISIONNEL**

## 1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous nous intéressons au développement mathématique du problème. Celui consiste à déterminer les grandeurs physiques attachées à la structure des cascades de collisions durant l'irradiation de la cible, en présence du phénomène de mixage collisionnel qui sera induit par une certaine dose d'ions. Dans ce travail, nous présentons le mécanisme de mixage collisionnel comme le changement de concentration près de la surface ou la profondeur d'un solide (changement de la densité originale) sous l'effet de variation des doses élevées (haute fluence) irradiant une cible monoatomique amorphe. Comme nous l'avons déjà vu que la profondeur moyenne de pénétration est un paramètre très sensible en présence du mixage collisionnel influant directement sur la résolution en profondeur, ce chapitre sera focalisé sur la profondeur moyenne de pénétration et la dispersion des ions, influencées par la dose d'ions primaires. Si cette influence existe elle peut être exprimée sous une forme analytique. En utilisant la théorie de transport des ions dans la matière décrite au chapitre 2, selon Lindhard, Sigmund et collègues [32], [38-40], nous démontrons comment ce mécanisme affecte ces grandeurs.

## 2. SIGNIFICATION PHYSIQUE DU PROBLEME

La conséquence d'une cascade de collisions sous l'effet de la pénétration d'un seul ion dans la cible est la création d'un certain nombre de défauts ponctuels, lacunes et interstitiels. Mais dans le cas d'une certaine dose d'ions le processus de cascade apparaît plus lourd en agissant sur la densité de la cible, provoquant ainsi un changement de densité dans une couche proche de l'impact. Cela est traduit par le phénomène du mixage collisionnel.

Autrement dit chaque impact crée un petit nombre de défauts. Mais la succession des impacts provoque une accumulation qui se termine par une précipitation en amas de ces défauts et donne une naissance de gradient de la densité originale, provoqué par une explosion au coeur de la cascade de collision.

Pendant que l'échantillon ait été érodé, tous les atomes résidants sur la surface instantanée auront été déplacés par une distribution de dommages complets de sorte que, en moyenne, chaque atome ait pulvérisé et poussée en dehors du volume unitaire de collision. Des atomes sont efficacement replacés du centre de la cascade et déposés à ses bords après une certaine dose  $\phi$ .

Un certain nombre d'atomes en mouvement causent ainsi un changement de la densité initiale de la cible [42].

En effet, la redistribution des atomes et le changement de leurs quantités sont localisés dans un volume unitaire très petit ( $\text{nm}^3$ ), approximativement sur une étendue de l'ordre de grandeur de la largeur des cascades de collisions. Cette redistribution est non homogène dans l'espace. Elle induit ainsi une densité non constante. Cependant, lorsqu'on exploite un grand volume unitaire ( $\text{cm}^3$ ) le changement de la quantité des atomes est négligeable devant le nombre immense à l'intérieur du même volume choisi, ainsi la densité du solide peut rester constante. Alors le choix d'un petit volume unitaire est le facteur principal pour balayer réellement la redistribution des atomes dans l'espace et pour obtenir des résultats plus précis décrivant ainsi le ralentissement des ions dans la matière (grandeurs associées aux cascades de collisions). Dans ce cas, la redistribution des atomes cible est localisée dans un petit volume appelé volume de collision.

### 3. DESCRIPTION DU MODELE

Dans un milieu ordonné ou non, on s'attend donc à un certain déterminisme de cascade, fixé par le premier impact de l'ion primaire sur un atome cible. Il aboutit donc à un déterminisme du mixage collisionnel. Nous supposons maintenant que les cascades de collisions et la corrélation entre les chocs successifs induisent le processus du mixage collisionnel.

La signification physique, de notre problème de collision, est la suivante : pour déclencher une cascade de collisions d'où l'apparition du phénomène de mixage collisionnel, il faut que les atomes soient arrachés de leur site. Ceci nécessite que l'énergie transmise dans une collision soit supérieure ou égale à une énergie minimale  $T_{min} = E_d$  énergie de déplacement de l'atome. Nous admettrons donc que l'énergie moyenne transmise dans une collision est supérieure ou égale à l'énergie du déplacement ( $T_{moy} \geq E_d$ ). Il en résulte un nombre d'atomes en mouvements qui provoquent un changement de densité dans les couches les plus voisines à partir du niveau de l'impact.

Dans ce cas-là, le calcul du changement (distorsion) de densité  $N(R)$  est dû au nombre croissant d'événements de relocalisation assurés par ces ions et qui ne sont pas encore pulvérisés à la région de collision. Dans notre modèle nous assumons des déplacements lancés par un projectile primaire par l'utilisation de la notation de 'densité d'échappement' qui décrit le nombre d'atomes déplacés en dehors de la région de collision, et la notation 'distorsion de densité' qui décrit le nouveau nombre d'atomes situés dans la même région de collision, les deux par le même volume unitaire.

Cependant et pendant l'irradiation le faisceau d'ions interagit continuellement avec la nouvelle quantité des atomes cible, effectivement la densité distordue  $N(R)$ .

On considère un solide semi-infini, dont la surface est localisée à  $R=0$ , le profil initial, est exprimé en atomes par unité de volume. A partir au moment où la surface de ce solide est bombardée par une dose d'ions primaires  $\phi$ , exprimée en ions primaires par unité de surface, la distorsion de la densité initial  $N_0$  à l'intérieur du solide devient dépendante de la dose envoyée et de la profondeur. On définit donc la densité pulvérisée et détectée par la densité d'échappement  $N_e$  et le profil modifié par les déplacements d'atomes après qu'une dose d'ions primaires  $\phi$  a été envoyée sur la cible par la densité distordue  $N(R)$ .

On peut d'écrire la densité initiale  $N_0$  comme le bilan couche par couche des ions apportés et emportés par les collisions à l'intérieur du solide.

On additionne la distorsion de densité avec la densité d'échappement et par conservation de quantité d'atomes donne :

$$N(R) = N_0 - N_e(R) \quad (62)$$

Notons que la densité initiale  $N_0$  est constante.

Dans ce contexte et d'après ce qui précède, pour déduire correctement les grandeurs moyennes attachées au processus de ralentissement des ions dans un solide, il faut utiliser un milieu ralentisseur non homogène et le formalise analytique de l'équation du transport de Boltzman.

Maintenant la cible est supposée changée durant la pénétration des ions, sous l'effet d'un mixage de collision isotropique et d'une dose d'irradiation constante perpendiculaire à la surface.

Des ions qui arrivent au niveau où le processus du mixage prend naissance interagissent avec ce milieu distordu et la pénétration des ions est effectuée avec cette couche mixée.

Nous nous sommes intéressés par la profondeur moyenne de pénétration de la manière que nous utilisons l'équation intégral-différentiel (52).

Supposons maintenant que la distorsion de la densité peut se développer en série de Taylor:

$$N(R) = \sum_{i=0}^n a_i R^i \quad (63)$$

$$\text{Avec : } a_i = \frac{N^i(0)}{i!}$$

En prenant le moment d'ordre 'un' à partir de l'équation (52), on obtient :

$$1 = \int d\sigma [N_1(E) - N_1(E-T)] + S_e(E) \frac{\partial}{\partial E} N_1(E) \quad (64)$$

$$1 = -\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial R} P(E, R) R dR \quad (65)$$

Lequel  $N_1(E)$  est le parcours moyen pénétré par la fonction  $N(R)$ , donné par la forme suivante :

$$N_1(E) = \int_0^\infty RN(R)P(E, R)dR \quad (66)$$

et

$$N_1(E) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{N(0)^{(i)}}{i!} \langle R^{i+1} \rangle \quad (67)$$

Avec  $\langle R^{i+1}(E) \rangle = \int_0^\infty R^{i+1}P(E, R)dR$  est le moment d'ordre  $(i+1)$

Nous sommes dans la gamme d'énergie en analyse en SIMS (200 eV jusqu'au 10 keV) de sorte que nous utilisons la section efficace différentielle l'équation (44) et nous sommes dans l'hypothèse des collisions élastiques seulement ( $S_e(E) = 0$ ), donc l'équation (64) ayant une solution analytique simple :

$$N_1(E) = A_1 \left( \frac{E^{2m}}{C} \right) \quad (68)$$

$$\text{avec : } A_1 = \frac{1}{-\frac{1}{m} \gamma^{-m} - B_\gamma(-m, 1+2m)}$$

L'égalité des deux équations (67) et (68) donne la profondeur moyenne de pénétration sous la première forme :

$$\langle R(E) \rangle = \frac{A_1}{a_0} \frac{E^{2m}}{C} - \frac{a_1}{a_0} \langle R^2(E) \rangle - \frac{a_2}{a_0} \langle R^3(E) \rangle - \dots - \frac{a_n}{a_0} \langle R^{n+1}(E) \rangle. \quad (69)$$

Nous prenons le deuxième moment autour de l'équation (52)

$$2\langle R(E) \rangle = \int d\sigma [N_2(E) - N_2(E-T)] + S_e(E) \frac{\partial}{\partial E} N_2(E), \quad (70)$$

$N_2(E)$  est donné par la forme suivante :

$$N_2(E) = \int_0^\infty R^2 N(R) P(E, R) dR = \sum_{i=0}^n a_i \langle R^{i+2}(E) \rangle. \quad (71)$$

Remplaçons l'équation(69) et l'équation (71) dans l'équation (70) nous obtenons :

$$2 \left\{ \frac{A_1}{a_0 C} E^{2m} - \frac{a_1}{a_0} \langle R^2(E) \rangle - \frac{a_2}{a_0} \langle R^3(E) \rangle - \dots - \frac{a_n}{a_0} \langle R^{n+1}(E) \rangle \right\} = \sum_{i=0}^n a_i \int d\sigma \left[ \langle R^{i+2}(E) \rangle - \langle R^{i+2}(E-T) \rangle \right] \quad (72)$$

La solution de cette équation est de la forme :

$$\langle R^i(E) \rangle = A_i \left( \frac{E^{2m}}{C} \right)^i, \text{ avec } i = 2, 3, \dots, n+2. \quad (73)$$

On peut définir :  $A_i = (-1)^i \frac{(2)^{i-1}}{a_0 \prod_{k=1}^i ((-1/m) \gamma^{-m} - B_\gamma(-m, 1+2mk))}$ . (74)

Nous remplaçons toutes les solutions de l'équation(73) dans l'équation(69), utilisant l'équation(74) nous obtenons la nouvelle formule théorique de la profondeur moyenne de pénétration au présence du mixage collisionnel, sous la forme suivante [43]:

$$\langle R_{mix}(E) \rangle = \sum_{i=0}^n b_i (E^{2m})^{i+1}, \quad (75)$$

$$\text{Avec : } b_i = (-1)^i \frac{2^i}{C^{i+1} \prod_{k=1}^{i+1} ((-1/m) \gamma^{-m} - B_\gamma(-m, 1 + 2mk))} \frac{a_i}{a_0^{i+2}}. \quad (76)$$

Cette formule (équation (75)), présente une somme de série les quelles ses termes modélisent le mixage collisionnel.

