



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: - NOUAR BAHIA

-BOUDOUAOUR SELMA

Dirigé par: ZOUIOUECHE MOHAMED

Soutenu le 11 / 07/2021

Membres de jury:

KEROUAZ F.Z

Président

KEROUAZ F.Z

Examineur

Dédicace 1

*Je dédie cet événement marquant de ma vie à la
mémoire de ma chère maman, que dieu la protège
et prenne soin d'elle et à toute ma famille*

(la famille Nouar)

Dédicace 2

*Je dédie cet événement marquant de ma vie à la
mémoire de mes chers parents, que dieu la protège
et prenne soin d'elle et à toute ma famille*

(lafamille Boudouaour)

Remerciements

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 reconnaissance à toutes les personnes

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



Table des matières

Table des matières :

Introduction générale	01 - 02
Chapitre I : Notions et principes fondamentaux	
I.1 Introduction	04
I.1.1 Notion fondamentale sur les semi-conducteurs	04
I.1.2 Notions sur l'électron	05
I.2 Interaction des électrons avec la matière	05
I.2.1 Dispersion Elastique et Inélastique	05
• électrons secondaires	06
• électrons rétrodiffusés	07
• Rayon X	07
• électrons absorbés	07
• électrons Auger	07
• électrons transmis	07
• états de surfaces	08
• cathodoluminescence	08
• parcours électronique	08
I.2.3 Energie de formation d'une paire électron-trou	10
I.2.4 phénomènes de recombinaison	10
I.2.5 les processus de recombinaison	10
I.2.5.1 Recombinaison SRH (Schokley-Read-Hall)	10
I.2.5.2 Recombinaison Auger	12
I.2.5.3 Recombinaison Radiative	13
I.2.5.4 Recombinaison en surface	14
I.3 Interaction ion-matière	15
I.3.1 les différents mécanismes d'interaction ion-matière	15
I.3.2 structure de bandes d'énergies	15
I.3.3 propriétés structurales de composé semi-conducteur GaAs, Ge	16
• défaut dans le germanium	16
I.3.4 Interaction des rayonnements ionisants avec la matière	17
I.3.4.1 les différents rayonnements	17
I.3.4.2 Directement ionisant	17
I.3.4.3 Indirectement ionisants	17
I.4 Pouvoir d'arrêt	18
I.4.1 pouvoir d'arrêt nucléaire	18
I.4.2 pouvoir d'arrêt électronique	19

I.5 Simulation de Monte Carlo	20
I.5.1 Historique	20
I.5.2 Efficacité de la méthode de Monte Carlo	20
I.6 Conclusion	22

Chapitre II : Simulation de l'interaction ion –matière par code SRIM

II.1 Introduction	24
II.2-Simulation du processus par les codes TRIM et SRIM	24
II.3. Condition de simulation	26
II.4. Simulation de la distribution d'ions Ar^+ et Kr^+ dans le GaAs	28
II.5. Etude du pouvoir d'arrêt d'ion Krypton dans la cible GaAs	31
• Modification du matériau	33
• Cascade de déplacements	33
II.6 la perte d'énergie par ionisation	34
II.7 la perte d'énergie par phonon	36
• l'évolution de l'énergie absorbée par les atomes de recul	37
II.8 production des lacunes	38
II.9 Etude de pouvoir d'arrêt d'ion Krypton dans la cible de Ge	40
II.10. Simulation de la distribution d'ions Ar^+ et Kr^+ dans le Ge	41
II.11 La perte d'énergie par ionisation	42
II.12 la Perte d'énergie par phonon	44
II.13 Production des lacunes	44
• la Comparaison entre les deux cibles	45
II.14 Conclusion	48

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

III.1 Introduction	50
III.2 présentation du logiciel Casino	50
III.3 comment crée une simulation par casino	51
III.4 présentation de notre travail (condition de simulation)	56
III.5 Résultats et discussion	57
A. La distribution des électrons dans la cible de GaAs et Ge	57
B. La distribution des électrons rétrodiffusés	61
C. Phénomène de Cathodoluminescence (CL)	64
D. Production de RX par les électrons sur la surface de l'échantillon	66
III.6 Conclusion	70

IV Conclusion générale	72
Résumé	74

Listes des figures :

Les figures de chapitre I :

FigureI.1 : la représentation de la diffusion élastique et inélastique	06
FigureI.2 : les effets produits suite au bombardement d'un échantillon par les électrons	08
FigureI.3 : Mécanismes de recombinaison Schokley-Read-Hall (SRH)	11
FigureI.4 : Mécanisme de recombinaison Auger-. L'excès d'énergie issu de la recombinaison peut être transférer à un électron (a) ou a un trou (b)	13
Figure I.5 : Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs	16
Figure I.6 : Energie de formation de V_{Ge} en fonction de niveau de Fermi	17
FigureI.7:les différents types de rayonnements	18
Figure I.8 : relation entre la théorie l'expérience et la simulation	21

Les figures de chapitre II :

Figure II-1 : tableau de bord du code TRIM et SRIM	25
FigureII.2 : Tableau des donnés TRIM pour le bombardement ionique	26
Figure II.3 : Interface du programme TRIM	27
FigureII.4 :Tableau de bord pour le bombardement ionique des ions Ar^+ dans le GaAs	28
Figure II.5 : Tableau de bord pour le bombardement ionique de Kr^+ dans le GaAs	28
Figure II.6 :Tableau des données TRIM pour le bombardement de l'interface de GaAs par les ions de l'argon Ar^+	29
Figure II.7 : Tableau des données TRIM pour le bombardement de l'interface de GaAs par les ions de Kr^+	29
FigureII.8.: Arrangement des ions sur la surface altérée de GaAs	31
Figure II.9:Interface du programme Ion Stopping and Range tables	31
Figure II.10 : simulation des pouvoir d'arrêt nucléaire et électronique des ions Ar^+ dans la cible de GaAs, en fonction de l'énergie incidente des ions	33
FigureII.11 : Cascade de déplacements induite par l'ion projectile	34
Figure II.12 : perte d'énergie pour le phénomène d'ionisation par les ions directs et lesions de recule(a) pour l'Argon (b) pour le krypton	34
FigureII.13 : création des phonons	36 - 37
FigureII.14 : évolution de l'énergie transférée aux atomes de reculs en fonction de la profondeur de la cible GaAs	38
a) Pour les ions Ar^+	
b) Pour les ions Kr^+	

Figure II.15: nombre de défauts créés en fonction de la profondeur de pénétration [2]	39
a) Pour les ions Ar^+	
b) Pour les ions Kr^+	
FigureII.16 : Simulations des pouvoirs d'arrêts des ions Kr^+ dans la cible de Ge.	41
(a)Pour les ions de Ar^+ (b) pour les ions Kr^+	
FigureII.17 : Arrangement des ions sur la surface altérée de Ge	41
FigureII.18. : perte d'énergie pour le phénomène d'ionisation par les ions directs et les ions de recul dans la cible de Ge	42
(a)Pour les ions de Ar^+ (b) pour les ions Kr^+	
FigureII. 19 : création des phonons	44
(a)Pour les ions de Ar^+ (b) pour les ions Kr^+	
Figure II.20 :distribution des lacunes dans la cible de Ge qui crée par les ions	45

Les figures de chapitre III :

Figure III.1 : la boîte de dialogue "Edite layer " de CASINO	51
Figure III.2 : la boîte COMPOSITION EDIT BOX	52
Figure III.3 : la boîte "Microscope and Simulation"	53
Figure III.4 : la boîte de dialogue «Distributions»	54
Figure III.5 : la boîte de dialogue «options»	55
Figure III.6 : la boîte de "ChoosingPhysicalModels"	55
Figure III.7 : l'fin de simulation des trajectoires des électrons	56
Figure III.8 : Trajectoire des électrons d'énergie 20 keV dans la cible GaAs (5000nm)	57
Figure III.8 : Trajectoire des électrons d'énergie 20 keV dans la cible Ge(5000nm)	58
Figure III.9 : Trajectoire des électrons d'énergie 20 keV dans la cible GaAs (5000nm)	58
Figure III.10 : Distribution normalisée des électrons dans la cible Ge en fonction de la profondeur	59
Figure III.11 : Distribution normalisée des électrons dans la cible GaAs en fonction de la profondeur	60
Figure III.12 : Répartition des électrons dans la poire d'interaction électrons-matière pour GaAs	60
Figure III.13 : Répartition des électrons dans la poire d'interaction électrons-matière pour Ge	61
Figure III.14 : Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés dans la cible Ge en fonction de la profondeur	62

Figure III.15 : Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés dans la cible GaAs	63
Figure III.16 :Variation du coefficient de rétrodiffusion en fonction du numéro atomique Z	63
Figure III.17 : les phénomènes de Cathodoluminescence	64
Figure III.18 : les variations de l'intensité CL (%) émis par Ge en fonction de la profondeur	64
Figure III.19 : les variations de l'intensité CL (%) émis par GaAs en fonction de la profondeur	65
Figure 20 : les phénomènes liés à l'émission des rayons X	65
Figure III.21 :variation des intensités RX émis par l'atome d'arsenic As	67
Figure III.22 :variation des intensités RX émis par l'atome d'arsenic Ga	67
Figure III.23 :variation des intensités RX émis par l'atome GaAs	68
Figure III.24 :variation des intensités RX émis par l'atome Ge	68

•**Listes des tableaux :**

les tableaux de chapitre I :

TabI.1 : conductivité électrique des métaux et des semi-conducteurs et des isolants	04
---	----

les tableaux de chapitre II :

TabII.1 : perte d'énergie en pourcentage d'ions Ar^+ dans la cible de GaAs	35
TabII.2 : perte d'énergie en pourcentage d'ions Kr^+ dans la cible de GaAs	35
TabII.3 : perte totale des deux ions dans la cible GaAs	36
TabII.4 : production des lacunes pour chaque ions dans la cible de GaAs	39
TabII.5 : Perte d'énergie en pourcentage d'ions Ar^+ dans la cible de Ge	42
TabII.6 perte d'énergie en pourcentage d'ions Kr^+ dans la cible de Ge	43
TabII.7 :production des lacunes pour chaque ion dans la cible de Ge	45
TabII.8.a.b : les paramètres de distribution dans le Ge et le GaAs	45 – 46
TabII.9.a.b :comparaison entre les deux cibles (GaAs, Ge)	46 - 47

Introduction Générale

Introduction Générale

Notre travail consiste à étudier la méthode de Monte Carlo, en vue de simuler les trajectoires des particules (électrons, ions) dans la matière, les cibles choisies sont des semi-conducteurs, tels que le germanium Ge et l'arséniure de Galium GaAs très utilisés en énergie électronique et en optoélectronique, les techniques de Monte Carlo sont couramment utilisées en physique des particules

La simulation probabilistes permettent d'estimer la forme d'un signal ou la sensibilité d'un détecteur La comparaison des données mesurées à ces simulations permettre de mettre en évidence des caractéristiques semblables, à celle des caractéristique réalisées par des systèmes de mesure expérimentaux[1] Plusieurs modèles de simulation Monté Carlo sont alors proposées et utilisés à des fins spécifiques, basées sur différente approches de traitement des diffusions (élastiques et inélastiques) des électrons [2] Le véritable développement des méthodes de Monte-Carlo s'est effectué sous l'impulsion de John Von Neumann et StanislawUlam, Notamment lors de la seconde guerre mondiale et des recherches sur la fabrication de la bombe atomique ,ils ont utilisé ces méthodes probabilistes pour résoudre des équations aux dérivées partielles dans le cadre de la Monte-Carlo N-Particule transport (MCNP)[3]

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, 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, c'est le phénomène de rétrodiffusion où il est utilisé dans le Microscopes à Balayage Electronique très connu sous abréviation (MEB),Cette simulation va se faire avec le logiciel Casino élaboré par le savant canadien D. Drouin et al.[2,4]Le bombardement d'une surface solide par des ions primaires s'accompagne d'uneséquence d'interactions au cours desquelles les ions primaires transfèrent tout ou une partie deleur énergie, L'ion incident peut parcourir dans le solide une certaine distance dissiper, sonénergie avant d'être finalement arrêtée ou éjectée du solide, nous allons discuter dans notretravail les deux types d'interactions, qui sont mises en jeu entre les ions énergétiques et lesatomes du solide, et qui provoquent le ralentissement des ions en utilisant le logiciel TRIM (Transport and Range of Ions in Mater) et SRIM (Stopping and Range of Ions in Mater)[2 ,5] élaborés par le savant allemand James Ziegler.

Introduction générale

Dans le premier chapitre nous donnons un rappel sur la théorie de la méthode de Monte Carlo concernant l'interaction de la matière avec les particules chargées et en particulier avec les électrons et les ions, Les formules fondamentales relatives aux deux interactions électrons-matière et ions-matière seront rappelées. Dans le 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 le Ge [3] Le troisième chapitre sera consacré au logiciel caspio qui en plus de la description de son emploi, nous enregistrons les différentes courbes de rayons 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 Ge et GaAs.[5]

Chapitre I

I.1 Introduction

L'existence d'un petit nombre d'éléments fondamentaux présents au coeur de toutes choses matérielles, est longtemps restée une hypothèse d'ordre philosophique dont les premières traces remontent à la Grèce antique (Anaximandre, Empédocle, Démocrite...). Il aura finalement fallu attendre plus de deux millénaires et la découverte des atomes (dont Mendeleïev établit une classification dès 1869) pour que cette conjecture se matérialise en un fait scientifiquement établi [1].

Mais le supposé caractère élémentaire des atomes a rapidement volé en éclats avec les découvertes successives du noyau (Rutherford, 1911), des protons (Rutherford, 1919) et neutrons (Chadwick 1, 1932) et enfin des quarks qui y sont confinés. Ces derniers ont été indirectement observés en 1968 lors d'expériences de collisions électron-proton au SLAC2 [2] où des diffusions dites « profondément inélastiques » n'ont pu être interprétées que par le recul d'une particule plus petite présente au sein même du proton [3]. Cette découverte suivie de celle du J/ψ en 1974 [4].

I.1.1 Notion fondamentale 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 B_v et bande de conduction B_c [5].

Du point de vue de leur conductivité électrique (σ), les semi-conducteurs se situent entre les métaux et les isolants, un exemple typique sur les valeurs de la conductivité rassemblées dans le tableau I.1 ces valeurs peuvent changer suivant [5] :

- nature et quantité des impuretés
- température
- champ électrique ou excitations par des photons

Tableau I.1 : Conductivité électrique des métaux des semi-conducteurs et des isolants

Métaux	$\sigma=10^6$ a $10^4 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$
semi-conducteurs	$\sigma=10^2$ a $10^{-10} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$
Isolants	$\sigma=10^{-14}$ a $10^{-16} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$

I.1.2. Notions sur l'électron

Electron c'est une 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 [6].

La masse des électrons 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 contiennent un moment magnétique qui est égal à $0,92827 \times 10^{-23}$ A.m², 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 c'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 [7].

I.2-Interaction des électrons avec la matière :

L'interaction é-matière donne la possibilité de déterminer les informations quantitatives au propos des paramètres électriques et optiques des matériaux, tel que l'interaction due à la force électrostatique qui est donné par :

$$F_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qq'}{r^2} \dots\dots\dots(1)$$

C'est le mécanisme le plus rencontrées au cours des interactions entre particules chargées et le milieu biologiques [8].

I.2.1. Dispersion Elastique et Inélastique

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 parties, des dispersions élastiques et d'autres inélastiques [9].(Voire figure (I.1)).

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, c'est le phénomène de rétrodiffusion où il est utilisé dans le MEB pour le contraste du nombre atomique et les effets de diffraction.

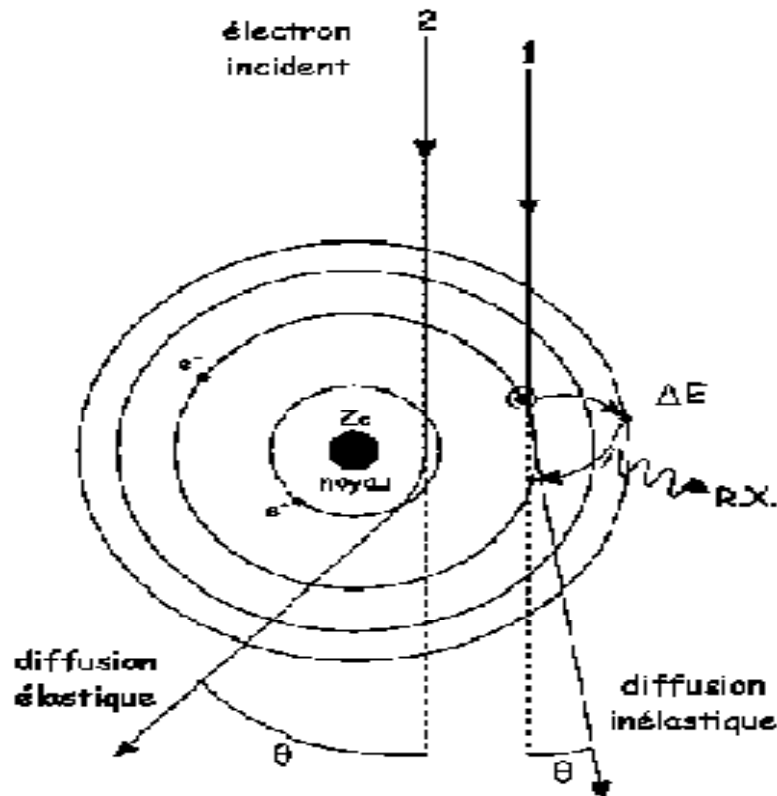


Figure I.1 : la représentation de la diffusion élastique et inélastique.

