



Ministère de l'Enseignement Supérieur et  
de la Recherche Scientifique  
Université ABBES LAGHROR de  
KHENCHELA



Faculté des Sciences et de la Technologie  
Département Sciences de la matière

N° de Série: .....

## Mémoire de fin d'étude

Pour l'obtention du diplôme de master (L.M.D)

Spécialité : Physique

Option : Physique des matériaux

# *Interaction des particules chargées avec la matière*

*Réalisé par : - Ferhati Hana*

*- Moussaoui Fatima Zohra.*

*Dirigé par: ZOUIOUCHE MOHAMED*

*Soutenu le / 06 / 2022*

*Membres de jury:*

*Président Dr.*

*Examineur Dr.*

*Année universitaire : 2021/2022*

# *Dédicace*

*Je dédie ce travail à :*

*A mon père et à ma très chère mère et à mon chère  
Adem pour leurs affections et leur amour Que dieu  
les garde et les protège.*

*A Dr Zouioeche Mohamed.*

*A Mes sœurs : Zineb et Meriem.*

*A Mes frères : Hamza et Salah Eddine*

*et mes chers amis Wissem, Hana et ma belle Zineb.*

*A Mes collègues et à tous ceux qui sont dans mon cœur.*

*Moussaoui Fatima Zohra.*

# *Dédicace*

*Je dédie ce travail à :*

*A mon père et à ma très chère mère pour leurs  
affections et leur amour Que dieu les garde et les protège.*

*A Dr Zouioeche Mohamed.*

*A mon seul frère : Alaa eddin*

*A Mes sœurs : Nour elhouda, Mouna, Nassira, Ahlem,*

*Sabrina et mon cher ami Moussaoui Fatima Zohra.*

*Les enfants : Youçaf, Miral, Bassem, Bessam, Souhir nour*

*Al Rahman, Mouaouia et Mariam.*

*A Mes amis et collègues et à tous ceux qui sont dans mon cœur.*

*Ferhati Hana.*

# **Remerciement**

*Tout d'abord, nous tenons à remercier Dieu,*

*De nous avoir donné la santé, la volonté et la patience pour mener à terme*

*Notre formation de Master et pouvoir réalisé ce travail de recherche.*

*Nous tenons à exprimer nos profonds remerciements à notre encadreur Mr **ZOUIOUCHE**  
**MOHAMED** qui nous a fourni le sujet de ce mémoire et nous a guidés de ces précieux  
conseils*

*Et suggestions et la confiance, qu'il nous a témoignée tout au long de ce travail*

*Nous tenons à gratifier aussi les membres de jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à notre  
recherche*

*En acceptant d'examiner notre travail.*

*J'adresse aussi nos remerciements à Mrs **HEZIL NAWAL** chef de département de physique.*

*Enfin, on adresse nos sincères sentiments de gratitude et de reconnaissances à toutes les  
personnes*

*Qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail*

## *Table des matières*

Introduction générale .....	11
<b>Chapitre I : Généralité sur les interactions rayonnements – matière</b>	
Introduction .....	14
I.2. Méthode de Monté Carlo .....	14
I.3. Notion fondamental sur les (Semi-conducteur) .....	14
I.4. Quelques propriétés des cibles choisies (le Si et le GaAs) .....	15
I.5. Généralité sur les interactions des rayonnements avec matière .....	16
I.6. Interaction des rayonnements indirectement ionisant avec la matière .....	18
I.6.1. L'effet photoélectrique.....	18
I.6.2. L'effet Compton .....	18
I.6.3. La production de paires .....	19
I.6.4. La diffusion Thomson-Rayleigh.....	19
I.7. Le pouvoir d'arrêt .....	20
I.7.1. Pouvoir d'arrêt nucléaire .....	21
I.7.2. Pouvoir d'arrêt électronique .....	21
I.8. Interaction électron-matière .....	22
I.8.1. Notion sur l'électron .....	22
I.8.2. Volume d'interaction .....	22
I.9. Les différentes collisions entre les électrons et les atomes de cible.....	23
I.9.1. Les collisions élastiques .....	23
I.9.2. Les collisions inélastiques .....	24
I.10. Parcours Electronique.....	27
I.11. Phénomène de Recombinaison .....	28
I.12. Les processus de recombinaison .....	28
I.12.1. Recombinaison SRH (Schokley-Read-Hall) .....	28
I.12.2. Recombinaison Auger.....	30
I.12.3. Recombinaison en surface.....	31
Conclusion.....	32
<b>Chapitre II : Simulation de l'interaction ion-matière par logiciel SRIM</b>	
Introduction .....	34

II.2.	Présentation du logiciel SRIM .....	34
II.3.	Présentation de notre travail (condition de simulation) .....	37
II.4.	Etude du pouvoir d'arrêt de $Ar^+$ et $Rn^+$ dans le cible $Si$ .....	38
II.5.	Simulation de la distribution d'ions $Ar^+$ et $Rn^+$ dans le cible $Si$ .....	40
II.6.	Influence de l'énergie des ions sur les paramètres de distribution .....	41
	.....	42
	.....	42
II.7.	La perte d'énergie par ionisation .....	43
II.8.	La perte d'énergie par phonon .....	45
II.9.	Production des lacunes .....	46
II.10.	Etude du pouvoir d'arrêt d'ion Argon $Ar^+$ dans la cible GaAs .....	48
II.11.	Influence de l'énergie des ions $Ar^+$ sur les paramètres de distribution .....	49
II.12.	Simulation de la distribution d'ions $Ar^+$ et $Rn^+$ dans le GaAs .....	51
II.13.	Processus de perte d'énergie des ions projectile $Rn^+$ et $Ar^+$ sur la cible GaAs .....	52
II.13.1.	La Perte d'énergie par ionisation .....	52
II.13.2.	La perte d'énergie par phonon.....	54
II.13.3.	Production des lacunes.....	55
	Conclusion.....	57

### **Chapitre III : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO**

	Introduction .....	60
III.2.	Comment créer une simulation par "CASINO" .....	61
III.3.	Condition de simulation .....	67
III.4.	Résultats et discussions .....	67
III.4.2.	La distribution des électrons rétrodiffusés .....	71
III.4.3.	Phénomène de Cathodoluminescence (CL) .....	73
III.4.4.	Production de RX par les électrons sur la surface de l'échantillon .....	75
	Conclusion .....	78
	Conclusion générale.....	80

## Listes des figures

### Les figures de chapitre I

<b>Figure I.1.</b> : Structure cristalline diamant de silicium ( $a = 5.66\text{\AA}$ ) .....	16
<b>Figure I.2.</b> :Structure cristalline zinc blende du GaAs.....	16
<b>Figure I.3.</b> :Formation des bandes d'énergie du silicium.....	17
<b>Figure I.4.</b> : Structure de bande d'énergie du GaAs.....	17
<b>Figure I.5.</b> : Les différents types de rayonnements.....	18
<b>Figure I.6.</b> : L'effet photoélectrique.....	19
<b>Figure I.7.</b> : Effet Compton.....	20
<b>Figure I.8.</b> : Production de pair.....	20
<b>Figure I.9.</b> : Diffusion Thomson.....	21
<b>Figure I.10.</b> : Diffusion Rayleigh.....	21
<b>Figure I.11</b> : Illustration le volume de génération et la résolution spatiale des différents phénomènes qui ont lieu suite à l'interaction électrons-matière .....	24
<b>Figure I.12</b> : Schéma représentant la diffusion élastique et inélastique [.....	26
<b>Figure I.13</b> : Les effets produits suite au bombardement d'un échantillon par les électrons.....	26
<b>Figure I.14</b> : Mécanisme de recombinaison Schokley-Read-Hall (SRH).....	31
<b>Figure I.15</b> : Mécanisme de recombinaison Auger. L'excès d'énergie issu de la recombinaison peut être transféré à un électron (a) ou a un trou (b).....	32

### Les figures de chapitre II

<b>Figure II-1</b> : tableau de bord du code TRIM et SRIM.....	38
<b>FigureII.2</b> : Tableau des données TRIM pour le bombardement ionique.....	39
<b>FigureII.3</b> : Les résultats numériques de la simulation présentés par TRIM pour le bombardement ionique. ....	40
<b>Figure II.4</b> : Les variations des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique des ions $\text{Ar}^+$ dans le Si, en fonction de l'énergie incidente des ions.....	42
<b>Figure II.5</b> : Les variations des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique des ions $\text{Rn}^+$ dans le Si, en fonction de l'énergie incidente des ions.....	42
<b>Figure II. 6.</b> : Les profile de distributions (8KeV) dans la cible Si (500 Å).....	43
Les ions d' $\text{Ar}^+$ (b) les ions de $\text{Rn}^+$ .....	43
<b>Figure II.7.</b> : Le profil de redistribution en profondeur de la cible de silicium.....	44
<b>Figure II.8.</b> : Influence de l'énergie d'accélération des ions primaires sur le parcours projeté.....	46
$R_p$ , la déviation standard $\Delta R_p$ et la déviation standard latérale $\Delta R_L$ a : pour les ions $\text{Ar}^+$ ; b : pour les ions $\text{Rn}^+$ .....	46
<b>Figure II. 9</b> : La perte d'énergie par ionisation :a) par les ions $\text{Ar}^+$ ; b) par les ions $\text{Rn}^+$ .....	47
<b>Figure II.10</b> : La perte d'énergie par phonon (a) par les ions $\text{Ar}^+$ ;(b) par les ions $\text{Rn}^+$ dans Si....	49

<b>Figure II. 11.</b> : Distribution des lacunes dans la cible Si qui créent par les ions.....	50
a : Ar+; b: Rn+ .....	50
<b>Figure II.12:</b> Simulation des pouvoirs d'arrêt (nucléaire et électronique) des ions Ar+dans une cible de GaAs.....	52
<b>Figure II.13</b> : la variation des paramètres de distribution en fonction de l'énergie .....	54
incidence des ion.....	54
<b>Figure II.14</b> :(a) le profile de distribution d'un ion d' Ar+ dans la cible GaAs.....	55
<b>Figure II.15</b> :(b) le profile de distribution d'un ion d' Rn+ dans la cible GaAs.....	55
<b>Figure II.16</b> : Perte d'énergie par ionisation pour les ions projectilesRn+. .....	57
<b>Figure II.19</b> : Perte d'énergie par ionisation pour les ions projectiles Ar+. .....	57
<b>Figure II.20</b> : la perte d'énergie par phonon des ions Ar+ (a) etRn+ (b) dans la cible GaAs.....	58
<b>Figure II.21</b> : distribution des lacunes dans la cible GaAs qui créent par Ar+ (a) ; Rn+ (b).....	59

### **Les figures de chapitre III**

<b>Figure III.1.</b> : Interface de code Casino. ....	63
<b>Figure III.2.</b> : La boîte de dialogue « Edite layer» de CASINO.....	64
<b>Figure III.3.</b> : La boîte de dialogue « COMPOSITION EDIT BOX».....	65
<b>Figure III.4.</b> : La boîte de dialogue « Microscope and Simulation».....	66
<b>Figure III.5.</b> :La boîte de dialogue «Distributions».....	66
<b>Figure III.6.</b> : La boîte de dialogue «options».....	67
<b>Figure III.7</b> : la boîte de «Select physics model» .....	68
<b>Figure III.8.</b> L'fin de simulation des trajectoires des électrons.....	69
<b>Figure III.9</b> : Trajectoire des électrons d'énergie 8 KeV dans la cible Si (5000nm).....	70
<b>Figure III.10</b> : Trajectoire des électrons d'énergie 8 KeV dans la cible GaAs (5000nm).....	70
<b>Figure III.11</b> : Distribution normalisée des électrons dans la cible Si en fonction de la profondeur.....	72
<b>Figure III.12</b> : Distribution normalisée des électrons dans la cible GaAs en fonction de la profondeur.....	72
<b>Figure III.13</b> : Répartition des électrons dans la poire d'interaction électrons-matière pour Si.....	73
<b>Figure III.14</b> : Répartition des électrons dans la poire d'interaction électrons-matière pour GaAs..	73
<b>Figure III.15</b> : Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés dans la cible Si en fonction de la profondeur.....	74
<b>Figure III.16</b> : Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés dans la cible GaAs.....	75
<b>Figure III.17</b> : Variation du coefficient de rétrodiffusion en fonction du numéro atomique Z.....	75
<b>Figure III.18:</b> les phénomènes de Cathodoluminescence .....	76
<b>Figure III.19</b> : Les variations de l'intensité CL (%) émis par Si en fonction de la profondeur.....	77

<b>Figure III. 20:</b> Les variations de l'intensité CL (%) émis par GaAs en fonction de la profondeur...	77
<b>Figure 21:</b> les phénomènes lie a l'émission des rayon X .....	78
<b>Figure III.22.:</b> variation des intensités RX émis par l'atome Si .....	79
<b>Figure III.23 :</b> Variation des intensités RX émis par l'atome d'arsenic Ga.....	79
<b>Figure III.24 :</b> variation des intensités RX émis par l'atome d'arsenic As .....	80

## *Liste des tableaux*

### **Les tableaux de chapitre I**

**Tableau I.1.** Quelques propriétés des cibles choisies (le Si et le GaAs).....16

### **Les tableaux de chapitre II**

**Tableau II. 1 :** Les résultats des pouvoirs d'arrêts électronique et nucléaire de l'Ar<sup>+</sup> dans Si.....38

**Tableau II.2 :** Les résultats des pouvoirs d'arrêts électronique et nucléaire de l'Rn<sup>+</sup> dans Si..... 38

**Tableau II. 3 :** La partie d'énergie en pourcentage par ionisation pour les deux ions utilisés..... 43

**Tableau II. 4 :** La partie d'énergie en pourcentage aux phonons pour les deux ions utilisés.....45

**Tableau II. 5 :** La partie d'énergie en pourcentage dans la production des lacunes  
pour les deux ions utilisés.....47

**Tableau II. 6 :** Les résultats des pouvoirs d'arrêts électronique et nucléaire de l' Ar<sup>+</sup> dans GaAs..... 47

**Tableau II.7 :** Perte d'énergie en pourcentage d'ion Rn<sup>+</sup> dans la cible GaAs.....52

**Tableau II.8:** Perte d'énergie en pourcentage d'ion Ar<sup>+</sup> dans la cible GaAs..... 53

**Tableau II.9** production des lacunes pour chaque ion dans la cible de GaAs..... 55

**Tableau II.10:** les paramètres de distribution dans Si et GaAs..... 55

### **Introduction générale**

La simulation numérique est l'un des outils permettant de modéliser des phénomènes réels. Dans ce but, elle fait appel à l'exécution d'un programme informatique sur ordinateur en vue de simuler un phénomène physique complexe, par exemple le transport de particules dans la matière. Elle est apparue en même temps que l'informatique, durant la seconde guerre mondiale, pour les besoins du projet Manhattan, afin de modéliser le processus d'explosion nucléaire. La première simulation numérique en physique théorique fut l'expérience virtuelle de Fermi-Pasta-Ulam en 1953 [1]. Depuis, elle a suivi l'évolution de l'informatique.

La méthode de Monte-Carlo désigne toute approche visant à calculer une valeur numérique en utilisant une séquence de nombres aléatoires. Ce nom, faisant allusion aux jeux de hasard pratiqués au casino de Monte-Carlo, a été inventé en 1947 [2] et publié pour la première fois en 1949 [3].

Notre travail consiste à étudier la méthode de Monte Carlo en vue de simuler les trajectoires des particules (électrons, ions ( $\text{Ar}^+$  et  $\text{Rn}^+$ )) dans la matière. Pour simuler ces phénomènes, nous avons utilisé le logiciel SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter). Les cibles choisies sont des semi-conducteurs tels que le silicium Si et l'Arsenic de galium GaAs qui très utilisés en énergie solaire photovoltaïque, en l'électronique et en optoélectronique [4]. Les techniques de Monte Carlo sont couramment utilisées en physique des particules, où des simulations probabilistes permettent d'estimer la forme d'un signal ou la sensibilité d'un détecteur. La comparaison des données mesurées à ces simulations peut permettre de mettre en évidence des caractéristiques semblables à celle des caractéristique réalisées par des systèmes de mesure expérimentaux.

Le bombardement d'une surface solide par des ions primaires s'accompagne d'une séquence d'interactions au cours desquelles les ions primaires transfèrent tout ou une partie de leur énergie. L'ion incident peut parcourir dans le solide une certaine distance, dissiper son énergie avant d'être finalement arrêtée ou éjectée du solide.

Pour mener à bien notre travail, nous avons structure ce mémoire comme suit :

Dans un premier chapitre nous donner un rappel sur la théorie sur la méthode de Monte Carlo concernant l'interaction de la matière avec les particules chargée et en particulier avec les

## *Introduction générale*

---

électrons et les ions. Les formules fondamentales relatives aux deux interactions électrons-matière et ions-matière seront rappelées.

Dans un deuxième chapitre on utilise le logiciel TRIM et SRIM permettant de simuler les interactions ions-matière. Les différents phénomènes comme les défauts Frenkel les vacances créés par les faisceaux d'ions, les distances parcourues par les ions dans leurs trajectoires, les phonons ; la perte d'énergie des ions seront traités. On s'intéressera à leurs courbes de variation avec l'énergie cinétique des ions incidents sur la surface de différents composants semi-conducteurs de notre choix comme le GaAs et Si.

Le troisième chapitre sera consacré au logiciel casio qui en plus de la description de son emploi, nous enregistrons les différentes courbes de rayon X émises par la matière lors de son interaction avec le faisceau des électrons incidents. On s'intéresse aux variations des intensités des rayons X avec l'énergie du faisceau des électrons incidents sur la surface des matériaux étudiés tels que GaAs et Si.

*Chapitre I :*  
*Généralité sur les interactions*  
*rayonnements – matière*

## Introduction

L'étude de la pénétration des particules chargées dans la matière a commencé au début du siècle avec les travaux de THOMSON et RUTHERFORD. L'intérêt pour ce sujet s'est réveillé avec la découverte de la fission des noyaux lourds en deux fragments de masses comparables, éjectés avec des énergies cinétiques de l'ordre de 100 MeV, et l'élargissement conséquent des domaines d'investigation.

### I.2. Méthode de Monté Carlo

La méthode de Monte Carlo a été utilisée depuis plusieurs siècles, la méthode a été utilisée dans des nombreux domaines où il est fructueuse d'employer des procédés de simulation.

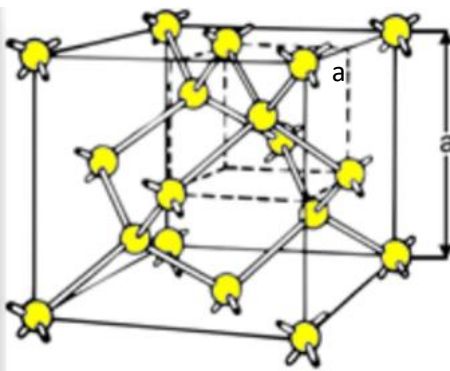
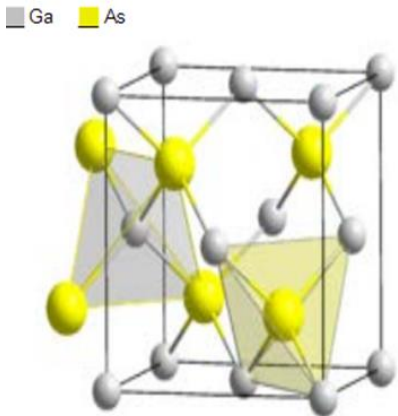
Elle désigne les modes de résolution des problèmes faisant appel aux variables aléatoires trop complexes pour être résolus analytiquement. Les méthodes de *MC* font parties des mathématiques expérimentales qui s'intéressent aux expériences sur les nombres aléatoires. Elles ont trouvées, depuis quelques décennies, une vaste utilisation dans le domaine de la recherche opérationnelle, de la physique nucléaire et dans de nombreux autres domaines de la science, y compris la chimie, la biologie et la médecine [1].

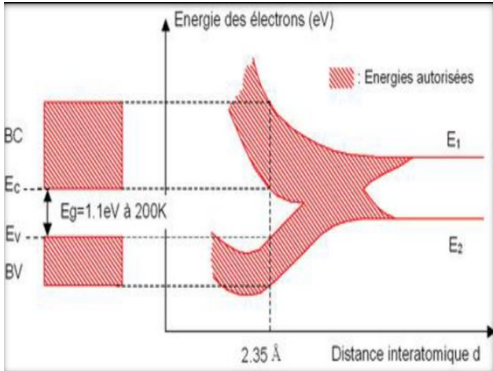
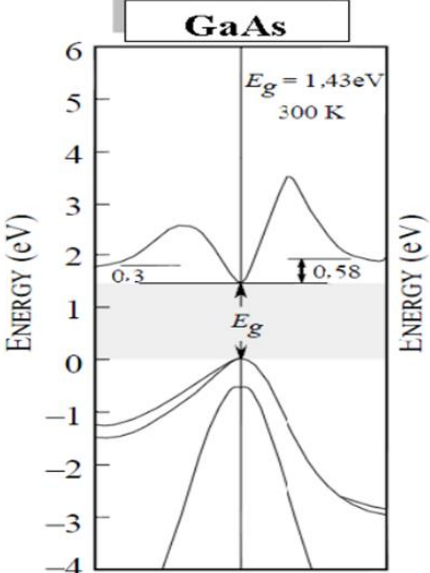
### I.3. Notion fondamental sur les (Semi-conducteur)

Les principes fondamentaux de la physique des semi-conducteurs reposent sur la théorie quantique des solides cristallins et sur la statistique de fermi-Dirac. L'étude des propriétés électriques de ces matériaux semi-conducteur a révélé l'existence de deux bandes d'énergies caractéristique séparées par un gap ou bande interdite .ces deux bandes sont définies respectivement pour la plus basse en énergie comme bande de valence  $E_v$  et bande de conduction  $E_c$  [2].

Les semi-conducteurs sont des matériaux solides caractérisent par leurs bande interdite (gap) intermédiaires entre les conducteurs ayant un gap nul et les isolants ayant un gap très large ( $E_g > 7$  ou  $8 eV$  ). Les semi-conducteurs sont caractérisent aussi par leurs conductivité électrique  $\sigma$  qui augmente avec l'augmentation du dopage ou de la température, le champ électrique ou excitations par des photons.

I.4. Quelques propriétés des cibles choisies (le Si et le GaAs)

Le semi-conducteur	Si	GaAs
La distance intra-atomique	La distance intra-atomique est de l'ordre de 2.35Å	Le paramètre du réseau est $a = 5,65 \text{ \AA}$
Géométrie	Tétraédrique	zinc blende
Le gap	La largeur de la bande interdite (gap) à 300°K est de l'ordre de $E_g = 1.1eV$	La largeur de la bande interdite (gap) à 300°K est de l'ordre de $E_g = 1.43eV$
Structure	<p>L'atome de silicium est tétravalent il est au centre de quatre liaisons covalentes et donc tétra coordonné selon une géométrie tétraédrique. Lorsqu'il est cristallisé, le silicium est donc solidifié de telle sorte que les atomes de silicium soient disposés les uns par rapport aux autres selon cette géométrie tétraédrique, [3].</p>  <p style="text-align: center;">Diamant</p> <p><b>figure I.1.</b> Structure cristalline diamant de silicium (<math>a = 5.66\text{\AA}</math>) [4].</p>	<p>. Chaque atome se trouve au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre espèce. Ceci signifie que la liaison est de type tétraédrique et chaque atome à quatre plus proches voisins [3].</p>  <p><b>figure I.2.</b> Structure cristalline zinc blende du GaAs [4].</p>

<p><b>Structure de bande d'énergie</b></p>	<p>Les atomes du silicium arrangés suivant un réseau périodique, constituant une maille très grande de telle manière que les atomes puissent être considérés comme isolés. Les deux niveaux les plus énergétiques sont repérés par <math>E_c</math> et <math>E_v</math>, le rapprochement des atomes jusqu'à la distance interatomique permet la formation de bande continues appelées bande de conduction (BC) et bande de valence (BV)</p>  <p><b>figure I.3.</b> Formation des bandes d'énergie du silicium [10].</p>	<p>Comme le GaAs est caractérisé par une bande interdite directe à l'inverse du Silicium (Si), qui admet une bande in</p>  <p><b>figure I.4.</b> Structure de bande d'énergie du GaAs [11].</p>
--	--	--

**Tableau I.1.** Quelques propriétés des cibles choisies (le Si et le GaAs)

### I.5. Généralité sur les interactions des rayonnements avec matière

D'une manière générale, on peut définir un rayonnement ou radiation comme un mode de propagation de l'énergie dans l'espace, sous forme d'ondes électromagnétiques ou de particules.

Les rayonnements ne peuvent être détectés et caractérisés que grâce à leurs interactions avec la matière dans laquelle ils se propagent. Ils peuvent céder au milieu qu'ils traversent, la totalité ou une partie de leur énergie au cours de ces interactions [4]. On peut classer les rayonnements selon leur mode d'interaction avec la matière en deux catégories :

- **Rayonnements directement ionisants** : ils sont constitués de particules chargées qui délivrent directement à la matière leur énergie, par le jeu des forces coulombiennes s'exerçant entre elles et les atomes du milieu. Les transferts d'énergie dépendent des masses des particules en mouvement et il y a lieu de distinguer entre particules chargées lourdes (proton, deuton, alpha, ions lourds) et électrons [5].
- **Rayonnements indirectement ionisants** : ils sont électriquement neutres et sont susceptibles de transférer une importante fraction ou la totalité de leur énergie en une seule interaction à des particules chargées. Ce sont ensuite ces particules secondaires qui ionisent le milieu. L'ionisation, dans ce cas, se fait donc en deux étapes. Les rayonnements électromagnétiques (X et  $\gamma$ ) et les neutrons entrent dans cette catégorie, mais leur mode d'interaction sont différents [5].