On obtient la dispersion des ions en remplaçant  $i = 2$  :

$$\langle R_{mix}^2(E) \rangle = A_2 \left( \frac{E^{2m}}{C} \right)^2, \quad (77)$$

$$\text{avec } A_2 = \frac{2}{a_0^2 \prod_{k=1}^2 ((-1/m) \gamma^{-m} - B_\gamma(-m, 1 + 2mk))}. \quad (78)$$

On remarque que la dispersion dépend de la densité vue en surface  $a_0$ , si le mixage collisionnel agit sur l'élargissement en profondeur mais pas en surface (c-à-d  $N_0 = a_0$ ) en d'autre terme pas de phénomène de rugosité, alors l'équation (78) sera égale à l'équation (61) sans mixage.

La dépendance de la profondeur moyenne de pénétration et la dispersion avec la densité localisée en surface de la cible est primordiale, on peut vérifier cette dépendance en revenant à tous les coefficients de l'équation(76).

En effet le travail théorique [32] a fourni l'évidence que les cascades aléatoires de collision induites par bombardement des ions se croisées à la surface de la cible.

Cependant, la valeur exacte de la densité vue en surface influe sur les valeurs des paramètres physiques telles que la profondeur moyenne de pénétration et la dispersion d'ions.

Nous étudions maintenant l'influence de la dose d'ions du faisceau primaire sur ces paramètres.

Le changement de la densité augmente avec l'augmentation des doses d'ions, soit  $d\phi$  l'incrémentaire élémentaire de la dose du bombardement d'ions lequel induit l'érosion de la cible avec une quantité pulvérisée donnée par [44]:

$$- N_e dR = Y d\phi. \quad (79)$$

$Y$  est le rendement de la pulvérisation et  $N_e$  c'est la quantité de la densité d'échappement causée par la dose  $\phi$  à la profondeur  $R$ .

Par intégration de l'équation(79) on obtient :

$$-\int_0^{\infty} N_e (R) dR = \int_{\phi}^0 Y(\phi)d\phi. \quad (80)$$

D'après les travaux de Dowsett ref [45], la quantité de la cible érodée est en fonction de la dose d'ions, augmente non linéairement pour une faible dose d'irradiation et linéairement pour des doses élevées. La formule est bien approchée par la fonction suivante [45] :

$$\int_0^{\phi} Y(\phi)d\phi = \alpha\phi + \mu(1 - \exp(-k\phi)), \quad (81)$$

Les paramètres  $\alpha$ ,  $\mu$  et  $k$  dépendent de la nature d'ion-cible, la pente est proportionnelle au rendement de la pulvérisation de la matrice de la cible.

L'égalité de l'équation (80) et l'équation (81) donne:

$$\int_0^{\infty} N_e (R) dR = \alpha\phi + \mu(1 - \exp(-k\phi)). \quad (82)$$

Le calcul utilisant l'équation (81) était approché pour le bombardement d'ion d'Oxygène d'énergie de 500eV sur la cible de Silicium dans la dose d'intervalle  $[10^{15}-2 \times 10^{17}]$ ions/cm<sup>2</sup> ( $\alpha = \eta 561.5$ ,  $\mu = \eta 318.7$  et  $k = \eta 18.35$  si  $\phi$  est mesuré à l'unité de dose  $10^{17}$  ions/cm<sup>2</sup> et  $\eta$  est le coefficient de proportionnalité).

Les phénomènes de transport suggèrent que la quantité d'élargissement de la densité d'échappement  $N_e$  est prévue à partir de la pulvérisation du profil en profondeur et puisse être plutôt bien évaluée en considérant seulement les déplacements isotropes dus au mixage collisionnel [21].

Nous allons inspirer la variation de la densité d'échappement avec la variation de la dose d'ions à partir des travaux [30-31], [44-45]. Dans une première approximation on suppose une distribution Gaussienne de la densité d'échappement ce qui donne:

$$N_e(R) = D_0 \exp\left(-\left(\frac{R - \hbar}{\delta}\right)^2\right), \quad (83)$$

$D_0$ : Maximum densité d'échappement, avec  $D_0 < N_0$ .

$\hbar$  : Profondeur correspond au maximum de la densité d'échappement.

$\delta$ : Largeur de dispersion, interprétée au terme du mixage collisionnel.

A très haute dose d'ions on peut négliger le terme exponentiel dans l'équation(82). En insérant l'équation(83) dans l'équation(82), on obtient donc la valeur maximale de la densité d'échappement sous la forme suivante :

$$D_0 = \alpha\phi + \mu. \quad (84)$$

Un aspect très intéressant du travail Réf [44], suggèrent que l'énergie du faisceau d'ion ait seulement un effet léger sur la largeur de distorsion du profile de densité et prouve que la largeur de distorsion augmente avec l'augmentation de dose d'ions comme  $\phi^n$ .

On peut mettre donc:  $\delta = L\phi$  , pour  $n=1$  (85)

$L$ : constant dépend de la nature ion-cible (coefficient de proportionnalité).

Remplaçant les équations (84), (85) dans l'équation (62), on obtient la forme de la distorsion de densité qui dépend de la dose d'irradiation:

$$N(R) = N_0 - (\alpha\phi + \mu) \exp\left(-\left(\frac{R - \hbar}{L\phi}\right)^2\right). \quad (86)$$

Les coefficients de la série de Taylor de l'équation (86) dépendant de la dose d'irradiation sont:

$$a_0 = N_0 - (\alpha\phi + \mu) \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^{s+1}}{s!} \left(-\frac{\hbar}{L\phi}\right)^{2(s)}, \quad (87a)$$

$$a_{2j-1} = \frac{(\alpha\phi + \mu)}{(L\phi)^{2j-1}} \sum_{s=j}^{\infty} \frac{(-1)^{s+1}}{s!} C_{2s}^{2j-1} \left(-\frac{\hbar}{L\phi}\right)^{2(s-j)+1}, \text{ pour } j=1, 2, \dots \quad (87b)$$

$$a_{2j} = \frac{(\alpha\phi + \mu)}{(L\phi)^{2j}} \sum_{s=j}^{\infty} \frac{(-1)^{s+1}}{s!} C_{2s}^{2j} \left(-\frac{\hbar}{L\phi}\right)^{2(s-j)}, \quad \text{pour } j = 1, 2, \dots \quad (87c)$$

avec:  $C_s^j = \frac{s!}{j!(s-j)!}$ .

#### 4. RESULTATS ET DISCUSSIONS

Les résultats de cette étude sont limités à cause de plusieurs paramètres contenus dans l'équation d'intégrale (81) (le rendement de pulvérisation en fonction de la dose d'irradiation pour des différentes natures ion-cible). A ce stade là, nous supposons que la dépendance de la dose d'ions avec la quantité totale de la densité d'échappement équation (82), prend la même forme que l'équation (81) pour des différents ions-cible, mais variable selon les différents paramètres  $\alpha$ ,  $\mu$ ,  $k$  qui dépendront de la nature ions-cible.

Selon le travail du Réf [44], nous pouvons dire que pour des doses d'irradiation très élevées l'augmentation du rendement de pulvérisation est due majoritairement à l'augmentation des doses et minoritairement à l'augmentation d'énergie, ce qui nous a permis de considérer que les paramètres  $\alpha$ ,  $\mu$  restent constants pour des énergies variables.

La figure (3-1) montre la variation de la densité due au phénomène du mixage collisionnel induit sous différentes doses d'irradiation d'ions d'Oxygènes pour une cible de Silicium.

Cette distorsion des dommages d'irradiation est approximée à partir de  $L=0.146\text{nm}^3$ ,  $\hbar=1.5\text{nm}$  et les paramètres effectifs  $\alpha=\eta 5.615$ ,  $\mu=\eta 318.7$  si on mesure  $\phi$  en unité de dose ( $\text{ions}/\text{nm}^2$ ) et  $\eta=0.68 \times 10^{-3}$ .

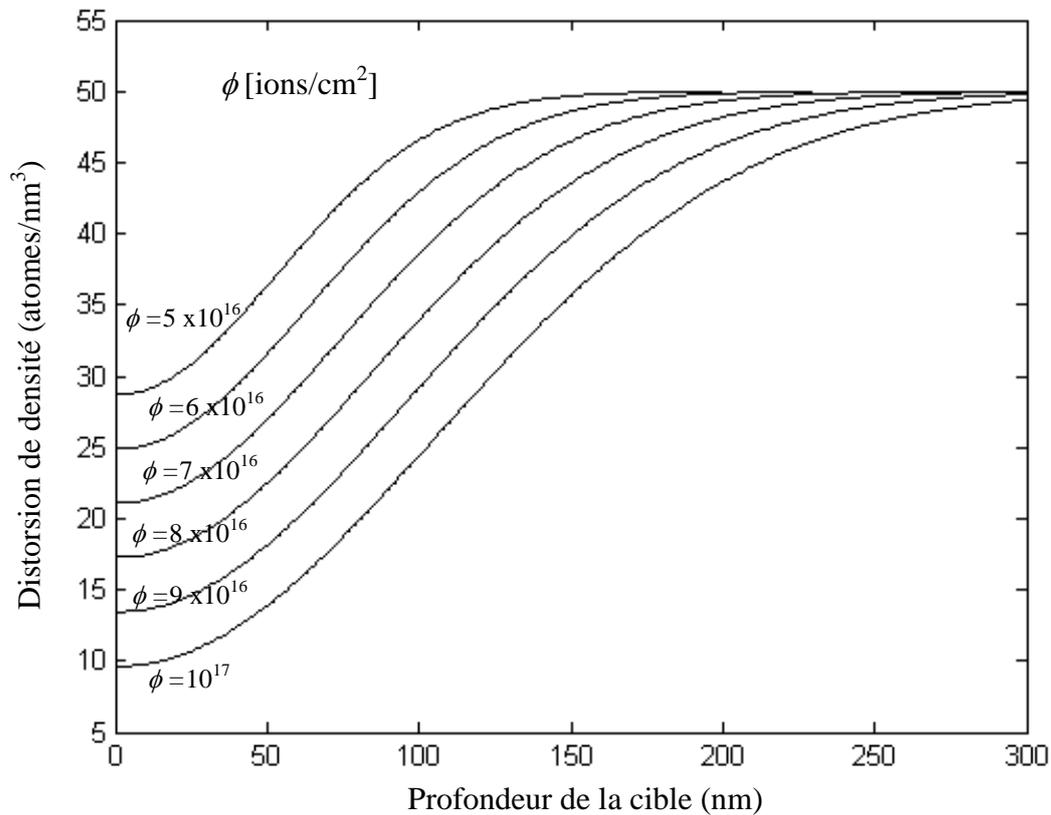


Figure (3-1): Evolution de la distorsion de densité avec des différentes doses d'ions d'Oxygènes irradiant une cible de Silicium amorphe, selon l'équation (86) [43]

A partir de la figure (3-1) ci-dessus, on remarque que les dommages en surface sont trop apparents, lorsque la dose d'irradiation augmente. Cela confirme en plus du mixage collisionnel, un effet de la rugosité très apparent en surface est induit à dose élevée.

Le mixage collisionnel est influé par les différents paramètres de la nature ion-cible et la dose d'ion  $\phi$ .

La figure (3-2) montre la variation de la profondeur moyenne de pénétration en fonction de l'énergie du faisceau d'ion pour des différentes doses. On voit à très basse énergie (inférieur à 1 keV) et pour des différentes doses d'irradiation engendrant faible changement de distorsion de densité, des valeurs proches de notre étude et celle sans mixage selon l'équation(60). Mais pour des énergies plus au moins élevées (supérieur à 1keV), la croissance de la profondeur moyenne de pénétration est beaucoup plus rapide à partir des doses d'irradiation élevées.