Les collisions inélastiques des électrons d'atomes cibles, qui sont soit éjectés de leurs orbites, avec une perte d'énergie et un faible transfert de vitesse, provoque une dispersion inélastique qui donne la naissance d'une grande variété de signaux de processus utiles (Figure I.2) on cite :

❖ **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 10nm de la surface). Donc, ces électrons donnent des informations spécifiques dans la zone d'interaction avec la matière [10].

❖ 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.

❖ 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 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 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 [10].

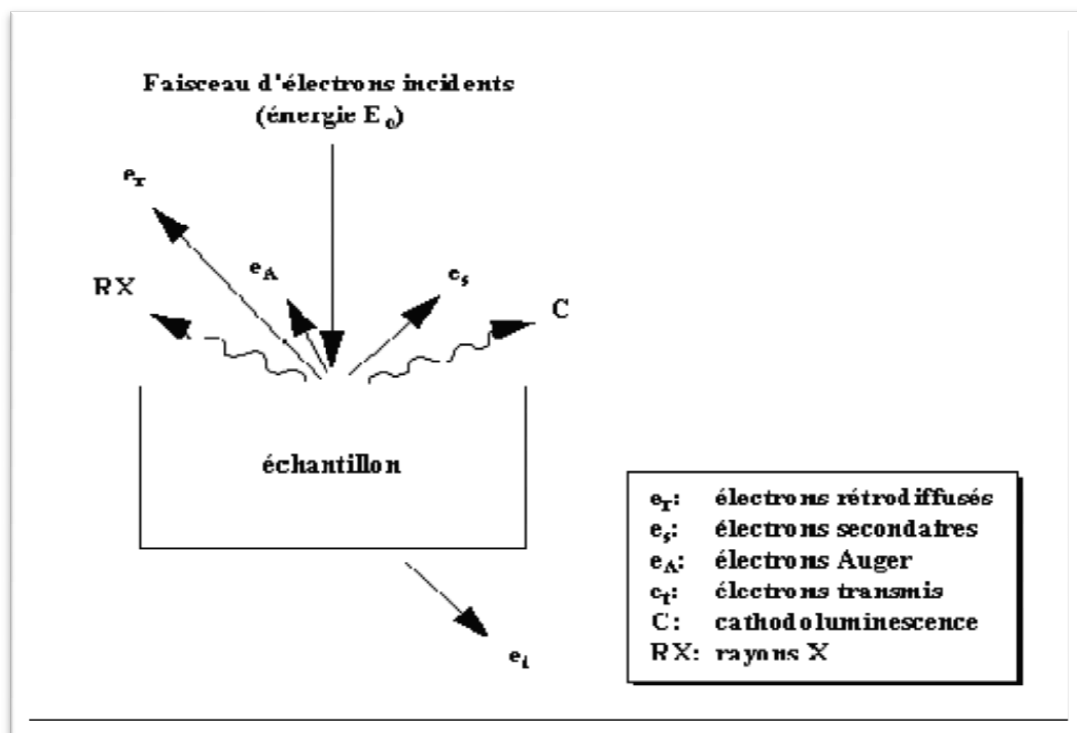


Figure 1.2 : Les effets produits suite au bombardement d'un échantillon par les électrons.

Parcours Electronique

Les électrons incidents subissent des séries successives de dispersion élastique et inélastique dans le semi-conducteur, et ont des trajectoires quelconques. Leur profondeur de pénétration R (range) est donnée par plusieurs expressions 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 : [11].

$$Re = \left(\frac{k}{\rho}\right) E_0^\alpha \quad \text{I.2}$$

Où ρ est la densité du matériau, K dépend du nombre atomique du matériau et de 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 [12,13]:

$$R_G = 4,57 \quad \text{I.3}$$

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

Selon Everhart et Hoff :

$$Re = (0.0398/\rho) E_0^{1.75} \quad \text{I.4}$$

où ρ est en g/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 [12] est utilisée plus tard :

$$R (\text{g}/\text{cm}^3) = 256 \cdot 10^{-3} (E_0/30)^{1.7} \quad \text{I.5}$$

L'équation 1.7 dans cette dernière équation n'est pas précise à basse énergie [11].

Une expression plus générale dérivée par Kanaya et Okayama s'est avérée pour être conforme bien aux résultats expérimentaux. D'après Kanaya et Okayama [14,15] est :

$$R_e = (0.0276A/\rho Z^{0.889}) E_0^{1.67} (\mu m) \quad \text{I.6}$$

Où E_0 est en keV, A est le poids atomique en g/mol, ρ est en g/cm³, et Z est le nombre atomique.

I.2.3 Energie de Formation d'une Paire Electron-trou

Cette énergie est définie comme une énergie moyenne dissipée pour créer une paire électron- trou. Dans la plus part des cas elle est considérée comme l'énergie d'ionisation qui est donnée par la relation suivante :

$$E_i = 2.8E_g + M \quad \text{I.7}$$

I.2.4 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 τ .

I.2.5 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 [16] :

I.2.5.1 Recombination SRH (Schokley-Read-Hall)

Le processus de recombinaison Schokley-Read-Hall est schématisé sur la figure I-3. 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 [16] :

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_{p0} \left[n - n_{ie} \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT_L}\right) \right] + \tau_{n0} \left[p - n_{ie} \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT_L}\right) \right]} \quad \mathbf{I.8}$$

Où E_t est la position énergétique des états de piège, E_i est le niveau de Fermi dans le semi-conducteur intrinsèque, τ_{n0} et τ_{p0} sont respectivement la durée 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.

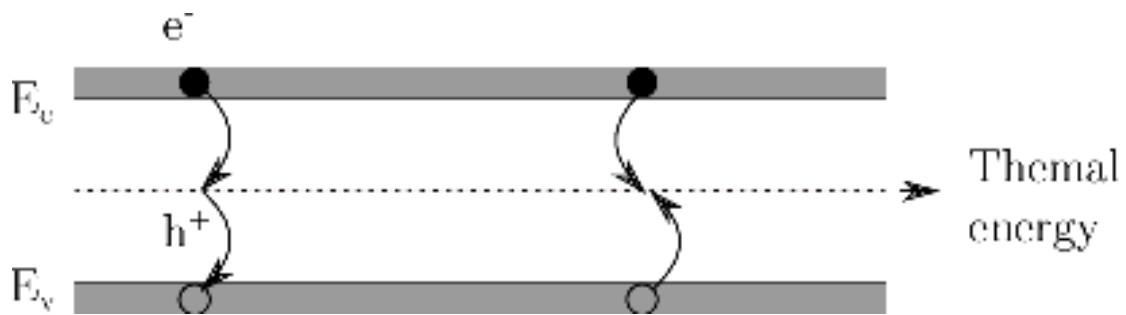


Figure I.3: Mécanisme de recombinaison Schokley-Read-Hall (SRH).

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

$$\tau_{n0}^{-1} = (\tau_{ksrhn}^{-1} + C_{ksrhn} \cdot n) \left(\frac{300}{T_L}\right)^{G_{ksrhn}} \quad \mathbf{I.9}$$

$$\tau_{p0}^{-1} = (\tau_{ksrhp}^{-1} + C_{ksrhp} \cdot p) \left(\frac{300}{T_L}\right)^{G_{ksrhp}} \quad \mathbf{I.10}$$

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.

$$\tau_n(N) = \tau_{n.min} \frac{\tau_{n.max} - \tau_{n.min}}{1 + \left(\frac{N}{N_{n.ref}}\right)^y} \quad \mathbf{I.11}$$

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

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.2.5.2 Recombinaison Auger

Le processus de recombinaison Auger est représenté sur la figure (I-4). 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 [16] :

$$R_{Auger} = C_{Aug.n}(pn^2 - nn_{ie}^2) + C_{Aug.p}(np^2 - pn_{ie}^2) \quad \mathbf{I.13}$$

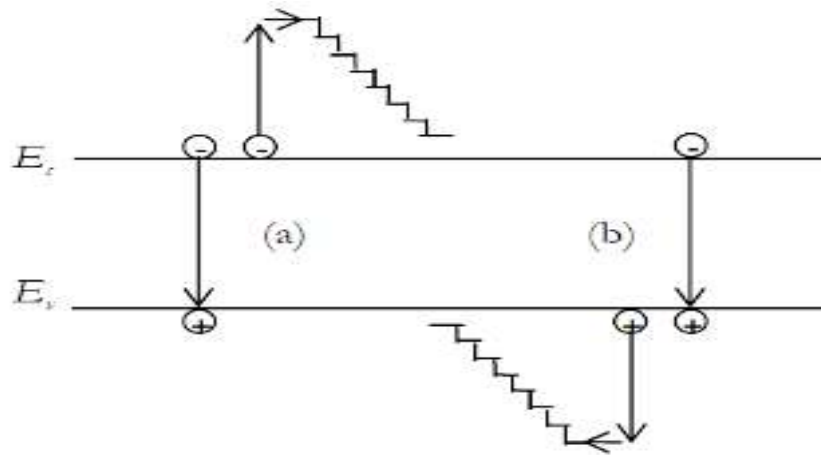


Figure I.4: Mécanisme de recombinaison Auger. L'excès d'énergie issu de la recombinaison peut être transféré à un électron (a) ou à un trou (b)

Où $C_{Aug,n}$ et $C_{Aug,p}$ 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.2.5.3 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 photogénération). 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 excitonique.

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 recombinaient 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 [16].

I.2.5.4 Recombinaison en surface

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

$$S = S_0 \left(\frac{N}{N_{set}} \right)^\alpha \quad \text{I.14}$$

S_0 , N_{set} et α dépendent du traitement de la surface et de la passivation. Par exemple pour une oxydation thermique d'une couche de silicium de type **n**, α est de **1** et N_{set} est de **10¹⁸ cm⁻³**.

La passivation est l'ajout d'une couche de **SiO₂** 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 [16] :

$$R_{surf} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_p^{eff} \left[n - n_{ie} \exp\left(\frac{Et - E_i}{KTL}\right) \right] + \tau_n^{eff} \left[p - n_{ie} \exp\left(\frac{Et - E_i}{KTL}\right) \right]} \quad \text{I.15}$$

$$\frac{1}{\tau_n^{eff}} = \frac{1}{\tau_n^i} + \frac{d_i}{A_i} S_n \quad \text{I.16} \quad \frac{1}{\tau_p^{eff}} = \frac{1}{\tau_p^i} + \frac{d_i}{A_i} S_p \quad \text{I.17}$$

I.3 Interaction ion-matière

I.3.1 Les différents mécanismes d'interaction ion-matière :

Le bombardement d'une surface solide par des ions primaires s'accompagne d'une séquence d'interactions si l'ion n'est pas réfléchi, tel que les ions primaires transfèrent tout ou une partie de leur énergie. Une particule primaire (l'ion incident) peut parcourir dans le solide une certaine distance, dissiper son énergie avant d'être finalement arrêtée ou éjectée du solide. Nous allons discuter brièvement les deux types d'interactions qui sont mises en jeu entre les ions énergétiques et les atomes du solide et qui provoquent le ralentissement des ions: les pertes d'énergie nucléaire et électronique. Signalons aussi que deux autres mécanismes peuvent exister (génération de photons et réaction nucléaire) à des énergies plus élevés [17]

I. 3.2 Structure de bandes d'énergies

Dans un atome un électron est soumis à un potentiel coulombien créé par le noyau et le nuage électronique qui est constitué par les électrons. Il ne peut occuper que des états quantiques bien définis et distincts les uns des autres. Ces états sont caractérisés par des niveaux d'énergie bien définis auxquels sont associées des fonctions d'onde. Chaque système quantique est caractérisé par des fonctions d'ondes ψ qui sont les solutions de l'équation de Schrödinger :

$$\frac{2m}{h^2}(E-V)\Psi=0 \quad \text{I.18}$$

Dans le cas de l'atome isolé la solution de l'équation de Schrödinger n'existe que pour des valeurs discrètes d'énergie $E_1, E_2, E_3, \dots, E_n$. Dans un solide cristallin les noyaux sont disposés en réseaux réguliers, les orbitales sont remplacées par des ondes de Bloch et les couches sont remplacées par des bandes d'énergie permises séparées par d'autres bandes interdites. Une bande permise comporte un nombre considérable de niveaux d'énergie comparable au nombre d'atomes dans le cristal, les niveaux d'énergie des électrons de valence et le niveau d'énergie d'ionisation génèrent ainsi deux bandes d'énergies permises particulièrement intéressantes, tel que la bande de valence et la bande de conduction, séparées par une bande nommée la bande interdite (Figure I.5).

La particularité de ces bandes permises tient au fait que les électrons peuvent circuler librement dans toute la maille cristalline et ainsi générer des courants de conduction électrique (s'agissant d'électrons partagés par les atomes du réseau cristallin) [18]

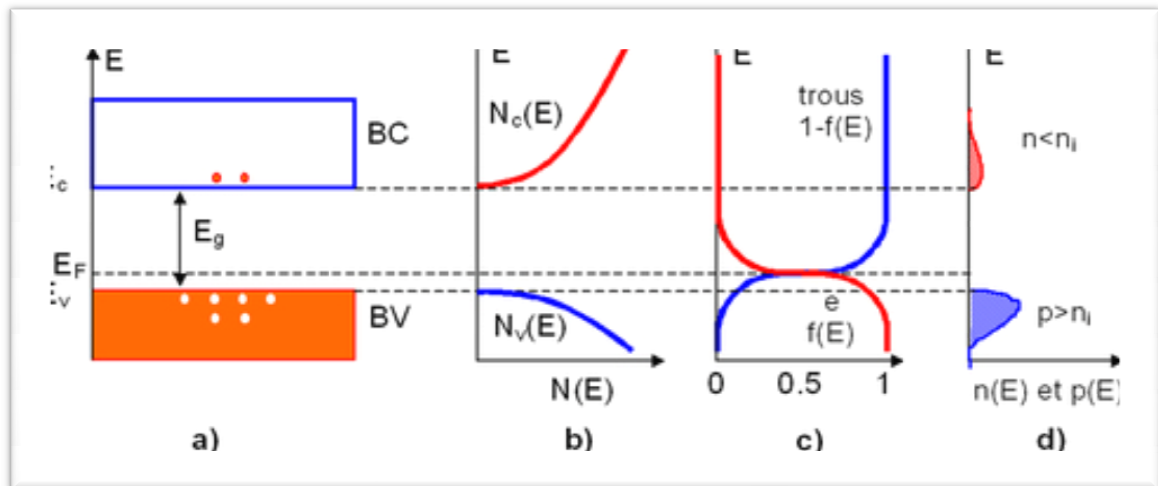


Figure I.5 : Diagramme des bandes d'énergie des semi-conducteurs

I.3.3 Propriété structurale de composé semi-conducteur GaAs .Ge

L'étude des propriétés électroniques de l'arséniure de gallium et d'indium montre qu'il existe des niveaux d'énergie situés dans la bande interdite correspondent à des états électroniques localisés, et leur effet sur les propriétés électroniques peut être néfaste. Ces niveaux localisés ont pour origine des défauts intrinsèques. Dans ce qui suit, nous présenterons l'état de connaissance actuel sur les défauts intrinsèques. Une description quantitative des défauts est nécessaire pour une analyse thermodynamique afin de pouvoir orienter les techniques servant à améliorer les performances des dispositifs à base de GaAs. Parmi les défauts importants existant dans le GaAs ; l'EL2 est le plus dominant. Cependant, les autres défauts ordonnant les propriétés de GaAs restent contestables [19].

•Défauts dans leGe

Le défaut le plus souvent rencontré dans le germanium est la vacance V_{Ge} . Le V_{Ge} est un défaut à basse énergie. Les états de charge qui lui correspondent étendant de (-2) à (+2). Les niveaux associés aux différentes transitions possibles se situent au-dessus de la bande de valence, où (+2/-1), (+1/0), (0/-1), (-1/-2) se trouvent à : 0.14, 0.15, 0.16 et 0.38 eV respectivement.

La figure I.6 représente l'énergie de formation en fonction du niveau de Fermi ainsi que les différents niveaux de transition (q/q') [20].

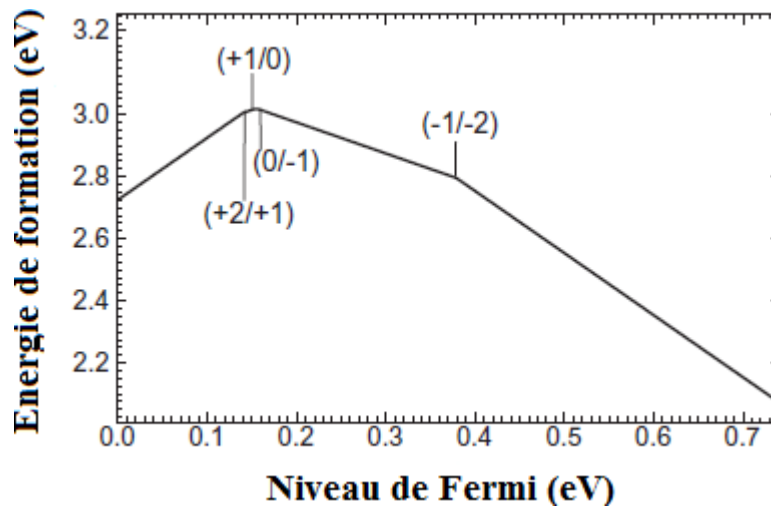


Figure I.6 : Energie de formation de V_{Ge} en fonction de niveau de Fermi.