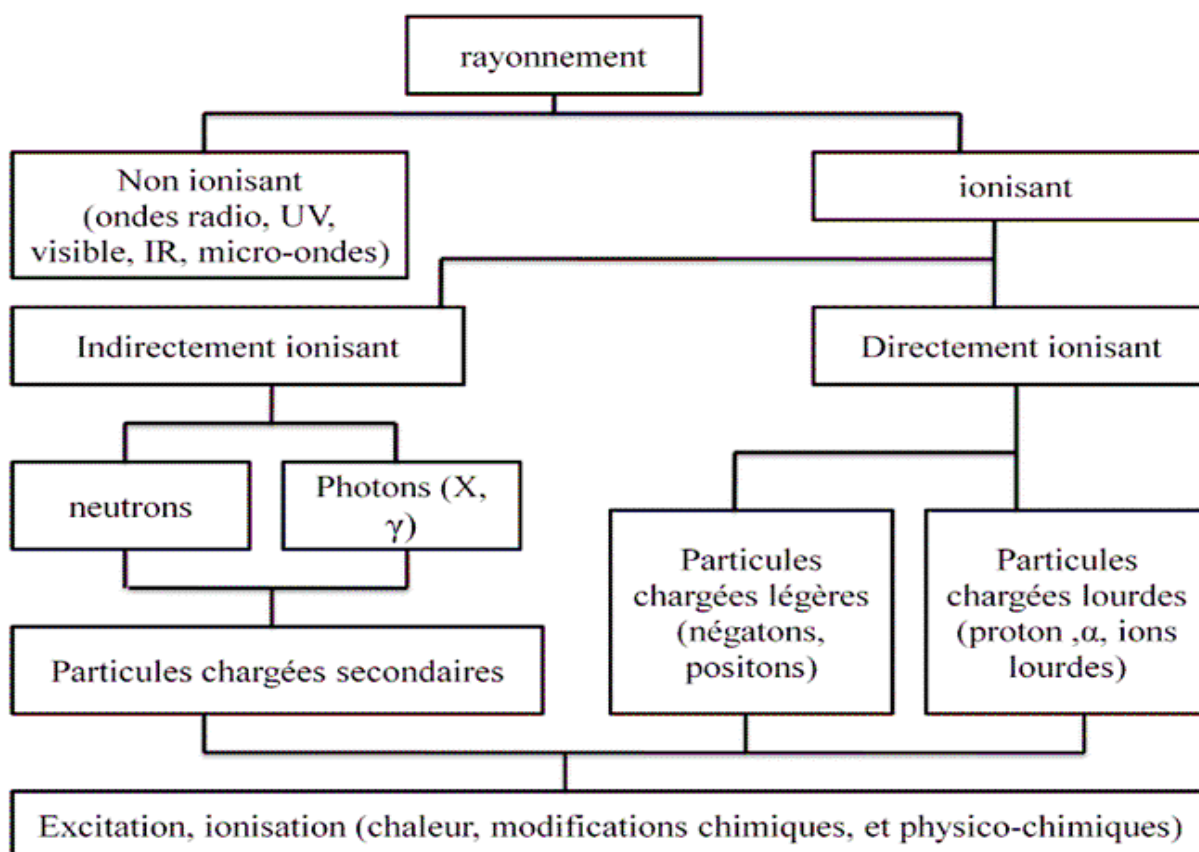


Figure I.5. Les différents types de rayonnements [20].

## I.6. Interaction des rayonnements indirectement ionisant avec la matière

Les photons transfèrent leur énergie aux molécules du milieu traversé, selon différents mécanismes d'interaction :

- L'effet photoélectrique.
- L'effet Compton.
- La production de paires.
- La diffusion Thomson-Rayleigh.

### I.6.1. L'effet photoélectrique

Le photon incident a une énergie  $E = h \cdot \nu$ . Dans le cortège électronique de l'atome-cible, chaque électron est lié au noyau avec une énergie de liaison  $E_L$ . Si l'énergie du photon incident est supérieure à l'énergie d'ionisation de l'électron [6], le photon est absorbé totalement en donnant lieu à un cation et un électron éjecté, suivant cette équation  $\gamma + X \rightarrow X^+ + e^-$

Ce processus concerne les électrons atomiques principalement les couches électroniques K et L. 80% de l'effet photoélectrique se produit avec des électrons de la couche K (couche la plus liée) [7].

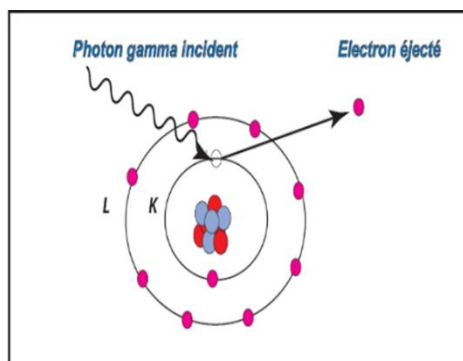
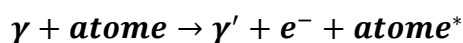


Figure I.6. L'effet photoélectrique [8].

### I.6.2. L'effet Compton

L'effet Compton résulte de l'interaction entre un photon incident  $\gamma$  et un électron quasi-libre (très peu lié) du cortège atomique [8]. Au cours de cette collision, l'électron cible, dit électron Compton, acquiert une énergie cinétique  $h \cdot \nu$  et est expulsé dans une direction donnée.



La diffusion Compton domine dans le domaine des énergies intermédiaires (quelques dixièmes de MeV à quelques MeV)

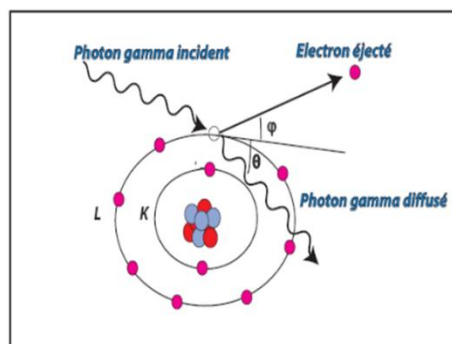


Figure I.7. Effet Compton [8].

### I.6.3. La production de pair

L'effet de production des pair ou matérialisation est un mécanisme par lequel un photon, dans le champ coulombien du noyau, se converti en un pair électron-positron  $\gamma \rightarrow e^- + e^+$ . [9]

L'effet de matérialisation se produit à une énergie du photon élevée ( $E > 2m_0.c^2$ ).

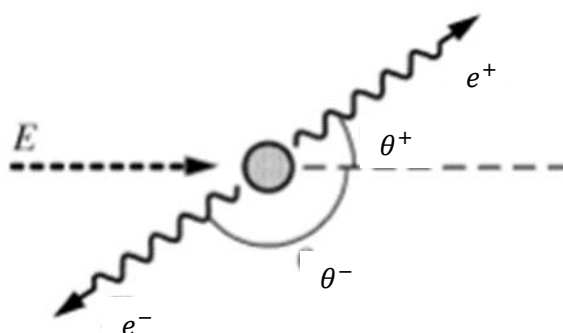


Figure I.8. Production de pair [8].

### I.6.4. La diffusion Thomson-Rayleigh

La diffusion Thomson-Rayleigh (ou diffusion simple) concerne les photons de faible énergie  $E < 45 \text{ KeV}$  Ce processus est néanmoins beaucoup moins probable que l'effet photoélectrique dans ce domaine d'énergie (phénomène cependant important pour les photons peu énergétiques : IR, visibles, UV) [10].

- **Diffusion Thomson** : les photons rencontrent une particule chargée de matière au repos, généralement un électron libre, c'est-à-dire non lié à un atome.
- **Diffusion Rayleigh** : se produit sur les électrons liés [11].

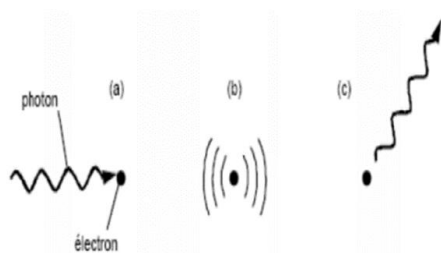


Figure I.9. • Diffusion Thomson [8].

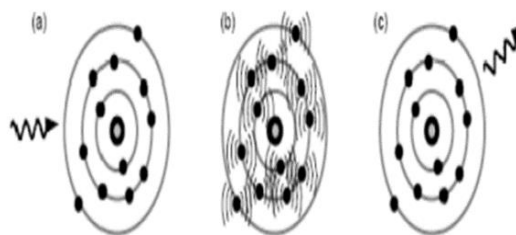


Figure I.10. Diffusion Rayleigh [8].

### I.7. Le pouvoir d'arrêt

Le pouvoir d'arrêt est la perte moyenne d'énergie de la particule par distance parcourue ( $MeV/cm$ ). Il dépend du type de particule, de son énergie et des propriétés de la matière traversée. En première approximation, le pouvoir d'arrêt des ions est la somme des pertes d'énergies nucléaire et électronique  $S = S_n + S_e$  [12].

Ce processus statistique, peut être décrit de façon continue par la formule de Bethe (1933) [13]. Cette formule traduit la perte d'énergie moyenne par unité de longueur  $dS$ .

$$\frac{dE}{dS} = -2\pi e^4 N_A \frac{\rho Z}{A E} \ln\left(\frac{1.166E}{j}\right) \quad \text{I.1}$$

Où  $e$  : est la charge électronique,

$N_A$  : est le nombre d'Avogadro,

$\rho$ : Est la densité,

$A$  : est le poids atomique,

$E$  : est l'énergie moyenne d'électron,

Et  $J$  est le potentiel moyen d'ionisation. Ce dernier est la dissipation d'énergie moyenne par interaction (pour indispser les processus possibles de dissipation d'énergie) est donné par : [13].

### I.7.1. Pouvoir d'arrêt nucléaire

Le pouvoir d'arrêt nucléaire correspond à la perte d'énergie de la particule chargée, induite par les interactions coulombiennes élastiques ou semi-élastiques avec les noyaux de la matière [14].

Le processus de ralentissement nucléaire est prédominant pour des ions lourds et de faible vitesse. Si  $E$  est l'énergie cinétique de l'ion incident et  $N$  le nombre d'atome par unité de volume du matériau cible, le pouvoir d'arrêt nucléaire (section efficace de ralentissement nucléaire) est défini par la relation suivante [15] :  $S_n = \frac{1}{N} \cdot \frac{dE}{dx} = \int T d\sigma$  I.2

Où

$T$  : l'énergie transférée à l'atome cible par l'ion incident

$d\sigma$  : la section efficace différentielle (i.e. la probabilité pour que le projectile cède de l'énergie à la particule cible lors du processus de collision).

### I.7.2. Pouvoir d'arrêt électronique

Lors des interactions électroniques inélastiques, l'énergie cinétique totale des particules n'est pas conservée du fait des processus d'excitation et/ou d'ionisation. Les mécanismes entrant en jeu dans le ralentissement de l'ion incident vont dépendre de sa vitesse. On se trouve dans le cas où la vitesse de la particule est beaucoup plus élevée que celles des électrons orbitaux des atomes de la cible.

Dans le cas des collisions à haute énergie, l'interaction ion-électron peut être décrite par un potentiel purement coulombien. Lorsqu'un projectile rapide d'énergie  $E$ , de masse  $M_1$  et de numéro atomique  $Z_1$  passe à proximité d'un atome cible de masse  $M_2$  et de numéro atomique  $Z_2$ , le Projectile est dévié d'un angle par effet coulombien entre la particule incidente et les électrons de la cible [16.17]

L'énergie est alors considérée comme étant transférée au nuage électronique, en produisant des vibrations thermiques au sein de celui-ci. Le pouvoir d'arrêt électronique est souvent décrit par ce modèle exprimé comme suit [18] :  $S_e = 8\pi e^2 a_0 \frac{Z_1^{7/6}}{(Z_1^3 + Z_2^3)^{3/2}} \cdot \frac{v}{v_0}$  I.3

$$S_e = K \cdot E^{1/2} \text{ I.4}$$

Où :  $V_0$  et  $a_0$  : sont la vitesse et le rayon de Bohr.

E : est l'énergie de l'ion.

K : est une constante tabulée théoriquement par Lindhard

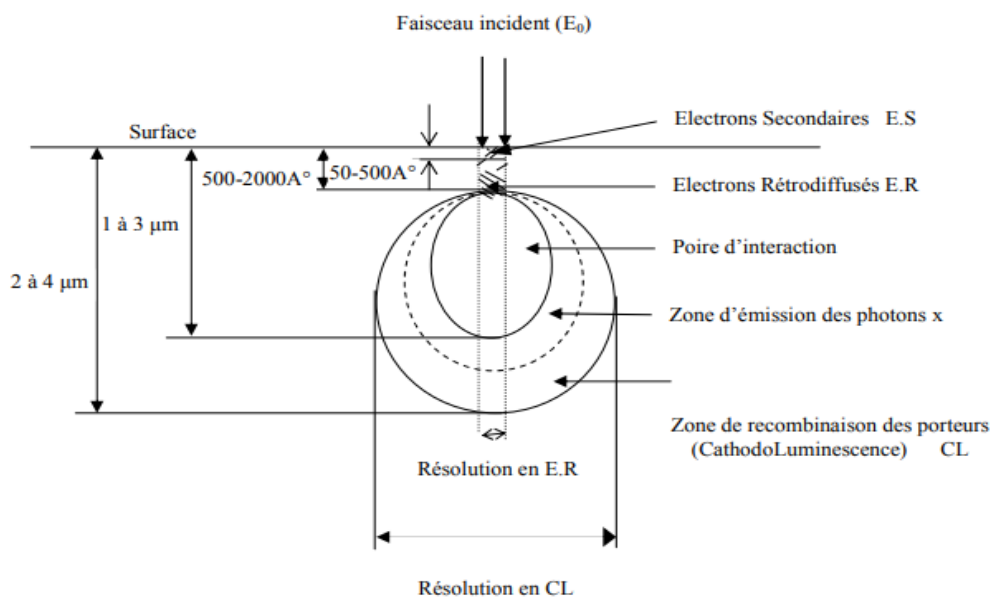
## **I.8. Interaction électron-matière**

### **I.8.1. Notion sur l'électron**

Electron, particule élémentaire constitutive, avec les protons et les neutrons, des atomes. L'électron est l'un des constituants fondamentaux de la matière, au même titre que les quarks. Il fait partie de la famille des leptons, qui comprend également le muon, le tauon, et les neutrinos. De plus, les électrons sont des fermions car leur spin est de 1/2. Le concept de spin est lié à la théorie quantique, que nous devons au physicien allemand Max Planck, qui a découvert la discontinuité de l'énergie en introduisant la notion de quanta, ainsi qu'au physicien français Louis de Broglie, prix Nobel en 1929 pour avoir découvert, en 1924, la nature ondulatoire des électrons [19]. Les électrons ont une masse d'environ  $9,1083 \times 10^{-28}$  g et une charge électrique élémentaire de  $1,602 \times 10^{-19}$  C (coulombs). La charge de l'électron est l'unité de base en électricité. Les électrons possèdent un moment magnétique qui est égal à  $0,92827 \times 10^{-23}$  A.m<sup>2</sup>, et un spin demi-entier caractéristique des fermions. Aussi, l'électron satisfait au principe d'exclusion de Pauli, qui permet la construction d'édifices atomiques stables et qui est à l'origine de la classification périodique des éléments. L'antiparticule de l'électron est le positron (ou positon), qui se manifeste dans la radioactivité bêta, ou dans l'annihilation des rayons gamma par création de paires électron-positron

### **I.8.2. Volume d'interaction**

Les électrons incidents pénètrent dans la matière en empruntant un parcours aléatoire jusqu'à la perte de leur énergie cinétique. Cette pénétration s'accompagne d'un élargissement du faisceau qui crée un volume appelé familièrement « volume d'interaction » (figure I.11). Les dimensions du volume d'interaction dépendent fortement de l'énergie du faisceau incident et le nombre atomique du matériau. Ce volume est d'autant plus allongé que l'énergie est élevée ou que le nombre atomique est faible [20].



**Figure I.11** : Illustration le volume de génération et la résolution spatiale des différents phénomènes qui ont lieu suite à l'interaction électrons-matière [21,22]

### I.9. Les différents collision entre les électrons et les atomes de cible

Le bombardement d'un semi-conducteur par un faisceau d'électrons donne naissance à divers phénomènes [23], tels que l'émission électronique secondaire ou de photons X et le phénomène de rétrodiffusion. La grande variété des signaux émis dépend de l'énergie des électrons primaires et de la composition chimique du matériau irradié. Les interactions entre ces électrons incidents et les atomes/molécules de l'échantillon peuvent être classés en deux catégories :

#### I.9.1. Les collisions élastiques

L'interaction élastique est le résultat de collisions entre les électrons énergétiques du faisceau primaire et les noyaux des atomes (partiellement avec les électrons liés) du matériau irradié.

Cette interaction entre ces deux particules chargées est de type coulombienne où le potentiel positif du noyau interagit directement avec le potentiel négatif de l'électron. En conséquence, aucune énergie n'est transférée (ou peu d'énergie) de l'électron à l'atome de l'échantillon analysé. En plus, cette interaction fait dévier la trajectoire de l'électron à chaque collision (l'électron suit un trajet de type zig-zag) pour donner naissance à des électrons rétrodiffusés,

c'est le phénomène de rétrodiffusion où il est utilisé dans le MEB pour le contraste du nombre atomique et les effets de diffraction [20] (figure I.12).

### I.9.2. Les collisions inélastiques

L'interaction inélastique provient de la collision entre l'électron énergétique incident et l'électron constituant l'atome de l'échantillon qui sont soit éjectés de leurs orbites, avec une perte d'énergie et un faible transfert de vitesse, provoque une dispersion inélastique qui donne naissance à une grande variété de signaux de processus utiles suivant les caractéristiques de l'échantillon et du faisceau primaire tel que : (Electrons secondaires , Rayons X , Electrons absorbés , Electrons Auger , les photon de Cathodoluminescence ....etc.) [20-24](figure I.13).

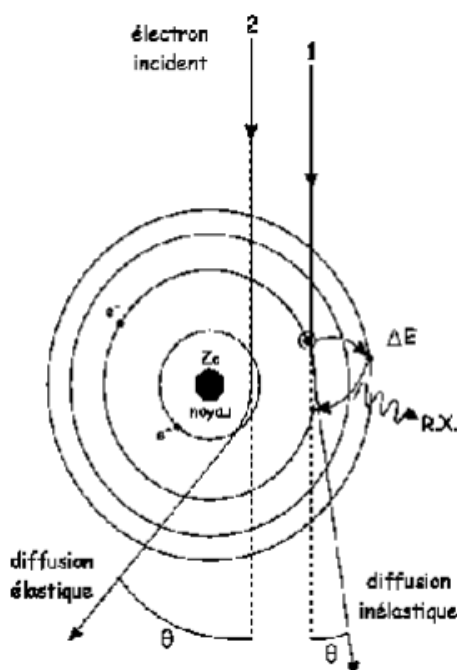


Figure I.12 : Schéma représentant la diffusion élastique et inélastique [24]

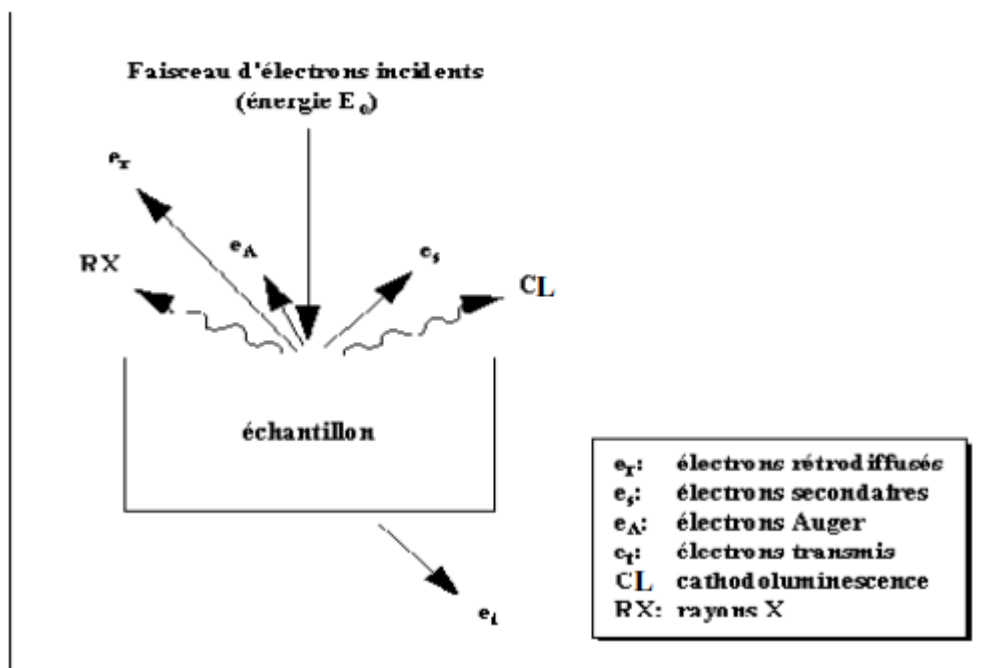


Figure I.13 : Les effets produits suite au bombardement d'un échantillon par les électrons

✓ **Electron rétrodiffusés :**

Le faisceau électronique incident subit aux collisions élastiques et inélastiques avec la matière. Quelques électrons peuvent rebrousser son chemin en sortant du matériau. Ce sont les électrons rétrodiffusés. L'émission de ces derniers, avec une fraction de perte d'énergie généralement de 50% à 80% par rapport à l'incident, dépend de la nature du matériau bombardé et de l'énergie des électrons incidents.

✓ **Electrons Auger :**

Au lieu d'être émise directement sous forme du rayonnement X, l'énergie libérée durant les transitions entre les divers états électroniques, peut être utilisée pour éjecter un deuxième électron d'un autre niveau. Ce phénomène a lieu près de la surface (de 1 à 5 nm) et nous permet donc l'étude la surface et la composition chimique de la cible.

✓ **Electrons secondaires :**

Les électrons secondaires (SE) sont ceux générés par l'atome cible après leurs collisions avec le faisceau incident. Ces électrons ont une énergie de l'ordre de 1 à 500 eV et avant de pouvoir quitter l'échantillon, ils subissent encore à une perte aléatoire d'énergie. Ce phénomène a lieu pour des distances plus proches à la surface (de 5 à 10 nm de la surface).

✓ **Rayons X**

Les électrons incidents peuvent exciter les atomes de la cible, qui deviennent instables ; sa durée de vie est de l'ordre de  $10^{-10}$  s. l'atome tend à l'état fondamental par suite des transitions électroniques, c'est-à-dire l'électron saute d'un niveau externe au niveau plus profond ; une énergie est ainsi libérée sous forme des rayons X caractéristiques.

En outre, les électrons subissent à une décélération dans le matériau et rayonnent un champ électromagnétique sous forme des rayons X fluorescents (continu). On peut obtenir des informations très importantes, concernant la composition intérieure du matériau et la contamination de la surface, à l'aide du traitement de ces rayonnements.

✓ **Electrons absorbés**

Les électrons sont fortement absorbés par la matière ou les mécanismes d'absorption prépondérants étant les diffusions élastiques et inélastiques. La section efficace de diffusion étant élevée ; les électrons sous l'effet des diffusions perdent successivement leur énergie de façon aléatoire jusqu'à l'arrêt éventuel. Ceci peut produire un courant dans la cible, que l'on peut mesurer expérimentalement.

✓ **Electrons transmis**

Les électrons primaires peuvent traverser l'échantillon, si celui-ci est suffisamment mince. Les électrons transmis perdent, à cause des collisions inélastiques avec les atomes du matériau, une fraction significative de leur énergie initiale.

✓ **Etats de surface**

L'électron, comme particule chargée, subit à une interaction image attractive du matériau semi-infini. Cette interaction peut être suffisamment forte pour que les électrons soient localisés sur la surface du matériau.

✓ **Cathodoluminescence (CL)**

Le bombardement électronique, dans certains matériaux (minéraux naturels, oxydes, semi-conducteurs), provoque l'émission des photons lumineux (la gamme s'étend de l'U.V à l'I.R). L'émission revient aux centres luminescents liés à la présence des défauts dans la matière ou bien à des transitions bande à bande. La CL est liée au gap du semi-conducteur et à la présence d'éléments étrangers, donc on peut identifier et connaître leur répartition dans le matériau, où chaque processus est déterminé par sa probabilité de production qui est décrite par une section efficace [25].

### I.10. Parcours Electronique

Les électrons incidents subissent des séries successives de dispersion élastique et inélastique dans le semi-conducteur, et ont des trajectoires quelconques. Leurs profondeur de pénétration R (range) est donnée par plusieurs expression proposées par différents auteurs :

La relation générale du parcours électronique (qui décrit la profondeur de pénétration de l'électron dans l'échantillon) est donnée en fonction de l'énergie d'accélération c'est à dire l'énergie du faisceau incident  $E_0$  sous la forme suivante : [23].

$$Re = \left(\frac{k}{\rho}\right) E_0^\alpha \quad \text{I.5}$$

Où  $\rho$  est la densité du matériau, K dépend du nombre atomique du matériau et d la formule qui ont été également proposées par d'autres auteurs.

En 1957, les travaux de Gruen ont conduit à un parcours électronique donné par [24,26]:

$$R_G = 4,57 E_0 \quad \text{I.6}$$

Là où  $R_G$  est en  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$  et  $E_0$  est en KeV.

Selon Everhart et Hoff :

$$Re = (0.0398/\rho) E_0^{1.75} \quad \text{I.7}$$

Où  $\rho$  est en  $\text{g}/\text{cm}^3$  et  $E_0$  est en KeV.