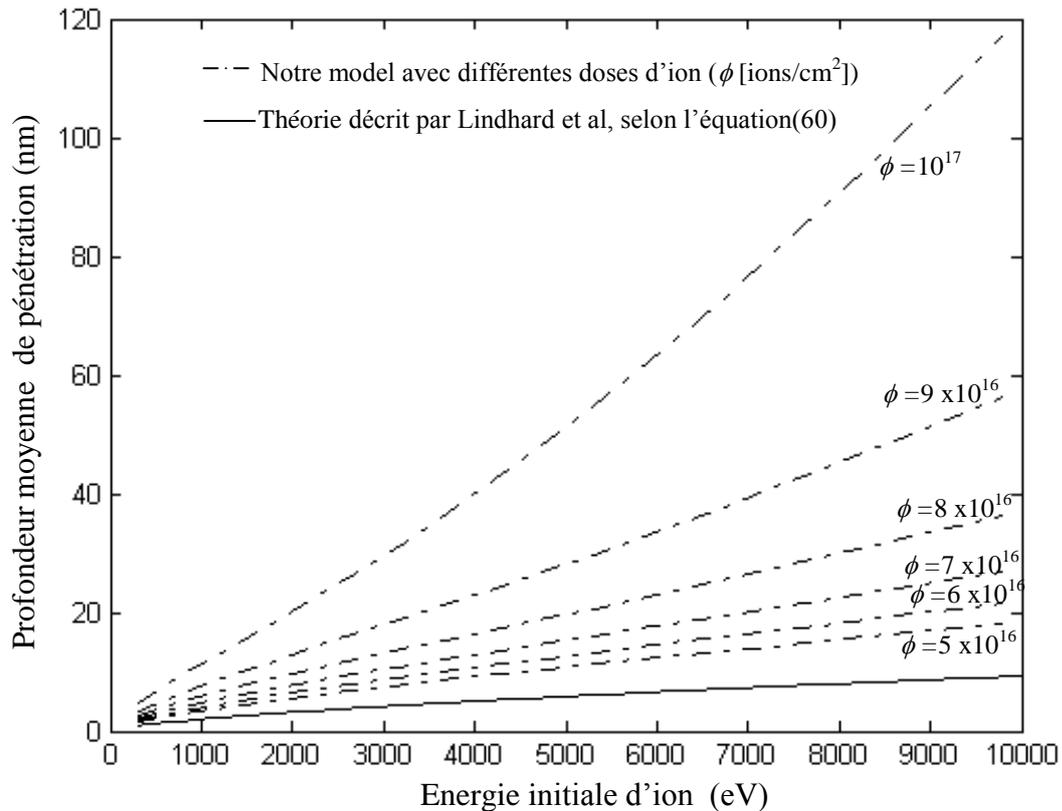


Figure (3-2): Comparaison de la profondeur moyenne de pénétration trouvée par notre model [43] pour différentes doses d'ions avec la théorie décrite par l'équation(60) qui exclut le mixage collisionnel (exemple d'Oxygène sur une cible Silicium amorphe)

Aux énergies élevées, la correction de la profondeur moyenne de pénétration est devenue nettement changée, l'effet étant plus évidant lorsque l'énergie et la dose d'ions d'irradiation augmentent. La forme croissante de la profondeur moyenne de pénétration est fortement affectée dans une large gamme d'énergie d'ion (figure (3-2)), quand le faisceau apporté à dose très élevée induit des effets d'élargissements (grand changement de valeur de concentration en surface et en profondeur) causés par une forte présence du mixage collisionnel, lourdement influe sur la croissance rapide de la profondeur moyenne de pénétration.

Un exemple de la correction théorique de la profondeur moyenne de pénétration pour différentes doses dans la gamme  $[5 \times 10^{16} - 10^{17}]$  ions/cm<sup>2</sup> et différents ions léger Li, B, N, O, F, Na, Mg et Al d'énergie 10 keV, bombardent une cible de Silicium amorphe est présentée dans la figure (3-3).

On a établi des formes analytiques simples pour des densités de distorsions, en choisissant des valeurs de paramètres très utiles  $\alpha$ ,  $\mu$ ,  $\hbar$ ,  $L$  pour différents ions-cible proches des valeurs précédentes.

Dans l'ordre d'approximation pour différentes doses d'irradiations et des ions léger induisent une distorsion de la densité du Silicium, les valeurs choisis sont :  $L_{Li}=0.069$ ,  $\hbar_{Li}=0.3$ ,  $L_B=0.076$ ,  $\hbar_B=0.85$ ,  $L_N=0.095$ ,  $\hbar_N=0.9$ ,  $L_O=0.146$ ,  $\hbar_O=1.5$ ,  $L_F=0.159$ ,  $\hbar_F=1.6$ ,  $L_{Na}=0.164$ ,  $\hbar_{Na}=1.8$ ,  $L_{Mg}=0.171$ ,  $\hbar_{Mg}=2.2$ ,  $L_{Al}=0.178$ ,  $\hbar_{Al}=2.5$  et les paramètres utiles  $\alpha_{Li}=2.53 \times 10^{-3}$ ,  $\mu_{Li}=1.3 \times 10^{-1}$ ,  $\alpha_B=3.289 \times 10^{-3}$ ,  $\mu_B=1.4 \times 10^{-1}$ ,  $\alpha_N=3.618 \times 10^{-3}$ ,  $\mu_N=1.9 \times 10^{-1}$ ,  $\alpha_O=3.818 \times 10^{-3}$ ,  $\mu_O=2.167 \times 10^{-1}$ ,  $\alpha_F=3.947 \times 10^{-3}$ ,  $\mu_F=2.17 \times 10^{-1}$ ,  $\alpha_{Na}=4.023 \times 10^{-3}$ ,  $\mu_{Na}=2.18 \times 10^{-1}$ ,  $\alpha_{Mg}=4.05 \times 10^{-3}$ ,  $\mu_{Mg}=2.26 \times 10^{-1}$  et  $\alpha_{Al}=4.1 \times 10^{-3}$ ,  $\mu_{Al}=2.29 \times 10^{-1}$ , si  $\phi$  est mesuré à l'unité de dose ions/nm<sup>2</sup> [43].

La profondeur moyenne de pénétration diminue avec l'augmentation du nombre atomique  $Z_I$  à l'exception de l'ion Li à la dose  $10^{17}$  ions/cm<sup>2</sup> et montre bien une concordance avec des données expérimentales trouvées par les travaux Réf [33] à la dose d'ions  $\phi=6 \times 10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup> pour les ions Li, B et N, à la dose  $\phi=7 \times 10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup> pour les ions O, F, Na, Mg et Al.

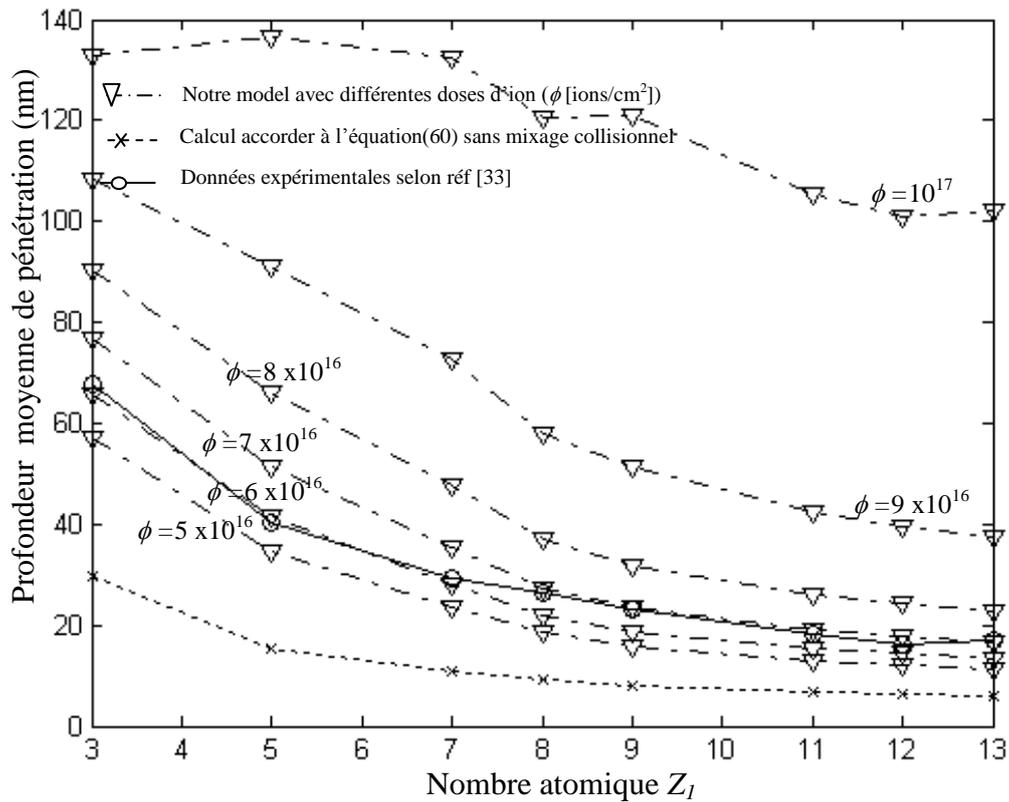


Figure (3-3): Comparaison de la profondeur moyenne de pénétration trouvée par notre model [43] avec les données expérimentales réf [33] et la théorie décrit par l'équation(60) sans mixage collisionnel. (Cas d'une cible de Silicium bombardée par différents ions léger ( $Z_1$ ) d'énergies 10keV pour différentes doses).

L'implantation expérimentale [33] des ions est à basse dose d'irradiation, faites dans la gamme  $5 \times 10^{11}$  au  $5 \times 10^{15}$  ions/cm<sup>2</sup>. Dans ce cas, nous nous prononçons que le bombardement des ions induit une distorsion de densité de la cible à faible dose d'ions correspondant aux précédentes valeurs choisies de la forme du mixage. Ce calcul théorique pourrait être sensiblement variable à partir des quantités d'entrées de bases, la forme du mixage modélisée par  $\alpha$ ,  $\mu$ ,  $h$ ,  $L$  et la dose d'irradiation des ions  $\phi$ .

## 5. CONCLUSION

Cette étude a prouvé qu'il est possible de décrire la profondeur moyenne de pénétration et la dispersion des ions en forme analytique, d'un simple régime théorique basé sur des événements développés au cours de l'analyse, telles que, une faible rugosité modélisée par la variation de densité en surface, la pulvérisation modélisée par l'équation (81) et paramétrée par la nature ion-cible, dont les deux effets sont additionnés au mixage collisionnel modélisé par l'équation (86).

Cette contribution traite la distorsion du profil de densité sous l'effet du mixage collisionnel induit par le bombardement d'ion. Elle donne un modèle simple prévoyant la profondeur moyenne de pénétration et la distorsion du profil interne.

Ce travail théorique a fourni l'évidence de la dépendance principale de la profondeur moyenne de pénétration et la dispersion d'ion, avec la fonction de dommages (distorsion de densité), la densité vue en surface de la cible et la dose d'ions.