I.3.4 INTERACTION DES RAYONNEMENTS IONISANTS AVEC LA MATIERE :

I.3.4.1 Les différent rayonnement

On distingue trois types de rayonnement:

- ❖ Rayonnement électromagnétique ou photons; comme rayonnement gamma, rayonnement X et la lumière, ...etc.
- ❖ Particules chargées; comme les protons, particules alpha,...etc.
- ❖ Particules non chargées; comme les neutrons, faisceaux d'atomes ou de molécules,...etc.[21]

I.3.4.2 Directement ionisants :

Ils Comprennent les particules chargées légères (les électrons), et les particules chargées lourdes(les protons, les particules α , et les ions lourdes) qui déposent l'énergie au milieu par une seule étape, par le processus d'interaction coulombienne entre la particule incidente et les électrons orbitales [22].

I.3.4.3 Indirectement ionisants :

Ils Comprennent les neutrons et les rayonnements électromagnétiques (photons X, et γ) qui déposent l'énergie au milieu par deux étapes [22]:

- Au premier temps une particule chargée est libérée dans le milieu absorbant (le photon libère un électron ou une paire électron/positon, et le neutron libère un proton ou un noyau de recul).

- Dans la deuxième étape les particules libérées déposent l'énergie au milieu absorbant par des interactions coulombiennes avec les électrons orbitales des atomes.

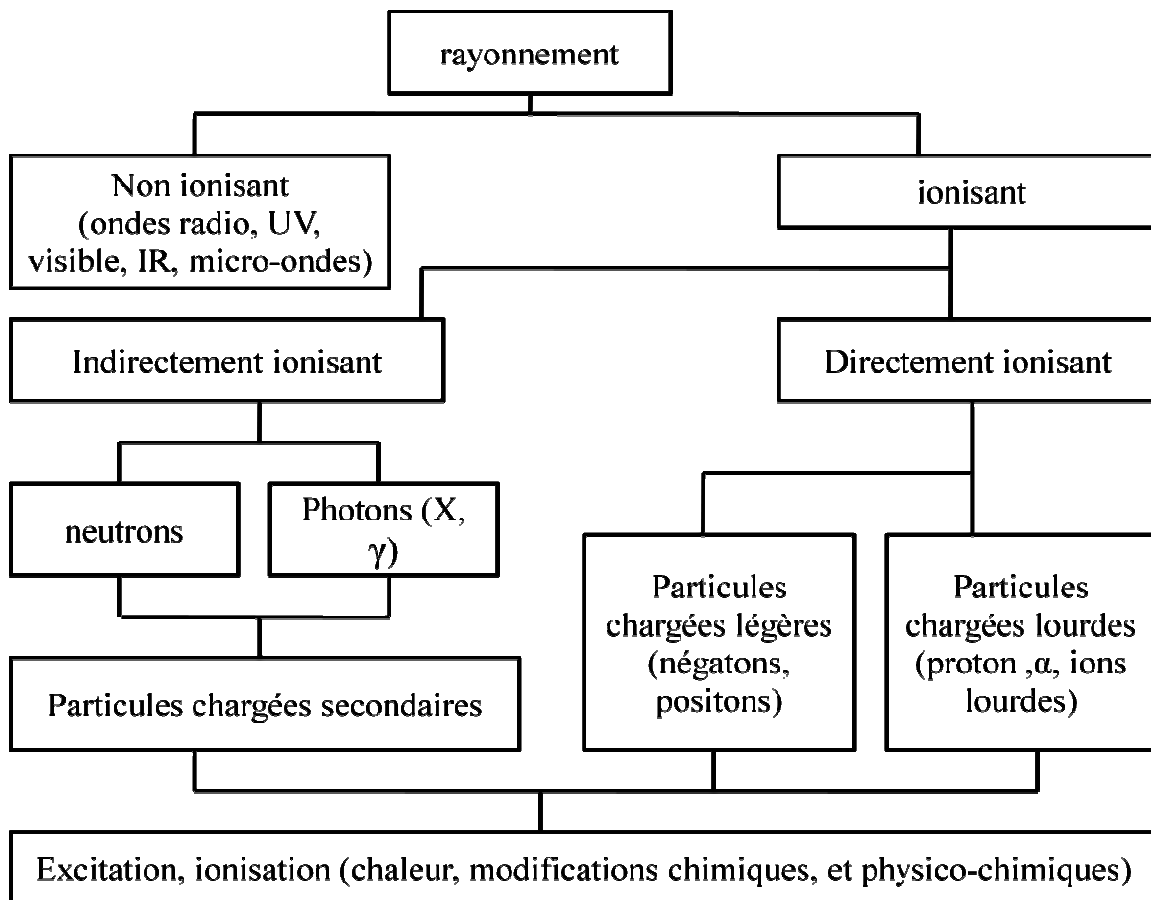


Figure1.7: les différents types de rayonnements.

1.4 Pouvoir d'arrêt

1.4.1 Pouvoir d'arrêt nucléaire

Le pouvoir d'arrêt nucléaire correspond à la perte d'énergie du proton, induite par les interactions coulombiennes élastiques ou semi-élastiques avec les noyaux de la matière, en tenant compte de l'effet d'écran que réalisent les électrons de cet atome [23]. Cette perte d'énergie est bien souvent mineure (voir figure 1.4) par rapport au pouvoir d'arrêt collisionnel décrit au §1.4.3. Le pouvoir d'arrêt nucléaire est usuellement obtenu par le calcul de la section efficace relative aux diffusions élastiques et à l'énergie de recul transférée au noyau [23].

Depuis peu, des études s'intéressent à l'utilisation du pouvoir d'arrêt nucléaire pour implémenter un algorithme de diffusion coulombienne multiple (DCM) [24,25]. Le pouvoir d'arrêt nucléaire linéique est exprimé par :

$$T = \frac{d\overline{\theta^2}}{dx} \mathbf{I.19}$$

Avec $d\overline{\theta^2}$ la variation moyenne de la variance des angles issus de la DCM.

Généralement, les algorithmes de transport de particules chargées par techniques Monte Carlo prennent en compte cet effet de manière condensée par la diffusion coulombienne multiple [26,27]. Néanmoins, pour une modélisation des impacts des radiations sur l'ADN et sur les molécules du cytoplasme, il peut être nécessaire de considérer la diffusion à l'échelle de la molécule comme le réalise Geant4-DNA [28,29]. La micro et la nano dosimétrie ne sont pas étudiées dans ce travail qui s'attarde à la macro et la méso dosimétrie

I.4.2 Pouvoir d'arrêt électronique

Le pouvoir d'arrêt S pour une particule chargée dans un matériau donné correspond à la perte d'énergie dE pour cette particule dans le matériau par interactions coulombiennes, divisée par la distance parcourue correspondante dx :

$$S = -\frac{dE}{dx} \mathbf{I.20}$$

$-dE/dx$ le long de la trajectoire d'une particule est appelée la perte d'énergie spécifique. Pour un ion donné de charge Z_p , l'expression de cette perte d'énergie spécifique, connue sous le nom de formule de Bethe-Bloch [30], s'exprime dans sa version corrigée des effets de densité d et de couche C [31] :

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi e^4 Z_m Z_p^2}{meV^2} \left[\ln \frac{2meV^2}{(I)} - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 - \frac{c}{Z_m} - \frac{\delta}{2} \right] \quad \mathbf{I.21}$$

V la vitesse du projectile

e, m_e respectivement la charge et la masse de l'électron

Z_m le numéro atomique du matériau

Z_p le numéro atomique du projectile

(I) le potentiel moyen d'ionisation du matériau

$\beta = \frac{v}{c}$ un facteur de Lorentz, c étant la célérité de la lumière

δ Un terme de correction prenant en compte l'influence de la densité du milieu à haute énergie

C Un terme de correction prenant en compte l'effet d'écrantage des électrons du noyau cible à basse énergie

L'équation I.22 est généralement valide pour différents types de particules chargées, tant que leur vitesse reste grande devant celle des électrons des orbitales électroniques du matériau absorbant. Pour une particule non relativiste, le pouvoir d'arrêt est inversement proportionnel au carré de la vitesse du projectile. Ceci est lié au fait qu'une particule lente demeure un temps plus long dans le voisinage d'un électron donné ; l'impulsion ressentie par l'électron, et par conséquent le transfert d'énergie, sont plus grands. Dans le cas de différentes particules chargées avec la même vitesse incidente, le seul facteur pouvant varier est la charge du projectile. Ainsi, les particules ayant la plus grande charge auront la plus grande perte d'énergie spécifique, cette dépendance étant quadratique. Le pouvoir d'arrêt dépend aussi de la nature du matériau. Le potentiel moyen d'ionisation du matériau est un paramètre important qui influe fortement sur le parcours des particules.[32]

I.5-Simulation de Monte Carlo :

C'est une méthode de simulation statique « Monte de Carlo » est très prometteuse puisque sa vitesse de convergence est indépendante de la dimension du problème posé [6]

Elle désigne les modes de résolution des problèmes faisant appel aux variables aléatoires trop complexes pour être résolus analytiquement [7]

I.5.1 Historique :

Les méthodes de Monte Carlo ont été utilisées depuis plusieurs siècles, l'appellation « Monte Carlo » date d'environ 1944 cette dénomination est due à METROPOLIS, inspiré de l'intérêt d'Ulan de Poker car Monte Carlo est un grand centre de jeux, est à l'origine les similarités avec les roulettes de hasard, cette méthode utilise par exemple : pour l'approximation des valeurs propres de l'équation de Schrödinger en 1950, la méthode a été utilisée dans de nombreux domaines partout où il est fructueux d'employer des procédés de simulation

I.5.2 Efficacité de la méthode Monte Carlo :

Tout système régi par le hasard nécessite que sa modélisation soit réalisée en utilisant des nombres aléatoires pour trouver une solution n'est pas aléatoire en

Chapitre 01 : généralités sur les interactions rayonnements-matières

répétant l'expérience n fois ou peut évaluer la dispersion (ou variance) des estimations de Monte Carlo par la relation $\sigma^2 = [\sum_{k=1}^n (p_k - p)^2] / [n(n - 1)]$ (4)

Avec $p = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n p_k$ (5)

σ^2 : La dispersion des estimations.

P : facteur moyen des estimations.

n : nombre d'expériences.

Lorsque la dispersion est plus petite la méthode de Monte Carlo est plus efficace, si le nombre d'épreuve dans chaque expériences croit la dispersion diminue donc si le temps de calcul T croit la méthode est plus efficace que T est petit pour σ^2

Efficacité = $\frac{1}{T\sigma^2}$ (6)

Donc la relation entre la théorie l'expérience et la simulation est donné par le schéma suivant :

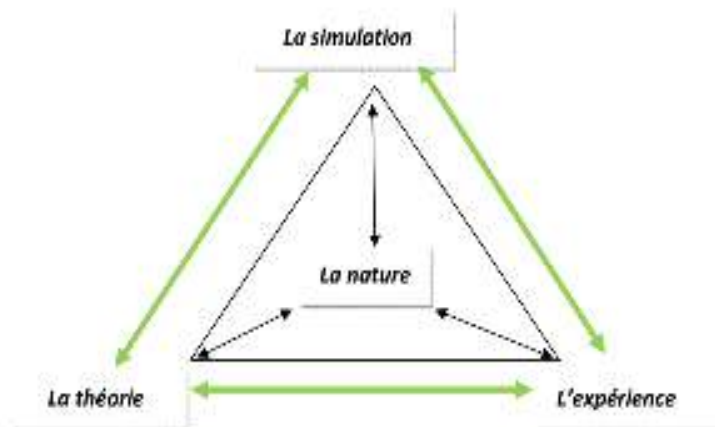


Figure I.8 : relation entre la théorie l'expérience et la simulation [6]

I.6 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

II.1 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 utilisés, 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 Ar^+ et Kr^+ dans les cibles de Ge et GaAs on va étudier 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 on s'intéresse aux ions d'Argon et les ions de Krypton sur la matrice de deux semi-conducteur choisis tel que l'Arséniure de Galium GaAs et le Germanium Ge [1]

II.2-Simulation du processus par les codes TRIM et SRIM :

Les propriétés des ions et des cibles bombardées peuvent être simulées par le code de calcul SRIM 2003 qui a été développé par Ziegler et al, pour choisir le mode de calcul désiré on utilise un Tableau de bord qui est présenté dans la figure suivante Figure II-1.

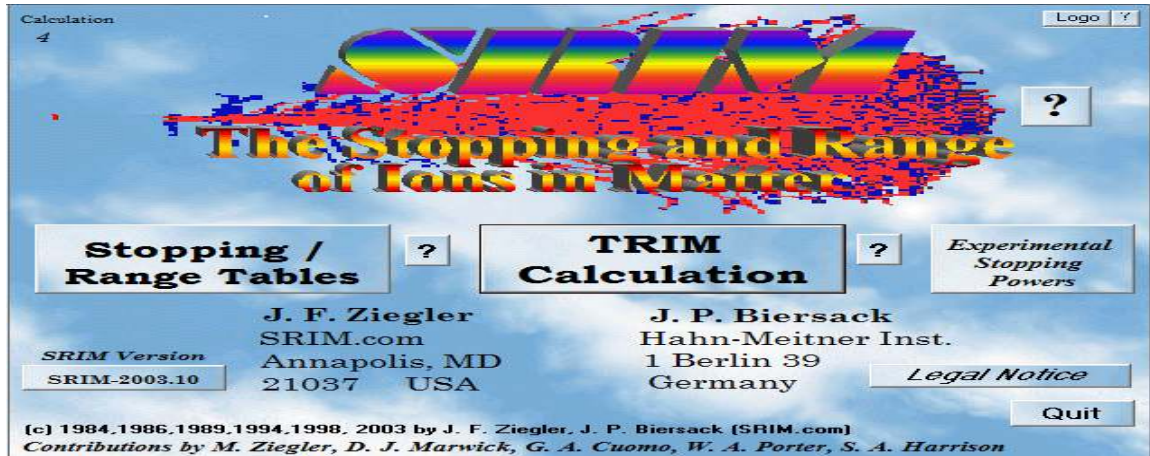


Figure II-1 : tableau de bord du code TRIM et SRIM

Premièrement : notre choix est porté sur la technique de bombardement ionique des ions sur la cible GaAs pour cela on choisit la fonction «TRIM Calculation» à droite du tableau de commande du logiciel. Deuxièmement : il apparait un deuxième tableau Figure II-2 sur lequel on fixe des données suivantes :

- les composé semi-conducteur utilisé GaAs, Ge
- l'ion utilisée et les propriétés de cette ions (Ar, Kr)
- la cible (GaAs et Ge) et ses propriétés avec toutes les caractéristiques physiques telles que la densité, la surface, l'énergie de liaisons
- épaisseur de l'échantillon $500A^0$
- le nombre d'ions utilisés pour le bombardement de la cible GaAs et Ge
- l'énergie cinétique du faisceau ionique (6Kev)
- l'angle d'incidence qui est fixé sur la valeur zéro 0^0 [1]

Chapitre 02 : simulation de l'interaction ions-matières par Code SRIM

Les résultats numériques présentés ci-dessous visent à étudier l'interaction faisceau d'ions avec les surfaces semi-conducteur, donc c'est une simulation TRIM et SRIM pour la caractérisation d'interaction des ions avec des cibles échantillons en gaz ou en solide. [3]

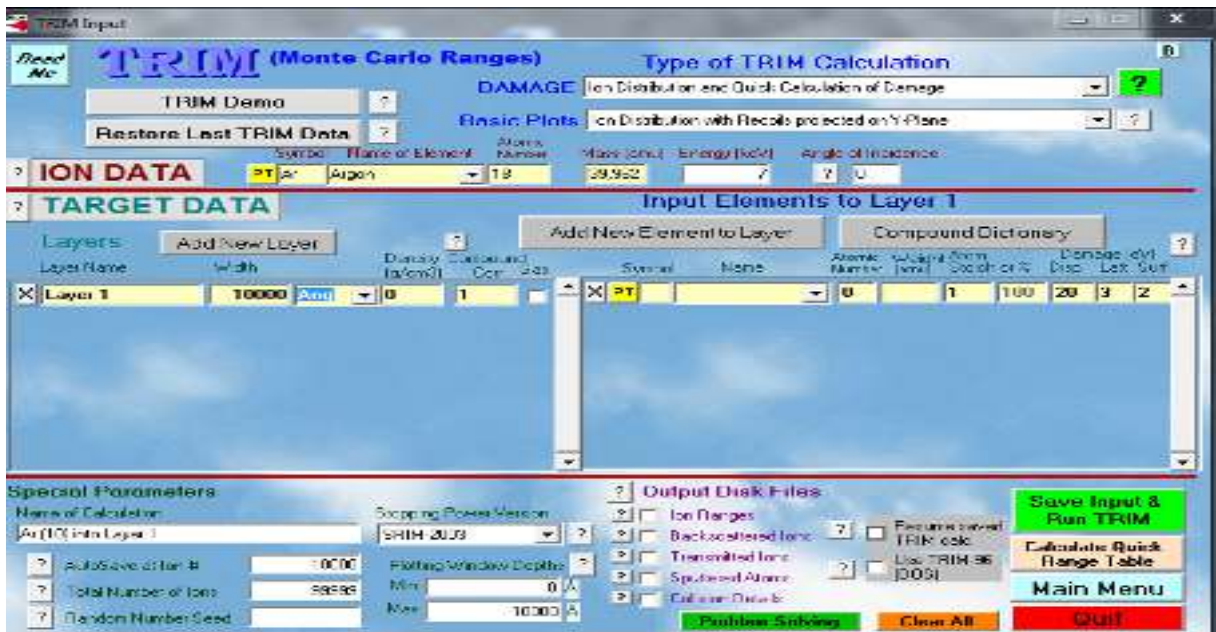


Figure II.2 Tableau des données TRIM pour le bombardement ionique

II.3. Condition de simulation :