Ces deux résultats ((I.4) et (I.5)) ont été dérivés pour des électrons de gamme d'énergie de 5 à 25 KeV et de nombres atomiques  $10 < Z < 15$ .

Une relation dérivée pour le GaAs par Wittry et Kyser [24] est utilisée plus tard :

$$R (\text{g}/\text{cm}^3) = 256 \cdot 10^{-3} (E_0/30)^{1.7} \quad \text{I.8}$$

L'équation 1.8 dans cette dernière équation n'est pas précise à basse énergie [23].

Une expression plus générale dérivée par Kanaya et Okayama s'est avérée pour être conforme bien aux résultats expérimentaux. D'après Kanaya et Okayama [27,28] est :

$$R_e = (0.0276A/\rho Z^{0.889})E_0^{1.67} (\mu m) \quad \text{I.9}$$

Où  $E_0$  est en keV,  $A$  est le poids atomique en g/mol,  $\rho$  est en g/cm<sup>3</sup>, et  $Z$  est le nombre atomique.

### **I.11. Phénomène de Recombinaison**

Dans l'étude des phénomènes de luminescence dans les semi-conducteurs, et Après la génération des paires électrons-trous, et en absence de l' influence extérieure, on considère que l'effet de la variation des porteurs minoritaires est prépondérant, la distance entre le point de création du porteur et le point de leur recombinaison (retour à l'état initiale) s'appelle longueur de diffusion  $L$ , et le temps qui s'est écoulé pour effectuer ce parcours s'appelle la durée de vie  $\tau$ .

### **I.12. Les processus de recombinaison**

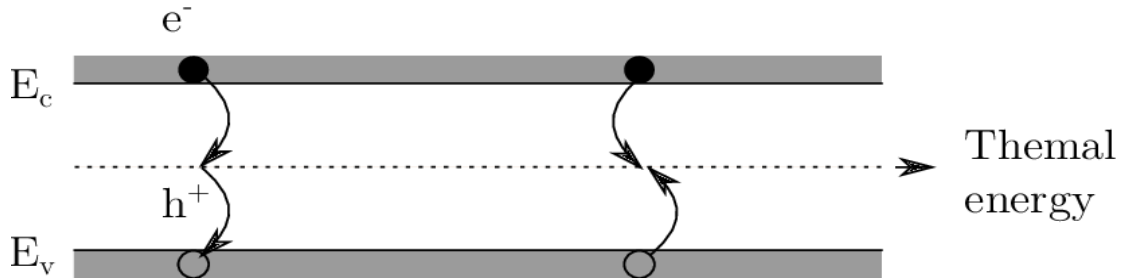
Par définition, la recombinaison est le retour de l'électron de l'état excité à l'état initial ou de la bande de conduction vers la bande de valence, car il ne peut rester dans un état excité que pour un temps faible ( $t < 10^{-8} s$ ). Ce retour de l'électron de l'état excité vers l'état stable peut avoir lieu selon plusieurs façons [29] :

#### **I.12.1. Recombination SRH (Schokley-Read-Hall)**

Le processus de recombinaison Schokley-Read-Hall est schématisé sur la figure I-14. Ce processus fait appel à des niveaux d'énergie voisins du milieu du gap (niveaux appelés pièges, dus à certains défauts cristallins ou à la présence de certaines impuretés dans le cristal) qui facilitent la recombinaison des porteurs par un mécanisme en deux étapes. Un électron de la bande de conduction va d'abord se relaxer sur un niveau d'énergie intermédiaire lié à un défaut. Ensuite, une deuxième relaxation va lui permettre de se recombiner avec un trou de la bande de valence. L'efficacité de ce processus dépend de la densité des niveaux profonds et par suite, de la qualité du matériau utilisé et de sa technologie d'élaboration. La recombinaison Schokley-Read-Hall est modélisée par [29] :

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau p_0 \left[ n - n_{ie} \exp\left(\frac{Et - Ei}{KTL}\right) \right] + \tau n_0 \left[ p - n_{ie} \exp\left(\frac{Et - Ei}{KTL}\right) \right]} \quad \text{I.8}$$

Où  $E_t$  est la position énergétique des états de piège,  $E_i$  est le niveau de Fermi dans le semi-conducteur intrinsèque,  $\tau_{n_0}\tau_{p_0}$  sont respectivement la dure de vie pour les électrons et les trous,  $n_{ie}$  est la concentration intrinsèque,  $k$  est la constante de Boltzmann et  $T_L$  la température en Kelvin.



**Figure I.14 :** Mécanisme de recombinaison Schokley-Read-Hall (SRH).

La dépendance de la dure de vie du modèle SRH avec la température est donnée par les deux relations de Klaassen's.

$$\tau_{n0}^{-1} = (\tau_{ksrhn}^{-1} + C_{ksrhn} \cdot n) \left(\frac{300}{T_L}\right)^{G_{ksrhn}} \mathbf{I.10}$$

$$\tau_{p0}^{-1} = (\tau_{ksrhp}^{-1} + C_{ksrhp} \cdot p) \left(\frac{300}{T_L}\right)^{G_{ksrhp}} \mathbf{I.11}$$

Où  $n$  est la concentration d'impureté totale.

Aussi la dépendance de la durée de vie avec le dopage est donnée par les relations de Scharfetter.

$$\tau_n(N) = \tau_{n.min} \frac{\tau_{n.max} - \tau_{n.min}}{1 + \left(\frac{N}{N_{n.ref}}\right)^\gamma} \mathbf{I.12}$$

$$\tau_p(N) = \tau_{p.min} \frac{\tau_{p.max} - \tau_{p.min}}{1 + \left(\frac{N}{N_{p.ref}}\right)^\gamma} \mathbf{I.13}$$

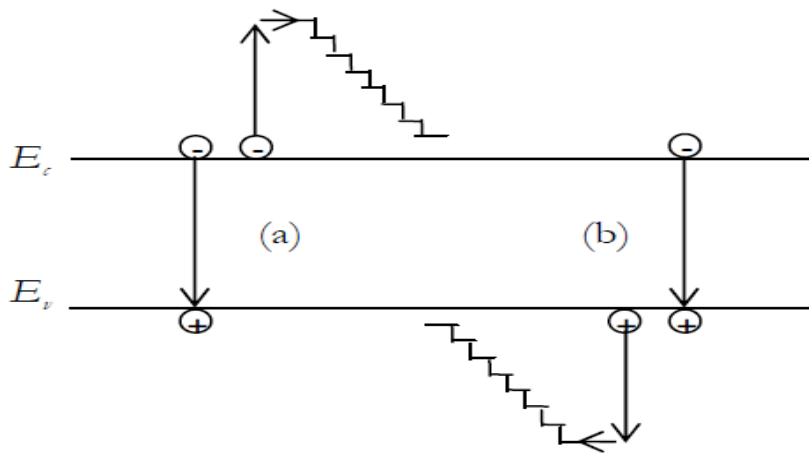
Où  $\tau_{n_{max}}$ ,  $\tau_{n_{min}}$ ,  $\tau_{p_{max}}$ ,  $\tau_{p_{min}}$  sont les valeurs maximales et minimales de la durée de vie des électrons et des trous respectivement,  $N_{n(ref)}$ ,  $N_{p(ref)}$  est le niveau de référence du dopage pour lequel.

$$\tau(N_{ref}) = \frac{\tau_{p.max} + \tau_{p.min}}{2} \quad \text{Et} \quad \tau(N_{ref}) = \frac{\tau_{n.max} + \tau_{n.min}}{2} \quad \gamma \text{ est l'exposant.}$$

### I.12.2. Recombinaison Auger

Le processus de recombinaison Auger est représenté sur la figure (I-15). L'excès d'énergie issu de la recombinaison d'un électron de la bande de conduction et d'un trou de la bande de valence peut être transféré à une troisième particule libre, électron ou trou. Ces charges sont considérées comme des particules quasi libres, n'interagissant pas entre elles. La recombinaison Auger est modélisée en utilisant l'expression suivante [29] :

$$R_{\text{Auger}} = C_{\text{Aug,n}} (pn^2 - nn_{ie}^2) + C_{\text{Aug,p}} (np^2 - pn_{ie}^2) \quad \text{I.14}$$



**Figure I.15** : Mécanisme de recombinaison Auger. L'excès d'énergie issu de la recombinaison peut être transféré à un électron (a) ou à un trou (b)

Où  $C_{\text{Aug,n}}$  et  $C_{\text{Aug,p}}$  sont les coefficients Auger pour les électrons et les trous.

- ✓ La recombinaison est dite radiative ou avec émission de photons, si l'énergie des particules qui se recombinent est émise sous forme d'énergie de photons.
- ✓ Le type de la recombinaison non radiative qui il appartient à la recombinaison par effet Auger, où l'énergie libérée par la recombinaison de deux particules est transférée à une troisième particule qui devient une particule « chaude » et qui cède son énergie supplémentaire au réseau au cours d'une série de collisions.

### I.10.1. Recombinaison Radiative

La recombinaison radiative correspond à la recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence, avec émission d'un photon d'énergie proche de celle du gap du matériau (processus inverse de la photo-génération). Le mécanisme de recombinaison radiative est un processus dominant dans les semi-conducteurs à gap direct

comme le GaAs. Pour le silicium à gap indirect, ce mécanisme est relativement rare du fait que cette transition ne peut avoir lieu qu'avec l'assistance d'un photon.

En plus de ces trois mécanismes l'énergie de recombinaison des particules peut être transférée au gaz électrique (recombinaison plasmique). Dans le cas où un électron et un trou forment un exciton, la recombinaison est dite exciton que.

L'évolution des processus de recombinaison radiative, photonique ou par effet Auger dépend du mécanisme de transition d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence.

Si l'électron et le trou recombinent par rencontre directe on dira que la recombinaison est intrinsèque ou inter bande. La recombinaison intrinsèque se manifeste principalement dans les matériaux à faible largeur de bande interdite, inférieur à 0,2 à 0,3 eV.

Lorsque la largeur de la bande interdite est supérieure à 0,5 eV, la recombinaison s'effectue par l'intermédiaire des niveaux localisés dans la bande interdite. Ces niveaux particuliers sont couramment appelés des niveaux-pièges de recombinaison [29].

### **I.12.3. Recombinaison en surface**

La surface d'un semi-conducteur contient de nombreuses recombinaisons, en raison des liaisons non satisfaites des atomes de surface et autre défauts caractéristiques à température ( $T=300^\circ\text{K}$ ). Les recombinaisons en surface avant et arrière inhérents aux densités de dopages selon la relation suivante :

$$S = S_0 \left( \frac{N}{N_{set}} \right)^\alpha \quad \mathbf{I.15}$$

$S_0$ ,  $N_{set}$  et  $\alpha$  dépendent du traitement de la surface et de la passivation. Par exemple pour une oxydation thermique d'une couche de silicium de type **n**,  $\alpha$  est de **1** et  $N_{set}$  est de  $10^{18}\text{cm}^{-3}$ .

La passivation est l'ajout d'une couche de **SiO<sub>2</sub>** en surface pour limiter les recombinaisons en surface et combler les liaisons cassées (en surface) lors de la découpe du semi-conducteur.

Le taux de recombinaison en surface est donné par l'expression suivante [29] :

$$R_{surf} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau p^{eff} \left[ n - n_{ie} \exp\left(\frac{Et - Ei}{KTL}\right) \right] + \tau n^{eff} \left[ p - n_{ie} \exp\left(\frac{Et - Ei}{KTL}\right) \right]} \quad \mathbf{I.16}$$

$$\frac{1}{\tau n^{eff}} = \frac{1}{\tau_n^i} + \frac{d_i}{A_i} S_n \quad \mathbf{I.17} \quad \frac{1}{\tau p^{eff}} = \frac{1}{\tau_p^i} + \frac{d_i}{A_i} S_p \quad \mathbf{I.18}$$

## **Conclusion**

Dans ce chapitre il a été question de donner les formules en relation avec les deux phénomènes d'interaction électrons-matière et ions-matière. Toutes ces formules sont en relation avec la théorie de Monte Carlo, Les trajectoires des ions et des électrons, dans un cible et toute les phénomènes résultant de l'interaction particules chargé (ions et électrons) avec la matière a été vue en détail. Ce chapitre on a permis de me familiariser avec tous ces différents phénomènes et toutes ces intéressantes formules.

## *Chapitre II*

# *Simulation de l'interaction ion- matière par logiciel SRIM*

## **Introduction**

SRIM (The Stopping and Range of ion in Mater) Dont la version accessible sous Dos appelée TRIM ( the Transport of Ion in Mater), l'un de plusieurs logiciels qui est utilisées pour calculer les phénomènes cinétiques associés aux pertes d'énergie des ions, c'est un ensemble de programmes qui permettent de calculer l'arrêt et l'étendue de pénétration des ions dans la matière. Il est basé sur la théorie de la mécanique quantique pour la description de la collision entre les ions incidents et la matière utilisée, ce programme utilise principalement la méthode de Monte Carlo [1] tel que cette méthode désigne les modes de résolution des problèmes faisant appel aux variables aléatoires trop complexes pour être résolus analytiquement [2]

Dans ce chapitre on utilise le logiciel SRIM pour la simulation des interactions des ions  $Rn^+$  et ions  $Ar^+$  dans les cibles de Si et GaAs on va étudiées les différents phénomènes comme : les défauts de Frenkel, les vacances créés par les faisceaux d'ions, les distances parcourues par les ions dans leurs trajectoires, les phonons, la perte d'énergie des ions et leurs courbes de variations avec l'énergie cinétique des ions incidents dans notre étude en s'intéresse aux ions d  $Rn^+$  et d  $Ar^+$  sur la matrice de deux semi-conducteur choisis tel que GaAs et le Si [1]

### **II.1. Présentation du logiciel SRIM**

SRIM est un programme qui suit le programme standard TRIM [1] .Ce programme, développé par Ziegler et Biersack [7, 8] permet de calculer différents paramètres qui sont liés à l'implantation d'ions dans la cible, on peut les citer comme suit : [9] La distribution spatiale des ions (la profondeur moyenne, la dispersion), Les distributions des pertes d'énergies électronique et nucléaire en fonction de la profondeur (distribution moyennes pour un ion exprimé en eV/A0 ), La distribution des lacunes qui se sont formés à partir du déplacement des atomes et Le rendement de pulvérisation.

Dans ces programmes l'énergie transférée à un atome-cible est analysée pour donner les résultats suivants : l'ionisation induite par les atomes repoussés, le nombre de lacunes et d'interstitiels créés suite à une cascade de collisions, et également le nombre de collisions transférant des énergies inférieures à  $E_d$  (énergie de déplacement), et qui produisent des phonons. Le code de ces programmes couple deux méthodes : celle de Kinchin-Pease modifiée pour les calculs locaux, et celle de la

cascade de collisions (suivi des atomes individuels reculés jusqu'à ce que leur énergie devienne inférieure à  $E_d$ ). Cette dernière donne directement la distribution spatiale des défauts. [2]

D'une façon très schématique le principe global de raisonnement est le suivant :

Soit  $Z_1$  le numéro atomique de l'ion projeté, et  $Z_2$  celui de l'atome-cible.  $E_1$  et  $E_2$  sont les énergies des deux particules après collisions, respectivement.

- $E_1 > E_d$  et  $E_2 > E_d$  : L'ion incident peut déplacer un atome cible de son site qui devient à son tour une particule incidente pouvant subir d'autres chocs. Il peut déplacer d'autres atomes cibles et constituer des lacunes.
- $E_1 > E_d$  et  $E_2 < E_d$  : L'énergie de l'atome cible est insuffisante, il reste alors dans son site et son énergie  $E_2$  sera dissipée dans le réseau pour la création des phonons (vibration de réseau). Quant à la particule incidente, elle continue son mouvement.
- $E_1 < E_d$  et  $E_2 > E_d$  : L'atome cible est éjecté de son site et devient une particule incidente pour subir d'autres chocs. la particule incidente occupe des sites vides (substitutionnels) et son énergie est dissipée dans le réseau par des vibrations (création de phonons).
- $E_1 < E_d$  et  $E_2 < E_d$  : L'atome cible continue à vibrer dans sa position d'équilibre sans quitter son site. L'ion incident peut occuper seulement des sites interstitiels et son énergie est dissipée dans le réseau pour la création de phonons. [2, 3, 4, 6]
- La figure II.1.Représente le tableau de bord permettant de choisir le mode de calcul désiré.

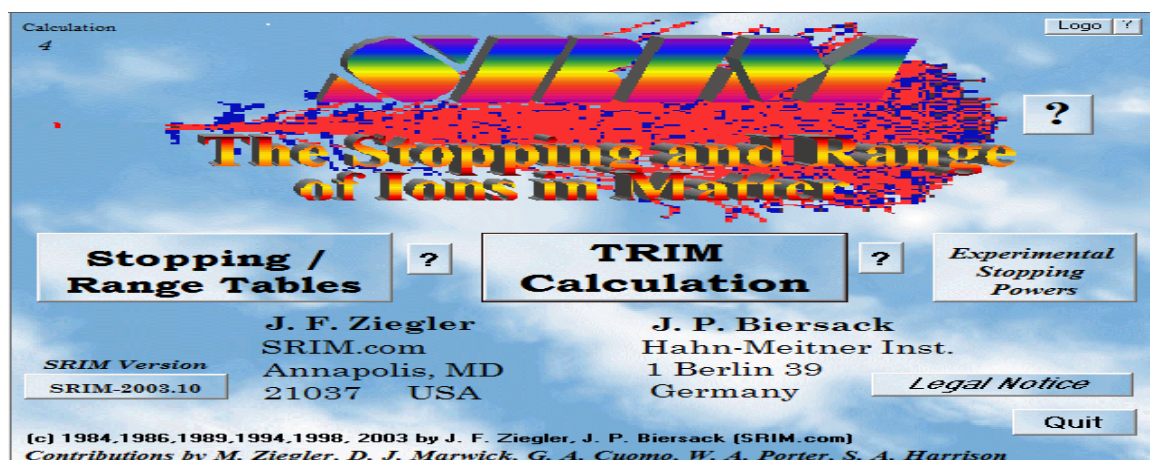


Figure II-1 : tableau de bord du code TRIM et SRIM

## Chapitre II : Simulation de l'interaction ion-matière par logiciel SRIM

Une fois ce choix fait, il apparaît un autre tableau représenté sur figure II.2 sur lequel on fixe des données comme l'ion le logiciel donne les propriétés de cet ion. Puis la cible qui est le composé avec toutes ces caractéristiques physiques telles que la densité, la surface l'énergie de liaison etc.

On fixe dans ce logiciel les paramètres suivants : l'épaisseur de l'échantillon ; le nombre d'ions qui seront utilisés pour le bombardement de la cible, l'énergie du faisceau ionique qui apparaît à gauche et qui est affichée.

Les résultats numériques présentés visent à étudier l'interaction faisceau d'ions avec les surfaces semi-conductrices. C'est une simulation dénommée TRIM et SRIM pour caractériser l'interaction des ions avec des cibles échantillons en gaz ou en solide [8]. (Voire figure II.3)

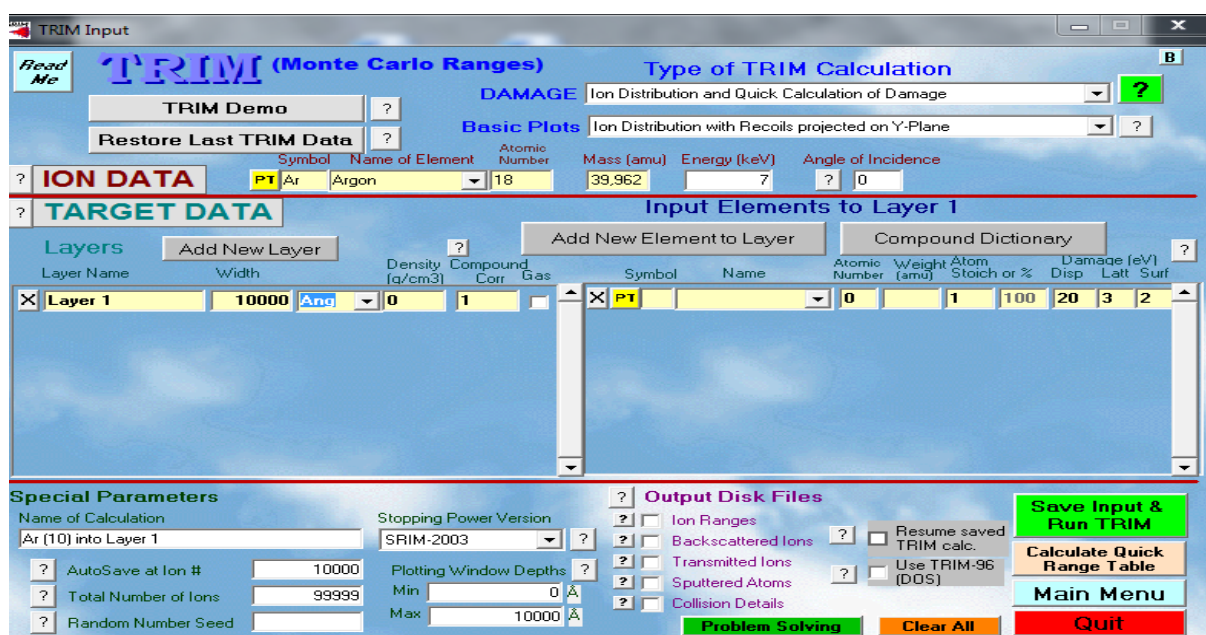


Figure II.2 Tableau des données TRIM pour le bombardement ionique

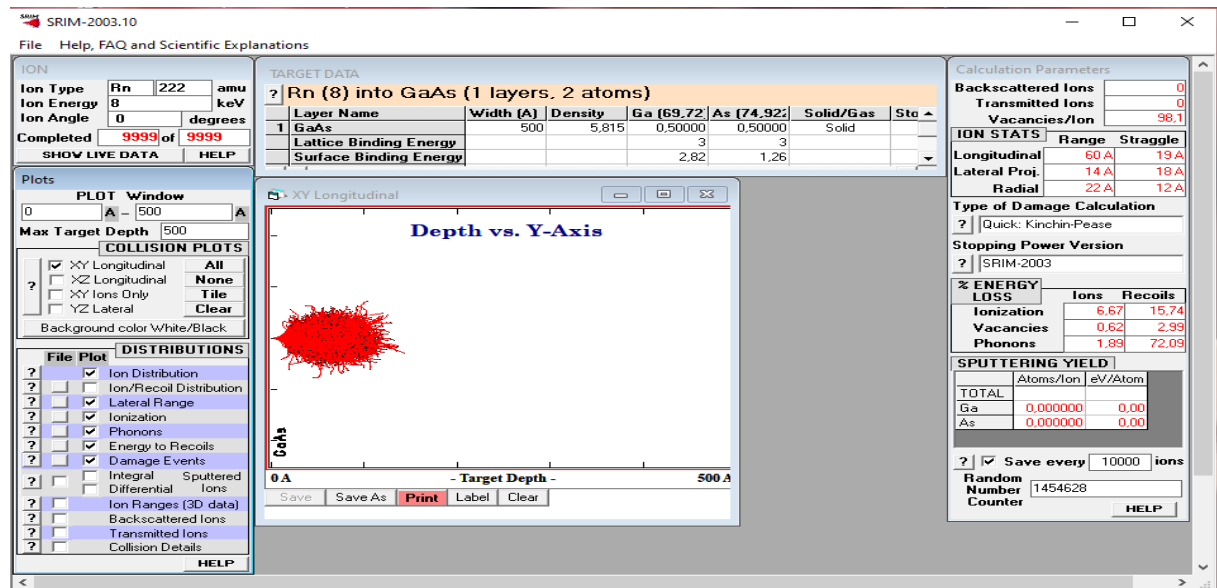


Figure II.3 Les résultats numériques de la simulation présentés par TRIM pour le bombardement ionique.

## II.2. Présentation de notre travail (condition de simulation)

Les résultats traités dans notre travail sont obtenus par logiciel SRIM 2003, on utilise les ions de l'Argon  $Ar^+$  et Radon  $Rn^+$  pour l'interaction avec les composés semi-conducteur Si et GaAs.