La profondeur moyenne de pénétration des ions à basse énergie a été étudiée dans un détail pointu. Elle est donnée sous la forme d'une somme de série avec des coefficients trouvés en adoptant des expressions faisables avec une description suffisante du phénomène de mixage collisionnel. Cette formule permet de coupler l'expérience avec la théorie qui donnera un nouveau axe de recherche couplé avec ce modèle.

La profondeur moyenne de pénétration a été comparée à la littérature [32] sans mixage collisionnel, suggère que l'effet d'élargissement induit par le faisceau d'ion a été presque négligeable pour des ions de très faible énergie et dose d'irradiation.

Les applications sont limitées aux cibles monoatomiques amorphes, à l'angle d'incidence normal et aux énergies relativement basses.

Dans une application plus générale de cette formule nous pouvons l'employer pour des densités de matrice quelconques du milieu.

## **CHAPITRE 4**

# **L'INFLUENCE DES GRANDEURS PHYSIQUES SUR LA RESOLUTION EN PROFONDEUR**

## 1. INTRODUCTION

Dans l'analyse SIMS en profondeur, la résolution en profondeur caractérise la précision d'un profil. La précision et l'exactitude du profil en profondeur dépendent de beaucoup de facteurs expérimentaux. Fréquemment, la dégradation de la résolution en profondeur est due aux changements observés de la topographie extérieure et à la composition de l'échantillon pendant la pulvérisation [12]. Littmark et Hofer [46] montrent que le mixage collisionnel est la principale cause de dégradation du profil et plusieurs travaux [47-52] visent à l'étudier et le minimiser.

Cependant la nature intrinsèque du processus du mixage collisionnel induit des changements de l'échantillon et dégrade la résolution en profondeur, ainsi que l'état initial de l'échantillon et la nature expérimentale peuvent contribuer aux changements. Du point de vue expérimental le problème est de s'approcher au mieux du profil original existant dans l'échantillon.

Dans ce chapitre nous commençons tout d'abord par une définition de la résolution en profondeur, représentation de l'état de l'art des différents travaux de recherches, pour donner ensuite une solution et remédier les facteurs de dégradations de la résolution en profondeur.

En effet, pour mener bien cette étude, il est nécessaire de caractériser la fonction de résolution en profondeur pour faire ensuite donné la résolution en profondeur.

La fonction de résolution en profondeur proposée dans ce travail, dépend des doses d'irradiation d'ions, en adoptant des expressions faisables dans une description suffisante et adéquate des phénomènes de pulvérisation et de mixage collisionnel, identifiée par une fonction d'erreur simple.

Pour améliorer la résolution en profondeur il est avantageux de jouer sur les paramètres physiques des ions tels que : l'énergie incidente, dose d'irradiation, la masse, ainsi que la nature de la cible et d'autres paramètres.

## 2. FONCTION DE RESOLUTION EN PROFONDEUR

L'objectif de construire le profil en profondeur est de déterminer la concentration des éléments présents dans l'échantillon en fonction de la profondeur perpendiculaire à la surface. La valeur et la forme de la fonction de résolution en profondeur, déterminent l'élargissement du profil. Selon la contribution dominante d'un tel processus physique, la fonction de résolution en profondeur est plus ou moins asymétrique, créée aux effets physiques tel que le mixage collisionnel.

Le profil en profondeur peut être décrit mathématiquement par l'intégrale de convolution suivant [53–55]:

$$I(r) = I(0) \int_{-\infty}^{+\infty} X(r') g(r - r') dr'. \quad (88)$$

$I(r) / I(0)$  : L'intensité normalisée.

$X(r')$ : Distribution en profondeur du composition.

$g(r-r')$ : Fonction de résolution en profondeur normalisée.

La description générale de la distorsion (l'élargissement) du profil en profondeur pendant l'analyse est décrit mathématiquement par la fonction de résolution  $g(r - r')$ .

La distribution en profondeur de composition  $X(r')$  est obtenue par déconvolution de l'équation(88) à partir du profile mesuré  $I(r) / I(0)$ .

La fonction de résolution peut être mesurée à partir d'une marche ou d'un Dirac : les marches isotopiques conviennent bien, mais l'analyse des structures en Dirac tel que le Silicium  $\delta$  dopé Arsenic se heurte à des problèmes liés à la faiblesse du rapport signal/bruit [12].

### 3. RESOLUTION EN PROFONDEUR

Etant donné que la mesure SIMS a tendance à élargir la courbe de concentration originale, la résolution en profondeur peut être estimée par la déformation de cette mesure d'une structure caractéristique et est spécifique selon la réaction ion-cible et les conditions expérimentales.

Elle peut être mesurée à partir d'une interface, un delta-dopage ou de couche mince. Cela peut être fait de plusieurs façons, selon le processus de dégradation dont on veut rendre compte, ou bien selon le type d'échantillon analysé.

Pour cela nous avons plusieurs méthodes d'estimations de la résolution en profondeur existante.

#### 3.1 Estimation de la résolution en profondeur à partir d'une interface

La mesure à partir d'une interface, la résolution en profondeur est mesurée par la distance nécessaire pour que le signal décroisse entre deux fractions de l'intensité maximale, généralement entre 84% et 16 % environ (figure (1-5)).

Ce critère montre après analyse d'une interface abrupte descendante, le choix pour la ressemblance entre l'allure de l'interface mesurée et celle de la fonction de résolution en profondeur soit une fonction Gaussienne [56], soit une traînée exponentielle.

a) Si le profil distordu est élargi par une fonction gaussienne, dans ce cas, la distance qui sépare  $R_{84\%}$  et  $R_{16\%}$  est égale à  $2\delta$ , cette définition correspond à  $\Delta r = 2\delta$  dans lequel  $\delta$  est l'écart type du Gaussien.

b) Si le profil distordu est élargi par une fonction exponentielle, comme nous l'avons vu au chapitre 1, la mesure d'une interface abrupte par SIMS se traduit par une traînée exponentielle caractérisée par le paramètre  $\lambda d$ , la distance nécessaire pour que le signal décroisse d'une décade (d'un facteur de  $e$ ).

### 3.2 Estimation de la résolution en profondeur à partir d'un delta-dopage

La mesure à partir d'un delta dopage donne directement une idée de la plus petite largeur qu'il est possible d'obtenir lors de l'analyse par SIMS, puisqu'il n'est pas possible de produire des échantillons d'épaisseurs plus fines. La largeur du résultat de l'analyse d'un delta-dopage contient donc tous les éléments pour définir la résolution en profondeur, à condition de définir l'unité de mesure qui rendra compte de cette largeur.

Un delta-dopage est par définition la plus petite structure géométrique qui puisse exister pour un couple impureté-matrice, c'est-à-dire une seule couche atomique d'une impureté dopante à l'intérieur d'une matrice.

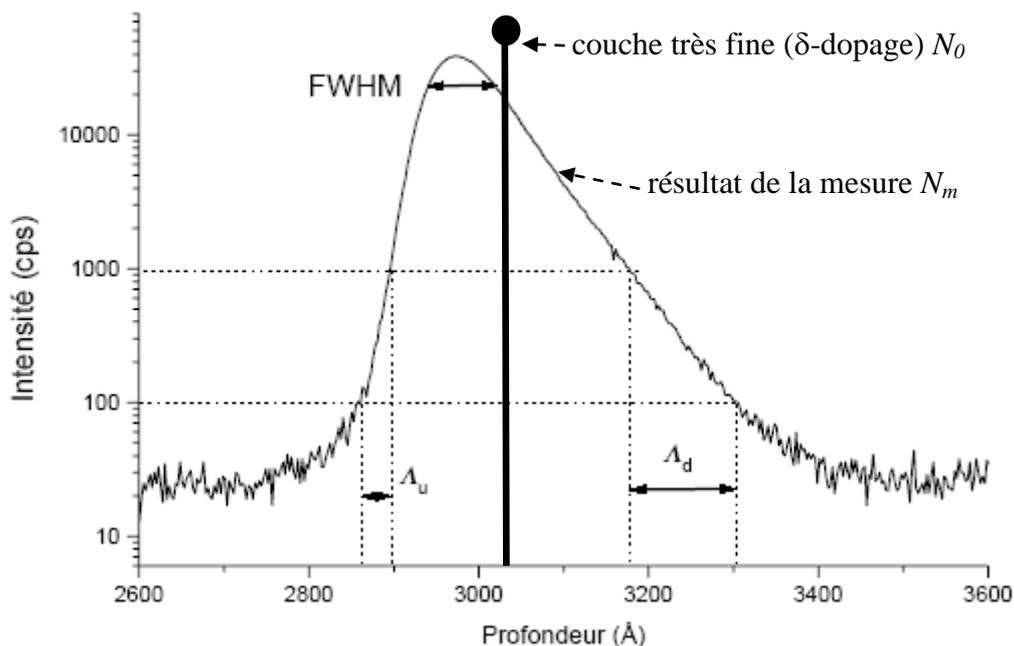


Figure (4-1) : Profil mesuré d'un delta dopage (Bore dans Silicium, 8kev, 38.7° d'angle d'incidence) d'après [12].

Considérons un delta-dopage et étudions sa mesure par SIMS. Le résultat ressemble à ce qui est représenté sur la Figure (4-1): soit  $N_o(r)$  le profil initial correspondant à la couche très fine, et  $N_m(r)$  le résultat de la mesure. On peut caractériser la résolution en profondeur par les différentes façons suivantes :

1. Dans le cas d'une gaussienne, le moyen le plus naturel pour caractériser ce profil est de mesurer la largeur à mi-hauteur de la courbe, la FWHM (Full Width at Half Maximum) donnée par la relation :  $FWHM = 2.355\delta$ , où  $\delta$  représente l'écart type d'une gaussienne d'équation

$$G(r) = \frac{B}{\sqrt{2\pi}\delta} e^{-\frac{r^2}{2\delta^2}} \quad (89)$$

$B$  : amplitude relative

2. Dans le cas d'une exponentielle, certains modèles [54-55] considèrent que les parties montante et descendante ont un comportement exponentiel, possédant un front de montée rapide et une traînée décroissante beaucoup moins rapide (figure (4-1)), qu'on peut donc caractériser par les constantes  $A_u$  et  $A_d$  qui représentent la longueur nécessaire pour que le signal respectivement croisse ou décroisse d'une décade.

Dans certaine publication [54], la résolution en profondeur mesurée sur une couche très fine est représentée uniquement par le paramètre  $\lambda_d$ , qui ne décrit pourtant qu'une partie de la largeur de la réponse. Cette pratique trouve son origine dans le fait que la traînée exponentielle observée sur les profils SIMS est supposée entièrement due au mixage collisionnel. Dans le cas où celui-ci est le mécanisme principal responsable de la dégradation de la résolution,  $\lambda_d$  est un bon indicateur de la résolution en profondeur.

3. Dans le cas où on prend la totalité de la courbe mesurée, c'est la manière la plus précise pour déterminer la résolution en profondeur est de calculer le moment centré d'ordre 2 (dispersion de la fonction autour de sa valeur moyenne). L'avantage de ce moment est mathématiquement prend en compte la totalité de la courbe, ce qui n'est pas le cas pour les deux paramètres précédents.