Les résultats traités dans notre travail sont obtenus par logiciel SRIM 2003, on utilise les ions de l'argon Ar^+ et de krypton Kr^+ pour l'interaction avec les composés semi-conducteur Ge et GaAs. Les différentes caractéristiques de cette simulation sont ;

- Les ions Ar^+ et Kr^+ ont une énergie cinétique de 6 KeV.
- Nombre des ions incidents est d'environ 9999.
- L'épaisseur de la cible est de $500A^0$ et la densité d'environ $5 g/cm^3$
- l'angle d'incident égale à 0^0 (pour une pénétration maximale et profondeur maximale)

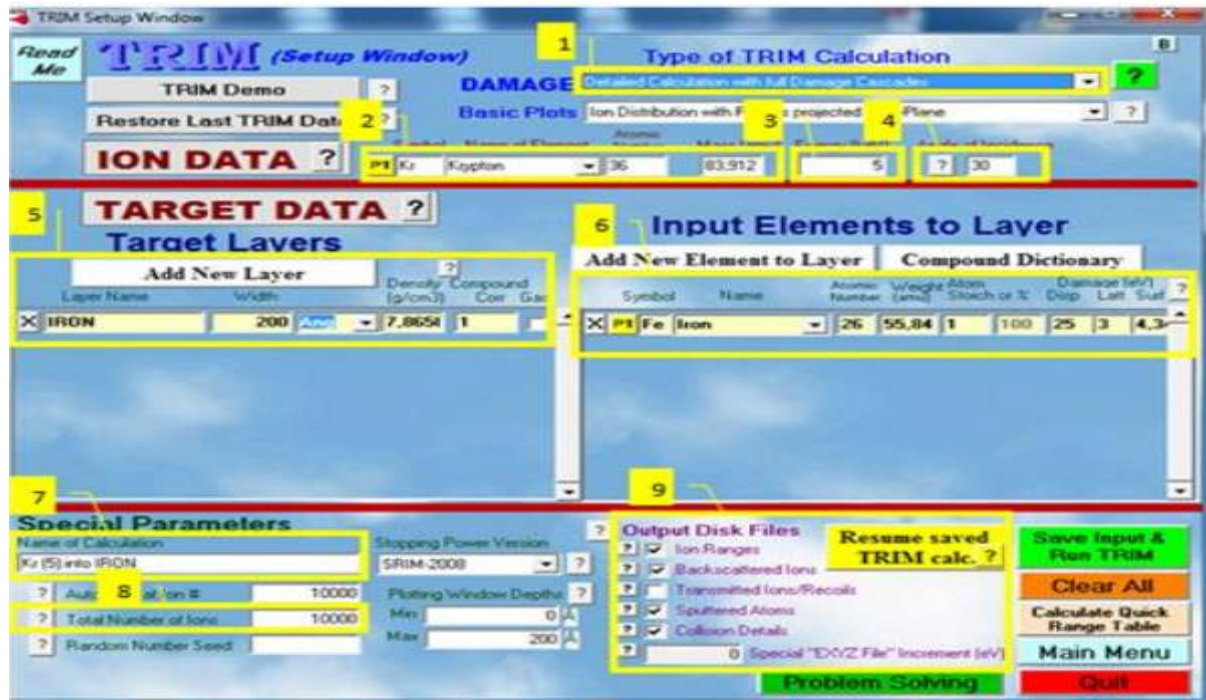


Figure II.3 : Interface du programme TRIM

Les paramètres donnée par la même interface comme la figure II.3 montre type de l'ion énergie d'impact, et l'angle d'incidence, la densité, la perte d'énergie en pourcentage, l'énergie de liaisons de surface et de réseau et l'énergie des ions et la profondeur de pénétration

Remarque :

- si un ion pénètre dans la matière, il entraine un suite de collisions nucléaires dans la cible.donc il perd son énergie ; si cette énergie est supérieur à l'énergie de liaison de l'atome cible, cette dernier quitte son cite et devenir un projectile nommé « atome de recul » donc la création d'un cite vacant.

Le logiciel SRIM qui est surtout utilisé dans le domaine de l'implantation ionique dans la cible. permet de calculer plusieurs paramètres qui sont : la profondeur moyenne et la dispersion, les distributions des pertes d'énergie électronique et nucléaires en fonction de la profondeur, la distribution des lacunes formés à partir de déplacement des atomes et le rendement de pulvérisation.

II.4.Simulation de la distribution d'ions Ar^+ et Kr^+ dans le GaAs :

Le logiciel SRIM permet de présenter une image complète de la trajectoire des ions dans la cible, les figures (II.5 ;II.6 et II.7) représente les dimensions des deux ions Ar^+ et Kr^+ (6 Kev et sous l'angle d'incidence 0°) délivré par le programme SRIM 2003 dans la cible de le GaAs.



FigureII.4 : Tableau de bord pour le bombardement ionique des ions Ar^+ dans le GaAs

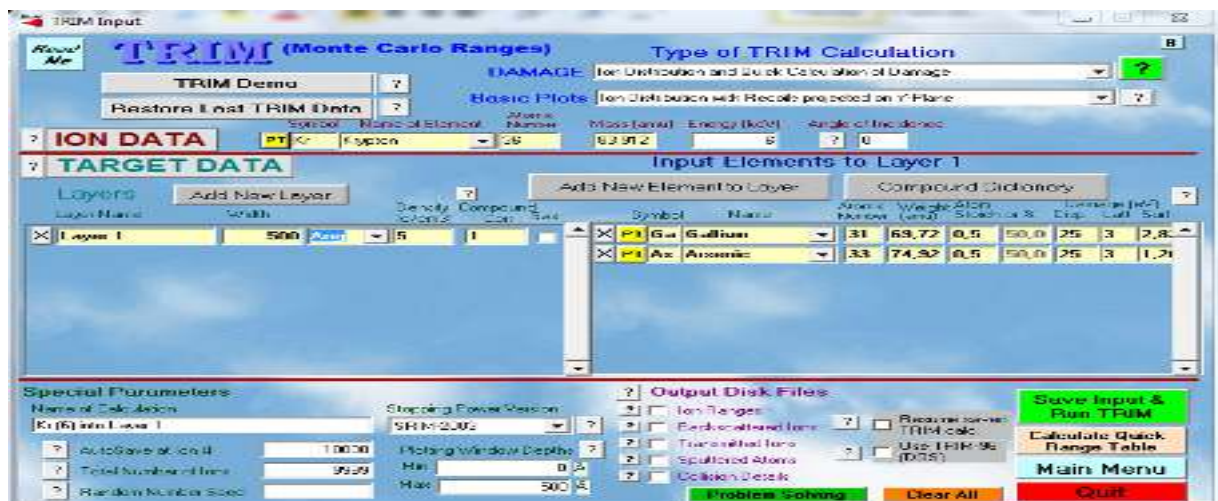


Figure II.5 : Tableau de bord pour le bombardement ionique de Kr^+ dans le GaAs

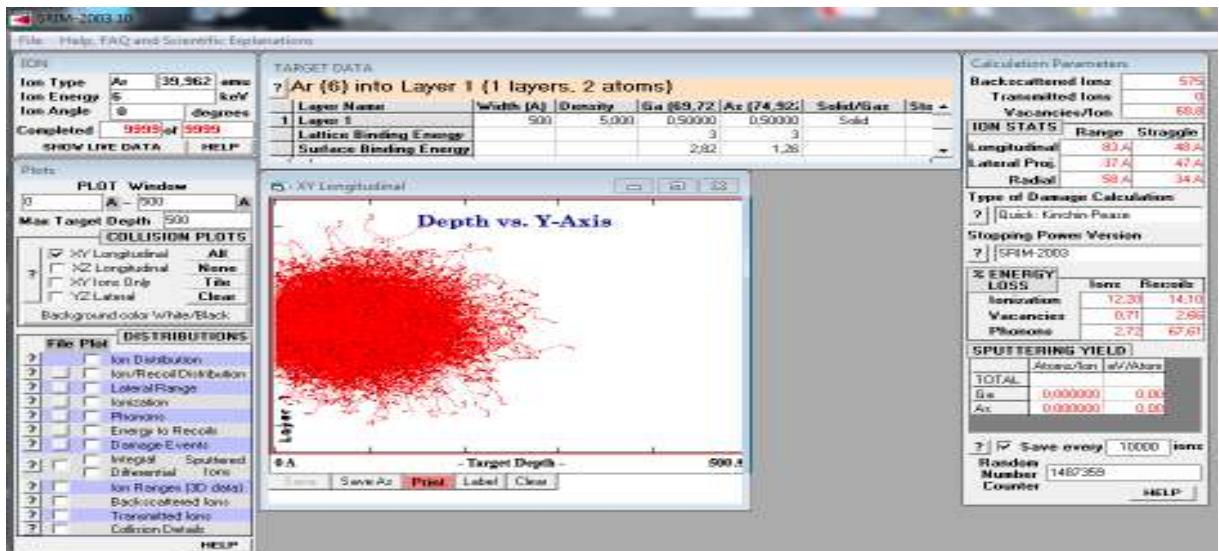


Figure II.6 : Tableau des données TRIM pour le bombardement de l'interface de GaAs par les ions de l'argon Ar^+

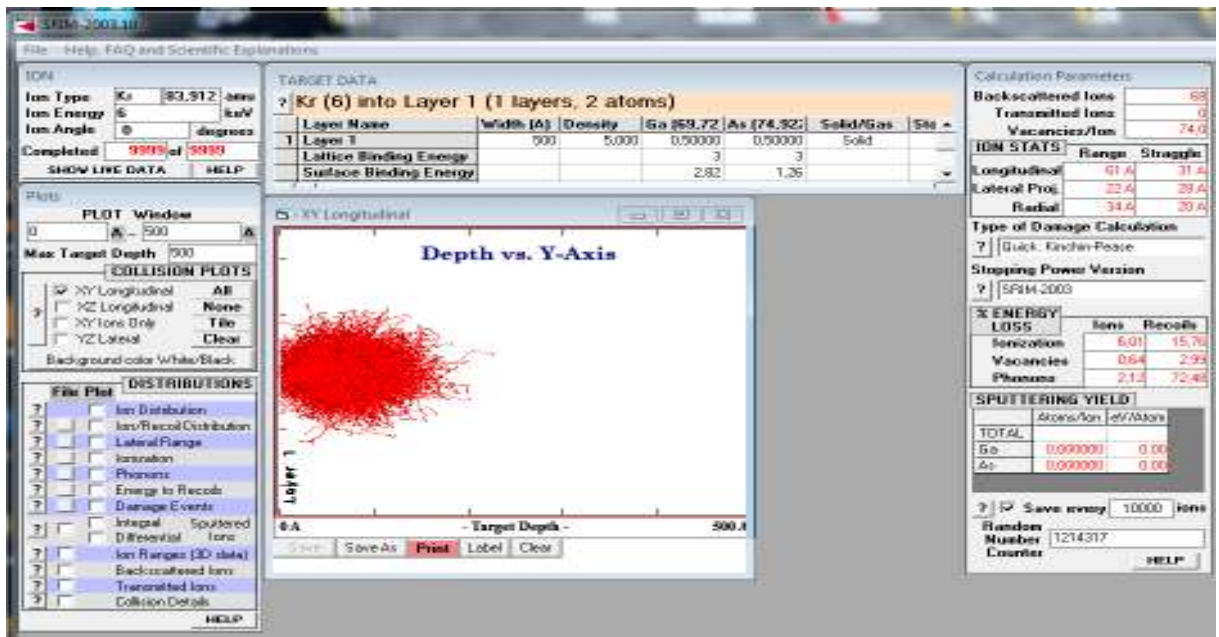


Figure II.7 : Tableau des données TRIM pour le bombardement de l'interface de GaAs par les ions de Kr^+ .

Dans la matrice de GaAs on remarque qu'il apparait un processus de pulvérisation des ions Ar^+ et Kr^+ induit à l'arrangement de ces ions étranger dans la cible, qui est montrée sur la figure II.7 plusieurs paramètres sont notées on cite ; La profondeur de pénétration, la largeur, le rayon, les ions de l'arrangement et qui sont dus au phénomène derecolis, ils sont arrêtés par les forces d'interaction Coulombienne, l'énergie est fixée sur 6 keV, la profondeur de pénétration des ions Ar^+ atteint 88 Å sur

Chapitre 02 : simulation de l'interaction ions-matières par Code SRIM

les 500 A^0 de la cible GaAs, et elle atteint 61A sur la même épaisseur de la cible pour les ions de Kr^+ , nous allons étudier la variation de la profondeur de pénétration en fonction de l'énergie de faisceau d'ions Ar^+ et d'ions Kr^+ , L'axe des ordonnées informe le nombre d'atomes par cm^2 introduit dans la matrice de GaAs pour le bombardement ionique des ions de Ar^+ et Kr^+ [2] On voit que la distribution finale de tous les ions et sous la forme d'une poivre noire centrées, on remarque que $R_p(Ar^+) = 88A^0 > R_p(Kr^+) = 61A^0$ ce qui est en accord avec la littérature qui dit : « lorsque une particule chargée pénètre dans le matériau cible, elle ralentit graduellement dans la matière par une série de collisions successives, plus le numéro atomique de la particule sera élevée 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 pour quoi on a :

$$R_p(Ar^+) > R_p(Kr^+)$$

$$Z(Ar^+) < Z(Kr^+)$$

$$Z(Ar^+) = 18 < Z(Kr^+) = 36$$

La figure II.8.a et b représente la distribution des ions Ar^+ et Kr^+ en profondeur de la cible de GaAs, la forme des deux courbes est gaussienne nous avons obtenu $\Delta R_p = 48 A^0$ pour les ions de Ar^+ et $\Delta R_p = 31 A^0$ pour les ions de Kr^+ , les deux autres moments qui sont le skewness γ et le kurtosis β ils sont estimés (Skewness, Kurtosis). pour les ions d'Argon (0.6395, 3.2311) et pour les ions de Krypton (0.6099, 3.2697) on voit que les valeurs ne sont pas éloignées par rapport à celle reportées dans le cas de la distribution gaussienne $\gamma \sim 0$ et $\beta \sim 3$. la valeur de γ est positive car le profil n'est pas parfaitement symétrique, et indique que nous avons des éléments lourds donc la queue de distribution est légèrement décalée vers la profondeur de la cible, β est différent de 3 ceci signifie que le pic du profil de concentration n'est pas parfaitement pointu, ce profil de la distribution des deux ions est décrit par une loi gaussienne.

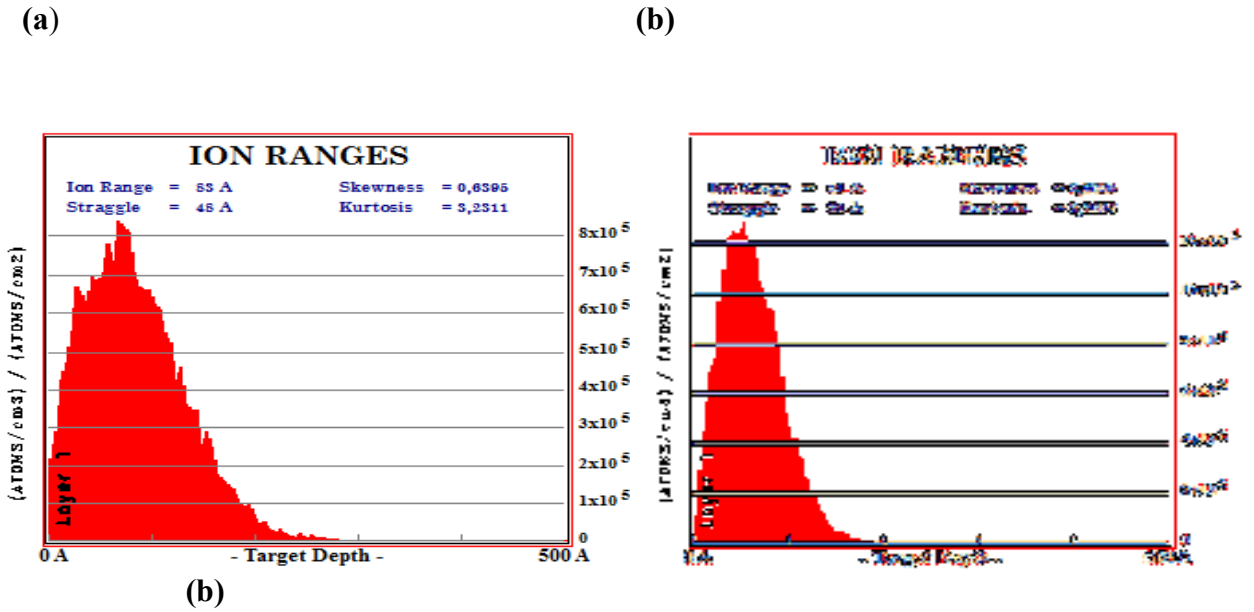


Figure II.8.: Arrangement des ions sur la surface altérée de GaAs.