- Les différentes caractéristiques des ions implantés ( $Ar^+$  et  $Rn^+$ ) et les cibles bombardées (Si et GaAs) sont représentées dans le tableau
- Les ions de Radon  $Rn^+$  et les ions d'argon  $Ar^+$  ont des énergies cinétiques de 8 KeV.
- Le nombre des ions incidents est 9999.
- L'épaisseur de la cible est de  $(500\text{Å})^0$ .
- L'angle incident est égal à  $0^0$  (pour une pénétration maximale en profondeur est maximale)

### II.3. Etude du pouvoir d'arrêt de $Ar^+$ et $Rn^+$ dans le cible Si

Les tableaux suivant est obtenu par logiciel SRIM 2003 et les courbes sont tracé par L'Excel

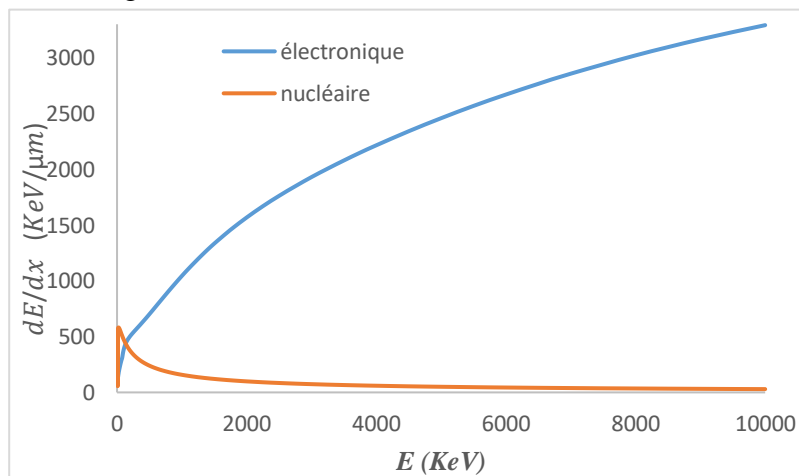
Energie des ions ( $Ar^+$ ) (Kev)	$\frac{dE}{dx} Elec(Kev/\mu m)$	$\frac{dE}{dx} Nucl(Kev/\mu m)$
8.00	9.868 E+01	5.340E+02
22.50	1.655E+02	5.817E+02
10000,00	3.292E+03	2.930E+01

**Tableau II. 1 :** Les résultats des pouvoirs d'arrêts électronique et nucléaire de l' $Ar^+$  dans Si

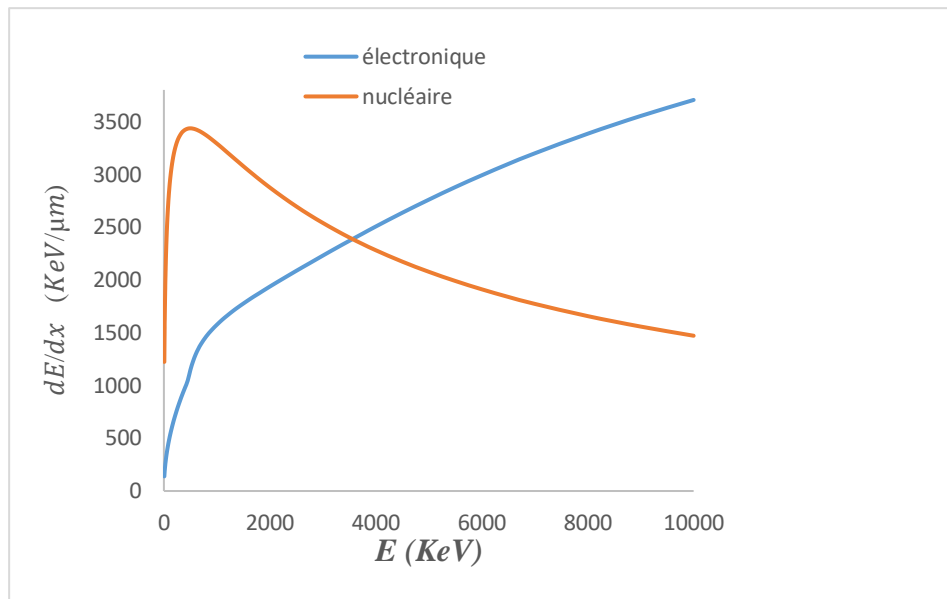
Energie des ions ( $Rn^+$ ) (Kev)	$\frac{dE}{dx} Elec(Kev/\mu m)$	$\frac{dE}{dx} Nucl(Kev/\mu m)$
8.00	1.386E+02	1.223E+03
500.00	1,147E+03	3.436+03
10000,00	3,705 E+03	1,471E+03

**Tableau II.2 :** Les résultats des pouvoirs d'arrêts électronique et nucléaire de l' $Rn^+$  dans Si

A partir des résultats obtenus par logiciel SRIM 2003 on représente les variations des pertes d'énergie électronique et nucléaire des particules chargées  $Ar^+$  et  $Rn^+$  en fonction de leur énergies incidente.



**Figure II.4 :** Les variations des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique des ions  $Ar^+$  dans le Si, en fonction de l'énergie incidente des ions.



**Figure II.5 :** Les variations des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique des ions  $Rn^+$  dans le Si, en fonction de l'énergie incidente des ions.

#### Analyse des courbes

- Pour les énergies cinétiques inférieures à **130KeV** et **3500KeV** pour le  $Ar^+$  et  $Rn^+$  respectivement le pouvoir d'arrêt nucléaire est prédominant, c'est-à-dire les collisions élastiques sont prédominantes. Lorsque les ions de  $Ar^+$  et  $Rn^+$  passent au voisinage du noyau, la force d'interaction électrostatique fait dévier leur trajectoire et réduit ainsi leur vitesse.
- Pour  $E = 130KeV$  et **3500KeV** pour le  $Ar^+$  et  $Rn^+$  respectivement perdons leurs énergies par les deux mécanismes à parts égales.
- Pour les énergies supérieures à **130KeV** et **3500KeV** pour le  $Ar^+$  et  $Rn^+$  respectivement les chocs inélastiques sont prédominants donc le pouvoir d'arrêt électronique devient prépondérant par rapport à l'arrêt nucléaire.

Rappelons que le pouvoir d'arrêt électronique est une interaction inélastique qui se fait avec les électrons orbitaux du milieu ralentisseur. Il est responsable de l'excitation et l'ionisation des atomes cibles [10]. La quantité d'énergie transférée lors de chaque collision est une très faible portion de l'énergie cinétique de la particule incidente.

#### II.4. Simulation de la distribution d'ions $Ar^+$ et $Rn^+$ dans le cible Si

Les figures ci-dessous représentent la distribution à deux dimensions des ions d'xénon et des ions de radon à l'intérieur de la cible (Si), une simulation provoquée par 9999 ions incidents de  $8KeV$  et sous angle d'incidence  $0^0$  calculée par logiciel *SRIM 2003*. Ce profil est obtenu à partir du logiciel, il montre la pénétration des ions dans la cible avec une animation complète.

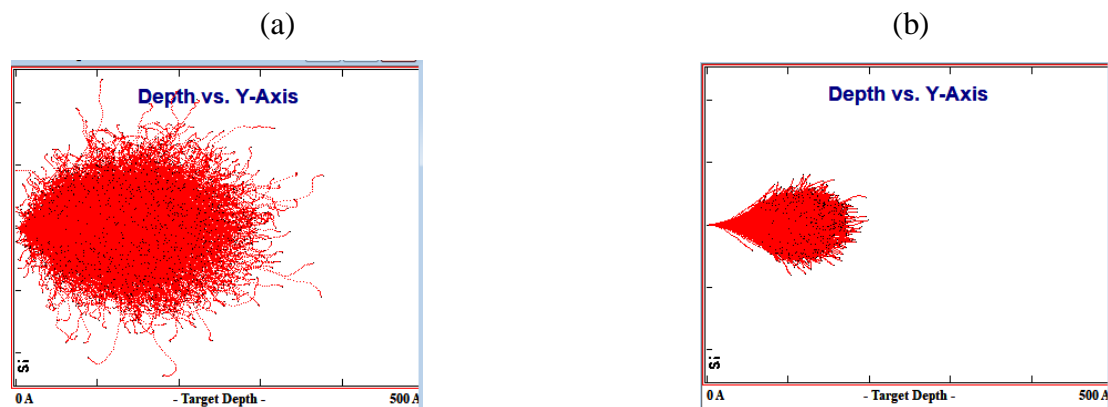


Figure II. 6. Les profile de distributions ( $8KeV$ ) dans la cible Si ( $500 \text{ \AA}$ )

(a) Les ions d' $Ar^+$       (b) les ions de  $Rn^+$

Chaque ion est représenté par sa trajectoire en trait rouge et par sa position finale en point noire

On remarque que les deux redistributions finales ont la même forme qui est une poire centré a une profondeur d'environ  $R_p = 131 \text{ \AA}$  et  $R_p = 113 \text{ \AA}$  pour le  $Ar^+$  et  $Rn^+$  respectivement.

Aussi Logiciel SRIM permet de simulé la Distribution des ions en profondeur de la cible sous forme des courbes avec des résultats plus précisé que celles aux la figure (II.7)

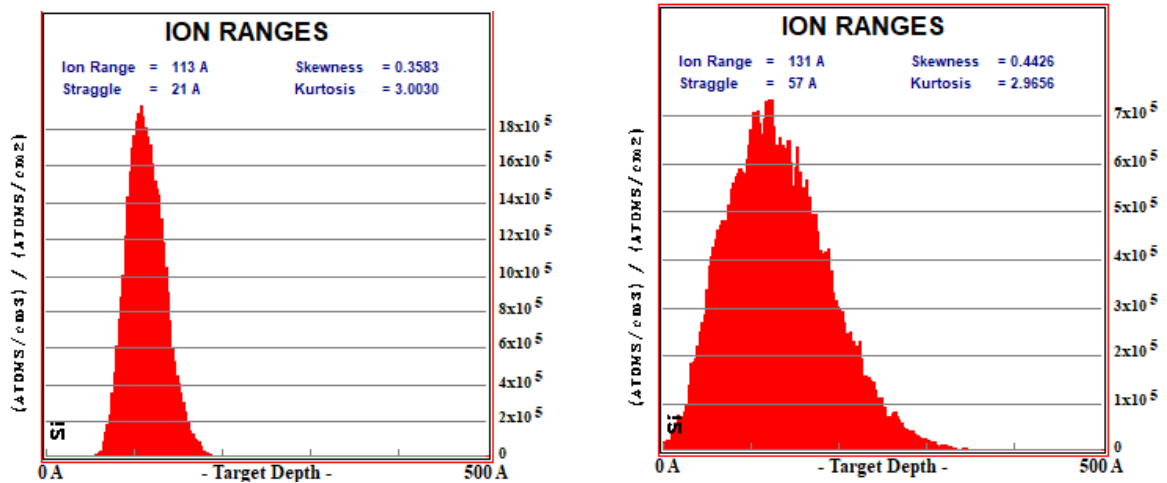


Figure II.7. Le profil de redistribution en profondeur de la cible de silicium

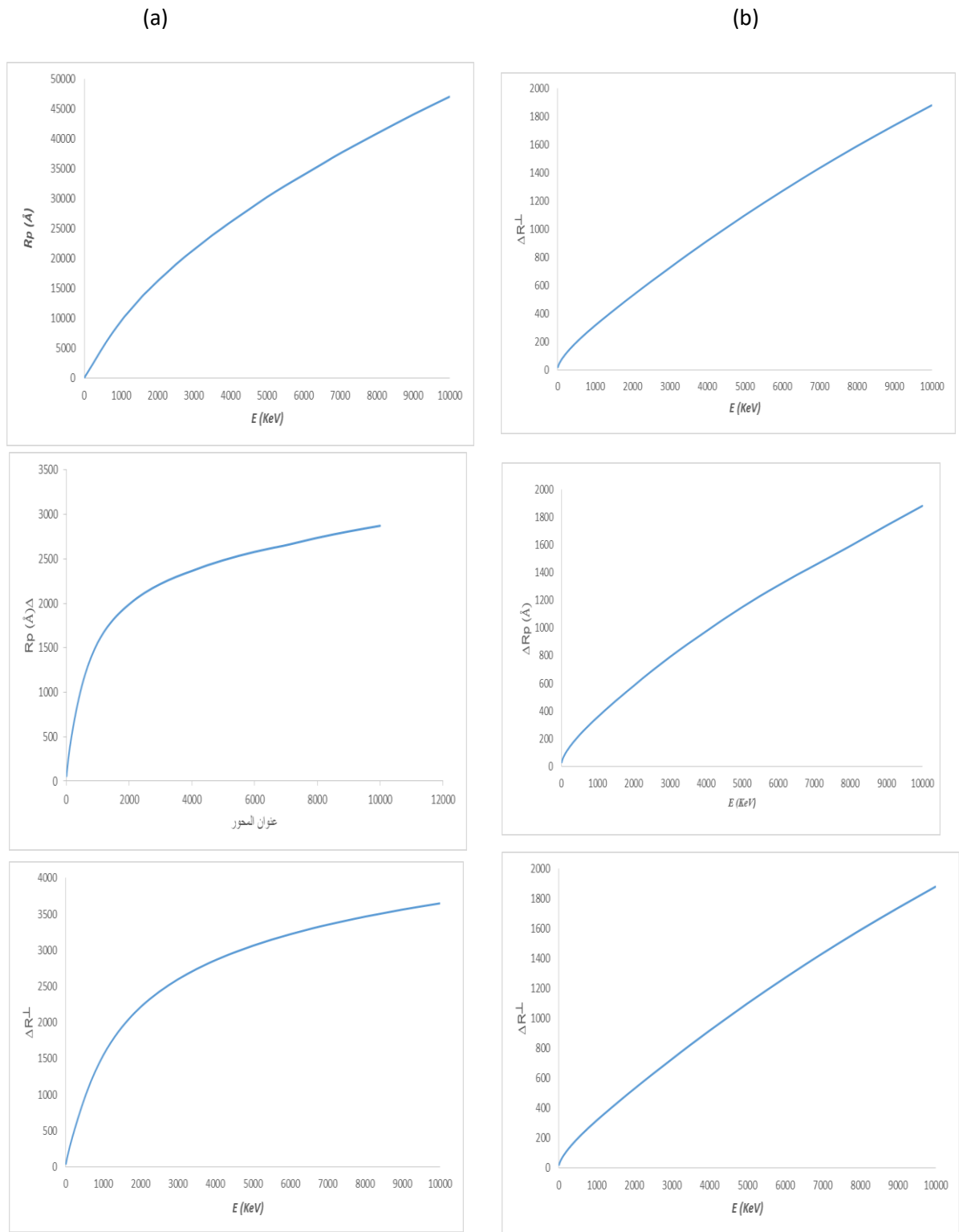
On remarque que la forme des deux courbes est gaussienne, ce qui est en bon accord avec la théorie L.S.S [11,12] relative à la pénétration des ions dans un solide amorphe. Ces deux courbes nous donnent le profil, et montre également un pic de concentration à une profondeur  $R_p$  approximativement égale à  $131 \text{ \AA}$  pour le  $Ar^+$  et  $113 \text{ \AA}$  pour le  $Rn^+$ . Ainsi la largeur à mi-hauteur, qui représente l'élargissement du profil autour de la concentration maximale, nous avons obtenu que  $\Delta R_p \cong 57 \text{ \AA}$  pour le  $Ar^+$  et  $Rn^+$  respectivement, et  $\Delta R_p \cong 21 \text{ \AA}$  pour le  $Rn^+$ .

S'agissant des deux autres moments qui sont le skewness ( $\gamma = 0.4426$  et  $\gamma = 0.3583$ ) et le Kurtosis ( $\beta = 2.9656$  et  $\beta = 3.0030$ ) pour le  $Ar^+$  et  $Rn^+$  respectivement. ,

Il est clair que les valeurs trouvées ne sont pas très éloignées par rapport à celles reportées dans le cas de la distribution gaussienne (i.e.  $\gamma \sim 0$  et  $\beta \sim 3$ ).

## II.5. Influence de l'énergie des ions sur les paramètres de distribution

A partir des résultats obtenus par logiciel SRIM 2003 on représente les variations des différents paramètres qu'ils sont le parcours projeté  $R_p$  (profondeur de pénétration ionique), la déviation standard  $\Delta R_p$  (la largeur mi-hauteur) et la redistribution latérale  $\Delta R_{\perp}$  des particules chargées  $Ar^+$  et  $Rn^+$  en fonction de leur énergies incidente.



**Figure II.8.** Influence de l'énergie d'accélération des ions primaires sur le parcours projeté  $R_p$ , la déviation standard  $\Delta R_p$  et la déviation standard latérale  $\Delta R_{\perp}$  a : pour les ions  $Ar^+$ ; b : pour les ions  $Rn^+$

Nous étudions l'influence d'énergie cinétique des ions incidents ( $Ar^+$  et  $Rn^+$ ) sur les paramètres qui définissent la pénétration ionique dans la cible Si et on trouve que plus l'énergie cinétique des ions augmente plus le parcours projeté  $R_p$  augmente rapidement, aussi on note que pour n'importe quel énergie incident  $R_p(Ar^+) > R_p(Rn^+)$ , c'est ce que nous obtiennons déjà dans la distribution des ions précédemment.

On constate que les dimensions augmentent d'une manière quasi proportionnelle avec l'énergie cinétique des ions  $Ar^+$  et  $Rn^+$  incident sur la surface du matériau Si. Par contre Comme la technologie actuelle (des circuits intégrés) exige leur minimisation, on déduit que les faibles énergies produisent les meilleurs résultats. Ceci justifie le choix de la valeur  $8KeV$  que nous avons utilisés dans la partie expérimentale.

## **II.6. La perte d'énergie par ionisation**

Le phénomène d'ionisation se produit afin de la pénétration des ions  $Ar^+$  et  $Rn^+$  dans la cible Si, ce phénomène peut avoir lieu par les collisions inélastiques entre les ions incidents et les électrons du Si, aussi par les atomes de recul qui résultant au cours des collisions élastique.

Chaque figure des figures ci-dessous contient deux diagrammes distinctes, le diagramme en bleu représente la perte d'énergie des atomes de recul et le diagramme en rouge représente la perte d'énergie des ions primaires (les ions incidents) les deux en fonction de la profondeur de la cible.

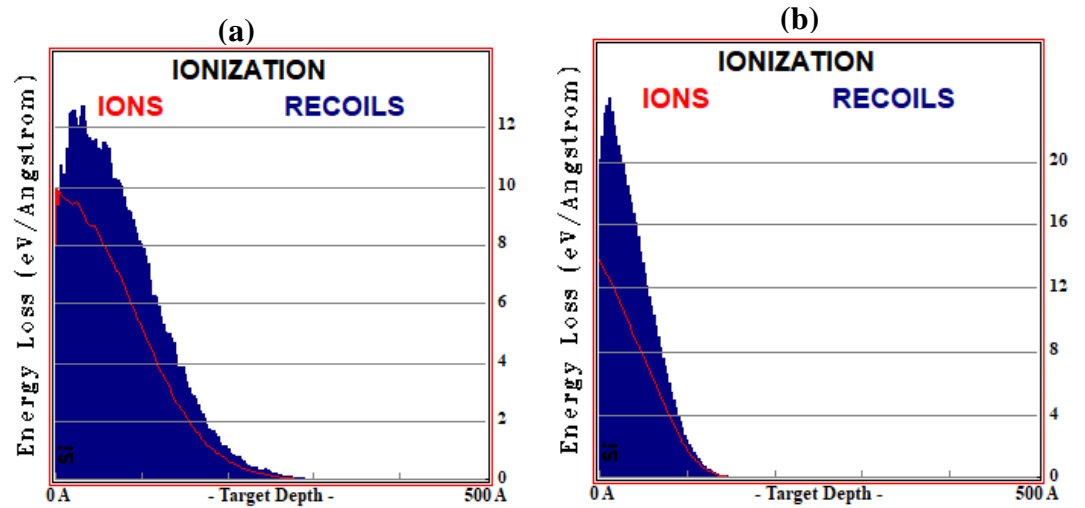


Figure II. 9 : La perte d'énergie par ionisation :a) par les ions  $Ar^+$  ; b) par les ions  $Rn^+$

Le tableau suivant donne la part d'énergie en pourcentage par ionisation pour les deux ions utilisés :

	Ion	Atomes de recoils
Les ions de $Ar^+$	13.32%	18.14%
Les ions de $Rn^+$	10.08%	16.88%

Tableau II. 3 : La part d'énergie en pourcentage par ionisation pour les deux ions utilisés.

Il est clair que l'énergie transférée par les atomes de recoils (**18.14%** ; **16.88%**) est supérieure à celle qu'elle transférée par les ions incidents (**13.32%** ; **10.08%**) pour le  $Ar^+$  et  $Rn^+$  respectivement puisque le nombre de ces atomes (les atomes de recoils) est toujours important dans les deux cas de  $Ar^+$  et  $Rn^+$  surtout pour le dernier (ion lourd soumis à des chocs élastiques de façon remarquable). D'autre part les collisions inélastique des atomes de recule et prédominant que celle des ions primaires tel que :

Dans les premières moments :  $E1 > Ed$  et  $E2 > Ed$  c'est à dire L'ion incident peut ioniser ou déplacer un atome cible de son site qui devient à son tour une particule incidente pouvant subir d'autres chocs inélastique donc l'ionisation se fait par les deux (l'ion incident et l'atome de recule)

Après un certain moment :  $E1 < Ed$  et  $E2 > Ed$  c'est à dire L'atome cible est éjecté de son site et devient une particule incidente pour subir d'autres chocs inélastique par contre la particule incidente occupe des sites vides (substitutionnels) et son énergie est dissipée dans le réseau et à cause de ça on trouve que l'ionisation se fait plus par les atomes de reculs, Nous rappelons que :

$Ed$  : l'énergie de déplacement de la cible ( $Ed=15\text{ev}$  pour Si)

$E1$  : l'énergie de la particule incidente ( $Ar^+$  et  $Rn^+$ ) après la collision

$E2$  : l'énergie des atomes de cible après la collision.

## II.7. La perte d'énergie par phonon

Au cours du bombardement de la cible avec des ions incidents la matrice absorbe des valeurs différents d'énergie, si l'énergie transférée à l'atome cible est insuffisante (inferieur à l'énergie de seuil de déplacement) implique que l'atome devient à l'état excité et pour que l'atome revenu à l'état stable par dissipation de l'énergie sous forme des phonons.

Chaque figure des figures ci-dessous contient deux diagrammes distinctes, le diagramme en bleu représente la perte d'énergie des atomes de recul et le diagramme en rouge représente la perte d'énergie des ions primaires (les ions incidents) les deux en fonction de la profondeur de la cible.

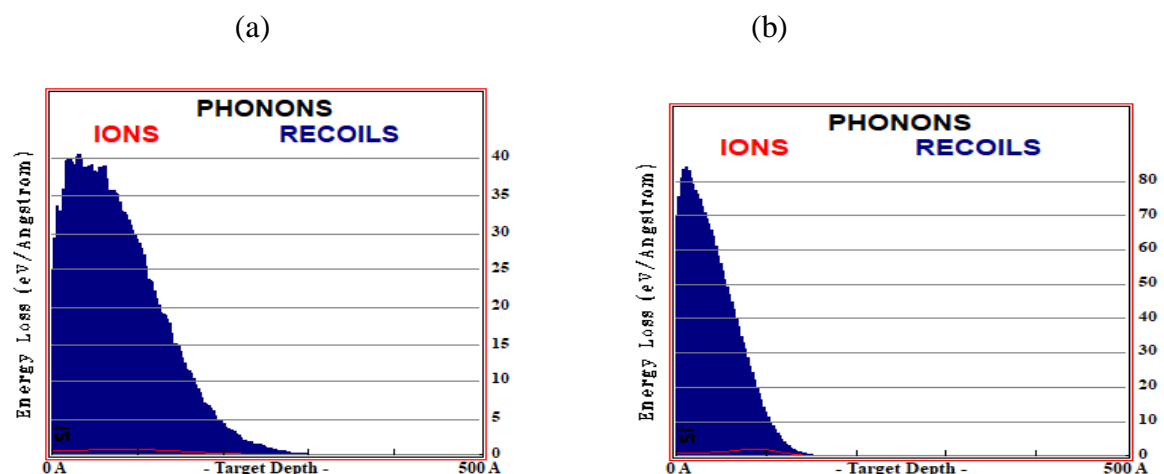


Figure II.10 : La perte d'énergie par phonon (a) par les ions  $Ar^+$  ;(b) par les ions  $Rn^+$  dans Si

Le tableau suivant donne la part d'énergie en pourcentage par phonons pour les deux ions utilisés

	Ion	Atomes de reculs
Les ions de $Ar^+$	1,48%	63.50%
Les ions de $Rn^+$	2.08%	67.20%

**Tableau II. 4 :** La part d'énergie en pourcentage aux phonons pour les deux ions utilisés

A partir des résultats obtenus par les diagrammes et le tableau précédant on remarque que la perte d'énergie aux phonons des ions  $Ar^+$  et  $Rn^+$  est produite par les atomes reculent en effet leur nombre est très grand.

Le phénomène de création des phonons peut avoir lieu pour plusieurs raisons, quand un ion incident frappe l'atome cible et l'énergie transférée soit inférieure à l'énergie de déplacement de site l'énergie absorbée par l'atome cible sera dissipée dans le réseau par création des phonons. Ainsi si l'énergie de l'ion incident après le choc soit inférieure de l'énergie de seuil de déplacement l'ion occupe des sites vides (substitutionnels) et son énergie est dissipée dans le réseau par des vibrations (création de phonons) après avoir éjecté l'atome cible. D'autre part si l'énergie des deux particules (l'ion incident et l'atome cible) après le choc soit inférieure de l'énergie de seuil de déplacement l'atome cible vibre dans sa position d'équilibre sans quitter son site. L'ion incident peut occuper seulement des sites interstitiels et son énergie est dissipée dans le réseau pour la création de phonons mais avec des proportions plus faibles que les atomes de recul [13].

## **II.8. Production des lacunes**

les lacunes se produisent quand un atome de site reçoit au cours des collisions avec les ions incidents  $Ar^+$  et  $Rn^+$  une énergie suffisante c'est-à-dire une valeur supérieure à l'énergie seuil de déplacement (on note que  $E_d = 15 eV$  pour tous les semi-conducteurs), l'atome quitte sa position et n'y revient pas immédiatement.

La densité de lacunes produites est maximale quand la perte d'énergie nucléaire est maximale. C'est à dire La création des lacunes dans la cible est résultée seulement à cause des collisions nucléaires soit entre les ions primaires incidents et les atomes-cibles

ou bien à partir des collisions secondaires des atomes de recul avec les atomes cible [14]. On peut assimiler les distributions obtenues par des lois gaussiennes centrées à une profondeur  $R_d \cong 25 \text{ \AA}$  pour  $Rn^+$  et  $R_d \cong 36 \text{ \AA}$  pour le  $Ar^+$ .