Nous allons donner brièvement les différents moments usuels. Supposons que  $f(r)$  soit la fonction représentant analytiquement le delta-dopage mesuré. Le moment d'ordre  $n$  de  $f(r)$  est défini par :

$$\mu_n = \int_{-\infty}^{+\infty} r^n f(r) dr \quad (90)$$

$\mu_0$  (qui est aussi l'intégrale de  $f(r)$ ) représente la surface sous la courbe de  $f(r)$ , ce qui correspond à la dose recueillie par l'analyse pour cette couche dopée.

$\mu_1$  représente le centroïde de  $f(r)$ , notée  $\bar{r}$ .

On définit donc un nouveau moment, le moment centré d'ordre  $n$  ( $n \geq 2$ ), par :

$$\mu_n^c = \int_{-\infty}^{+\infty} (r - \bar{r})^n f(r) dr \quad (91)$$

On a donc le moment centré d'ordre 2, ou variance, qui mesure la dispersion de  $f(r)$  autour de  $r$ .  $\mu_2^c$ , tient compte de toutes les caractéristiques de  $f(r)$ , ses fronts montant et descendant ainsi que sa largeur. Si  $f(r)$  est une gaussienne pure, alors son paramètre  $\delta$  est égal à  $\sqrt{\mu_2^c}$  (écart-type).

### 3.3 Estimation de la résolution en profondeur à partir de l'expérience

Si le critère de la DRF devient aussi arbitraire que les autres, c'est-à-dire la fonction de résolution ne prenne la forme ni gaussienne ni exponentielle, ce qui est effectivement le cas pour des structures quelconques.

La résolution en profondeur peut seulement être une caractérisation approximative  $\Delta z_{exp}$ . Cependant, la résolution mesurée peut être décomposée dans différentes contributions [55], [57-58]. L'indépendance mutuelle arrogante, elles ajoutent vers le haut dans la quadrature à  $\Delta r_{exp}$  expérimentalement déterminé [55], [57-58] du total :

$$\Delta r_{exp} = [\Delta r_0^2 + \Delta r_s^2 + \Delta r_k^2 + \Delta r_\lambda^2 + \Delta r_r^2 + \Delta r_i^2 + \dots]^{1/2} = \left[ \sum_j (\Delta r_j)^2 \right]^{1/2} \quad (92)$$

$\Delta r_0$ : Largeur originale d'interface.

$\Delta r_s$ : Rugosité de surface par des statistiques de pulvérisation.

$\Delta r_k$ : Mixage atomique.

$\Delta r_\lambda$ : Profondeur d'information.

$\Delta r_r$ : Rugosité induite par le faisceau d'ions.

$\Delta r_i$ : Intensité non homogène de faisceau d'ions.

Des paramètres instrumentaux peuvent souvent être optimisés pour réduire au minimum la dégradation de résolution en profondeur; réciproquement, les arrangements mal choisis d'instrument peuvent causer davantage dégradation.

#### **4. ÉTAT DE L'ART DE LA FONCTION DE RESOLUTION ET LA RESOLUTION EN PROFONDEUR**

Les approches de la résolution en profondeur optimisée dépendant du choix de la fonction de résolution en profondeur, les travaux de plusieurs recherches des études [54-56], [58-59], [65-66] ont été, pour obtenir une haute résolution en profondeur avec une optimisation soignée des paramètres instrumentaux et les conditions d'analyse, ce qui réduit à la fois la rugosité induite par pulvérisation, le mixage collisionnel et d'autres effets.

Le concept de la résolution en profondeur (DR) est une description simple et utile de la composition moyenne dans un intervalle de profondeur dans lequel on ne sait rien sur la forme de la distribution en profondeur originale, une évaluation des données supplémentaires doit plus approfondie des mécanismes fondamentaux du profil en profondeur afin de trouver la fonction de résolution en profondeur (DRF) responsable de la déviation de la forme du profil mesuré. Pour atteindre cet objectif, des modèles théoriques [54],[59-60] pour des paramètres qui déterminent DR et la DRF ont été développés en collaboration avec l'amélioration expérimentale. Un certain nombre de théories ont été mis en place.

Les premiers DRF décrivant le profil d'élargissement [62] et la déconvolution des profils [63] étaient simplement des fonctions gaussiennes. L'une des prédictions du modèle premier d'une DRF pour une utilisation pratique dans le profil de pulvérisation était soi-disant sequantuel de couche de pulvérisation (SLS) modèle basé sur l'augmentation de la rugosité de surface avec la profondeur pulvérisée selon une fonction de Poisson [63],[66]. Bien qu'il suppose seulement la présence de phénomène de la rugosité et néglige en même temps le mixage collisionnel. Les mathématiques soulignés avant que l'équilibre de la pulvérisation est établie c'est à dire à l'état transitoire, les deux mécanismes sont pratiquement les mêmes pour le commencement de la pulvérisation proche de la surface. Le modèle SLS a été s'avère très utile pour la reconstruction de profil des 10-20 premières monocouches, suffisant pour une

évaluation quantitative des couches d'oxyde natif ou de couches passives de la corrosion [62], [69].

Selon les auteurs [54], [59-60] le choix de la fonction de résolution analytique approchant au mieux le signal mesuré peut être assez différent. D'un point de vue pratique, il est important que la forme analytique puisse approcher correctement la DRF dans des conditions expérimentales assez différentes. Nous citons deux modèles :

#### 4.1 Mise en équation de la fonction de résolution par le modèle de Dowsett

Illustrons donc la fonction de résolution (DRF) proposée par Dowsett et al [61] qui sera représentée par la réponse de la mesure d'un delta dopage ou Dirac de dopage. La réponse à ce Dirac est assimilée à la réponse impulsionnelle SIMS. Cette fonction est le résultat de la convolution d'une double exponentielle par une Gaussienne centré. On obtient une fonction de résolution décrite par trois paramètres  $\lambda_u$ ,  $\lambda_d$  et  $\delta$ .

Voyons maintenant son expression mathématique :

$$f(r) = D \exp(r) \otimes Gauss(r) \quad (93)$$

Avec :

$$D \exp(r) = A \begin{cases} e^{-\frac{r-r_0}{\lambda_u}} & r \leq r_0 \\ e^{-\frac{r-r_0}{\lambda_d}} & r \geq r_0 \end{cases} \quad (94)$$

et la fonction  $Gauss(r)$  est égale à l'équation(89), donc :  $Gauss(r) = \frac{B}{\sqrt{2\pi\delta}} e^{-\frac{r^2}{2\delta}}$

La DRF doit être normalisée, les amplitudes relatives  $A$  et  $B$  seront donc éliminées.

Comme nous l'avons vu précédemment, on peut caractériser la résolution en profondeur au moyen d'un delta-dopage, en calculant le moment centré d'ordre 2. La forme analytique de la DRF étant mathématiquement assez simple équation (93). On peut facilement calculer le moment centré d'ordre 2, c'est-à-dire l'écart type total  $\delta_{tot}$  donné par la somme des carrés des paramètres de la DRF. Ainsi ce paramètre donne une estimation de la résolution en profondeur :

$$\delta_{tot}^2 = \lambda_u^2 + \lambda_d^2 + \delta^2 \quad (95)$$

Les trois paramètres de la DRF ont de manière générale un comportement linéaire en fonction de la profondeur de pénétration des ions primaires et peuvent être estimés assez précisément pour les plus hautes énergies [11]. Dans les très faibles énergies d'impact, il est préférable d'approcher directement la DRF à partir de la mesure d'un delta dopage.

Les régressions linéaires correspondant à chaque paramètre sont décrites par les relations suivantes (en angströms) [11]:

$$\lambda_u = 10.9 - 3.24 \cdot 10^{-3} R_p \quad (96 \text{ a})$$

$$\lambda_d = 15.5 - 0.302 R_p \quad (96 \text{ b})$$

$$\delta = 12.9 + 0.131 R_p \quad (96 \text{ c})$$

$R_p$  profondeur de pénétration

## 4.2 Mise en équation de la fonction de résolution par le modèle de Hofmann

S. Hofmann [53], [59] propose un modèle MRI (Mixing Roughness Information depth) qui donne une description mathématique de la DRF en se basant sur les trois phénomènes physiques fondamentaux: le mixage collisionnel, la rugosité de la surface analysée, et la profondeur d'échappement. La DRF contient des paramètres physiques qui déterminent la réponse impulsionnelle du système en termes de profil mesuré, basé sur trois paramètres : le mixage collisionnel caractérisé par une zone de mixage de longueur  $w$ , décrit par une fonction exponentielle  $g_w$ , la rugosité décrite par une fonction Gaussienne  $g_\delta$  avec une déviation standard  $\delta$ , enfin la profondeur d'échappement décrite par une autre fonction exponentielle  $g_\lambda$  de paramètre  $\lambda$ . Le modèle MRI est donné par les relations suivantes :

$$\left. \begin{aligned} g_w &= \frac{1}{w} \exp[-(r - r_0 + w) / w] \\ g_\lambda &= \frac{1}{\lambda} \exp[-(r - r_0) / \lambda] \\ g_\delta &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\delta} \exp[-(r - r_0)^2 / (2\delta^2)] \end{aligned} \right\} (98)$$

$r_0$  est la position du delta dopage qui engendre la DRF.

L'écart type total  $\delta_{tot}$  nous donne une estimation de la résolution en profondeur. Quand la rugosité apparaît, on additionne les carrés des moments centrés d'ordre 2 qui prennent la forme suivante :

$$\delta_{tot}^2 = \delta_p^2 + \delta_r^2 \quad (99)$$

où les variables  $\delta_p$  et  $\delta_r$ , représentent respectivement la largeur globale du profil sans rugosité et la largeur de la fonction DRF quand la rugosité apparaît.

## 5. MODELISATION DE LA RESOLUTION EN PROFONDEUR

Les modèles précédents présentés ont au moins un double objectif: ils servent de manuel pour l'optimisation des méthodes de profil expérimentales et ils permettent la modélisation analytique de la DRF, qui permet la déconvolution des profils. Notons que ces modèles présentés ne montrent pas la dose d'ion, paramètre très essentiel qui contrôle la pulvérisation et le mixage collisionnel par le biais du rendement pulvérisation et la profondeur moyenne de pénétration (discuter au chapitre 3).

Théoriquement, l'étude complète de l'effet du mixage collisionnel sur la résolution en profondeur passe par le calcul de l'évolution du profil interne en fonction de la dose d'ions primaires envoyées sur l'échantillon, au moyen de la théorie du transport des ions. Comme nous l'avons déjà vu que la dégradation de la résolution en profondeur apparaît dans le cas de l'analyse des jonctions abruptes, dans notre modèle on s'intéresse à ce cas là, on reste dans les mêmes conditions supposées au chapitre 3. Ce qui fait négliger la rugosité devant la pulvérisation et le mixage collisionnel c'est-à-dire ces deux effets sont les plus dominants.

Une première approximation peut être faite en modélisant l'influence des deux phénomènes par une gaussienne utilisons les équations (79), (81) et la largeur des profils équation (85) et selon la distribution gaussienne de la densité d'échappement détectée par SIMS équation (83). En plus d'un point de vue expérimental, les phénomènes aléatoires de nature physique qui pourraient intervenir lors de la mesure sont eux-mêmes caractérisés par une gaussienne aussi. Si l'un d'eux venait à s'ajouter à la fonction de résolution, sa contribution viendrait se combiner à la partie gaussienne de la fonction de résolution, ce qui donnerait à nouveau une fonction de même type que la DRF.