(a) Pour les ions Ar^+ (b) pour les ions Kr^+

II.5. Etude du pouvoir d'arrêt d'ion Krypton dans la cible GaAs :

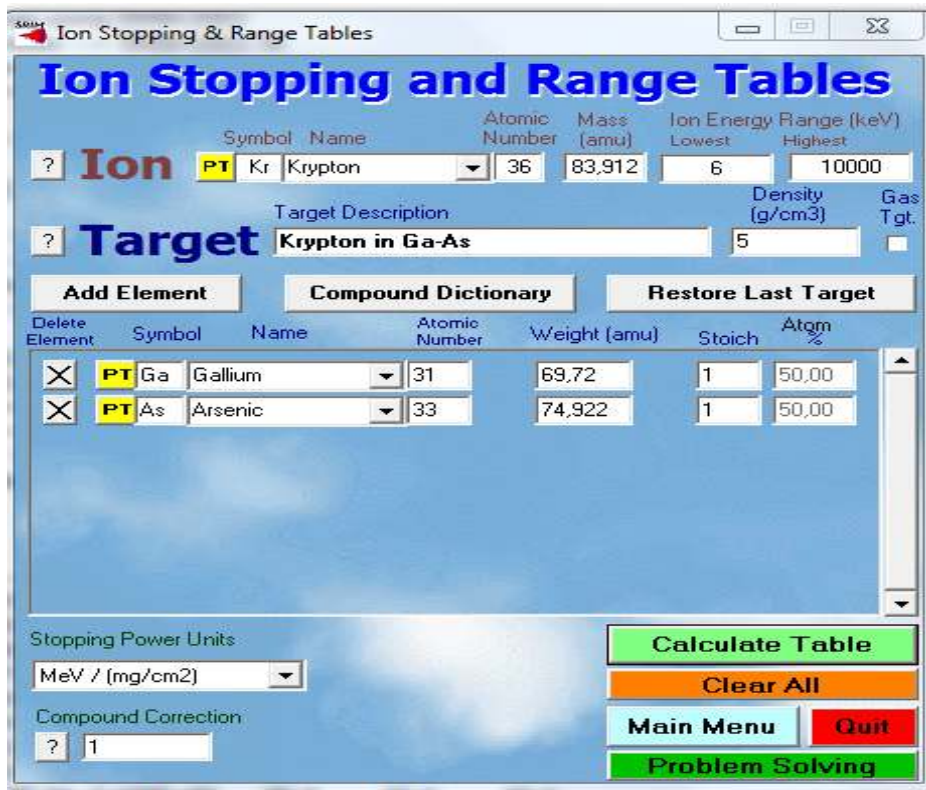


Figure II.9: Interface de programmer "Ion Stopping and Range tables".

Chapitre 02 : simulation de l'interaction ions-matières par Code SRIM

```

Calculation using SRIM-2003
SRIM version --> SRIM-2003.10
Calc. date --> mai 28, 2021
=====

Disk File Name = SRIM Outputs\Krypton in Ga-As

Ion = Krypton [36] , Mass = 83,912 amu

Target Density = 5,0000E+00 g/cm3 = 4,1634E+22 atoms/cm3
===== Target Composition =====
Atom  Atom  Atomic  Mass
Name  Numb  Percent Percent
-----
  Ga   31   050,00  048,20
  As   33   050,00  051,80
=====

Bragg Correction = 0,00%
Stopping Units = MeV / (mg/cm2)
See bottom of Table for other Stopping units

  Ion      dE/dx   dE/dx   Projected  Longitudinal  Lateral
  Energy   Elec.   Nuclear  Range      Stragglng     Stragglng
-----
  6,00 keV 1,331E-01 1,950E+00 59 A       36 A          26 A
  6,50 keV 1,385E-01 2,004E+00 62 A       38 A          27 A
  7,00 keV 1,438E-01 2,055E+00 65 A       39 A          28 A
  8,00 keV 1,537E-01 2,146E+00 70 A       42 A          30 A
  9,00 keV 1,630E-01 2,227E+00 75 A       45 A          32 A
 10,00 keV 1,718E-01 2,299E+00 81 A       47 A          34 A
 11,00 keV 1,802E-01 2,364E+00 85 A       50 A          36 A
 12,00 keV 1,882E-01 2,424E+00 90 A       52 A          38 A
 13,00 keV 1,959E-01 2,478E+00 95 A       55 A          40 A
 14,00 keV 2,033E-01 2,528E+00 100 A      57 A          41 A

```

Les ions qui bombardent la cible sont freinés suite à deux types d'interaction électronique et nucléaire. l'évolution du pouvoir d'arrêts électronique et nucléaire lors de l'interaction d'un faisceau d'ions Kr^+ avec une cible GaAs en fonction de l'énergie de la particule incidente, d'après notre informations obtenue nous remarquons une différence de l'évolution du pouvoir d'arrêts électronique et nucléaire à basse énergies le ralentissement nucléaire est plus important que le ralentissement électronique donc on peut dire que l'interaction élastique entraine une cascade de collision et provoque le déplacement d'atomes dans la cible, nous remarquons que la perte d'énergie nucléaires croît rapidement à très basses énergie ensuite ralenti avec l'énergie puis s'aperçoit que les pouvoirs d'arrêts électronique et nucléaires sont similaires, a partir d'une valeur donnée de l'énergie le freinage d'origine électronique devient prépondérant par rapport à l'arrêt nucléaire.

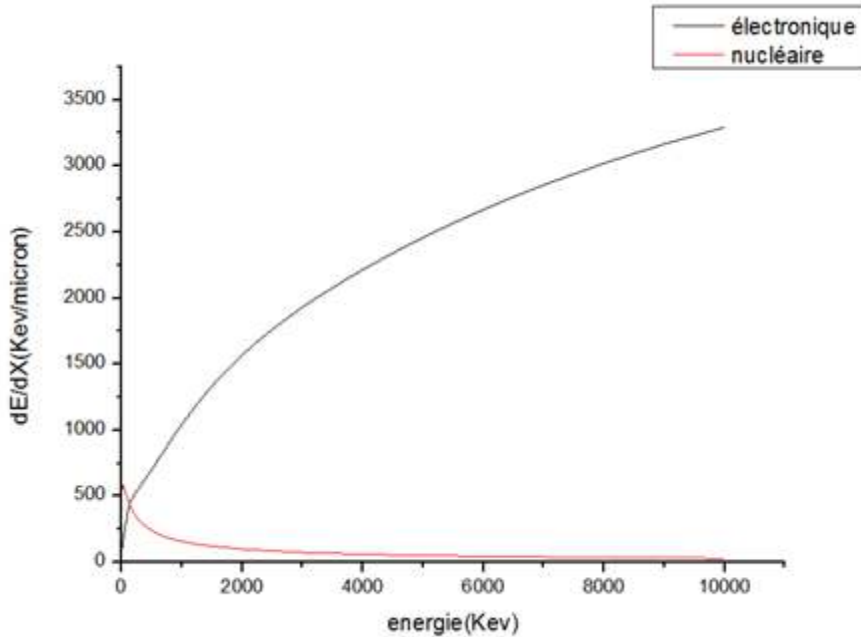


Figure II.10 : simulation des pouvoir d'arrêt nucléaire et électronique des ions Ar^+ dans la cible de GaAs, en fonction de l'énergie incidente des ions.

•Modification du matériau :

L'ion qui pénètre dans un matériau perd son énergie par deux moyens différents :

- les collisions atomique
- les collisions électroniques

Le mécanisme global de l'implantation ionique modéliser, comme un ion frappe successivement différents atomes de la cible, cet ion étant ralenti dans les partie rectilignes de son trajet, ces deux mécanisme de ralentissent électroniques et nucléaire impliquent des modifications physique et chimique du matériau.

•Cascade de déplacements :[5]

Au cours de la pénétration dans la matrice des semi- conducteurs utilisé, l'ion provoque de nombreuses collisions d'atomes qui se mettre en mouvement et se déplace jusqu'à percuter d'autres atomes. qui eux- même se déplacent donc il y a production d'un très grand nombre de déplacements dans la cible. on parle alors de « cascade de collision » ou cascade de déplacements, ce phénomène est montrés sur la figure II.11. tel que tous les ions n'ont pas la même trajectoire et les atomes déplacés terminant leur mouvement dès qu'ils n'ont plus suffisamment d'énergie pour se

déplacer. donc l'ensemble de déplacements des atomes entraîne des modifications structurales de la cible.

•**Remarque** : Si la masse de l'ion incident est élevée les dommages sont plus importants, plus la masse atomique de l'ion est élevée moins il est sensible au ralentissement électronique donc il cause plus de chocs nucléaires tout au long de son parcours dans le matériau.

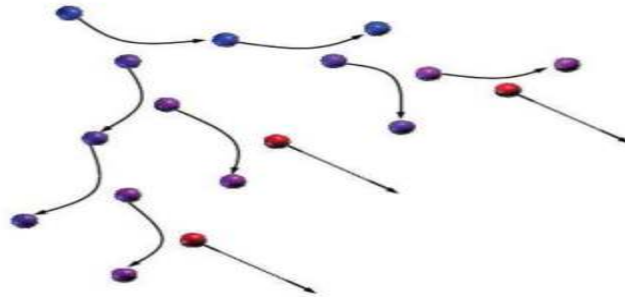


Figure II.11 : Cascade de déplacements induite par l'ion projectile.

II.6 la perte d'énergie par ionisation :

La figure II.12 représente le phénomène d'ionisation créé par les deux ions de Kr^+ et Ar^+ sur la surface du matériau GaAs, on remarque que l'énergie perdue ou absorbée par la matrice de GaAs varie avec la profondeur de pénétration des deux ions, on note que deux formes de perte d'énergie sont visibles sur la courbe .

En rouge : les ions directs et En bleu : les ions de recul, La figure II. 12 nous renseigne aussi sur le nombre d'événements ou de postes vacants appelés communément défauts ponctuels portés sur cette figure par l'axe des ordonnées. dépend beaucoup de l'énergie cinétique des ions Ar^+ et Kr^+ atteignant la surface de la cible GaAs, il y a deux diagrammes différents un pour la perte d'énergie électronique des ions incidents et un pour la perte d'énergie des atomes cibles reculant.

(a) (b)

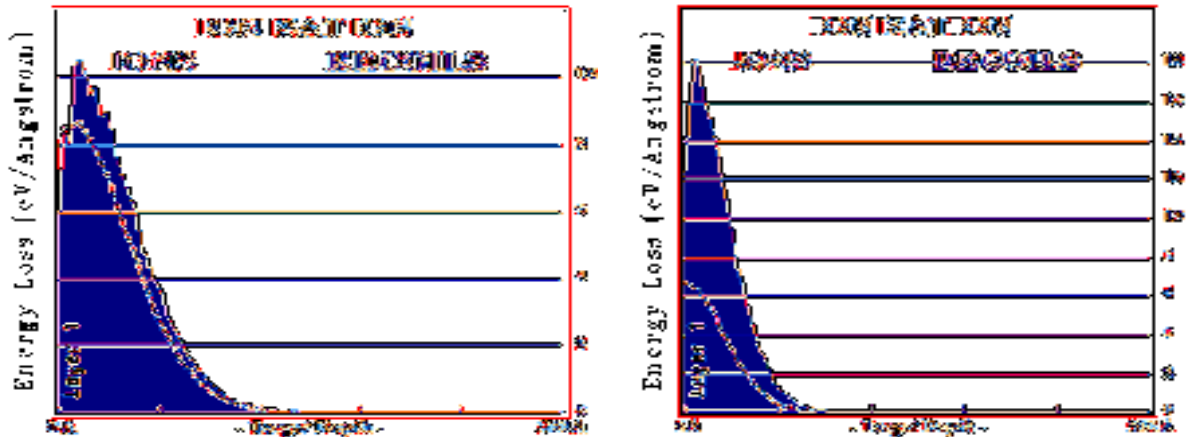


Figure II.12 : perte d'énergie pour le phénomène d'ionisation par les ions directs et lesions de recule(a) pour l'Argon (b) pour le krypton

Les tableaux (II.1 ;II.2) 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	12,20
Vacancies	0,71	2,66
Phonons	2,72	67,61

TabII.1 : perte d'énergie en pourcentage d'ions Ar^+ dans la cible de GaAs

% ENERGY LOSS	Ions Recoils	
	Ionization	6,01
Vacancies	0,64	2,99
Phonons	2,12	72,48

TabII.2 :perte d'énergie en pourcentage d'ions Kr^+ dans la cible de GaAs

Le tableau II.1qui donne la perte d'énergie en pourcentage montre que les ions incidents perdent d'énergie 12.20 % moins que les atomes de reculs 14.10% qui donne la perte totale 26.3% donc l'énergie transférée par les atomes de reculs est supérieur à celle de l'ion projectile Ar^+ dans la cible de GaAs.

Chapitre 02 : simulation de l'interaction ions-matières par Code SRIM

Le tableau II.2 montre que les ions incidents perdent seulement une petite quantité de leurs énergies aux électrons cibles 6.01%. alors que les atomes de reculs déposent 15.76% de leurs énergie soit au totale 21.77% .les résultats de la simulation montre que l'énergie transférée par les atomes de recul est supérieur à celle des ions projectile Kr^+ dans le GaAs.

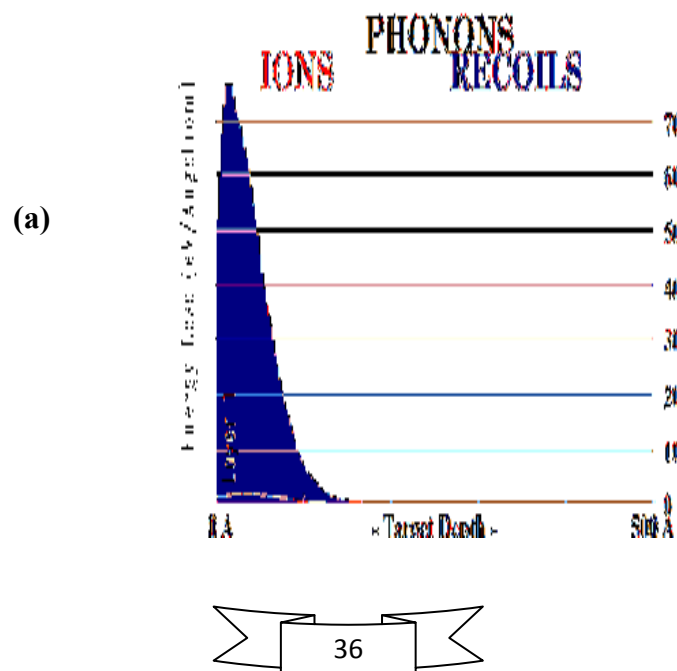
II.7 la perte d'énergie par phonon :

La figure II.13 donne les résultats des pertes d'énergie en ev/A^0 en fonction de la profondeur de la cible GaAs, le profil donnée sous forme gaussienne, il montre la perte d'énergie aux phonons des atomes de reculs GaAs.

La ligne rouge : désigne la perte d'énergie aux phonons des ions Ar^+ et Kr^+ ces phonons sont produits presque par les atomes cibles reculant, les tableaux (II.1 ;II.2) donne l'énergie dissiper de chaque ion, la rangée de phonons montre que les ions perdre seulement une petite quantité de leurs énergie en phonons 2.72% pour l'Argon et 2.12% pour le krypton alors que les atomes de reculs déposent 67.61% pour Ar^+ et 72.48% pour Kr^+ de l'énergie en phonons donc la perte totale est :

Ar^+	70.33
Kr^+	74.6

TabII.3 : perte totale des deux ions dans la cible GaAs



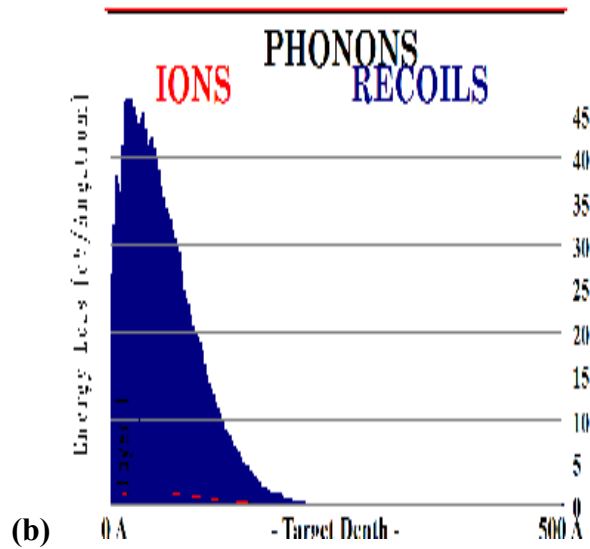


Figure II.13 : création des phonons

- (a) Pour les ions d'Argon
- (b) Pour les ions de krypton

• l'évolution de l'énergie absorbée par les atomes de reculs :

La figure II.13 obtenue par code SRIM 2003 représente l'évolution de l'énergie absorbée par les atomes de reculs en fonction de la profondeur de la cible. à l'aide du tableau II.2 on peut calculer l'énergie transférée aux cascades de recul, dans le cas des ions d'Argon est : $14.10\% + 2.66\% + 67.61\% = 84.37\%$ de l'énergie des ions incidents qu'ils déposent donc 15.63% de leur énergie directement à la cible et 84.37% aux cascades de recul. Dans le cas des ions de Krypton l'énergie transférée aux cascades de recul est donnée par : $15.76\% + 2.99\% + 72.48\% = 91.23\%$ de l'énergie des ions incidents. donc les ions incidents déposent 8.77% de leur énergie dans la cible de GaAs.