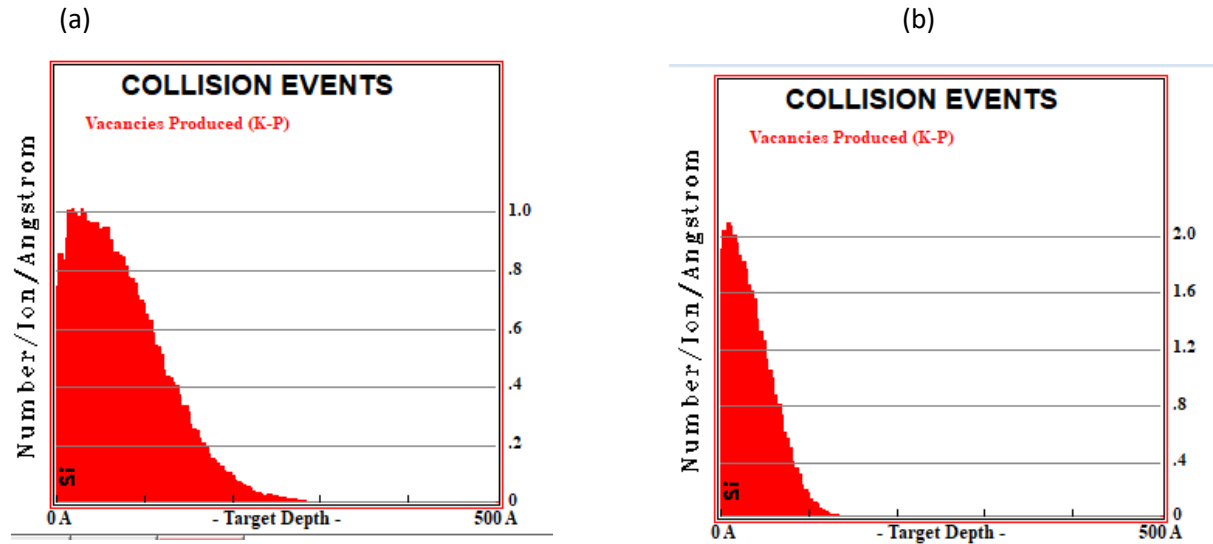


Figure II. 11. Distribution des lacunes dans la cible Si qui créent par les ions

a :  $Ar^+$ ; b:  $Rn^+$

Le tableau suivant donne la part d'énergie en pourcentage dans la production des lacunes pour les deux ions utilisés

	Ion	Atomes de reculs
Les ions de $Ar^+$	0.51%	3.04%
Les ions de $Rn^+$	0.76%	3.00%

Tableau II. 5 : La part d'énergie en pourcentage dans la production des lacunes pour les deux ions utilisés

Bien que la profondeur de la pénétration des ions  $Ar^+$  est supérieure à celle des ions  $Rn^+$  mais créent des espaces vides avec une concentration supérieure à celle des ions  $Ar^+$  ce qui est en bon accord avec les études expérimentales. où  $Z(Rn^+) > Z(Ar^+)$  en plus à partir des résultats obtenus précédemment dans l'étude des pouvoirs d'arrêt ces déjà on trouve que le nombre des collision inélastiques qui provoque l'existence des lacunes est plus important dans le cas des ions  $Rn^+$  que celles relatives aux ions d' $Ar^+$ : c'est pourquoi on trouve la concentration des lacunes qui créent par  $Rn^+$  en profondeur  $R_d$  est supérieure à celle créée par  $Ar^+$  mais a une faible profondeur.

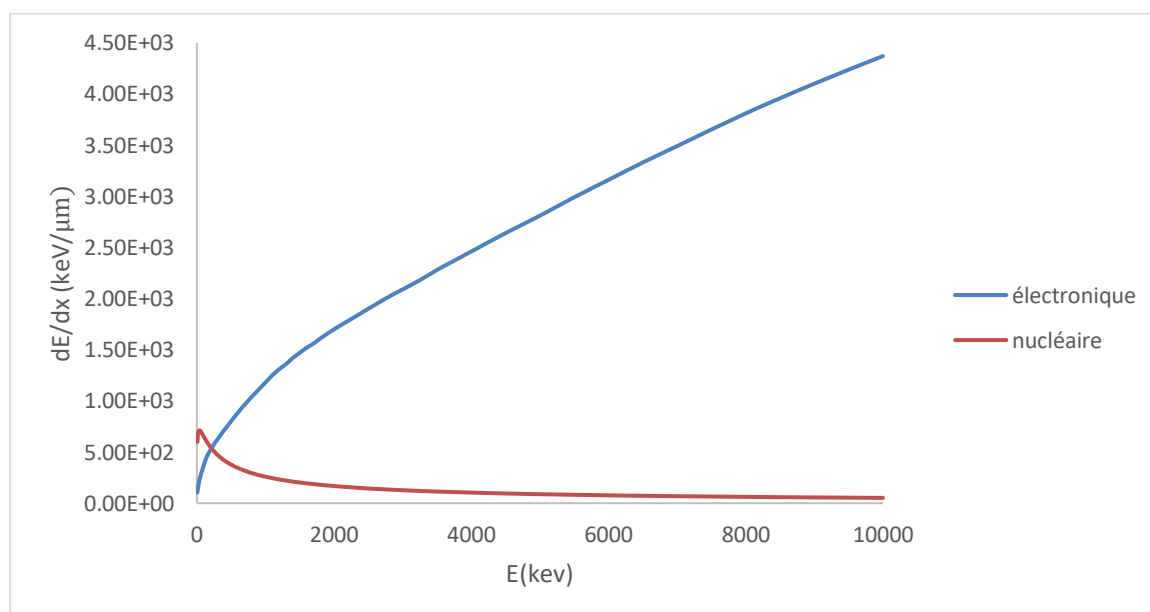
### II.9. Etude du pouvoir d'arrêt d'ion Argon $Ar^+$ dans la cible GaAs

Les tableaux suivant est obtenu par logiciel SRIM 2003 et les courbes sont tracé par L'Excel

Energie des ions ( $Ar^+$ ) (Kev)	$\frac{dE}{dx}$ Elec(Kev/ $\mu m$ )	$\frac{dE}{dx}$ Nucl(Kev/ $\mu m$ )
8.00	1,04E+02	5,99E+02
22.50	1,74E+02	6,97E+02
10000,00	4,37E+03	5,22E+01

**Tableau II. 6 :** Les résultats des pouvoirs d'arrêts électronique et nucléaire de l'  $Ar^+$  dans GaAs.

A partir des résultats obtenus par logiciel SRIM 2003 on représente les variations des pertes d'énergie électronique et nucléaire des particules chargées  $Ar^+$  en fonction de leur énergies incidente.



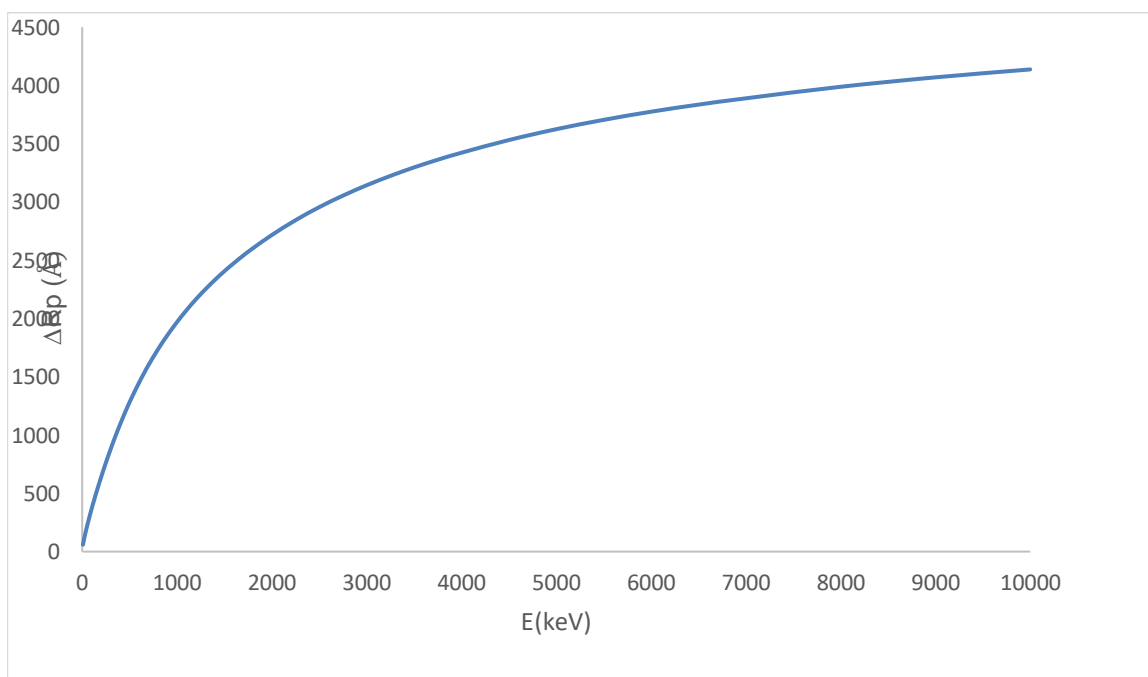
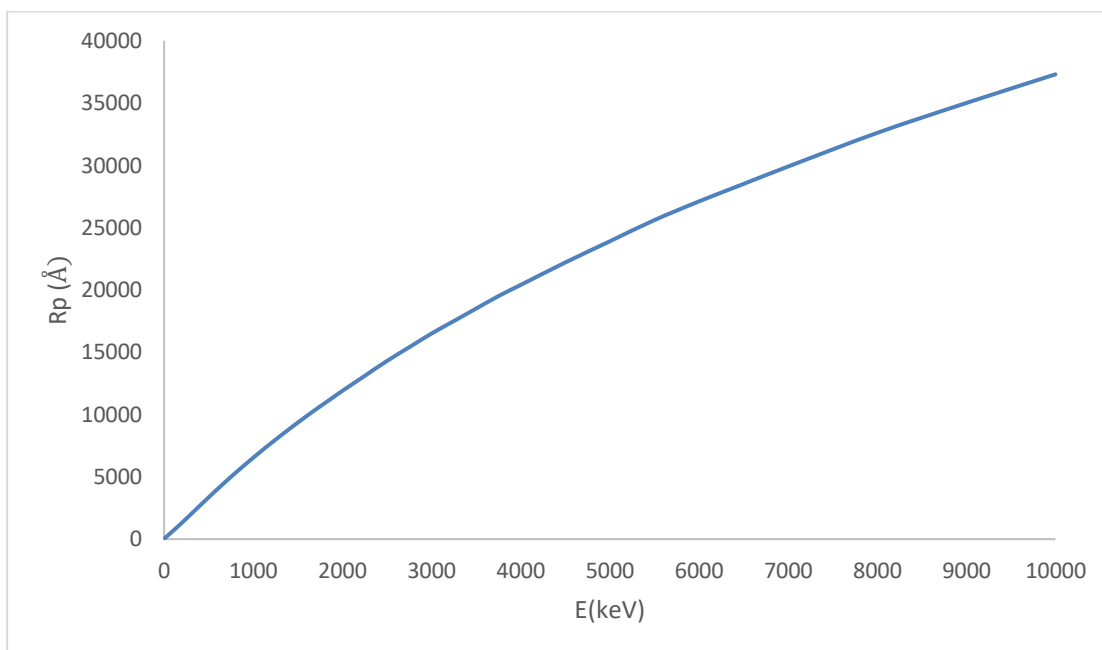
**Figure II.12:** Simulation des pouvoirs d'arrêt (nucléaire et électronique) des ions  $Ar^+$  dans une cible de GaAs.

Les ions qui bombardent la cible sont freinés suite à deux types d'interactions : électronique et nucléaire. La figure II .12 montre l'évolution du pouvoir d'arrêt électronique et du pouvoir d'arrêt nucléaire lors de l'interaction d'un faisceau d'ions  $Ar^+$  avec une cible GaAs en fonction de l'énergie de la particule incidente. D'après les courbes données par le logiciel SRIM, nous remarquons une différence de l'évolution du pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire.

- Pour les énergies cinétiques inférieures à **200 Kev** pour le  $Ar^+$  le pouvoir d'arrêt nucléaire est prédominant, c'est-à-dire les collisions élastiques sont prédominantes. Lorsque les ions de  $Ar^+$  passent au voisinage du noyau, la force d'interaction électrostatique fait dévier leur trajectoire et réduit ainsi leur vitesse.
- Pour  $E = 200Kev$  pour le  $Ar^+$  perdons leurs énergies par les deux mécanismes à parts égales.
- Pour les énergies supérieures à **200Kev** pour le  $Ar^+$  les chocs inélastiques sont prédominants donc le pouvoir d'arrêt électronique devient prépondérant par rapport à l'arrêt nucléaire.

### **II.10. Influence de l'énergie des ions $Ar^+$ sur les paramètres de distribution**

Sur la figure II.13, nous reportons les variations des paramètres de distribution des ions  $Ar^+$  ( $R_p, \Delta R_p, \Delta R_{\perp}$ ) en fonction de son énergie incidente. D'après cette figure on constate que les dimensions augmentent d'une manière quasi proportionnelle avec l'énergie cinétique des ions  $Ar^+$  et incident sur la surface du matériau GaAs. Par contre le parcours projeté  $R_p$  augmente rapidement suivi par la largeur mi-hauteur.



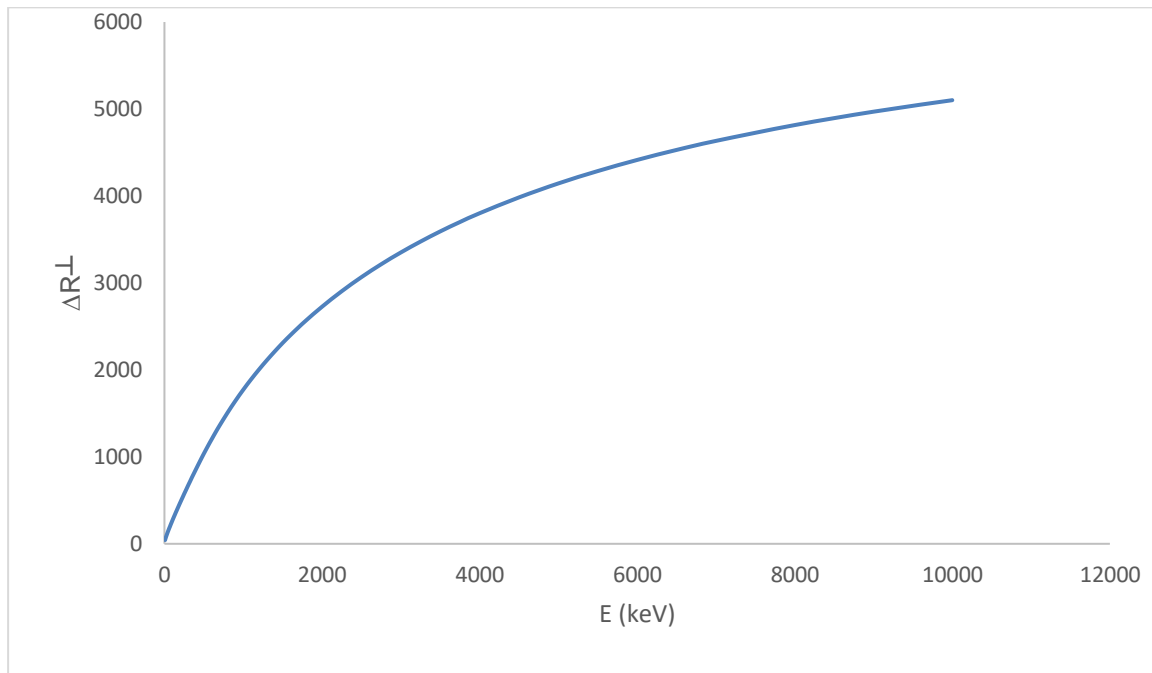


Figure II.13 : la variation des paramètres de distribution en fonction de l'énergie incidence des ions

### II.11. Simulation de la distribution d'ions $Ar^+$ et $Rn^+$ dans le GaAs

Le logiciel SRIM permet de présenter une image complète de la trajectoire des ions dans la cible, les figures (II.14 ; II.15) représente les dimensions des ions  $Ar^+$  et  $Rn^+$  (8 Kev et sous l'angle d'incidence  $0^0$ ) délivré par le programme SRIM 2003 dans la cible de le GaAs.

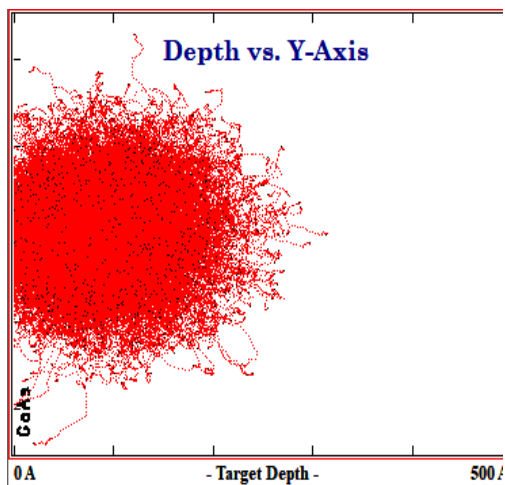


Figure II.14 :(a) le profile de distribution d'un ion d' $Ar^+$  dans la cible GaAs.

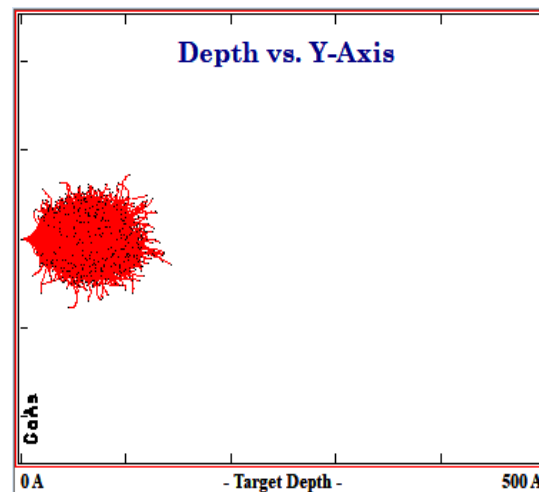


Figure II.15 :(b) le profile de distribution d'un ion d' $Rn^+$  dans la cible GaAs.

Chaque ion est représenté par sa trajectoire(en trait rouge) et par sa position finale (en point noire). A partir de deux figures (II.14 et II.15) on remarque que : La redistribution finale de tous les ions est sous la forme d'une poire centrée à une profondeur d'environ  $R_p = 87 \text{ \AA}$  pour les ions de argon  $Ar^+$  et d'environ  $R_p = 60 \text{ \AA}$  pour les ions de radon  $Rn^+$ , ce qui est en bon accord avec la littérature qui dit : Lorsqu'une particule chargée pénètre dans le matériau cible, celle-ci ralentit graduellement dans la matière par une série de collisions successives. Plus le numéro atomique de la particule sera élevé plus la cible subira de collisions (varie selon  $Z^2$  de la cible) et plus la particule s'arrêtera rapidement dans la matière, c'est pourquoi on trouve que :  $R_p (Ar^+) > R_p (Rn^+)$  car :  $Z(Ar^+) = 18 < Z(Rn^+) = 86$ .

## **II.12. Processus de perte d'énergie des ions projectile $Rn^+$ et $Ar^+$ sur la cible GaAs**

### **II.12.1. La Perte d'énergie par ionisation**

Le tableau (II.7 ; II.8) montre la perte d'énergie en pourcentage donnée par l'interface du logiciel SRIM 2003, il permet de diviser l'énergie des ions incidents en différents types.

% ENERGY LOSS	Ions Recoils	
	Ionization	6,67
Vacancies	0,62	2,99
Phonons	1,89	72,09

**Table II.7 :** Perte d'énergie en pourcentage d'ion  $Rn^+$  dans la cible GaAs

La figure (II.16) décrit la perte d'énergie par ionisation en fonction de la profondeur de la cible. On remarque qu'il y a deux diagrammes distincts, un pour la perte d'énergie électronique des ions incidents, et un pour la perte d'énergie des atomes cibles reculant.

Il est clair que l'énergie transférée par les atomes de reculs (**15.74%**) est supérieure à celle qu'elle transférée par les ions incidents (**6.67%**) pour le  $Rn^+$ . on constate toujours que le phénomène est plus important dans le cas relatif aux atomes de recul, parce que les collisions élastiques entre les ions  $Rn^+$  et les atomes de cible (GaAs) est prédominant que celles au collision inélastique pour une énergie de 8 Kev, à cause de

ca on trouve que le nombre des atomes de recul est toujours plus important que le nombre d'ions incidents, alors la probabilité que l'ionisation se fait par les atomes des recul est supérieure a celles aux ions primaire.

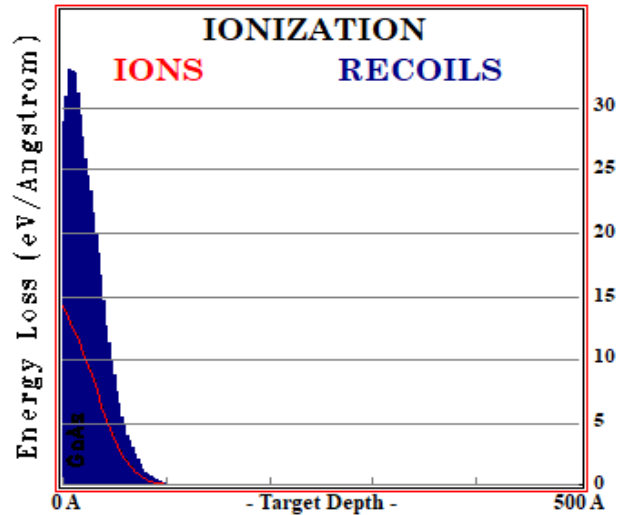
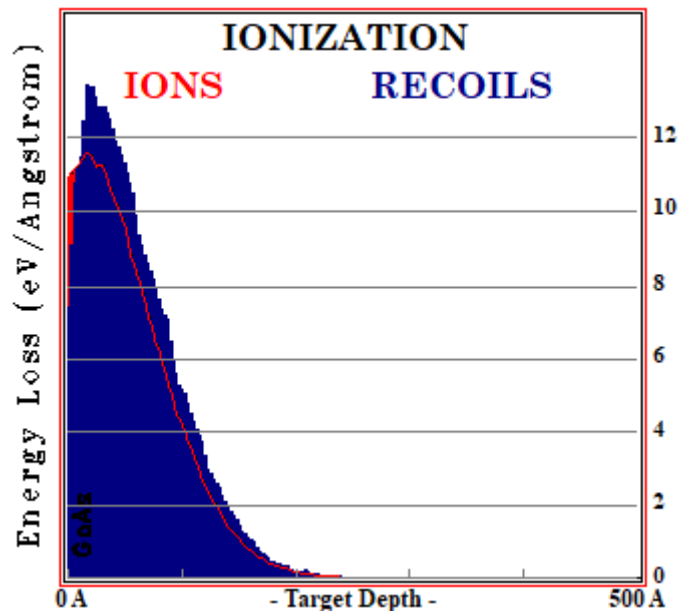


Figure II.16 : Perte d'énergie par ionisation pour les ions projectiles  $Rn^+$ .

% ENERGY LOSS	Ions Recoils	
	Ionization	12,86
Vacancies	0,62	2,72
Phonons	2,28	66,96

Table II.8: Perte d'énergie en pourcentage d'ion  $Ar^+$  dans la cible GaAs.

sur la figure II.19 nous reportons la perte d'énergie par ionisation sous l'effet des ions incident et par les atomes des recul, Le tableau II.8 qui donne la perte d'énergie en pourcentage montre que les atomes de reculs perdent d'énergie (14.56%) plus que l'énergie des ions incidents (12.86%), cela donne une perte totale 27.42%. Les résultats de la simulation du phénomène d'ionisation du projectile à l'intérieur de la cible GaAs montre que l'énergie transférée par l'ion  $Ar^+$  projectile est inférieur à l'énergie transférée par les atomes reculs.



La figure II.19 : Perte d'énergie par ionisation pour les ions projectiles  $Ar^+$ .

### II.12.2. La perte d'énergie par phonon

Chaque figure des figures ci-dessous contient deux diagrammes distinctes, le diagramme en bleu représente la perte d'énergie des atomes de recul et le diagramme en rouge représente la perte d'énergie des ions primaires (les ions incidents) les deux en fonction de la profondeur de la cible.

le nombre des atomes de recul est toujours plus important que le nombre d'ions incidents ( $Ar^+$  et  $Rn^+$ ) Comme nous avons discuté précédemment dans l'étude de pouvoir d'arrêt, Où nous avons trouvée : pour des énergies inférieures à 8 Kev la cible devient sensible au ralentissement nucléaire, ce qui crée un grand nombre des atomes de recul par rapport a celles de les ions primaire, alors l'énergie perdue sous forme de phonons par les atomes de recul est supérieure à celle perdue par les ions primaires.