La gaussienne est d'expression simple, elle est continue et dérivable. Les propriétés de la gaussienne sont intéressantes, et peuvent faciliter les calculs. L'estimation de la fonction de résolution (équation (83)) dans ce travail pour la prévisibilité, dépend des conditions expérimentales ( $\alpha$ ,  $\mu$ ,  $k$ ,  $L$  et  $\phi$ ) et la compréhension détaillée de transport d'ions dans la matière durant la pulvérisation ionique.

Dans notre modèle, on choisi une fonction d'élargissement gaussienne décrite par un paramètre de dispersion de largeur  $\delta$ . En utilisant cette supposition, afin de simplifier mathématiquement la résolution en profondeur pour la rendre dépendante de la dose d'irradiation.

La résolution en profondeur est donc :

$$\Delta r = 2L\phi \quad (100)$$

Il convient de noter ici que la relation de la résolution en profondeur avec la dose d'ions est une description linéaire, lequel on a vu que  $L$  constant dépend de la nature ion-cible. C'est un coefficient de proportionnalité qui ne modifie pas l'allure de la variation par contre la précision des résultats, pour cela on ne va pas tenir compte, ce qui nous intéresse sera l'allure de l'évolution de la résolution en profondeur. Elle sera mise en place en adoptant des coefficients faisable  $L$  pour différent ions-Silicium.

Les changements de cette résolution sous chaque dommage est une première approximation des différents paramètres (décrit au chapitre 3)  $L_{Li}=0.069\text{nm}^3$ ,  $L_B=0.076\text{nm}^3$ ,  $L_N=0.095\text{nm}^3$ ,  $L_O=0.146\text{nm}^3$ ,  $L_F=0.159\text{nm}^3$ ,  $L_{Na}=0.164\text{nm}^3$ ,  $L_{Mg}=0.171\text{nm}^3$  et  $L_{Al}=0.178\text{nm}^3$  si  $\phi$  est mesuré en unités de dose [ions/nm<sup>2</sup>].

Ces résultats sont trouvés en choisissant un échantillon de Silicium (Si) pour différents ions (Li, B, N, O, F, Na, Mg et Al).

La figure (4-2) montre les changements correspondants de la résolution en profondeur avec les doses ions.

Ce résultat est la combinaison entre l'augmentation de la résolution en profondeur avec la diminution de la dose d'ions du faisceau primaire.

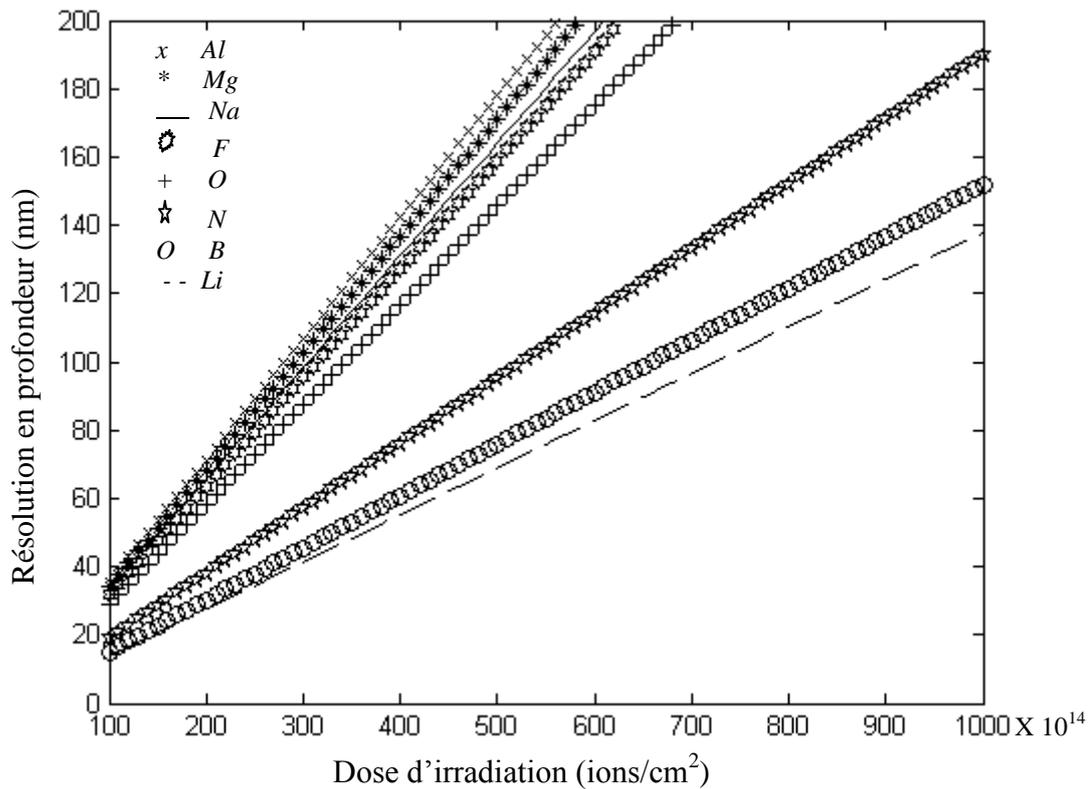


Figure (4-2): Changements de la résolution en profondeur en fonction de la dose pour différents ions (Li, B, N, O, F, Na, Mg et Al).

La forme croissante de la DRF est fortement élargie et la résolution en profondeur est principalement influencée par le mixage et la pulvérisation atomique, lorsque la dose d'ions augmente.

Cette résolution est devenue nettement changée, l'effet étant plus évident lorsque la dose d'ions augmente (Figure (4-2)).

Le calcul pourrait raisonnablement être variable à partir des quantités d'entrée de base, forme du profil de concentration de la matière pulvérisée et mixée (fonction résolution en profondeur équation (83)), coefficient de proportionnalité et la dose d'irradiation ionique.

Cependant, la pente de la relation linéaire entre la résolution et la dose d'ions dépend fortement du type de faisceau d'ion primaire employé. En effet, l'utilisation d'un faisceau d'ions le plus léger aboutit à des pentes nettement faibles, c'est-à-dire à des meilleures résolutions en profondeur. La même remarque a été trouvée par les travaux de Petravic et al [16] dans le cas d'emploi du faisceau d'Oxygène (grâce au phénomène de gonflement de la matrice par Oxydation superficielle).

Nous avons vu que  $\delta$  est impliqué dans les phénomènes à caractère Gaussien de dégradation de la résolution en profondeur.

Le paramètre de dispersion  $\delta$  a été étudié par Littmark [21] et il montre que même dans des conditions expérimentales supposées idéales (pas de rugosité, cratère plat,...),  $\delta$  existe et il dépend de  $R_p$  aussi. L'hypothèse est donc que  $\delta$  est lié aux cascades de collisions isotropes. Le profil est ainsi de plus en plus élargi quand  $R_p$  augmente.

Donc on peut même estimer la variation de la résolution en profondeur à partir de la variation de la profondeur moyenne de pénétration donnée par notre modèle, grâce à ce lien linéaire. On se limite à l'étude théorique c'est-à-dire on ne tient pas compte des valeurs du coefficient de linéarité, on se contente constamment de l'allure de l'évolution de la résolution. En utilisant nos équations (75), (83) et (86), on peut tracer cette évolution qui sera donnée par la figure (4-3).

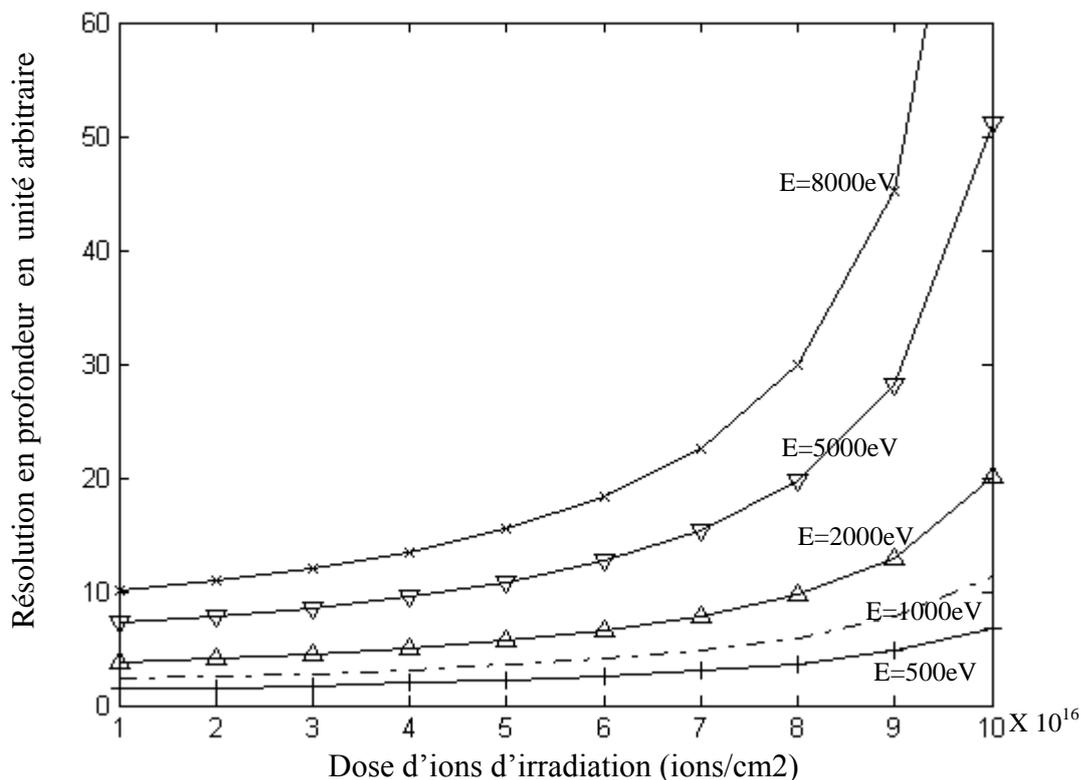


Figure (4-3) : Evolution de la résolution en profondeur pour différentes doses d'irradiation élevées (exemple Silicium bombardé par des ions d'Oxygènes)

Cette figure (4-3) montre bien l'évolution non linéaire de la résolution en fonction de la dose et de l'énergie. Elle montre aussi la perte de résolution à des doses très élevées, en plus cette perte sera très apparente lorsque l'énergie augmente.

De cette discussion, il est clair que certaines tendances générales peuvent être dégagées. Les paramètres instrumentaux tels que la dose d'ions, l'énergie et la nature ion-cible peut-être un des effets marqués sur la dégradation de la résolution en profondeur.

Par la suite, le résultat important de notre étude est de choisir la dose d'ions adéquate et les paramètres expérimentaux réels de la nature ion-cible pour obtenir des résultats plus précis.

## 6. CONCLUSION

Une hypothèse mathématique simple de la fonction de résolution en profondeur (matière pulvérisée ajoutant le mixage collisionnel) a été proposée, qui tient compte des paramètres de la nature de réaction ion-cible et la dose d'irradiation.