Conclusion : le transfert de l'énergie décroît rapidement en fonction de la profondeur de la cible, et les phénomènes de collisions en cascades dépendent de l'énergie d'impact du projectile.

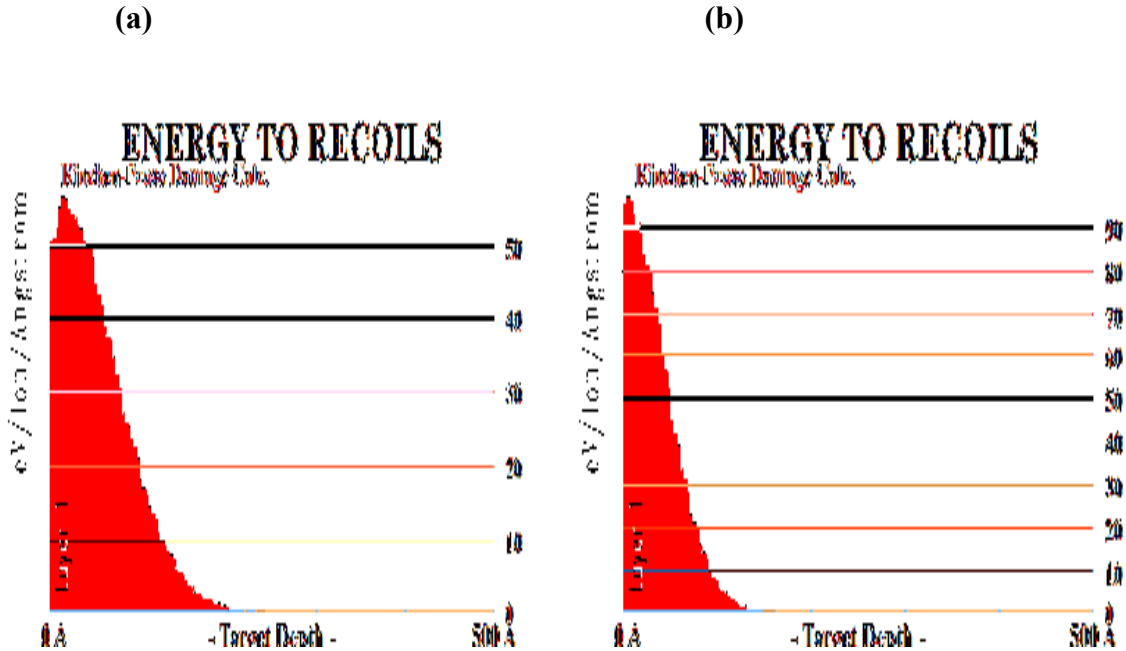


Figure II.14 : évolution de l'énergie transférée aux atomes de recoils en fonction de la profondeur de la cible GaAs

- c) Pour les ions Ar^+
- d) Pour les ions Kr^+ [6]

II.8 production des lacunes :

La diffusion ou l'implantation d'ions incidents dans le cristal crée les défauts ponctuel, quand ces défauts sont actifs la neutralisation électronique est nulle, les propriétés électroniques du matériau sont altéré par le bombardement ionique, il provoque des dérives dans des applications technologiques, les phénomènes interaction ions-matière dépendent de plusieurs paramètres à savoir l'énergie, la masse, l'angle d'incidence du faisceau d'ions, la nature des ions (Ar^+ ou Kr^+), la structure et la composition chimique du cristal, Pour l'énergie de nettoyage, une couche amorphe apparaît, la dernière couche de la surface, tel que le processus de pulvérisation cause une destruction, si l'énergie des ions décroît dans la dégradation du cristal diminue. on

le verra sur les couches de variation des paramètres en fonction de l'énergie cinétique des ions Ar^+ et Kr^+ .

(a) (b)

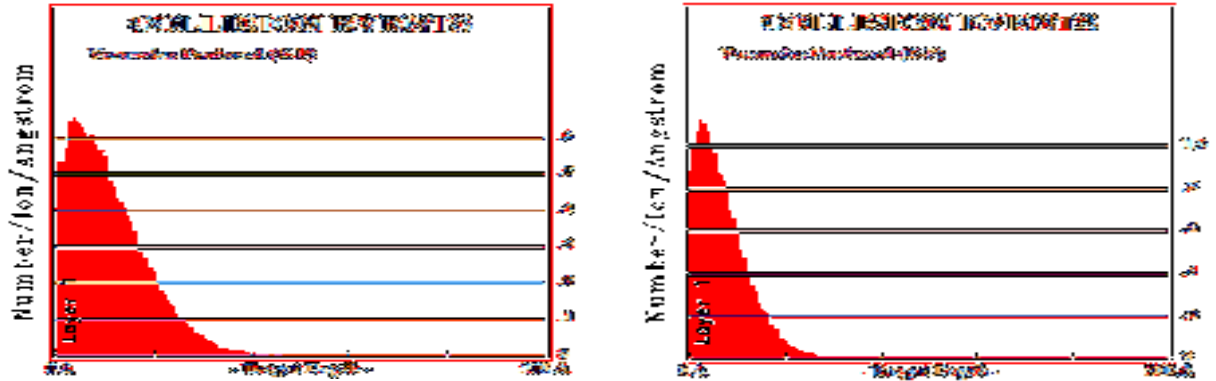


Figure II.15: nombre de défauts créés en fonction de la profondeur de pénétration [2]

- c) Pour les ions Ar^+
- d) Pour les ions Kr^+

On trouve que les lacunes se produit à une profondeur R_d . on remarque que le profil des défauts est toujours gaussien, les distributions obtenue est assimiler par les lois gaussiennes centrées à une profondeur $R_d \cong 25A^0$ (Ar^+) et $R_d \cong 20A^0$ (Kr^+) dans le cas des ions de krypton la concentration est plus grand (étudiée expérimentalement) [7,8,9] car $Z(Ar^+) = 18 < Z(Kr^+) = 36$

•**Conclusion** :le nombre de collision inélastique qui provoque les existences des lacunes est plus important dans le cas des ions Kr^+ que les ions de Ar^+ .

Production des lacunes (sites vacans)	Ar^+	Kr^+
Ions	0.71	0.64
recul	2.6	2.99

TabII.4 : production des lacunes pour chaque ion dans la cible de GaAs

II.9 Etude de pouvoir d'arrêt d'ion Krypton dans la cible de Ge :



SR Calculation: SRIM Output:Krypton in Germanium

 Calculation using SRIM-2003
 SRIM version --> SRIM-2003.10
 Calc. date --> jun 26, 2021

Disk File Name = SRIM Output:Krypton in Germanium

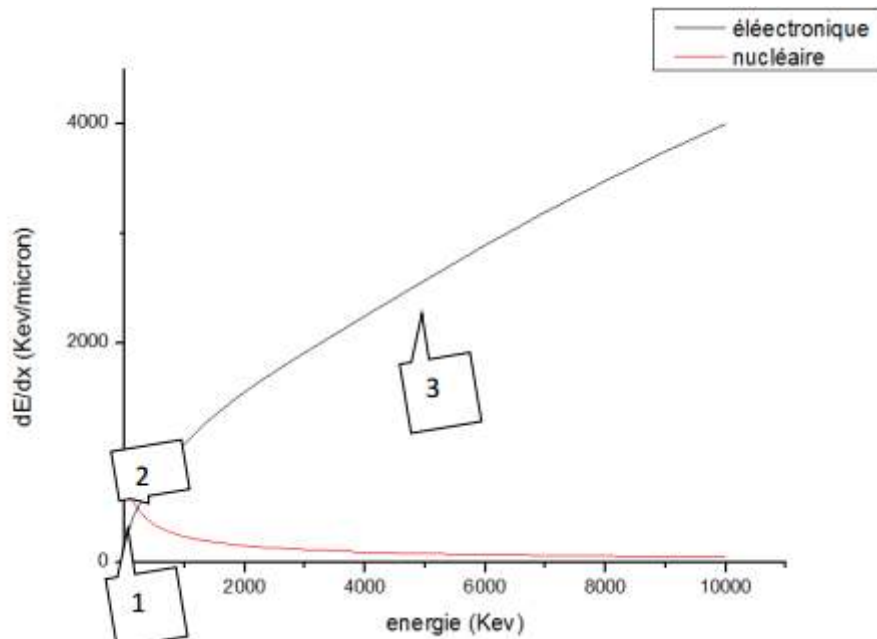
Ion = Krypton [36] , Mass = 83.912 amu

Target Density = 5.000E+00 g/cm3 = 4.1468E+22 atoms/cm3
 ===== Target Composition =====
 Atom Atom Atomic Mass
 Name Numb Percent Percent

 Ge 32 100.00 100.00

Bragg Correction = 0.00%
 Stopping Units = MeV / (mg/cm2)
 See bottom of Table for other Stopping units

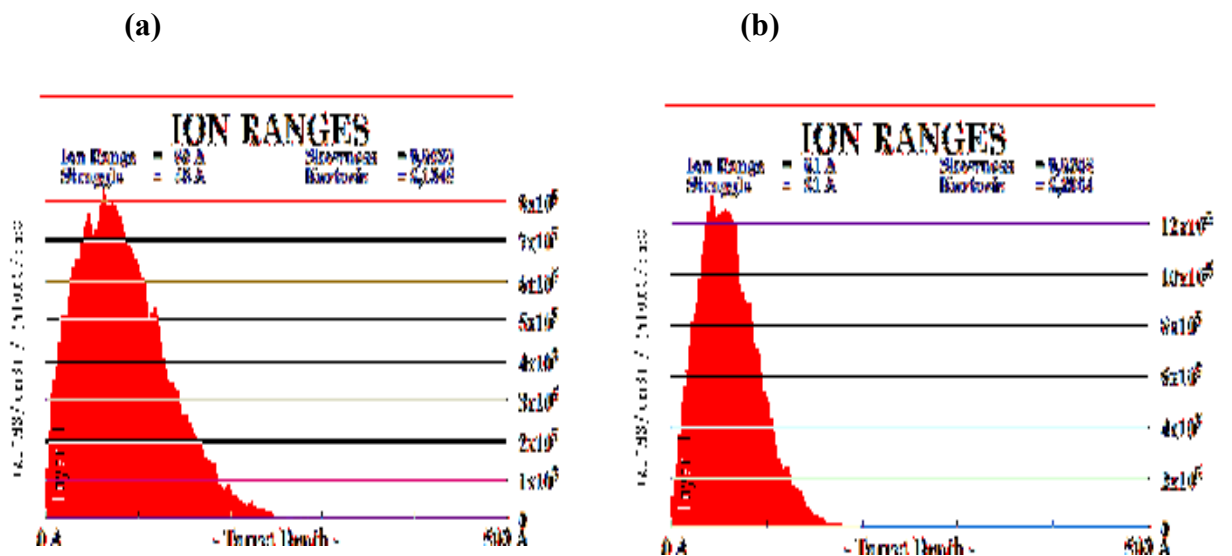
Ion Energy	dE/dx Elec.	dE/dx Nuclear	Projected Range	Longitudinal Straggling	Lateral Straggling
6.00 keV	1.373E-01	1.941E+00	59 A	36 A	26 A
6.50 keV	1.429E-01	1.995E+00	62 A	38 A	27 A
7.00 keV	1.483E-01	2.045E+00	65 A	39 A	28 A
8.00 keV	1.585E-01	2.136E+00	70 A	42 A	30 A
9.00 keV	1.681E-01	2.218E+00	76 A	45 A	32 A
10.00 keV	1.772E-01	2.288E+00	81 A	47 A	34 A
11.00 keV	1.859E-01	2.353E+00	86 A	50 A	36 A
12.00 keV	1.941E-01	2.412E+00	91 A	52 A	38 A
13.00 keV	2.021E-01	2.466E+00	95 A	55 A	40 A
14.00 keV	2.097E-01	2.516E+00	100 A	57 A	41 A



FigureII.16 : Simulations des pouvoirs d'arrêts des ions Kr^+ dans la cible de Ge.

II.10.Simulation de la distribution d'ions Ar^+ et Kr^+ dans le Ge :

La figure II. 17représente la distribution à deux dimensions d'atomes à l'intérieur de la cible, une simulation provoquée par 9999 ions incidents d 'Argon et de Krypton de 6 Kev calculée par logiciel SRIM 2003 dans la cible Ge. ce profil est obtenue à partir du logiciel, il montre la pénétration des ions dans la cible avec une animation complète.



FigureII.17 Arrangement des ions sur la surface altérée de Ge

(a) Pour les ions de Ar^+ (b) pour les ions Kr^+

A partir des deux figures II.17 on remarque que la redistribution finale de tous les ions est sous la forme d'une poire centrée a une profondeur d'environ $R_p = 83 \text{ A}$ pour les ions de Ar^+ et d'environ $R_p = 61 \text{ A}$ pour les ions de Kr^+ .

C'est pour quoi On a $R_p (Ar^+) > R_p(Kr^+)$ car $Z(Ar^+) < Z(Kr^+)$

$$Z(Ar^+) = 18 < Z(Kr^+) = 36$$

II.11 La perte d'énergie par ionisation :

Le tableau II.5 montre la perte d'énergie en pourcentage donné par l'interface du logiciel SRIM 2003 il permet de diviser l'énergie des ions incidents en différentes types.

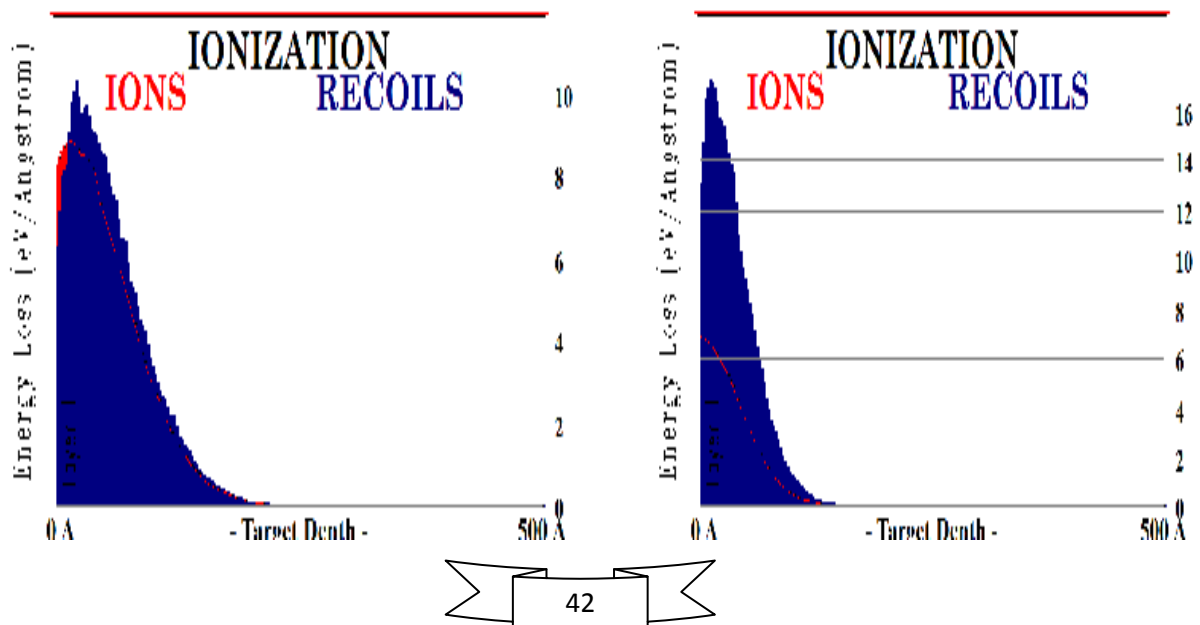
% ENERGY LOSS	Ions Recoils	
	Ionization	12,76
Vacancies	0,59	3,20
Phonons	1,65	67,65

TabII.5 Perte d'énergie en pourcentage d'ions Ar^+ dans la cible de Ge

(a)

(b)

FigureII.18. : perte d'énergie pour le phénomène d'ionisation par les ions directs et



Chapitre 02 : simulation de l'interaction ions-matières par Code SRIM

les ions de recul dans la cible de Ge

(a) Pour les ions de Ar^+ (b) pour les ions Kr^+

La figure II.a.18 décrit la perte d'énergie par ionisation en fonction de la profondeur de la cible, On remarque qu'il y'a deux diagrammes distincte. un pour la perte électronique des ions incidents et un pour la perte d'énergie des atomes cibles reculant, le tableau II.5 qui donne la perte d'énergie en pourcentage montre que les ions incidents perde une quantité de leurs énergies aux électrons cibles d'environ 14.15% .

D'après les résultats obtenue par la simulation du phénomène d'ionisation du projectile, à l'intérieur de la cible Ge montre que l'énergie transférée par les atomes de recul est supérieur à l'énergie transférée par les ions projectile Ar^+ .

% ENERGY LOSS	Ions	Recoils
Ionization	6,23	15,86
Vacancies	0,52	3,56
Phonons	1,26	72,58

TabII.6 perte d'énergie en pourcentage d'ions Kr^+ dans la cible de Ge

La figure II.18.b décrit la perte d'énergie par ionisation en fonction de la profondeur de la cible. il y'a deux diagrammes différents un pour la perte d'énergie électronique des ions incidents, et un pour la perte d'énergie des atomes reculant, le tableau II.6 qui donne la perte d'énergie en pourcentage montre que les ions incidents perdent d'énergie 6.23% moins que l'énergie des atomes de reculs 15.86% .cela donne une perte totale 22.09 % ; d'après les résultats obtenues par la simulation du phénomène d'ionisation du projectile à l'intérieur de la cible Ge .ils montre que l'énergie transférée par l'ion projectile Kr^+ est inférieur à l'énergie transférée par les atomes reculs.