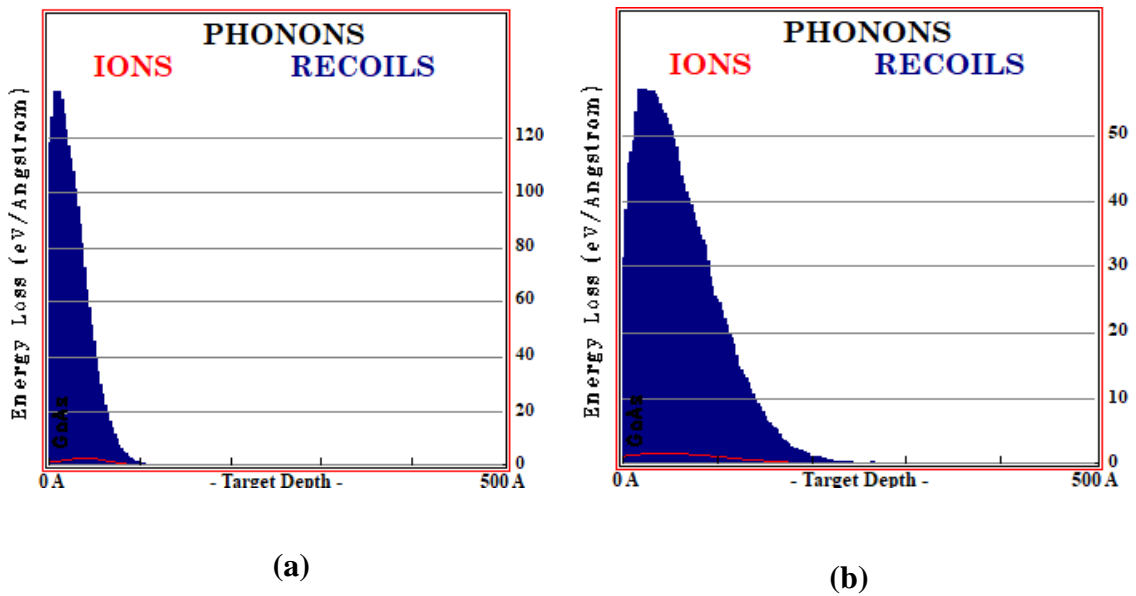


Figure II.20 : la perte d'énergie par phonon des ions  $Ar^+$  (a) et  $Rn^+$  (b) dans la cible GaAs.

### II.12.3. Production des lacunes

Sur la figure II.21 nous montrons les résultats de simulation de la production des lacunes dans la cible GaAs en fonction de la profondeur, Ceci on trouve les lacunes se produit à une profondeur  $R_d$  autour de laquelle le profil est quasiment gaussien mais on peut assimiler les distributions obtenues par des lois gaussiennes centrées à une profondeur  $R_d \cong 15 \text{ \AA}$  pour  $Rn^+$  et  $R_d \cong 30 \text{ \AA}$  pour le  $Ar^+$ , donc on remarque que la concentration des lacunes qui créent par  $Ar^+$  en profondeur  $R_d$  est supérieur a celle créée par  $Rn^+$ .

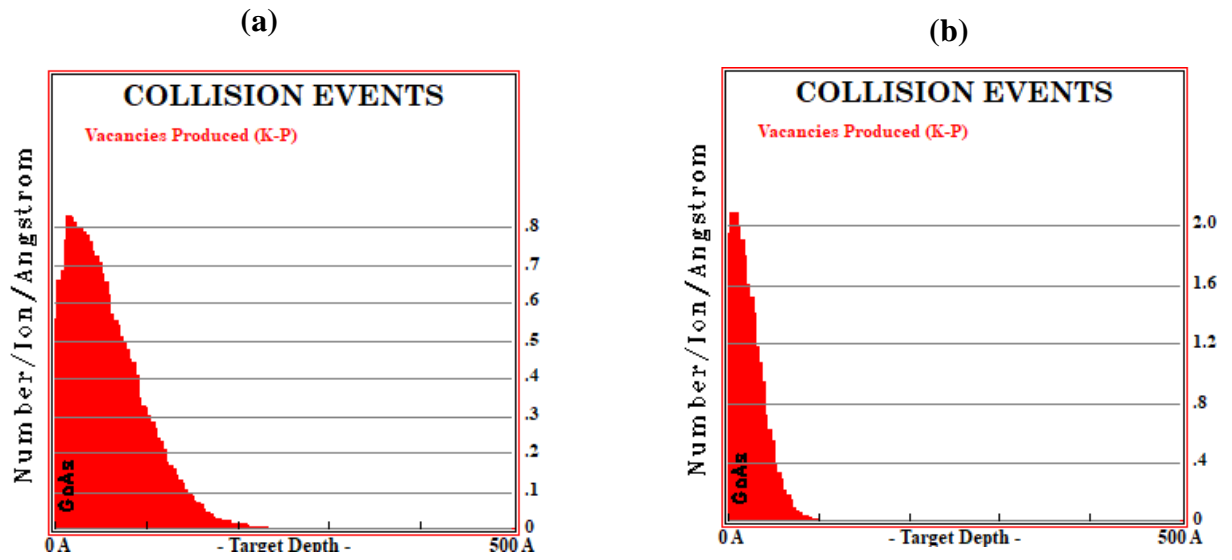


Figure II.21 : distribution des lacunes dans la cible GaAs qui créent par  $Ar^+$  (a) ;  $Rn^+$  (b).

Production des lacunes	$Ar^+$	$Rn^+$
Ions	0.62	0.62
Recul	2.72	2.99

Tableau II.9 production des lacunes pour chaque ion dans la cible de GaAs.

➤ **Comparaisons entre les deux cibles (Si et GaAs) :**

Pour cette comparaisons on choisir l'ion d'Argon  $Ar^+$ .

Paramètres de distribution	$R_p(\text{Å})$	$\Delta R_p(\text{Å})$	Skewness $\alpha$	Kurtosis $\beta$
GaAs	87	49	0.5967	3.1282
Si	131	57	0.4426	2.9656

**Tableau II.10:** les paramètres de distribution dans Si et GaAs.

	Si		GaAs	
	Ions	Atomes de reculs	ions	Atomes de reculs
Perte d'énergie en pourcentage par ionisation (%)	13.32	18.14	12.86	14.56
Perte d'énergie en pourcentage par phonons (%)	1,48	63.50	2.28	66.96
Production des lacunes(%)	0.51	3.04	0.62	2.72

**Tableau II.11 :** Comparaisons entre les deux cibles (Si et GaAs).

## **Conclusion**

Dans ce chapitre (la simulation de l'interaction des ions  $Ar^+$  et  $Rn^+$  dans les cibles de GaAs et Si par le logiciel SRIM 2003), plusieurs résultats ont été obtenus par la simulation, ce logiciel est utilisé dans plusieurs domaines, essentiellement dans le domaine de l'implantation ionique pour calculer les phénomènes cinétiques associés aux pertes d'énergie des ions, ce logiciel basé sur la méthode de Monte Carlo. Les phénomènes de collision entre les ions utilisés et les cibles de Si et GaAs amorphe ont été prédits. Les différentes redistributions des ions (en profondeur, latérale) ont été obtenues et plusieurs paramètres ont été estimés : le parcours projeté  $R_p$ , la déviation standard  $\Delta R_p$ , le parcours latéral  $\Delta R_{\perp}$ , etc. L'étude de la formation de défauts a également été prise en considération. Nous avons pu obtenir les différentes redistributions possibles, à savoir : la production de lacunes, le phénomène d'ionisation et la création de phonons.

## *Chapitre III*

# *Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO*

### **Introduction**

La simulation par la méthode monte Carlo de l'interaction des électrons avec le solide est largement utilisée depuis plusieurs années dans divers domaines d'applications ; notamment pour les techniques de caractérisation des surfaces et de la spectroscopie électronique [1].

Il existe plusieurs logiciels de simulation de cette interaction mais le plus rapide et le plus accessible sur le net est Casino.

Dans ce chapitre, nous analyserons le phénomène de transmission et de distribution des électrons dans les cibles Si et GaAs, respectivement. Nous décrirons les parcours théoriques des électrons dans le volume de l'échantillon. Les calculs des trajectoires et des profondeurs de pénétration des électrons primaires et rétrodiffusés sont effectués par Casino.

### **III.1. Présentation du logiciel Casino**

Dont l'acronyme est monte « **Carlo Simulation of electroN trajectory in sOlid** » apparaît le mieux adapté à notre étude de l'interaction électron –matière. Ce logiciel nous permet d'utiliser une gamme d'énergie des électrons allant de 0 à 30 KeV. Ce qui est largement suffisant pour simuler les interactions électron matière solide. Ce logiciel est applicable aux cibles massives pures ou multicouches [2].


Il est basé sur la méthode de Monte Carlo. Il permet de faire un calcul approximatif de la trajectoire des électrons et de donner la profondeur de pénétration maximale des électrons dans le matériau. Le logiciel Casino, version 2.42 en deux dimensions axisymétriques, s'attache au calcul microscopique de la trajectoire d'un électron unique, interaction après interaction. Plusieurs centaines de milliers de trajectoires peuvent être calculées lors d'une simulation.

La simulation d'une trajectoire d'un électron primaire peut se séparer en trois phases : la pénétration initiale de l'électron dans la cible sans subir de déviation angulaire, puis le régime permanent de diffusion et enfin la fin de la trajectoire.

### III.2. Comment créer une simulation par 'CASINO'

Pour créer une simulation utilisons le code *CASINO* les étapes suivantes

#### 1- La création d'une simulation

Pour créer une simulation sélectionnez **File/new** dans le menu ou cliquez sur l'icône . Une boîte de dialogue sera affichée sur l'écran appelée « **Edite Layers** »

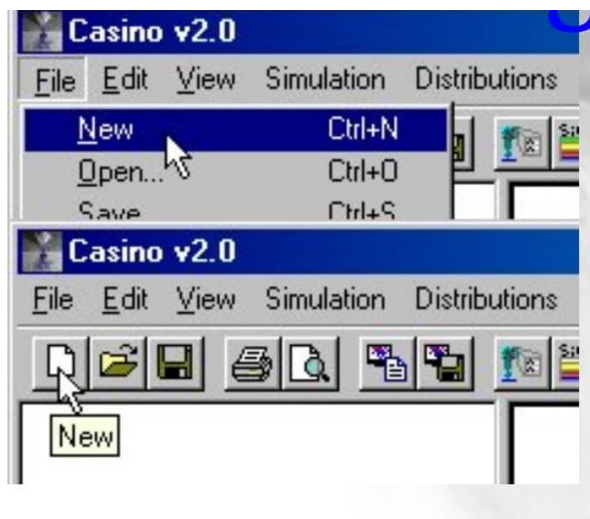


Figure III.1. Interface de code Casino.

#### 2- La création d'un couche

Cette étape consiste à choisir l'élément chimique (l'échantillon), pour ajouter une couche tout simplement cliquez sur le bouton « **ADD LAYER** », si vous avez besoin de plusieurs couches cliquez encore une fois sur le bouton précédent mais si vous voulez supprimer la couche cliquez sur le bouton « **REMOVE SELECTED LAYER** »

Si vous souhaitez définir la dernière couche comme un substrat, assurez-vous que la case à cocher Utiliser est cochée, Si l'échantillon est multicouche horizontal, sélectionnez « **MULTI-LAYER** » ou, s'il est composé de couches verticales, sélectionnez « **GRAIN BOUNDARY** ». L'épaisseur de ces couches peut être modifiée en cliquant simplement sur l'épaisseur actuelle et en tapant la nouvelle épaisseur.



**Figure III.2.** La boîte de dialogue « Edite layer» de CASINO

### 3- L'édition de couche

Cette boîte de dialogue « **LAYER CHEMECAL COMPOSITON**» vous permet de donner un nom et une composition chimique à la couche.

- Commencer par entrer l'élément chimique.
- Donner un nom à la couche.
- La densité sera calculée automatiquement du poids atomique et les fractions molaires. Ce calcul ne prend pas en compte la structure du matériau et vous pouvez changer la densité à sa valeur actuelle.
- Si vous voulez changer la fraction atomique ou bien la fraction de poids vous pouvez faire cela manuellement, cliquez dans la zone correspondante à ce paramètre et entrez la valeur.
- Si vous voulez enregistrer un élément nommez-le et appuyez sur «**Add to Library**»

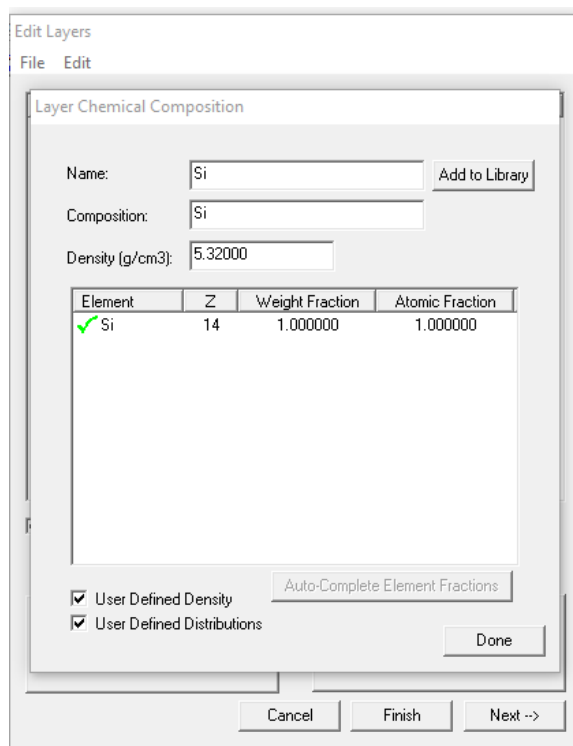


Figure III.3. La boîte de dialogue « COMPOSITION EDIT BOX».

#### 4. Configuration du microscope et simulation

- D'abord, entrez l'énergie que vous voulez utiliser dans la simulation, la première case c'est où vous définissez l'énergie de départ, la deuxième case indique l'énergie finale et la dernière case indique le pas en KeV entre deux simulation successive. Si l'énergie de départ et l'énergie finale sont égaux le pas sera ignoré et une seule simulation à l'énergie de départ sera effectuée.
- Deuxièmement, entrez le nombre des électrons que vous souhaitez simuler, plus le nombre est élevé plus les résultats sera beaucoup mieux.
- Troisièmement, entrez les paramètres du faisceau la première case représente l'angle d'incidence des électrons dans l'échantillon et la deuxième représente la largeur du faisceau.
- Quatrièmement, définissez l'angle de détecteur de rayons X.
- Enfin, définissez les limites de l'analyse (L'échantillon est centré à 0 nm et le pas est en nanomètres). Si vous ne souhaitez pas analyser votre

échantillon, décochez la case « **SCAN BEAM TO CREATE AN IMAGE** »

- La case FROM contient alors la position du faisceau sur l'échantillon

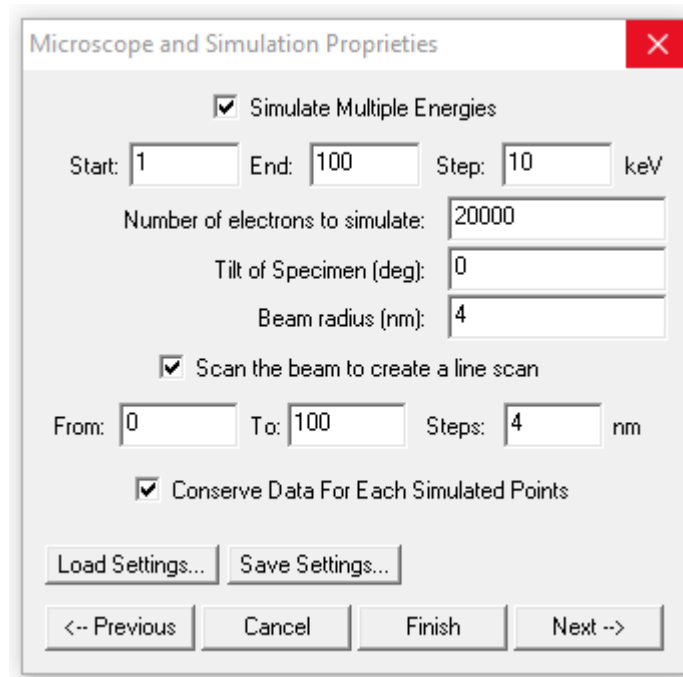


Figure III.4. La boîte de dialogue « Microscope and Simulation »

### 5. Sélection d'une distribution

Cocher les cases des distributions que vous voulez voir après les calculs et entrez le nombre des points que vous voulez attribuer à chaque distribution.

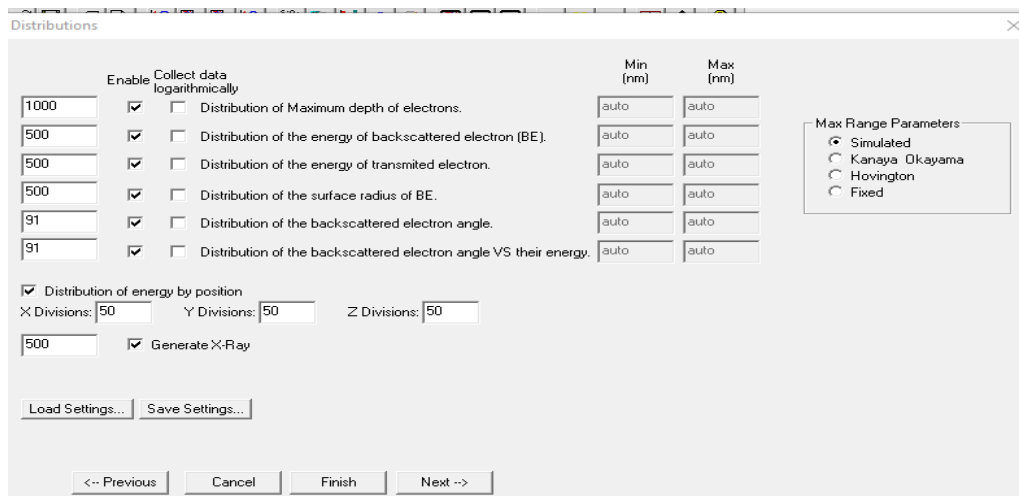


Figure III.5. La boîte de dialogue «Distributions»

### 6- Les options

Il y a quelques options d'utilisation :

- « **NONE** » ne mémorisera aucune trajectoire, ce qui signifie qu'il n'y a aucun moyen de visualiser les trajectoires après qu'elles ont été calculées.
- « **DISPLAYED ONLY** » ne conservera que les trajectoires affichées à l'écran. Cette option est utile si vous souhaitez afficher les trajectoires et modifier certains de leurs paramètres d'affichage.
- « **ALL** » est utilisé si vous souhaitez conserver toutes les trajectoires en mémoire, afficher un écran. Sélectionnez pendant le calcul, mais après les calculs, il les affichera tous.
- Nombre de trajectoires d'électrons à afficher à l'écran pendant les calculs. Temps minimal entre les sauvegardes permettant de poursuivre la simulation en cas de fin accidentelle de la simulation.
- L'énergie minimale, en KeV, à laquelle une trajectoire est terminée. Si coché, les trajectoires étaient affichées à intervalles réguliers pendant la simulation, sinon les premières trajectoires seraient affichées.

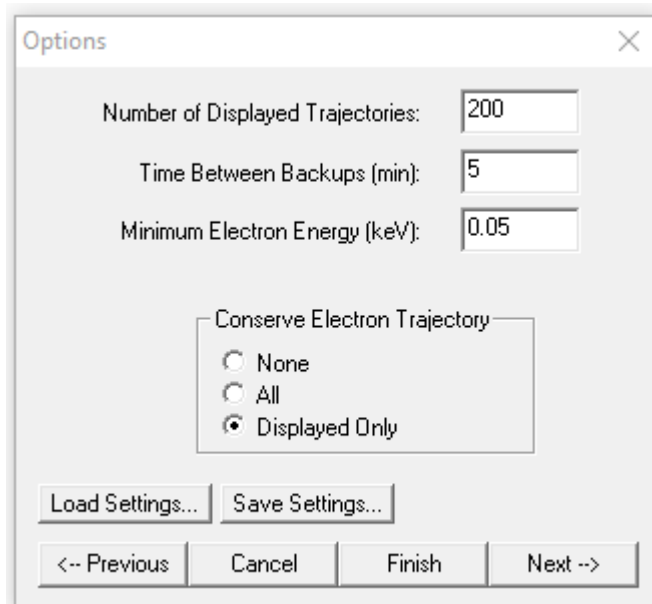
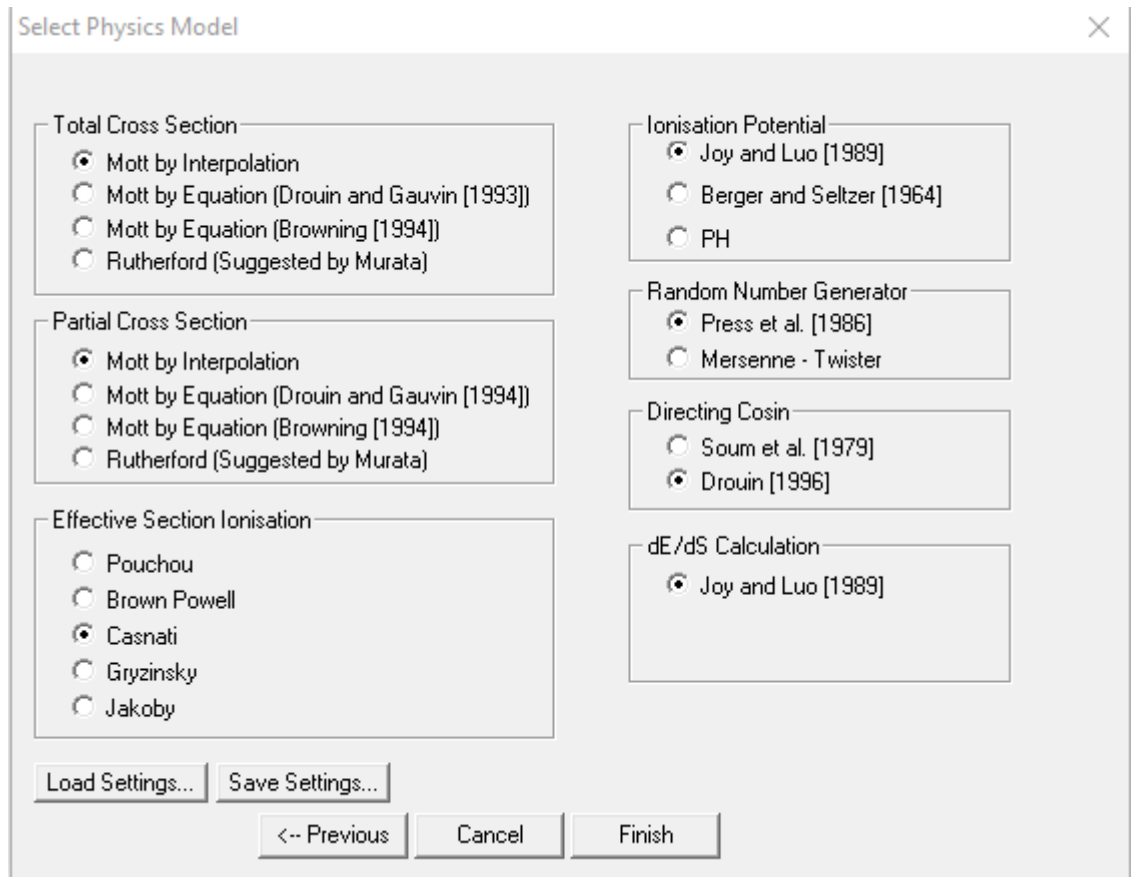


Figure III.6. La boîte de dialogue «options»

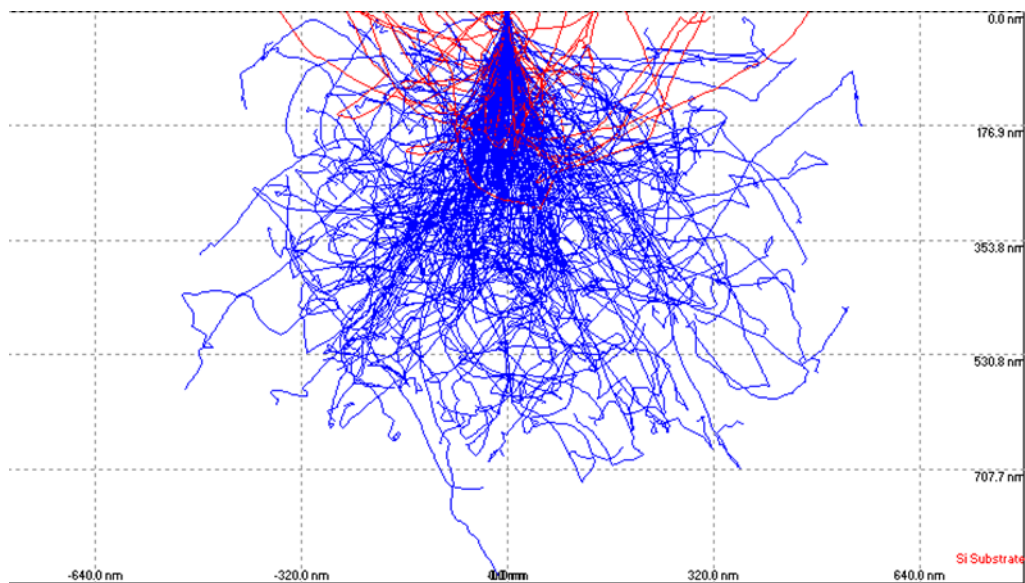
### 7- Le choix du modèle physique

Cette boîte de dialogue «**Select physics model**» vous permettra de choisir les modèles physiques de calculs. Si vous ne savez pas quel modèle fait quoi, passez à l'étape suivante



**Figure III.7 :** la boîte de «Select physics model»

Finalement appuyez sur **FINISH** lorsque votre simulation est prête à être calculée, une boîte de dialogue sera afficher sur l'écran appuyez sur **YES** si vous souhaitez commencer la simulation sinon appuyez sur **NO**.