En effet, notre modèle montre bien cette dépendance principale qui ne figure pas dans les travaux cités.

L'augmentation de l'énergie et la dose provoque la perte rapide et non linéaire de la résolution en profondeur. La résolution en profondeur dépend fortement du type de faisceau d'ion primaire employé, c'est-à-dire de la valeur réelle du coefficient de proportionnalité. En effet, la meilleure résolution en profondeur est obtenue pour des coefficients de proportionnalités les plus faibles à des doses faibles.

L'objectif d'améliorer la résolution en profondeur en réduisant la dose d'ions a conduit à se placer dans les meilleures conditions expérimentales possibles, basse énergie et nature adéquate du faisceau d'ions employée.

Enfin, l'hypothèse du choix analytique de la fonction de la résolution en profondeur et le coefficient de proportionnalité lié à la nature des ions sont les limites des résultats analytiques trouvés.

# **CONCLUSION GENERALE**

## CONCLUSION GENERALE

Notre approche du problème a débuté par une description de la technique d'analyse par SIMS. Nous avons passé en revue les différents phénomènes qui interviennent, pour en dégager la dégradation de la résolution en profondeur en cours d'analyse.

Cette étude portait sur l'influence des paramètres physiques en résolution en profondeur. Nous avons montré que la forme des profils en profondeur interne se dégrade par la distorsion, l'élargissement  $\delta$  et le décalage éventuel  $\bar{h}$ , est cela à cause d'une redistribution spatiale des atomes sous la surface instantanée dû au mixage collisionnel. Cette redistribution a lieu dans un volume très petit approximativement sur une étendue de l'ordre de grandeur de la largeur des cascades de collisions. Cette dégradation est induite par le bombardement d'ions primaires pour une dose donnée. La planéité de la surface à l'échelle atomique est elle-même éventuellement perturbée, cet effet de rugosité renforçant la perte de résolution en profondeur.

Notre étude théorique porte sur une cible monoatomique amorphe bombardée par un faisceau d'ions primaire monochrome normal à la surface, donne l'importance de la dépendance principale des grandeurs moyennes physiques attachées aux cascades de collisions avec la densité de la cible vue en surface qui peut modéliser la rugosité à parts du mixage et la pulvérisation.

Au cours de cette étude, nous avons mis en modèle ces grandeurs physiques associées aux paramètres expérimentales d'entrées (nature du faisceau d'ion, énergie, dose et nature de la cible) influant la sensibilité de la résolution en profondeur et intervient même dans la modélisation de ces phénomènes lors de l'analyse SIMS. En effet ce qui est accessible par l'expérience en analyse en profondeur par SIMS, c'est la profondeur moyenne de pénétration (parcours moyen projeté), nous avons proposé ainsi, un modèle prévoyant ce paramètre et la distorsion du profil interne.

Nous avons donné une nouvelle formule de la profondeur moyenne de pénétration en présence du phénomène du mixage collisionnel et nous avons montré que ce parcours dépend non seulement de l'énergie du faisceau d'ion mais de la dose et la nature qui le constitue, ces données ne figurent pas dans les travaux cités dans ce travail.

En fait une comparaison de nos résultats avec des résultats expérimentaux trouvés par des travaux déjà réalisés, permet d'identifier l'effet du mixage collisionnel sur le ralentissement des ions dans une cible monoatomique amorphe, d'une part et d'autre part de cerner les problèmes de validité de notre modèle.

Par la suite nous avons proposé un modèle simple de la fonction de résolution en profondeur, qui ne tient pas compte de la rugosité, mais il donne une idée précise de la forme de la dégradation causée par les autres phénomènes sous différentes doses d'irradiation. Nous avons également dégagé une relation simple donnant la résolution en profondeur, en fonction de la dose des ions primaires et leur nature.

Nous avons pu constater que la résolution est sensiblement meilleure pour les ions primaires à dose faible et notamment léger, dans le cas où les fonctions sont modélisables par des Gaussiennes. Nous avons montré que la dose élevée peut être considérablement la cause de la dégradation de la résolution en profondeur.

Nos résultats montrent que :

L'analyse à haute énergie en plus de la dose élevée conduit à un profil mixé absolument distordu.

L'analyse à basse énergie et à faible dose d'ions, révèle une faible distorsion de concentration.

Quelle que soit l'énergie d'analyse et donc la dégradation du profil de concentration initiale est à haute dose d'irradiation, par conséquent la résolution en profondeur est très faible. Elle devient contrôlée par la nature du faisceau d'ion employé. Il semblerait aussitôt que si l'on pouvait employer des faisceaux dont le coefficient de proportionnalité est bien défini expérimentalement, on pourrait obtenir des résolutions en profondeurs plus nettes et détecter ainsi des détails plus fins et avoir des conditions de travail optimisées du choix adéquat des paramètres expérimentaux d'entrées.

Notre modèle possède de nombreux paramètres difficiles à estimer théoriquement et joue finalement le rôle de l'élément destiné à faire coller la modélisation à l'expérience.

Nous avons mis en place ces différents paramètres de base qui contrôlent ces phénomènes et qui contribuent à faire des progrès dans les prochaines recherches dans le domaine de l'interaction ion avec la matière, en utilisant les performances ultimes de l'analyseur ionique pour faire pousser la résolution vers ses limites.

Évidemment, les suppositions analytiques de la fonction de distorsion de la densité, section efficace classique et nature ion-cible choisis dans cette étude limitent les résultats analytiques.

## **REFERENCES**

## REFERENCES

- [1] E. Bulska, W. Jędral, E. Kopyś, H. M. Ortner, S. Flege, Secondary ion mass spectrometry for characterizing antimony, arsenic and selenium on graphite surfaces modified with noble metals and used for hydride generation atomic absorption spectrometry, *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, Vol. 57, Issue 12, (2002), p.2017-2029.
- [2] I. Marchetti, L. Menichetti, C. Kusmic, L. Aldave de las Heras, P. Salvadori, R. Fuoco, F. Belloni, A. L'Abbate, M. Betti, Analytical procedure for mapping the distribution of  $^{10}\text{B}$  and  $^{99}\text{Tc}$  markers in cryo-sections of animal tissue samples by secondary ion mass spectrometry, *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, Vol. 64, Issue 9, (2009), p.911-920.
- [3] K. Keune, F. Hoogland, J. J. Boon, D. Peggie, C. Higgitt, Evaluation of the “added value” of SIMS: A mass spectrometric and spectroscopic study of an unusual Naples yellow oil paint reconstruction, *International Journal of Mass Spectrometry*, Vol. 284, Issues 1–3, (2009), p.22-34.
- [4] R. Taylor, C. Clark, S. M. Reddy, The effect of grain orientation on secondary ion mass spectrometry (SIMS) analysis of rutile, *Chemical Geology*, Vol. 300–301, (2012), p. 81-87.
- [5] M.E. Hartley, T. Thordarson, C. Taylor, J.G. Fitton, EIMF, Evaluation of the effects of composition on instrumental mass fractionation during SIMS oxygen isotope analyses of glasses, *Chemical Geology*, (2012), Vol. 334, p.312-323.
- [6] S. Portier, C. Degueldre, N. Kivel, Solving isobaric interferences in Secondary Ion Mass Spectrometry: The case of Am and Pu in irradiated thorium-based fuel, *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, Vol. 73, (2012), p.35-38.
- [7] G. Peponi, C. Strelis, P. Wobrauschek, N. Zoeger, K. Luening, P. Pianetta, D. Giubertoni, M. Barozzi, M. Bersani, Nondestructive dose determination and depth profiling of arsenic ultrashallow junctions with total reflection X-ray fluorescence analysis compared to dynamic secondary ion mass spectrometry, *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, Vol. 59, Issue 8,(2004), p.1243-1249.
- [8] C. Mansilla, T. Wirtz, Oxidation effect on the SIMS analysis of samples sputtered and deposited by the Storing Matter technique, *Applied Surface Science*, Vol. 258, Issue 15, (2012), p.5698-5702.
- [9] G. Tamborini, M. Betti, V. Forcina, T. Hiernaut, B. Giovannone, L. Koch, Application of secondary ion mass spectrometry to the identification of single particles of uranium and their

isotopic measurement, *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, Vol. 53, Issue 9, (1998), p.1289-1302.

[10] Freddy C. Adams, Carlo Barbante, *Nanoscience, nanotechnology and spectrometry*, *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, Vol. 86, (2013), p.3-13.

[11] B. Gautier, *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par SIMS. Détermination de la fonction de résolution pour le bore dans le silicium, mise au point d'une procédure de déconvolution et applications*. Thèse de Doctorat: INSA de Lyon, (1997), p.231.

[12] G. Mancina, *Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS par déconvolution : algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la micro-électronique silicium*. Thèse de doctorat, N° d'ordre: 01 ISAL 0016, INSA de Lyon- (2001).

[13] H.W. Etzkorn, J. KIRSCHNER, *Depth resolution of sputter profiling investigated by combined Auger-X ray of thin films*. *Nucl. And Instrum. methods*, (1980), Vol. 168, p.395-398.

[14] Hofmann, Zlar, *Auger electron spectroscopy depth profiling of Ni/Cr multilayers by sputtering with N<sup>+</sup> ions*, *Thin solid Films*, Vol. 60, (1979), p.201-211.

[15] B. Blanchard, *Analyse par émission ionique secondaire (SIMS)*. *Techniques de l'ingénieur*, (1987), N° 2618, p.1-19.

[16] M. Petravic, R.G. Elliman, J.S. Williams, *Recoil mixing in SIMS profiling of thin buried layers*, In : *International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry 1991 : Amsterdam, The Netherlands (SIMS VIII)*, A. Benninghoven ed. New York : Wiley, (1992), p. 367-370.

[17] M. Meuris, W. Vandervorst, *On the effect of an oxygen beam in sputter depth profiling*, *Journal of vacuum science and technology*, (1991), Vol. A9, N° 3, p. 1482-1488.

[18] J.C. Dupuy, G. Prudon, C. Dubois, P. Warren, D. Dutartre, *Depth resolution in SIMS study of boron delta-doping in epitaxial silicon*, *Nuclear Instruments and Methods for Physics Research B*, Vol. 85, (1994), p. 379-382.

[19] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, *The stopping and range of ions in solids*, vol 1. In : *The stopping and range of ions in matter*, New York : Pergamon Press, (1985), p 321.

[20] G. Blaise C. Caudray, *Pénétration des ions dans les solides, Le vide les couches minces*, (1985), p. 17-52.

[21] U. Littmark, W.O. Hofer, *The theory of recoil mixing in solids*, in *Thin films and depth profile analysis*, H. Oechsner ed. Berlin : Springer-Verlag, (1984).

[22] P.Chevallier, *Interaction du rayonnement avec la matière*, *Technique d'ingénieur*, A211, A215.