II.12 la Perte d'énergie par phonon :

La figure II.19 représente la perte d'énergie par phonon sous l'effet des ions incident et portant toujours dans le cas relatif aux atomes de recul. le nombre des atomes de recul est plus important que le nombre d'ions incidents (Ar^+ , Kr^+) ; pour des valeurs d'énergie basse inférieur à 15 Kev la cible devient sensible au ralentissement nucléaire. ce qui crée un grand nombre des atomes de recul par rapport à celles des ions primaires donc on conclure que l'énergie perdue sous forme de phonons par les atomes de recul est supérieur à celle perdue par les ions primaires.

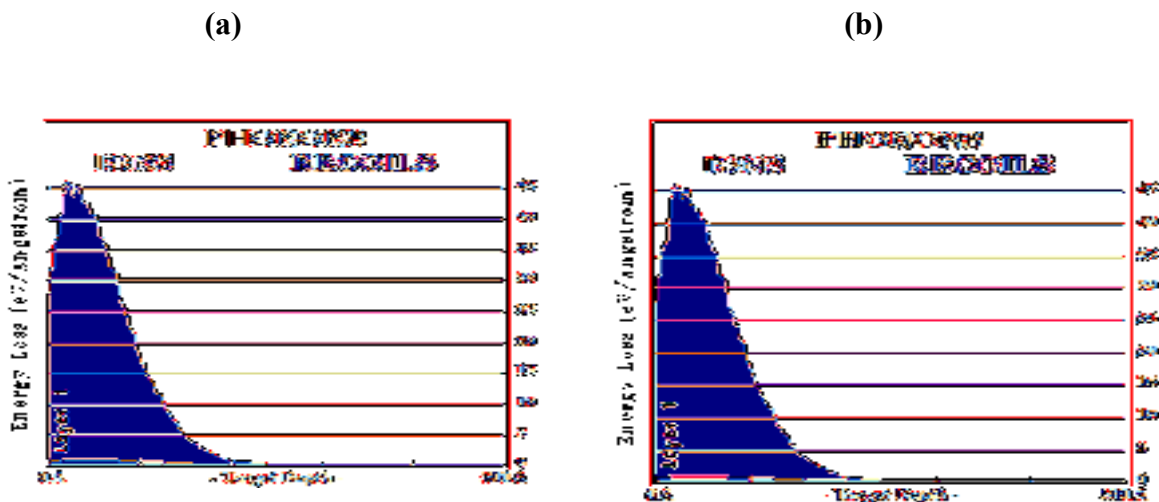


Figure II. 19 : création des phonons

(a) Pour les ions de Ar^+ (b) pour les ions Kr^+

II.13 Production des lacunes :

La figure II.20 représente la distribution des lacunes dans la cible de Germanium qui créent par Ar^+ et Kr^+ , elle montre les résultats de simulation de la production des lacunes dans la cible en fonction de la profondeur, on trouve aussi les lacunes se produit à une profondeur R_p autour de laquelle les courbes obtenues est quasiment gaussienne mais on peut assimiler les distributions obtenus par les lois gaussiennes centrées à une profondeur $R_p=83 A^0$ pour Ar^+ et $R_p=61 A^0$ pour Kr^+ ; donc on remarque que la concentration des lacunes qui créent par les ions de Krypton en profondeur R_d supérieur à celle crée par les ion d'Argon..

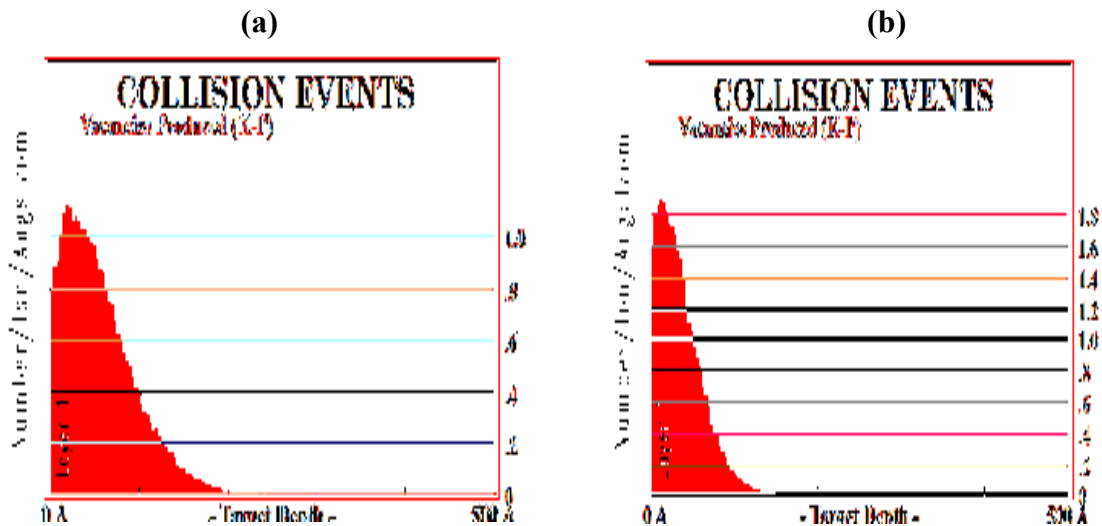


Figure II.20 :distribution des lacunes dans la cible de Ge qui crée par les ions

(a) Pour les ions de Ar^+ (b) pour les ions Kr^+

Production des lacunes	Ar^+	Kr^+
Ions	0.59	0.52
recul	3.20	3.56

TabII.7 production des lacunes pour chaque ion dans la cible de Ge

• la Comparaison entre les deux cibles :

On choisit l'ion de l'Argon Ar^+ :

(a)

Paramètres de distribution	R_p	ΔR_p	Skewness α	Kurtosis β
GaAs	$83A^0$	$48A^0$	0.6395	3.2311
Ge	$83A^0$	$48A^0$	0.6620	3.1848

On choisit l'ion de Krypton Kr^+ :

(b)

Paramètres de	R_p	ΔR_p	Skewness α	Kurtosis β
---------------	-------	--------------	-------------------	------------------

Chapitre 02 : simulation de l'interaction ions-matières par Code SRIM

distribution				
GaAs	$61A^0$	$31A^0$	0.6099	3.2697
Ge	$61A^0$	$31A^0$	0.6308	3.2964

TabII.8.a.b les paramètres de distribution dans le Ge et le GaAs

Pour les ions d'Argon Ar^+ :

(a)

Type de semi-conducteur	GaAs	GaAs	Ge	Ge
Ions ou recul	ions	Atomes de recul	ions	Atomes de recul
Perte d'énergie par ionisation	12.20	14.10	12.76	14.15
Perte d'énergie par phonons	2.72	67.61	1.65	67.65
Production des lacunes	2.72	67.61	0.59	3.20

Pour les ions de Krypton Kr^+ :

(b)

Type de semi-conducteur	GaAs	GaAs	Ge	Ge
Ions ou recul	ions	Atomes de	ions	Atomes de

Chapitre 02 : simulation de l'interaction ions-matières par Code SRIM

		recul		recul
Perte d'énergie par ionisation	6.01	15.76	6.23	15.86
Perte d'énergie par phonons	2.12	72.48	1.26	72.58
Production des lacunes	0.64	2.99	0.52	3.56

TabII.9.a.b comparaison entre les deux cibles (GaAs, Ge)

II.14 Conclusion :

Dans ce chapitre (la simulation de l'interaction des ions Ar^+ et Kr^+ dans les cibles de GaAs et Ge par le logiciel SRIM 2003), plusieurs résultats ont été obtenue par la simulation, ce logiciel est utilisé dans plusieurs domaines, essentiellement dans le domaine de l'implantation ionique pour calculé les phénomènes cinétiques associés aux pertes d'énergie des ions, ce logiciel basé sur la méthode de Monte Carlo, il montre les phénomènes de collision entre les ions de Ar^+ et Kr^+ dans la cible GaAs et Ge, ont à étudiées les processus de perte et de transfert d'énergie, et on a obtenu les différents redistributions des ions (en profondeur latérale et à trois dimensions) on a estimés plusieurs paramètres tel que le parcours projetés R_p la déviation standard ΔR_p le parcours latéral ΔR_{\perp} et l'étude de la formation de défauts, nous avons obtenir les différents paramètres de redistribution possibles à savoir : la production des lacunes, le phénomène d'ionisation et la création de phonons [4]

Chapitre III

III.1 Introduction :

L'avancement de la théorie de l'interaction électron-matière et le développement des méthodes de simulation de type Monte Carlo a permis de trouver des réponses aux différentes questions relatives au volume d'interaction, qui n'est pas facile à obtenir expérimentalement. [1]. Il existe plusieurs logiciels de simulation de cette interaction. mais le plus rapide et le plus accessible sur le net est Casino sous plusieurs versions. Le logiciel casino V2.42 et V2.64 dont l'acronyme est monte Carlo Simulation of electron trajectory in solid apparait 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].

Dans ce chapitre, nous analyserons le phénomène de transmission et de distribution des électrons dans les cibles Ge et GaAs, respectivement. Nous décrivons 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.2 Présentation du logiciel Casino :

CASINO (Monte Carlo Simulation of electrons in solids) est utilisé. Comme son nom l'indique, 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.3 Comment créer une simulation par "CASINO" [3] :

1. Sélectionnez File / New dans le menu ou cliquez sur l'icône open.

Ensuite vous verrez une boîte de dialogue "Edite layer ". Pour ajouter un calque, appuyez simplement sur le bouton ADD LAYER. Vous pouvez également supprimer le calque que

vous ne voulez pas en utilisant le bouton REMOVE SELECTED LAYER (voire la figure III.1).

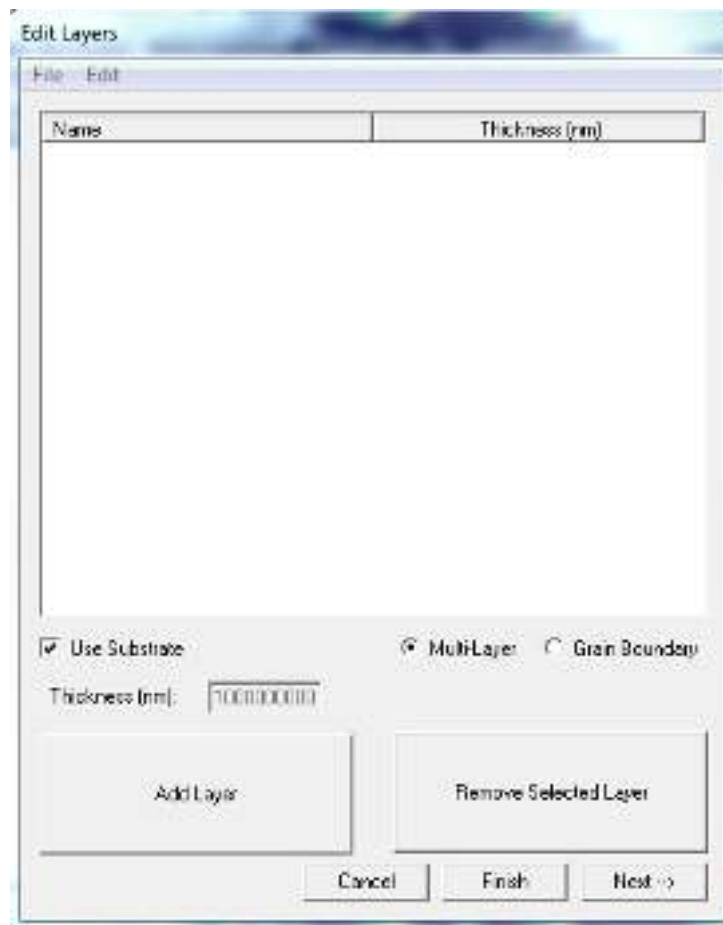


Figure III.1 : la boîte de dialogue "Edite layer " de CASINO

2. 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-LYER 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.
3. Double-cliquez sur la couche que vous souhaitez modifier. Une boîte de dialogue "layer chemical composition" apparaît.

- ✓ entrer la composition chimique dans la boîte COMPOSITION EDIT BOX.
- ✓ La densité sera calculée automatiquement à partir des fractions atomiques
- ✓ Vous pouvez également modifier les fractions atomiques ou les fractions de poids manuellement en cliquant simplement sur la valeur que vous souhaitez modifier
- ✓ Pour enregistrer un élément en vue d'une utilisation ultérieure, nommez-le et appuyez sur ADD TO LIBRARY (voire la figure III.2).

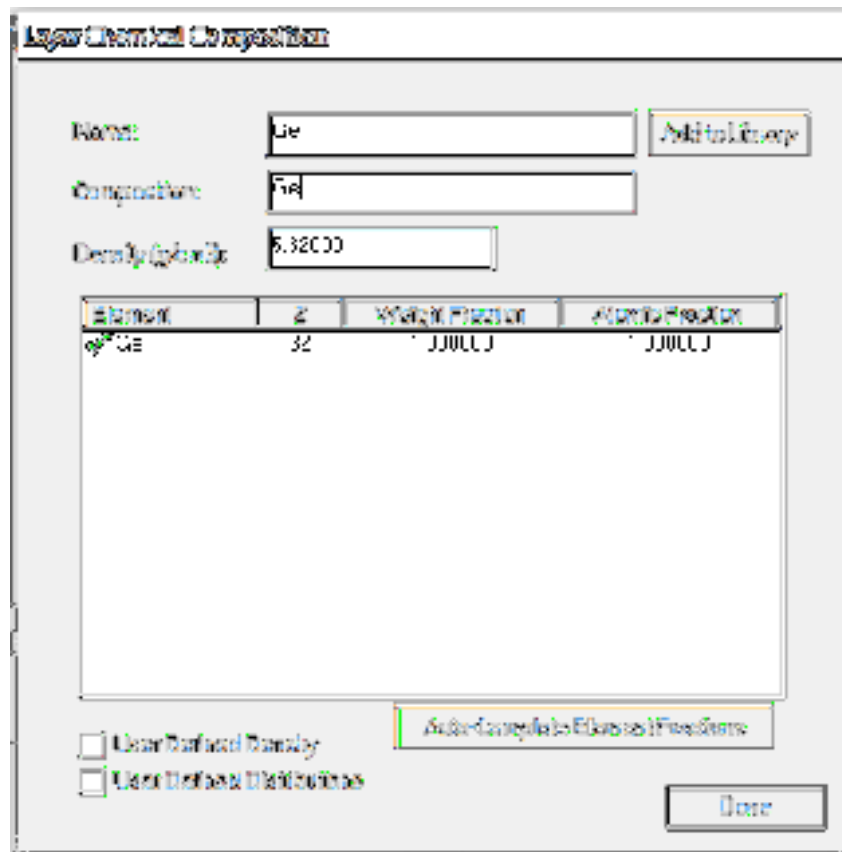


Figure III.2 : la boîte COMPOSITION EDIT BOX.

Une fois terminé, appuyez sur “Next” pour passer à la boîte de dialogue suivante “MICROSCOPE AND SIMULATION PROPERTIES”.

4. Configuration du “Microscope and Simulation” (voire figure III.3) :

- ✓ Tout d’abord, entrez l’énergie utilisée pour votre simulation. La première case est celle où vous définissez votre énergie de départ, la seconde est l’énergie à laquelle vous souhaitez arrêter la simulation et la troisième case indique l’étape en KeV entre chaque simulation.
- ✓ Si l’énergie de fin est inférieure ou égale à celle du départ, l’étape sera ignorée et une seule simulation à l’énergie de départ sera effectuée.
- ✓ Deuxièmement, entrez le nombre d’électrons que vous souhaitez simuler.

- ✓ Troisièmement, les paramètres du faisceau, la première zone représente l'angle d'incidence des électrons dans l'échantillon et la seconde contient la largeur du faisceau
- ✓ Quatrièmement, définissez l'angle de votre détecteur de rayons X.
- ✓ Enfin, définissez les limites de votre 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.

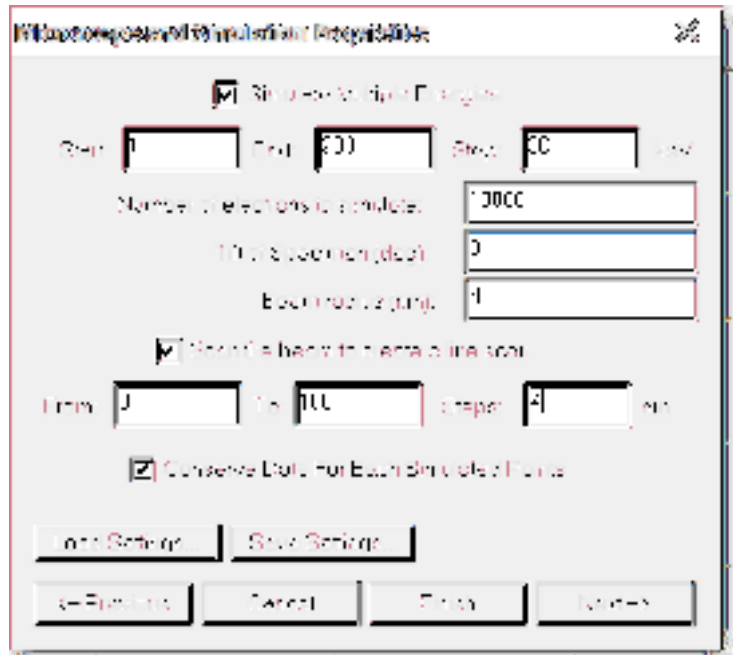


Figure III.3 : la boîte "Microscope and Simulation"

5. Vous pouvez maintenant voir la boîte de dialogue «Distributions» (Figure III.4).
Cochez la case pour chaque distribution que vous voulez voir après les calculs.
Entrez le nombre de points que vous souhaitez attribuer à chaque distribution.
Passez à l'étape suivante.