**Figure III.8.** L'fin de simulation des trajectoires des électrons

### III.3. Condition de simulation

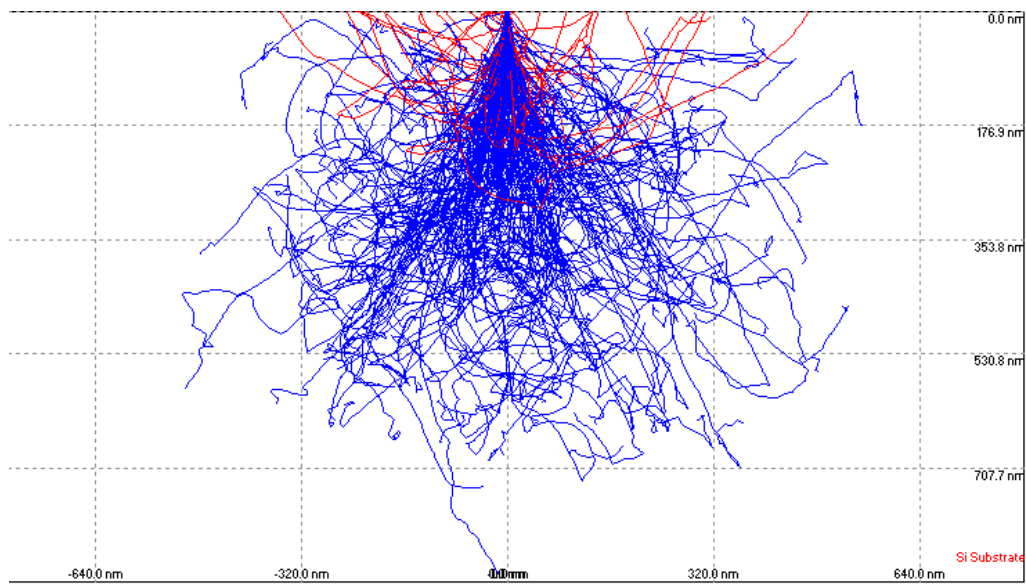
Dans notre travaille, nous allons faire des calculs avec :

- 20000 électrons incidents.
- L'énergie des électrons est 8 KeV dans notre simulation.
- Les cible choisi est toujours silicium (Si) et Arsenic de galium (GaAs).
- L'angle d'incidence est  $0^0$  (la profondeur de pénétration de la trajectoire est maximale et le volume d'interaction est symétrique).
- L'épaisseur des cibles est 5000 nm.
- Le rayon du faisceau d'électron est 4 nm.
- Le choix de différents modèles physiques est effectué comme suit :
  - ✓ La section efficace différentielle élastique « mott par interpolation ».
  - ✓ La section efficace totale élastique : « mott par interpolation ».
  - ✓ La section efficace d'ionisation : « Castani ».
  - ✓ Le potentiel d'ionisation « Joy et Luo ».

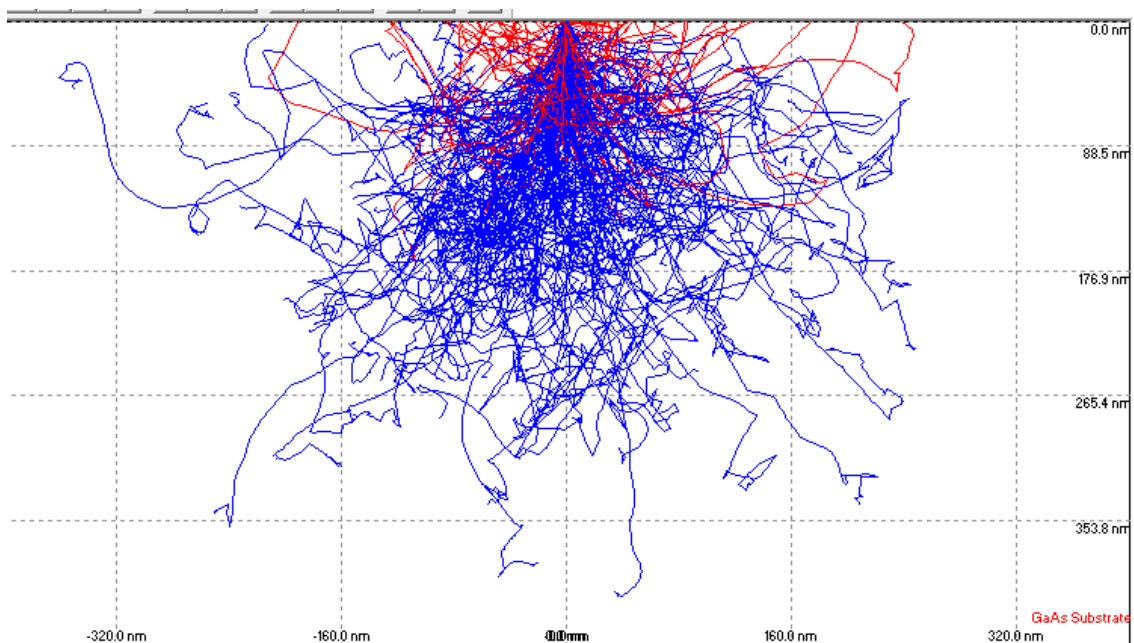
### III.4. Résultats et discussions

#### III.4.1. La distribution des électrons dans les cible Si et GaAs

Le logiciel commence son calcul numérique et montre les trajectoires des électrons aléatoires prises par les différent électrons dans le matériau Si et le matériau GaAs comme montré sur les figures (III.9 et III.10)



**Figure III.9 :** Trajectoire des électrons d'énergie 8 KeV dans la cible Si (5000nm)



**Figure III.10 :** Trajectoire des électrons d'énergie 8 KeV dans la cible GaAs (5000nm)

D'après les figures (III.9 et III.10) on constate que :

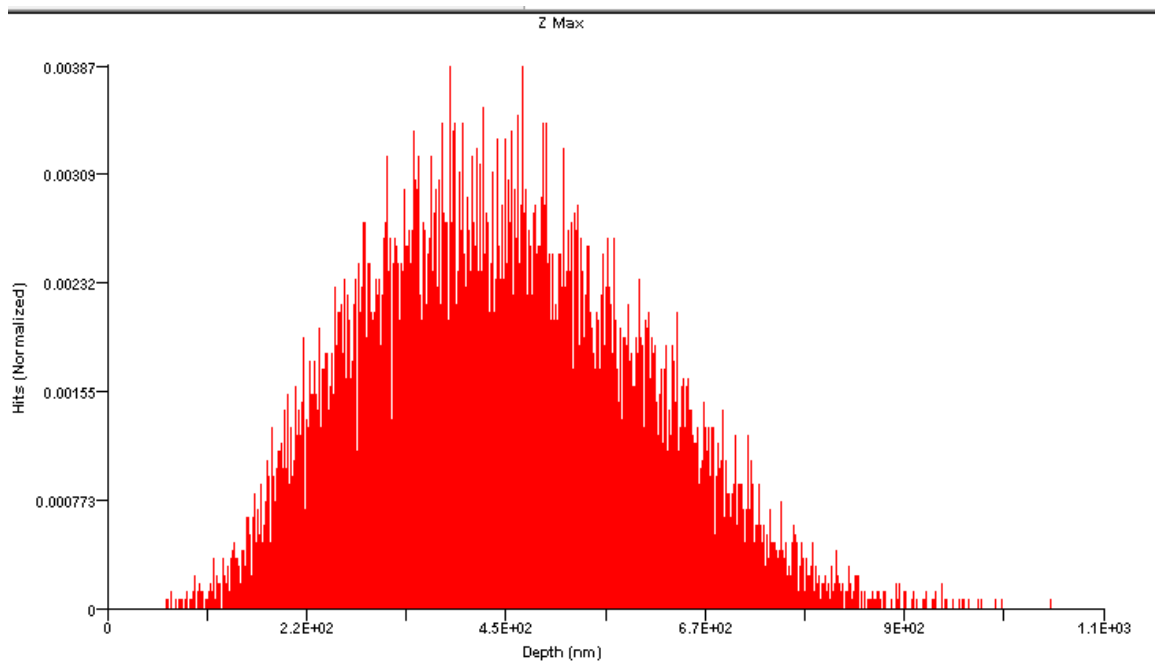
Les trajectoires des électrons s'arrêtent à une profondeur maximale d'environ  $R_e$  (700-800) nm de la surface irradiée pour la cible de Si et pour la cible GaAs on trouve que la profondeur de pénétration maximale des électrons est d'environ  $R_e$  (350-450) nm

### ***Chapitre III : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO***

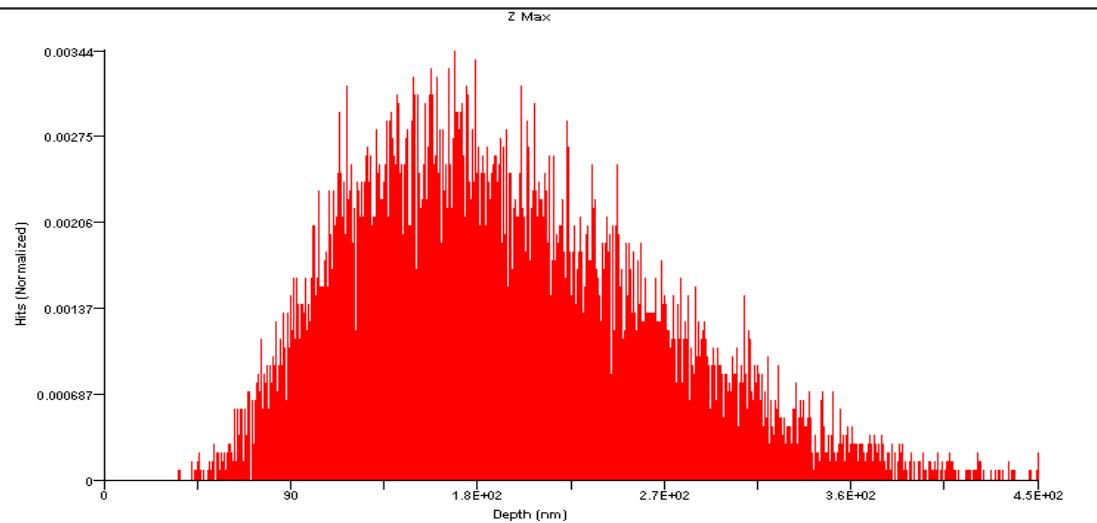
- Cette différence entre les volumes d'interaction du Si et de GaAs est due à la différence de numéro atomique  $Z$  et la densité  $\rho$  des deux matériaux qui jouent un grand rôle dans la relation de parcours électronique comme nous avons vu au (chapitre 01)
- Les électrons pénétrant dans la cible GaAs perdent leur énergie à cause des chocs successifs avec les atomes cibles et s'arrêtent rapidement à une profondeur moins que celle dans la cible Si.
- Plus le numéro atomique de la cible sera élevé, plus la cible subira de collisions (varie selon  $Z^2$ ) et plus la particule s'arrêtera rapidement dans le cristal [3]

Pour mieux visualiser la redistribution des figures (III.9 et III.10), nous reportons sur les deux figures (III.11 et III.12) Distribution normalisée des électrons en fonction de la profondeur pour les deux cibles Si et GaAs respectivement.

Les deux figures montrent que la distribution des électrons dans les deux matériaux est gaussienne centrée à 420 nm pour Si et à 180 nm pour GaAs. La pénétration maximale des électrons dans les cibles Si et GaAs sont 900 nm et 450 nm respectivement.

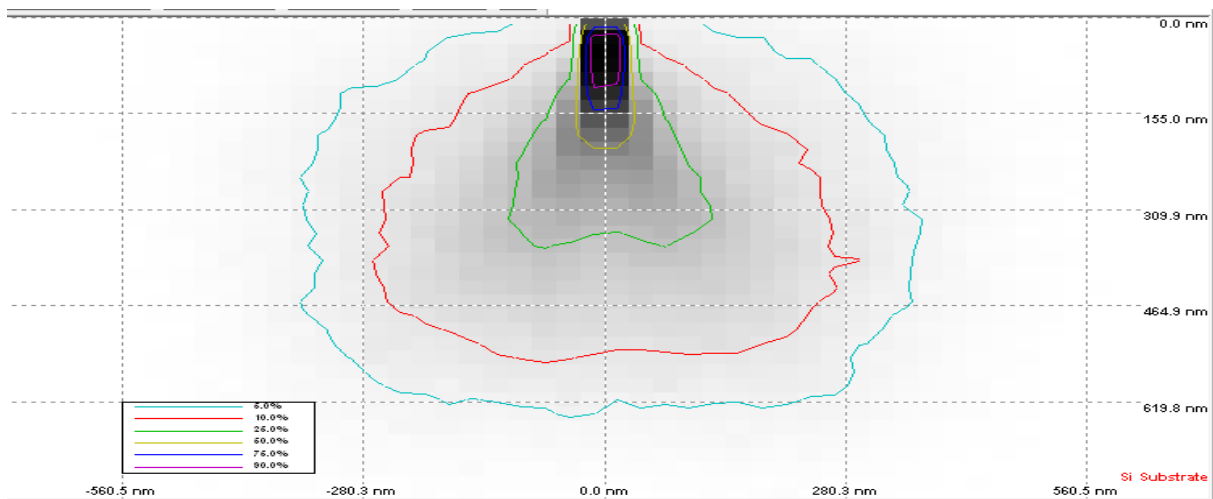


**Figure III.11 :** Distribution normalisée des électrons dans la cible Si en fonction de la profondeur.

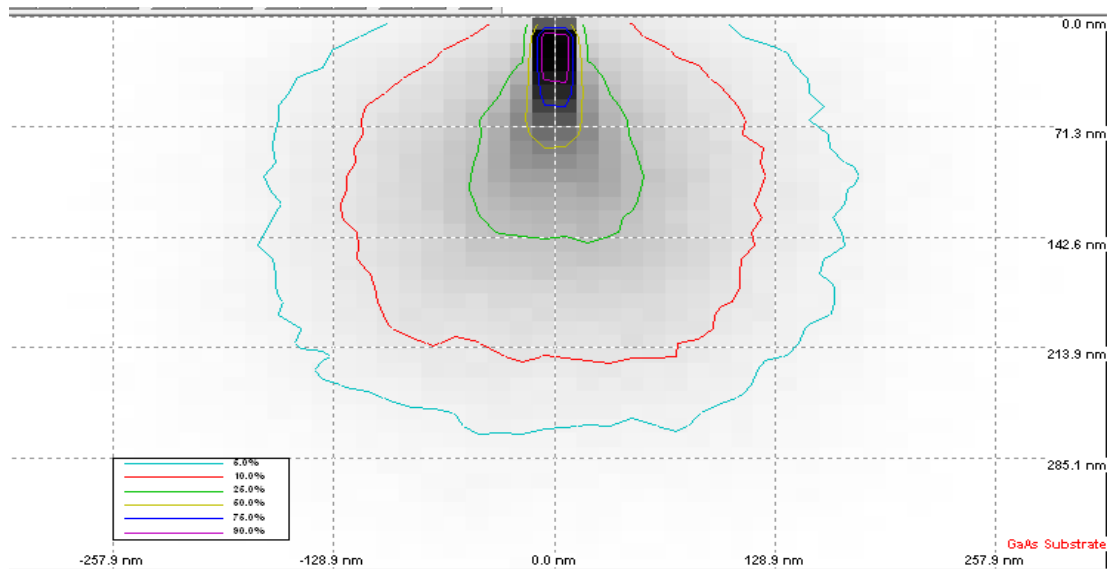


**Figure III.12 :** Distribution normalisée des électrons dans la cible GaAs en fonction de la profondeur.

La figure III.13 et la figure III.14 montre la répartition en pourcentage des électrons bombardant la surface des cibles Si et GaAs respectivement à une incidence normale. Cette répartition forme la poire d'interaction rayonnement électronique –matière. A l'énergie de 08 keV représentant l'énergie cinétique du faisceau d'électrons, on voit que les principales parties de ces électrons sont localisées sur les profondeurs près de la surface du matériau en particulier pour GaAs, où les électrons pénètrent dans la cible à une profondeur inférieure à celle du silicium.



**Figure III.13 :** Répartition des électrons dans la poire d'interaction électrons-matière pour Si.



**Figure III.14 :** Répartition des électrons dans la poire d'interaction électrons-matière pour GaAs.

#### **III.4.2. La distribution des électrons rétrodiffusés**

Le bombardement d'un semi-conducteur par un faisceau d'électrons donne naissance à divers phénomènes. D'un point de vue global on peut les diviser en deux volets, des dispersions élastiques et d'autres inélastiques [4]. La diffusion ou la dispersion élastique des électrons par les atomes donne naissance à des électrons rétrodiffusés, où les électrons changent de direction sans que leur énergie change.

Logiciel Casino 2.51 permet de simulé la Distribution normalisé des électrons rétrodiffusés en profondeur des cibles Si et GaAs Comme décrit ci-dessous sur les figure III.15 et III.16 respectivement D'après ces figures :

Pour la cible Si :

- ✓ la distribution des électrons rétrodiffusés est quasi-gaussien centré a une profondeur environ de 120 nm
- ✓ les électrons rétrodiffusés sont positionné à une profondeur maximale environ de 420 nm

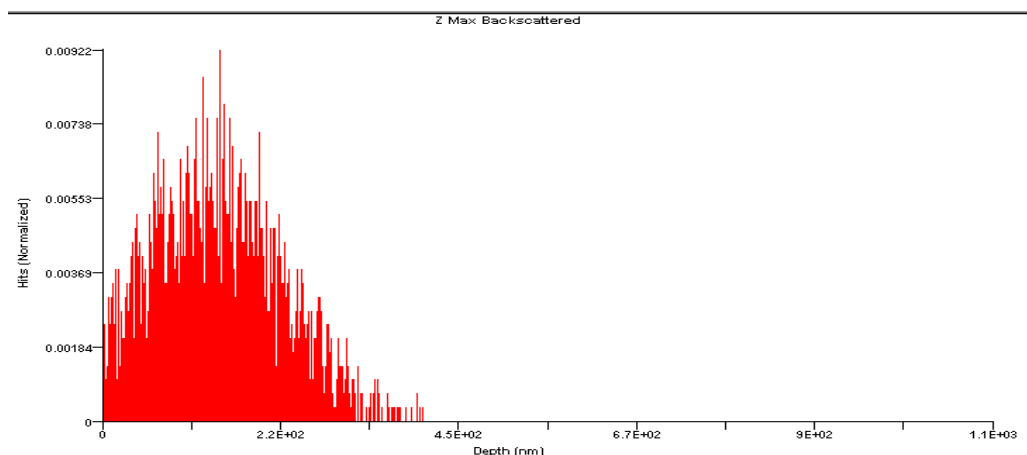
Pour la cible GaAs :

- ✓ la distribution des électrons rétrodiffusés est quasi-gaussien centré a une profondeur environ de 50 nm
- ✓ les électrons rétrodiffusés sont positionné à une profondeur maximale environ de 180 nm

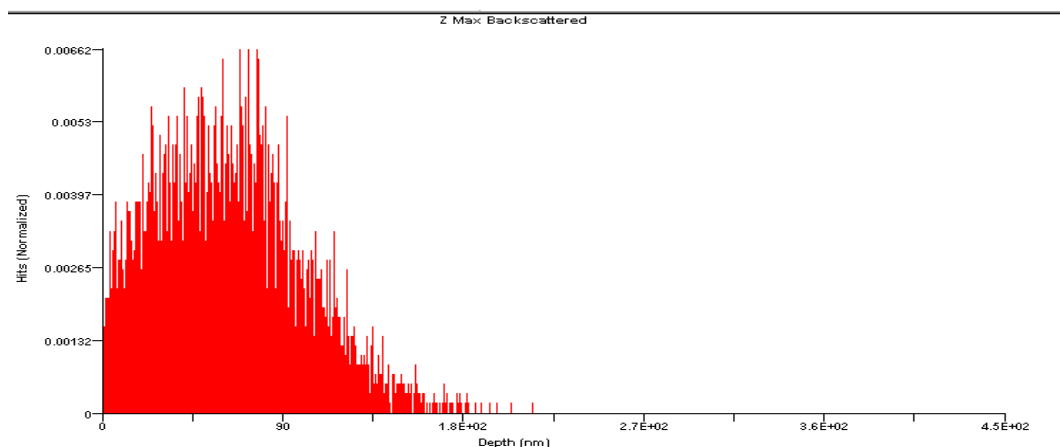
### ***Chapitre III : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO***

À partir des résultats obtenus ci-dessus et des figures suivant on déduit qu'une partie des électrons primaires qui pénètrent dans la cible perdent son énergie cinétique à cause des collisions élastique avec la cible qui donne naissance à des électrons rétrodiffusés

- ✓ La concentration des électrons rétrodiffusés dans la cible Si est plus grand que celle à la cible GaAs

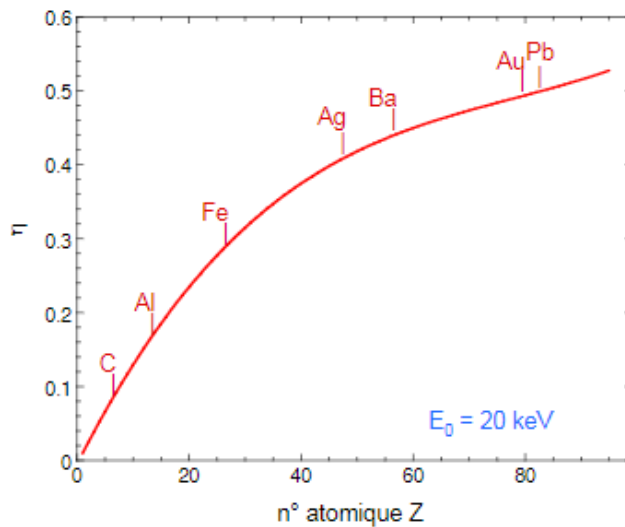


**Figure III.15 :** Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés dans la cible Si en fonction de la profondeur.



**Figure III.16 :** Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés dans la cible GaAs

Les coefficients de rétrodiffusion  $\eta$  des électrons pour les deux cible Si et GaAs sont: 0.140400 et 0.322500 respectivement ce qui est en bon accord avec le résultat expérimental du littérateur (voire figure III.17)

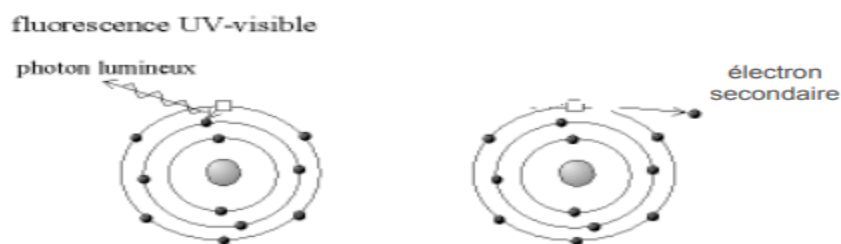


Le coefficient de rétrodiffusion augmente avec le numéro atomique

**Figure III.17 :** Variation du coefficient de rétrodiffusion en fonction du numéro atomique Z [5]

### III.4.3. Phénomène de Cathodoluminescence (CL)

L'interaction entre les électrons primaires et les atomes cible de l'échantillon provoque l'émission des photons lumineux (la gamme s'étend de l'U.V à l'I.R) résultant a des transitions des électrons de la cible entre les bands d'énergies [6]  
Les rayons émis (la gamme s'étend de l'U.V à l'I.R) s'appelés Les rayons de Cathodoluminescence (figure III. 18).

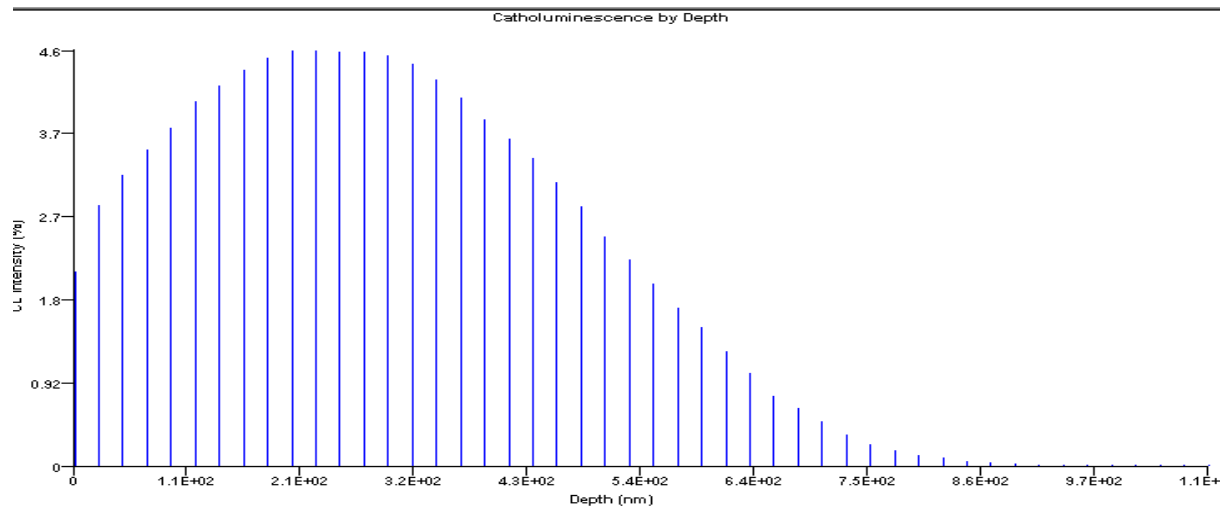


**Figure III.18:** les phénomènes de Cathodoluminescence [7]

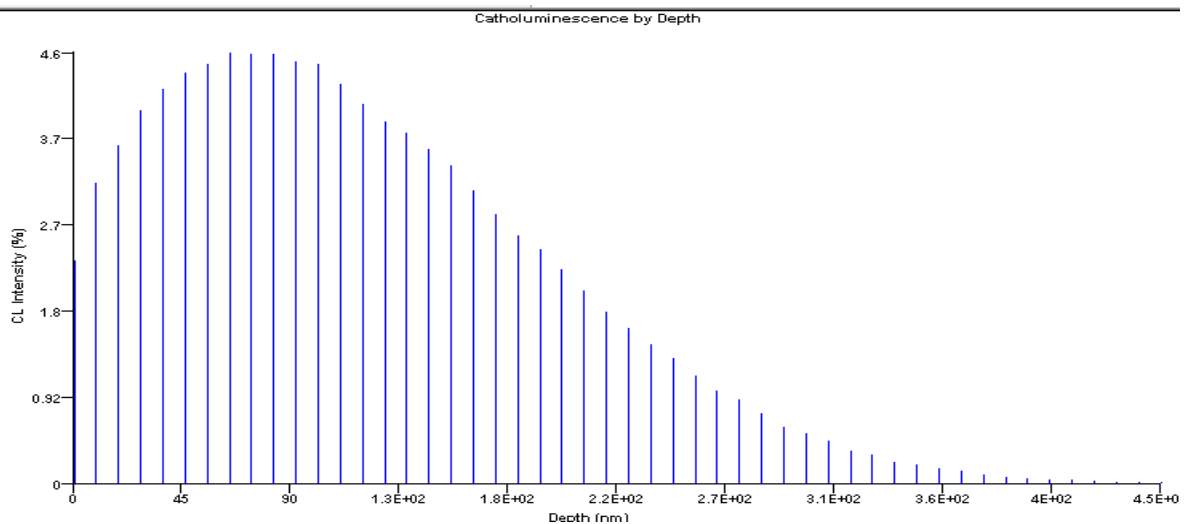
- ❖ Pour la cible Si : la distribution des photons émis par les atomes de cible est gaussien centré a une profondeur 260 nm qui corresponde au une proportion maximale d'intensité (4.6%)

### ***Chapitre III : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO***

- ❖ *Pour la cible GaAs:* la distribution des photons émis par les atomes de cible est gaussien centré a une profondeur 70 nm qui correspondre au une proportion maximale d'intensité (4.6 %)
- ✓ La différence des intensités émis des photons CL dans GaAs et Si est due a la différence de l'énergie de gap  $E_g$  talque :  $E_g(\text{GaAs}) > E_g(\text{Si})$ , mais la distribution des intensités de ces photons en profondeur est plus grande pour Si car l'électron pénètre plus profondément dans cette cible que GaAs.