- [23] Vincent S.Smentkowski, Trends in Sputtering, Progress in Surface Science, Vol. 64, (2000), p. 1-58.
- [24] M.G.Stepanova, Relaxation-induced segregation in the theory of collisional mixing, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol. 95, (1995), p. 481-484.
- [25] P.V. Serba and Yu.F. Blinov, Mechanism of lattice relaxation in the theory of ion beam mixing, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol. 160, (2000), p. 231-234.
- [26] R. Collins, T. Marsh and J.J. Jimenez-Rodriguez, The diffusion approximation in atomic mixing, Nuclear Instruments and Methods North-Holland Publishing Company, Vol. 209/210, (1983), p. 147-156.
- [27] G.Brice, Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires. Thèse de doctorat, INSA de Lyon, (1997).
- [28] G. Blaise, M.o. Ruault, C. Caudray, Y. Limoge, Les cascade de collisions ou la physique du jeu de billes, p. 4-16.
- [29] T. Aoki, S. Chiba, J. Matsuo, I. Yamada, J.P. Biersack , Molecular dynamics and Monte-Carlo simulation of sputtering and mixing by ion irradiation, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol. 180, (2001), p. 312-316.
- [30] Y. Miyagawa, H. Nakadate, F. Djurabekova, S. Miyagawa, Dynamic-sasamal: simulation software for high-dose ion implantation, Surface and Coatings Technology, Vol. 87-93, (2002), p. 158-159.
- [31] A.Schönborn, N.Hecking, E.H.Te Kaat, Dynamic monte carlo simulation of high dose effects during ion bombardment, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol.43, (1989), p. 170-175.
- [32] P. Sigmund, Collision theory of displacement damage, ion ranges, and sputtering, Rev. Roum. Phys, Vol. 17, N° 9, (1972), p.823-999.
- [33] W. Wach and K. Wittmaack, Ranges of low-energy, light ions in amorphous silicon, Physical Review B, Vol. 27, (1983), p. 3528-3537.
- [34] M.T . Robinson, I.M. Torrens, Computer simulation of atomic displacement cascades in solids in the binary-collision approximation, Physical Review B, Vol. 5008, (1974), p. 9-12.
- [35] M.T Robinson, Theoretical aspects of monocrystal sputtering. In : sputtering by particle bombardment I. Edited by R. Behrisch Berlin: Springer-Verlag, (1981), p. 73-144.
- [36] P. Sigmund Theory of sputtering I, Sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets, Physical Review, Vol.184, N ° 2, (1969), p.383-416.

- [37] J. Linhard, V. Nielsen, M. Scharff, Approximation method in classical scattering by screened coulomb fields. *Mat. Fys. Medd. Dan. Vidensk. Selsk*, Vol. 36, N°10, (1968), p.1-32.
- [38] U. Littmark, Modelling of ballistic low energy ion solid interaction-conventional analytic theories versus computer simulations, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, Vol. 90, (1994), p. 202-211.
- [39] P. Sigmund, Theory of sputtering. I. Sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets, *Physical Review*, Vol.184, N ° 2, (1969), p. 383-416.
- [40] A. Gras-Marti and P. Sigmund, Distortion of depth profiles during ion bombardment II. Mixing mechanisms, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, Vol.180, (1981), p. 211-219.
- [41] U. Littmark and J.F. Ziegler, Ranges of energetic ions in matter, *Physical Review A*, Vol.23, (1981), p. 64-72.
- [42] U. Littmark, Aspects of the theoretical description of ballistic atomic mixing, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 7/8, (1985), p. 684-693.
- [43] D. Mahdi, A. Chaabi, Influence of collisional mixing on mean projected range at high dose irradiation of low-energy ions, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, Vol.285, (2012), p. 148–152.
- [44] K. Wittmaack, Vacuum, Beam-Induced Broadening Effects in Sputter Depth Profiling, Vol.34, (1984), p. 119-137.
- [45] M.G. Dowsett, S.H. Al-Harhi, T.J. Ormsby, B. Guzman, F.S. Gard, T.C.Q. Noakes, P. Bailey, and C.F. McConville, *Physical Review B*, Vol. 65, (2002), p. 1-4.
- [46] U. Littmark, W. O. Hofer, Recoil mixing in solids by energetic ion beams, *Nuclear instruments and methods*, Vol. 168, (1980), p 329-342.
- [47] U. Littmark, Extended abstracts, *Vacuum*, Vol. 42, N° 1/2, (1991), p. 169-173.
- [48] P. Sigmund, Exact solution of balance equation governing ion-beam-induced composition changes and sputtering, *App. Phys. Lett.*, Vol. 66, (1995), p. 433-435.
- [49] J. Remmerie and H.E. Maes, Theoretical analysis of sputter profiling, *Spectrochimica Acta*, B 40, (1985), p. 787-793.
- [50] J. Remmerie, W. Vandervorst and H.E. Maes, Assessment of profile broadening sputtering, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, Vol. 13, (1986), p. 416-240.

- [51] G.A. Cooke, M.G. Dowsett, P.N.Allen, R.Collins and K.Miethe, Use of maximum entropy deconvolution for the study of silicon delta layer inGaAs, *J. Vac. Sci. Technol, B*, N° 1, (1996), p. 132-135.
- [52] K. Wittmaack, Effect of surface roughening on secondary ion yields and erosion rates of silicon subject to oblique oxygen bombardment, *J. Vac. Sci. Technol, A*, Vol. 8, N° 3, (1990), p. 2246-2250.
- [53] S. Hofmann, Characterization of nanolayers by sputter depth profiling, *Applied Surface Science*, Vol. 241, (2005), p.113-121.
- [54] S. Hofmann, Approaching the limits of high resolution depth profiling, *Applied Surface Science*, 70/71, (1993), p.9-19.
- [55] S. Hofmann, Ultimate depth resolution and profile reconstruction in sputter profiling with AES and SIMS, *Surface and Interface Analysis*, Vol. 30, (2000), p.228-236.
- [56] C.W. Magee, R.E. Honig, Depth profiling by SIMS : depth resolution, dynamic range and sensitivity, *Surface and Interface Analysis*, Vol. 4, N °2, (1982), p 35-41.
- [57] S. Hofmann, High resolution compositional depth profiling, *J. Vac. Sci. Technol A*, Vol. 9, (1991), p1466.
- [58] H. Oechsner, Ed., *Thin Film and Depth Profile Analysis*, Topics in Current Physics, Vol.37, Springer, Berlin, (1984).
- [59] S. Hofmann, Advances in sputter depth profiling using AES, *Surf. Interface Anal*, Vol. 35, (2003), p 556.
- [60] T. Kitada, T.Harada, S.Tanuma, Analysis of Auger sputter depth profiles with a resolution function, *Appl. Surf. Sci*, Vol.100-101, (1996), p. 89-91.
- [61] M.G. Dowsett, G. Rowlands, P.N. Allen, R.D. Barlow, An analytic form for the SIMS response function measured from ultra-thin impurity layers, *Surface and Interface Analysis*, Vol.21, (1994), p. 310-315.
- [62] H.H. Andersen, The depth resolution of sputter profiling, *Appl. Phys*, Vol.18, (1979), p. 131-140.
- [63] P.S. Ho and J.E. Lewis, Deconvolution method for composition profiling by Auger sputtering technique, *Surf. Sci*, Vol. 55, (1976), p 335.
- [64] B. Fares, B. Gautier, N. Baboux, G. Prudon, P. Holliger and J.C. Dupuy, Influence of surface orientation on the formation of sputtering-induced ripple topography in silicon, *Applied Surface Science*, Vol. 231-232, (2004), p. 678-683.

- [65] A. Takano, Y. Homma, Y. Higashi, H. Takenaka, S. Hayashi, K. Goto, M. Inoue and R. Shimizu, Evaluation of SIMS depth resolution using delta-doped multilayers and mixing-roughness-information depth model, *Applied Surface Science*, 203-204, (2003), p. 294-297.
- [66] S. Hofmann, Evaluation of concentration-depth profiles by sputtering in SIMS and AES, *Appl. Phys*, Vol. 9, (1976), p59-66.
- [67] S. Hofmann, Depth resolution in sputter profiling, *Appl. Phys*, vol. 13, (1977), p. 205-207.
- [68] A. Zalar, Improved depth resolution by sample rotation during Auger electron spectroscopy depth profiling, *Thin Solid Films*, Vol. 124, (1985), p 223-230.
- [69] S. Hofmann, Atomic mixing, surface roughness and information depth in high-resolution AES depth profiling of a GaAs/AlAs superlattice structure, *Surface and Interface Analysis*, Vol. 21, (1994), p. 673.

## ملخص

نتائج الظواهر الفيزيائية خلال التحليل بواسطة محلل الطيف الكتلي للأيونات الثانوية (SIMS)، تظهر عن طريق قذف الأيونات الأولية على الوسط المراد تحليله، بحيث تغير من تكوينه الأصلية، والظاهرة الأساسية في أحداث هذا التغيير هو الخلط التصادمي. هذا العمل يختص في إيجاد المقادير الفيزيائية المرتبطة بدخول الأيونات الأولية في الصلب احادي الذرة ذوسطح عشوائي التكوين، من أجل جرعات شعاعية مختلفة وعالية القيم وعمودية على السطح. التكوينية النظرية تعتمد على المعادلة الخطية لبولتسمان لإنتقال الأيونات. هذه النظرية تسمح بتعيين هذه المقادير الفيزيائية باحتوائهم على ظاهرة الخلط التصادمي، حيث أن هذه المقادير تتحكم في دقة التحليل العمقي. وفي هذا الصدد، هذا العمل يبين تطور دقة التحليل العمقي من خلال عدة مقادير مدخلة في التجربة (طبيعة الشعاع الأيوني، الطاقة، الجرعة وطبيعة الجسم المراد تحليله)، من أجل السماح بظروف عمل مناسبة للتحليل الجيد بغية الوصول إلى أحسن دقة في التحليل العمقي.

**الكلمات الرئيسية :** محلل الطيف الكتلي للأيونات الثانوية، الخلط التصادمي، مسقط المسار الوسطي، التحليل العمقي

## Résumé

Les résultats des événements physiques lors de l'analyse SIMS produits par le bombardement des ions sur le milieu perturbent sa constitution originale; l'événement essentiel étant le mixage collisionnel. Ce travail consiste à trouver les grandeurs physiques associées à la pénétration des ions dans un solide monoatomique amorphe pour des différentes doses élevées d'incidences normales. La formulation théorique est basée sur l'équation linéaire de transport d'ions de type Boltzman. Cette théorie permis de décrire ces grandeurs physiques, en présence du mixage collisionnel, ces dernières gouvernent la résolution en profondeur.

En effet, ce travail montre l'évolution de la résolution en profondeur à partir de différents paramètres expérimentaux d'entrées (nature du faisceau d'ion, énergie, dose et nature de la cible), pour permettre des conditions de travail d'analyse optimisée, ainsi d'aboutir à une meilleure résolution en profondeur.

**Mots-Clés:** SIMS, mixage collisionnel, parcours moyen projeté, resolution en profoneur.

## Abstract

The physical events results during SIMS analysis produced by the bombardment of the ions on the medium disturb its original constitution; the essential event was the collisional mixing. This work consists in finding the physical parameters associated to the transport of ions in amorphous monoatomic solid bombarded with normally incident at different high dose irradiation. The theoretical formulation is based on linear Boltzman transport equation of ions. This theory allowed to describe these physical parameters in the presence of the collisional mixing, these parameters control the in-depth resolution.

Indeed, this work shows the evolution of the in-depth resolution with various input experimental parameters (ion beam nature, energy, dose and the target nature) for got good working conditions of optimized analysis, so to lead a better in-depth resolution.

**Keywords:** SIMS, collisional mixing, mean projected range, depth resolution.