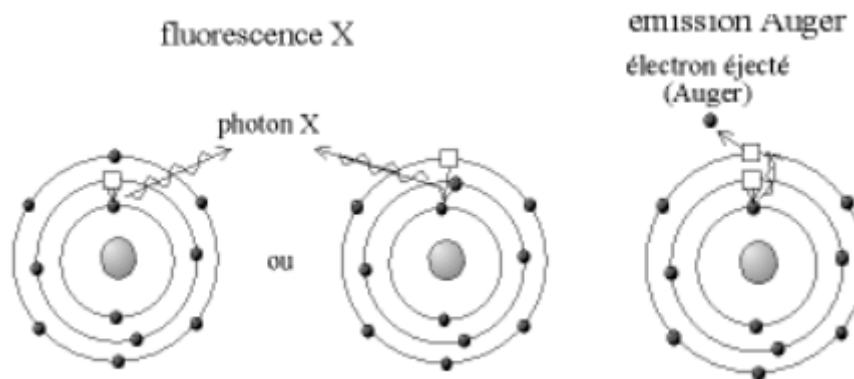
**Figure III.19 :** Les variations de l'intensité CL (%) émis par Si en fonction de la profondeur



**Figure III. 20:** Les variations de l'intensité CL (%) émis par GaAs en fonction de la profondeur

**III.4.4. Production de RX par les électrons sur la surface de l'échantillon**

Un électron ayant une énergie cinétique initiale  $E_0$  qui heurte (interagit avec) un des atomes de la cible. L'électron peut perdre une énergie à  $E$ , qui peut se traduire par l'émission d'un photon de rayon X qui rayonne à partir du site de la collision. (Il y a très peu d'énergie transférée au recul de l'atome en raison de la masse relativement élevée de ce dernier, on peut donc la négliger) ce spectre continu de rayons X est appelé le rayonnement de freinage (figure III.21).

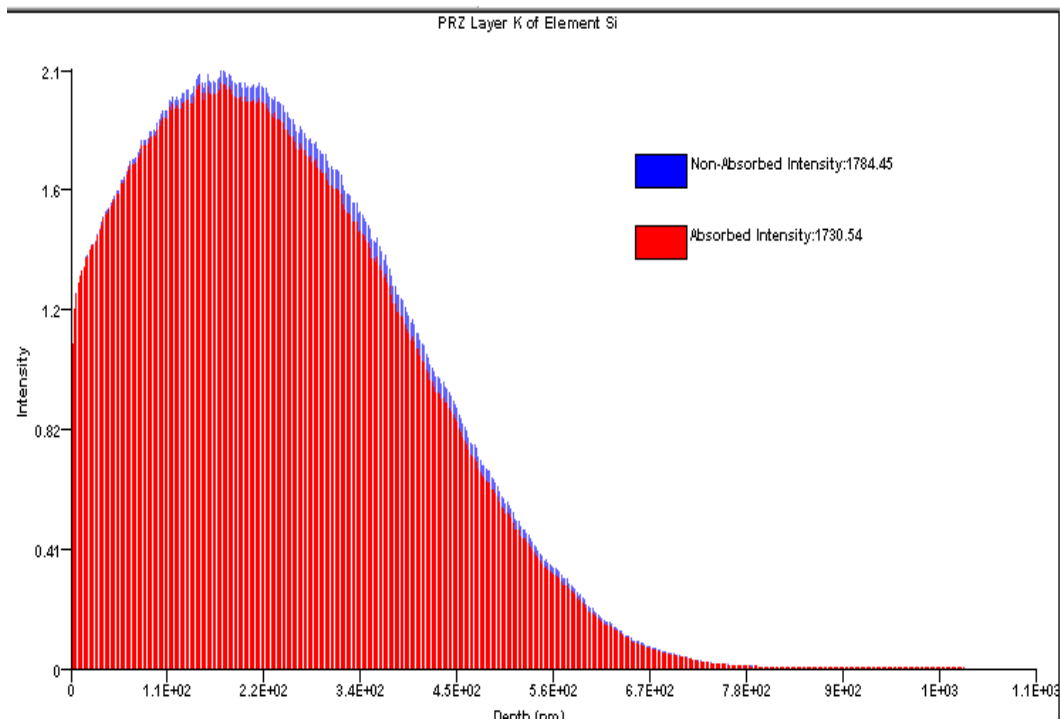


**Figure 21:** les phénomènes lie a l'émission des rayon X [7]

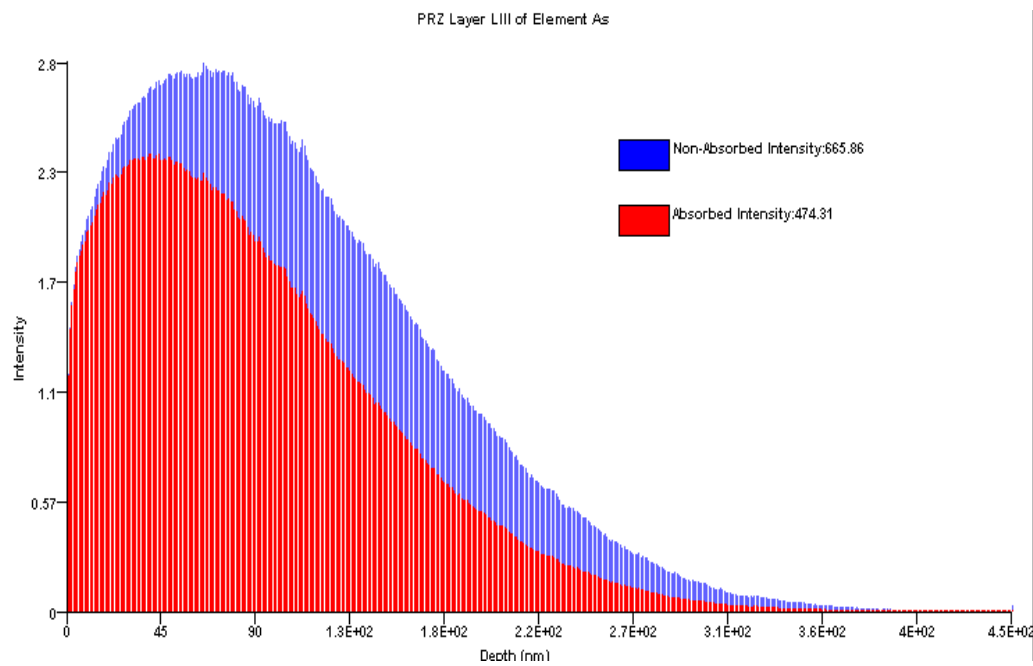
Apparemment dans le logiciel Casino V2.42 on utilise une terminologie non uniforme pour décrire la génération et l'émission des rayons X. Les rayons X générés qui ne

s'échappent pas de l'échantillon (normalement appelés générés) sont appelés "**Non-absorbed**", et les rayons X qui s'échappent de l'échantillon et atteignent le détecteur (normalement appelés détectées ou émis) sont appelé "**Absorbed**".

Sur les figure (III.22 et III.23 et III.24) Nous avons relevé les variations des intensités "**absorbed**" et "**non absorbées**" des rayons X produits par le faisceau des électrons tombant sur les deux matériaux Si et GaAs à une énergie cinétique 08 KeV et émis par chacun des trois atomes constituant à savoir le silicium Si; le gallium Ga et l'arsenic As en fonction de la profondeur de pénétration.



**Figure III.22.:** variation des intensités RX émis par l'atome Si



**Figure III.23 :** Variation des intensités RX émis par l'atome d'arsenic Ga

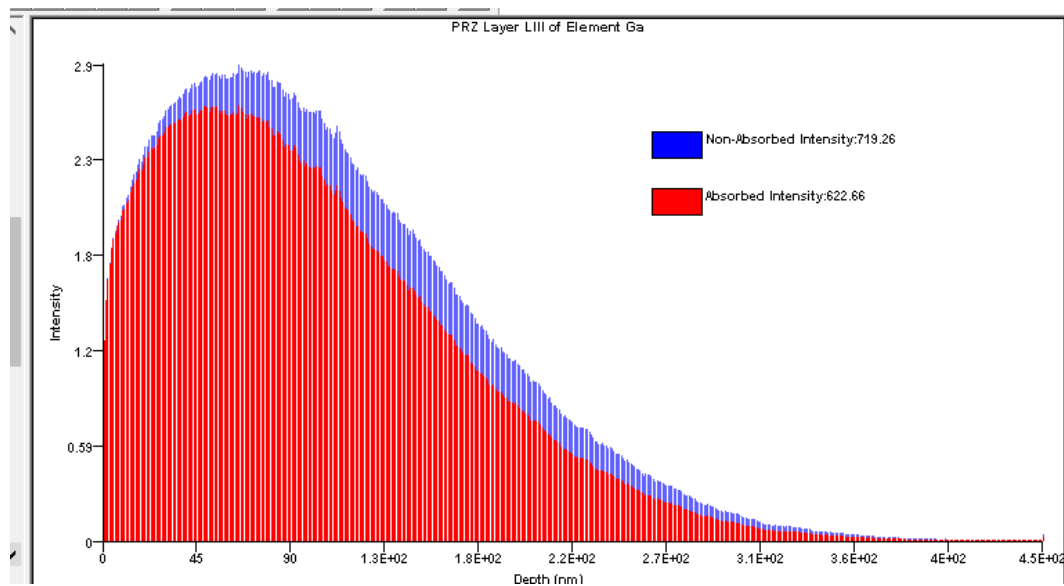


Figure III.24 : variation des intensités RX émis par l'atome d'arsenic As

### Analyse des courbes

On remarque que les trois courbes ont la forme gaussienne dans les trois cas (Si, Ga et As) sachant que les intensités maximales de ces rayons sont situées à des profondeurs des collisions successives maximales :

**Si : 180nm**

**Ga : 75nm**

**As : 75nm**

On sait que les rayons X se produisent par deux méthodes soit par un rayonnement de fluorescence qui caractérise chaque élément chimique par une valeur précise, il peut avoir lieu quand un électron incident expulse un électron atomique. Il se produit alors un rayonnement électronique, un électron d'une couche supérieure, prenant sa place. Durant ce rayonnement un photon X d'énergie caractéristique de la transition est émis, et égal à la différence d'énergie des deux niveaux mis en jeu. Ou bien par un rayonnement de freinage qu'il se produit quand un électron incident approche de noyau d'un atome de la cible qui le dévie de fait de sa charge positive qui l'attire, donc il est ralenti. L'énergie de freinage se dégage sous forme d'un photon X

Les rayons X résultant de ces interactions peuvent interagir avec les atomes de la cible par trois types de mécanisme : la diffusion Rayleigh, la diffusion Compton et

### ***Chapitre III : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO***

---

l'effet photoélectrique, tel que une partie de ces rayons sera absorbée et l'autre partie n'est pas absorbée. Sachant que le processus d'absorption est effectué en fonction des niveaux d'énergie des atomes c'est-à-dire : si l'énergie d'un photon X est égale à la différence entre deux niveaux d'énergie il sera absorbé sinon va émis hors de la cible.

L'énergie de  $8 \text{ KeV}$  peut arracher la série K de l'élément Si mais insuffisant pour arracher le même série pour les éléments Ga et As, c'est pour ça on trouve que les électrons arrachant pour les deux derniers éléments sont les électrons de la série LIII puisque l'énergie minimale pour arracher les séries dans chaque élément augmentent par l'augmentation de numéro atomique de même élément

Comme les électrons incidents ( $8 \text{ KeV}$ ) peuvent arracher les électrons de la couche K pour l'atome Si et de la couche L pour les atomes Ga et As, c'est-à-dire l'intégrale de la fonction de distribution des rayons X en profondeur est plus grande pour la cible Si. Parce que la transition des électrons de la couche externe vers la couche K provoqué l'émission d'une grande quantité des rayonnements par contre la transition électronique entre les couches externe et la couche L va produire des rayonnements X en profondeur avec faible quantité par rapport à l'autre transition (vers la couche K)

### ***Chapitre III : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO***

---

#### **Conclusion**

Dans ce chapitre III ; il a été question de faire le point sur les interactions d'un faisceau d'électrons avec les matériaux choisis tel que GaAs et Si, nous enregistrons les différentes courbes des différents phénomènes résultant (distribution et émission) par CASINO lors de son interaction avec le faisceau des électrons incidents et nous avons constaté que ce processus de simulation réalisé avec le logiciel Casino répond au mieux à la théorie et aux résultats expérimentaux sur les rayonnements X et les effets du nombre atomique ou bien la densité des cibles sur les phénomènes obtenus .

### **Conclusion générale**

L'objectif de cet mémoire est d'étudier les phénomènes résultantes de l'interaction ion-matière telle que « l'ionisation, excitation... » en utilisant la méthode de Monte Carlo qui est un outil utile permettant de résoudre les problèmes liés aux variables aléatoires comme les trajectoires des ions et les électrons dans les substrats solides d'un certain semi-conducteur. Cette méthode consiste à simuler les collisions successives entre les deux espèces pour pouvoir estimer l'emplacement des ions implantés et les déplacements des atomes de la cible. Par cette simulation nous avons pu prévoir plusieurs phénomènes : distribution des ions implantés, distribution des défauts générés (lacunes, phonons.....).

Une telle étude est assurée par les deux logiciels SRIM et CASINO qu'ils sont déjà décrits dans les chapitres précédents, elle est basée sur l'analyse des courbes et des tableaux qui l'on obtient par les deux logiciels. Nous avons abouti à plusieurs résultats. La première constatation, nous a conduits à dire que l'évolution du pouvoir d'arrêt électronique est différent que celui relative au pouvoir d'arrêt nucléaire. Notons que l'interaction inélastique ne produit pas directement le déplacement d'atome par contre l'interaction élastique peut entraîner une cascade de chocs secondaire pouvant induire des déplacements d'atomes dans le matériau cible.

En outre la redistribution finale de tous les ions est sous forme d'une poire. Le processus de perte d'énergie des ions projetés et les atomes cible se traduit par les phénomènes de collisions se progressent jusqu'à épuisement de l'énergie incidente des ions primaire. L'évolution de l'énergie transférée aux atomes de reculs en fonction de la profondeur de la cible a une forme d'une cloche qui suit la forme gaussienne.

Ces rôles ont pour objet de faire le point sur l'interaction rayonnement-matière et qui sont la base des différentes techniques et applications très répandues en science et en technologie nucléaire.

### **Résumé**

La méthode de Monte Carlo est un outil efficace pour la simulation des trajectoires aléatoires des ions et des électrons lors des bombardements de la surface de composés semi-conducteurs par des faisceaux d'ions ou d'électrons. Après un rappel théorique décrivant la technique de Monte Carlo relative au bombardement ionique et électronique, on a utilisé des logiciels SRIM et CASINO pour simuler respectivement l'interaction ions avec la matière et l'interaction des électrons avec matière. Les résultats obtenus sont donnés sous formes de tableaux et sous formes de courbes relatant les différents phénomènes liés au pouvoir d'arrêt, la distance parcourue des ions dans la matière et les effets de génération de rayon X par les faisceaux des électrons. Les résultats sont comparés avec ceux de l'utilisation des microscopes MEB et du dopage des matériaux semi-conducteurs pour la fabrication des composants électroniques et optoélectronique

### **Abstract**

The Monte Carlo method is an effective tool for the simulation of random trajectories of ions and electrons when the surface of semi-conductor compound were submitted to ions and electron beams bombardment. After a theoretical reminder describing the Monte Carlo technique on the ion and electron bombardment, we use SRIM and Casino program to simulate the interaction respectively with ions in matter and with electron in matter. The results are given as tables and as curves relating the different phenomena related to stopping powers, the distance of ions in matter and the generating of RX effects by electrons beam. The results were compared with TEM microscopy and doping of materials for the manufacturing of electronic and optoelectronic devises.

### **ملخص**

طريقة مونتني كارلو هي أداة فعالة لمحاكاة مسارات عشوائية من الايونات والالكترونات في قذف سطح مركبات أشباه النوافل بواسطة حزمة من الأشعة الأيونية او الالكترونوية بعد تذكير نظري يصف تقنية مونتني كارلو على قذف الايونات والالكترونويات قمنا باستخدام برنامج(نقل وجمع الايونات والمادة) (مونتني كارلو محاكاة مسار الإلكترون في المواد الصلبة) لمحاكاة التفاعل مع المادة على التوالي لمحاكاة التفاعل الايونات مع المادة وتفاعل الالكترونات مع المادة والنتائج التي تم الحصول عليها في جداول ومنحنيات كما قمنا بسرد الظواهر المختلفة المتعلقة بالسلطة المطلقة المسافة بين الايونات والمادة وأثار الأشعة اكس واسطة حزمة من الأشعة الالكترونوية تتم مقارنة النتائج باستخدام المجاهر وتنشط المواد أشباه النوافل لصناعة المكونات الالكترونية والضوئية.

### **Les Références**

#### **Les références du chapitre 1**

- [1] .J. Kelvin, Ninetieth century clouds over the dynamical theory of heat and light, Phil-Mag. 2 (1901) 1.
- [2] ZarkiAbdErazzek «transport dans les semi-conducteurs» thèse de master université larbi Ben m'hidi (Oum ELBouaghi) 2011
- [3] A. Lachgueur, Etude des couches minces de ZnO dopées Simulation des dopages par TRIM (Transport of Ions in Matter), mémoire de Master 2, Université de Tlemcen ,Algérie (2009).
- [4] Mr. Ammari Hocine" Calculs des effets induits par les rayonnements de protons Dans les cristaux semi-conducteurs de type A<sup>III</sup> B<sup>V</sup>", Thèse de MAGISTER, Univ. 08 mai 1945, (2008)
- [5] Abdellatif Nachab, Etudes expérimentales et modalisations Mont Carlo de fond au niveau de la mer, Thèse de doctorat Univ Bordeaux I (1998)
- [6] A.Zoukel, étude des phénomènes d'interaction faisceau d'électron gaz –matière dans un MEB, Thèse Doctorat ,Université LilleI (2013)
- [7] Aloine Selmi L'influence des impuretés sur les coe-cients des transports MEMOIRE DE MASTERE juin 2011
- [8] Aloine Selmi " L'influence des impuretés sur les coe-cients des transports ", MÉMOIRE de MASTER en physique, Univ.TUNIS-EL MANAR (2011)
- [9] J. L. Thobel, Thèse d'ahabitation à diriger des recherches en Sciences Physique, Université de Lille (2000).
- [10] S. Galdin, Thèse de Doctorat, Université de Paris-Sud, Centre d'Orsay(1992).
- [12]V.V. Balashov Interaction of particles and radiation with matter, Springer, (1997).

## *Références Bibliographiques*

---

- [13] Frederik Faure, interaction entre le rayonnement et la matière, Notes de cours, Université Joseph Fourier (2003)
- [14] ICRU. Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles. ICRU report. International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, Md., U.S.A, 1993.
- [15] N. Bohr, Kgl. Danske Videnskab. Mat-Fys. Medd., 18(8), (1948).
- [16] Balanzat E., Bouffard S., Solid State Phenomena, 31-32 (1993) 7.
- [17] N. Belabed, Thèse de Magister, Université Mentouri de Constantine, Algérie
- [18] Lindhard J., Scharff M. and Shiott H. E., Mat. Phys. Medd., 33 (1963), 14, Range concepts and heavy ion ranges.
- [19] Y. Sayad, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 2003
- [20] A. Zoukel, étude des phénomènes d'interaction faisceau d'électron gaz –matière dans un MEB, Thèse Doctorat, Université Lille I (2013)
- [21] M. Hadeff, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 1999
- [22] K. Guergouri, Thèse d'état, Université Paris 6, 1987
- [23] Frederik Faure, interaction entre le rayonnement et la matière, Notes de cours, Université Joseph Fourier (2003)
- [24] Bencharif Mohamed Fakhri, étude de l'interaction electron-matière par la méthode Monte Carlo application sur le GaAs type P, thèse de Magistère, Université Mentouri Constantine (2005)
- [25] B.G. Yacobi and D.B. Holt, "Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids", Edition Plenum Press, New York and London, 1990
- [26] S.F. Mao, Y.G. Li, R.G. Zeng, Z.J. Ding, « Electron inelastic scattering and secondary electron emission calculated without the single pole approximation », J. Appl. Phys., **104**, (2008), pp.114907.
- [27] B.G. Yacobi, D.B. Holt, J. Appl. Phys. 59(4) R1 1986
- [28] K. Kanaya, S. Okayama, J. Phys. D: Appl. Phys. 5, pp. 43, 197

### **Les références du chapitre 2**

- [1] K. Antoshchenkova, Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique, Paris (2010).

## *Références Bibliographiques*

---

- [2] N.Bettou, Application de la méthode de Monte Carlo à l'étude de l'interaction rayonnement-matière codes TRIM et CASINO, thèse Master université de Khemis Miliana, 2015/2016.
- [3] J. Kelvin, Ninetieth century clouds over the dynamical theory of heat and light, Phil-Mag. 2 (1901) 1.
- [4] J. F. Ziegler, J. Biersack, and U. Littmark, \_The stopping and range of ions in matter, vol. 1, 1, Pergamon Press, New York, 1985
- [5] J. Ziegler, J. Biersack, and M. Ziegler, \_Srim\_the stopping and range of ions in matter, ion implantation press\_, 2008
- [6] H. Faik-Etienne, Étude de l'implantation ionique dans les miroirs multicouches Mo/Si : application aux optiques diffractives, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, 2005
- [7] J. Lindard, M. Scharff, H.E. Schiff and K. Dan, Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 33 (1963) 1-39.
- [8] N. Belabed, Thèse de Magister, Université Mentouri de Constantine, Algérie 82
- [9] M. Ledra, Thèse de Magister, Université de Constantine, Algérie (1995).
- [10] K. Antoshchenkova, Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique, Paris (2010).
- [11] F. Zeigler, J.P. Beirsack, U. Littman, 1985, The Stopping and Range of IoninSolids, Pergamon Press, New York, version 2013.
- [12]. Lindhard, scharff, Energy Dissipation by Ions in the keV Region, Phy. Rev., 124(1), (1961)..
- [13] K. Antoshchenkova, Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique, Paris (2010).
- [14] H. Bernas, "Materials Science with Ion Beams", Springer Verlag Berlin Heidelberg, (2010).

### **Les références du chapitre 3**

- [1] PAVEL DRYAK, PETR KOVAR, Experimental and MC determination of HPGe detector efficiency in the 40–2754 keV energy range for measuring point source geometry with the source-to-detector distance of 25 cm, Applied Radiation and Isotopes 64 (2006) 1346–1349

## *Références Bibliographiques*

---

- [2] D. Drouin, A.R. Couture, D. Joly, X. Tastet, V. Aimez and R Gauvin, CASINO V2.42,(2007) a fast and easy-to-use modeling tool for scanning microanalysis, Journal Scanning Electron.101,p.4992( version 2013)
- [3] A. Lachgueur, Etude des couches minces de ZnO dopées Simulation des dopages par TRIM (Transport of Ions in Matter), mémoire de Master 2, Université de Tlemcen ,Algérie (2009).
- [4] Frederik Faure, interaction entre le rayonnement et la matière, Notes de cours, Université Joseph Fourier (2003)
- [5] Nicolas Menguy, Polycopié A Interaction rayonnement – Matière, institue minéralogie physique des milieux condensé Paris
- [6] Bencharif Mohamed Fakhri , étude de l'interaction electron-matière par la méthode Monte Carlo application sur le GaAs type P , thèse de Magistère , Université Mentouri Constantine (2005)
- [7] <http://spiralconnect.univ-lyon1.fr/spiral-files/download?mode=inline&data=1420506>