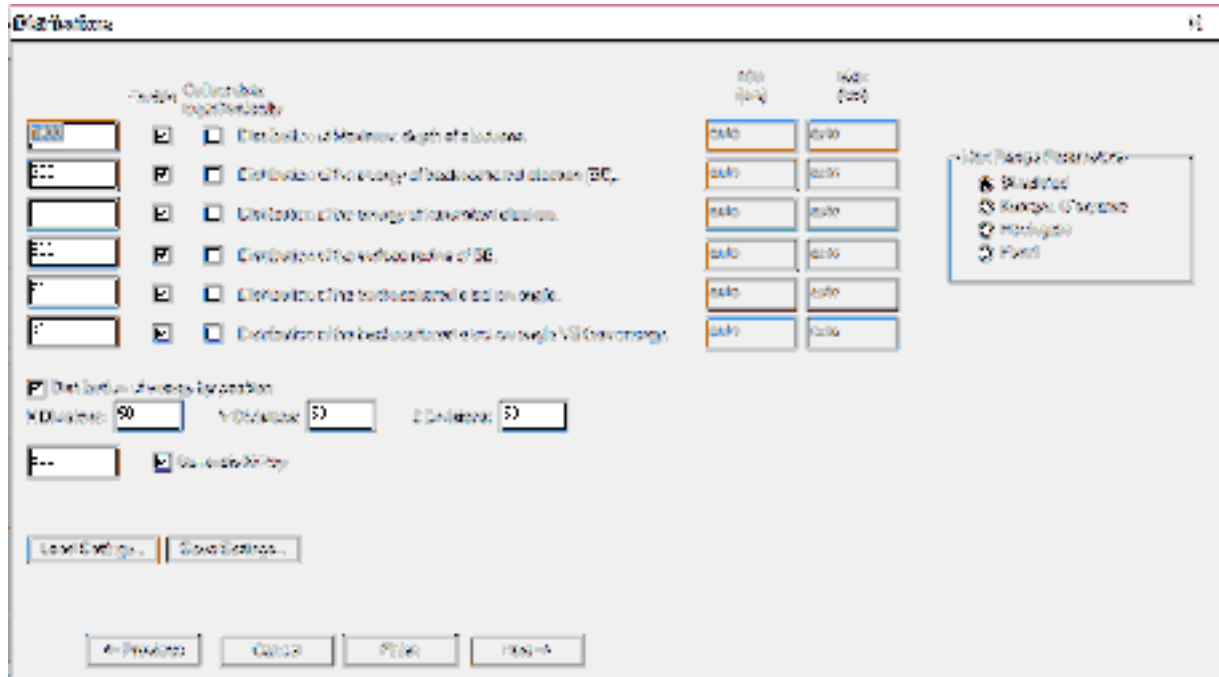


Figure III.4 :la boîte de dialogue «Distributions»

6. Voici la boîte de dialogue «options» (Figure III.5) :

Il y a quelques options d'utilisation :

- ✓ “Conserving NONE” :ne mémorisera aucune trajectoire, ce qui signifie qu’il n’ya 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.sélectionné 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.

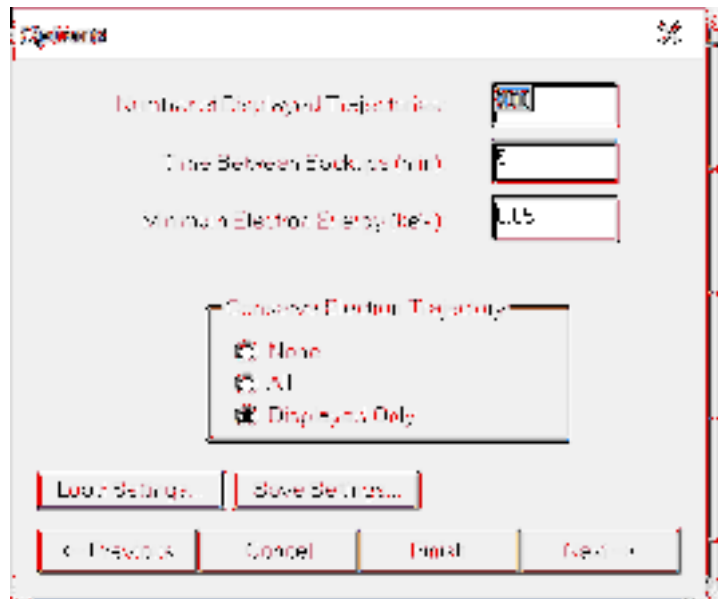


Figure III.5 :la boîte de dialogue «options»

7. Voici la boîte de "ChoosingPhysicalModels" (Figure III.6) : Si vous ne savez pas quel modèle fait quoi, passez à l'étape suivante

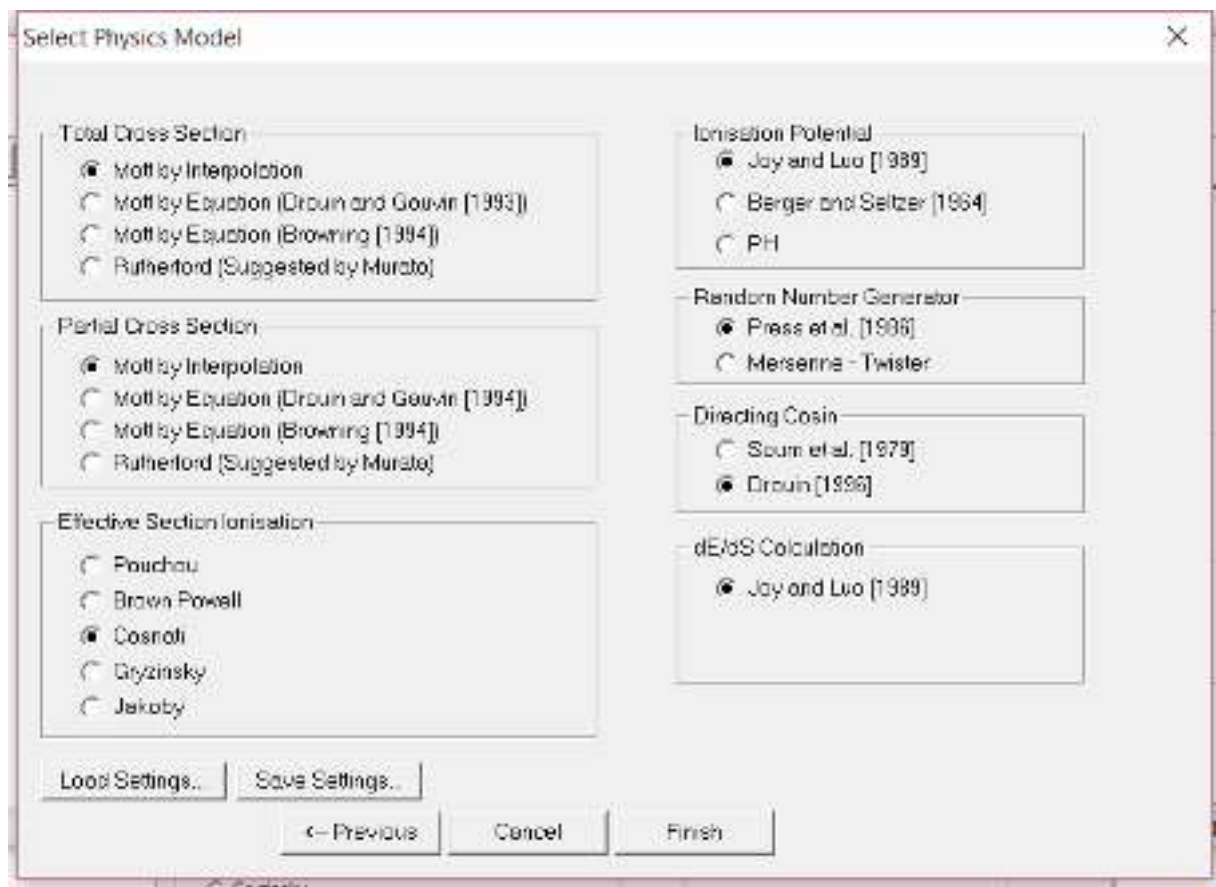


Figure III.6 :la boîte de "ChoosingPhysicalModels"

8. Appuyez sur FINISH lorsque votre simulation est prête à être calculée et passez à l'étape suivante.
9. La fin : Après avoir appuyé sur FINISH, il vous sera demandé si vous souhaitez commencer la simulation, appuyez sur YES si vous souhaitez sinon appuyer sur NO.

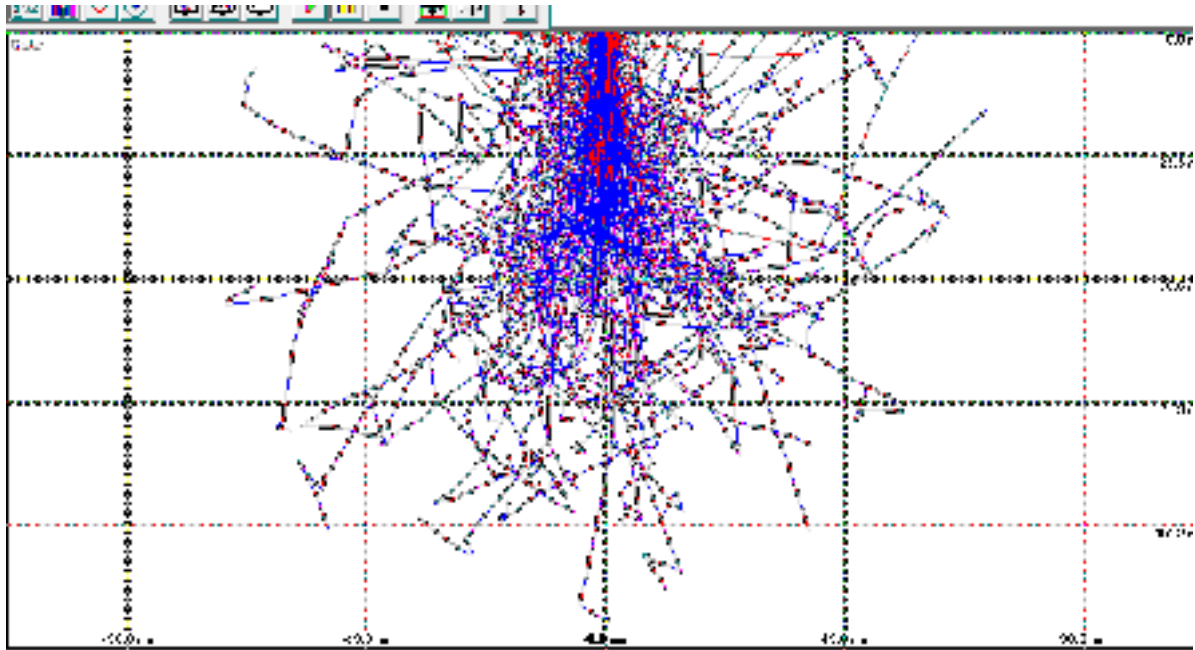


Figure III.7 : P'fin de simulation des trajectoires des électrons

III.4 Présentation de notre travail (condition de simulation):

Dans notre travaille, nous allons faire des calculs avec :

- ✓ 10000 électrons incidents
- ✓ L'énergie des'électrons est 20 keV dans notre simulation
- ✓ Les cible choisi est toujours silicium (Ge) 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.5 Résultats et discussions :

A) La distribution des électrons dans les cible Ge et GaAs :

Une fois les données injectées et en particulier le nombre d'électron fixé (10000) comme affiché précédemment, le logiciel commence son calcul numérique et montre les trajectoires des électrons aléatoires prises par les différent électrons dans le matériau Ge et le matériau GaAs, comme montré sur la figure III.8 et la figure III.9 respectivement .

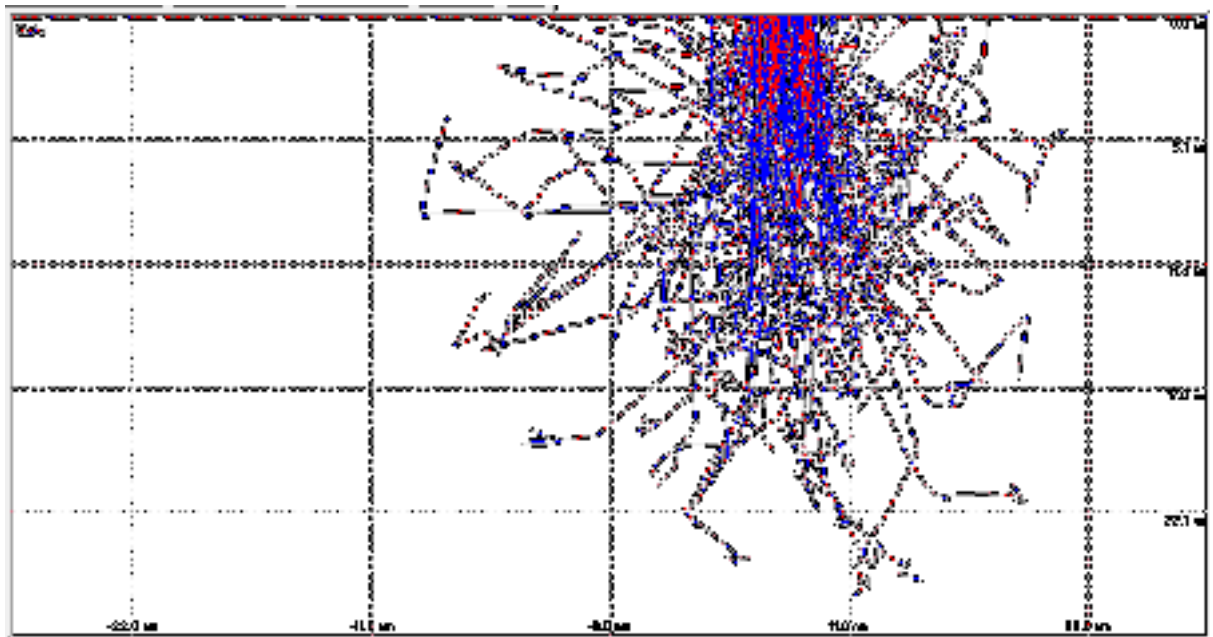


Figure III.8 : Trajectoire des électrons d'énergie 20 keV dans la cible GaAs (5000nm)

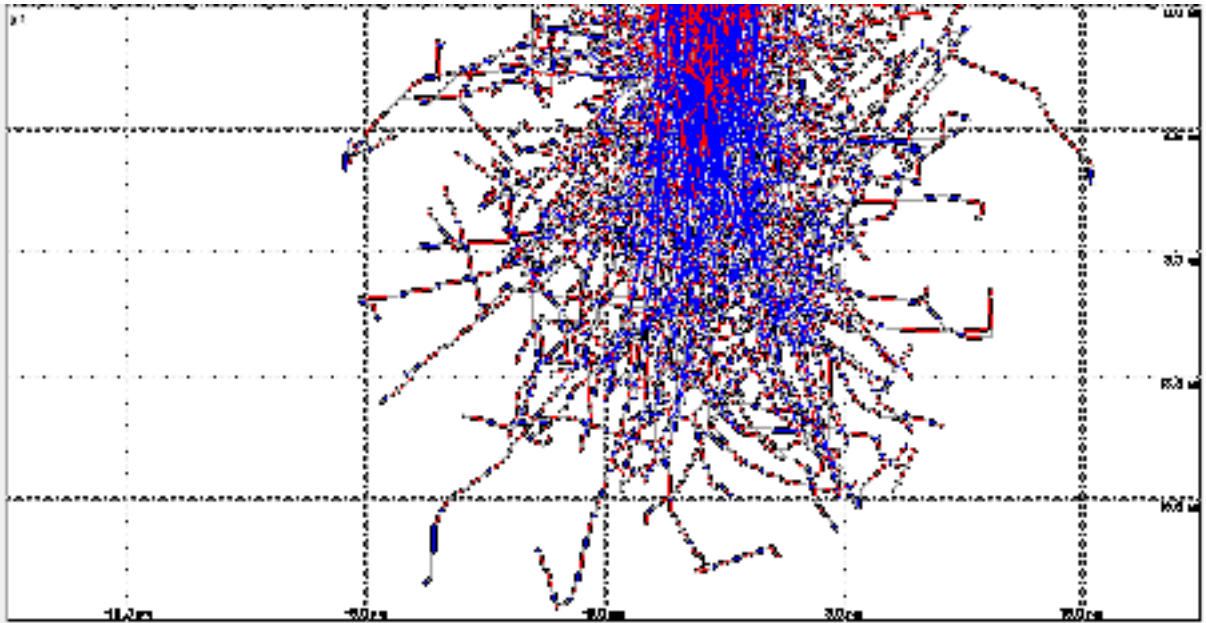


Figure III.8 :Trajectoire des électrons d'énergie 20 keV dans la cible
Ge(5000nm)

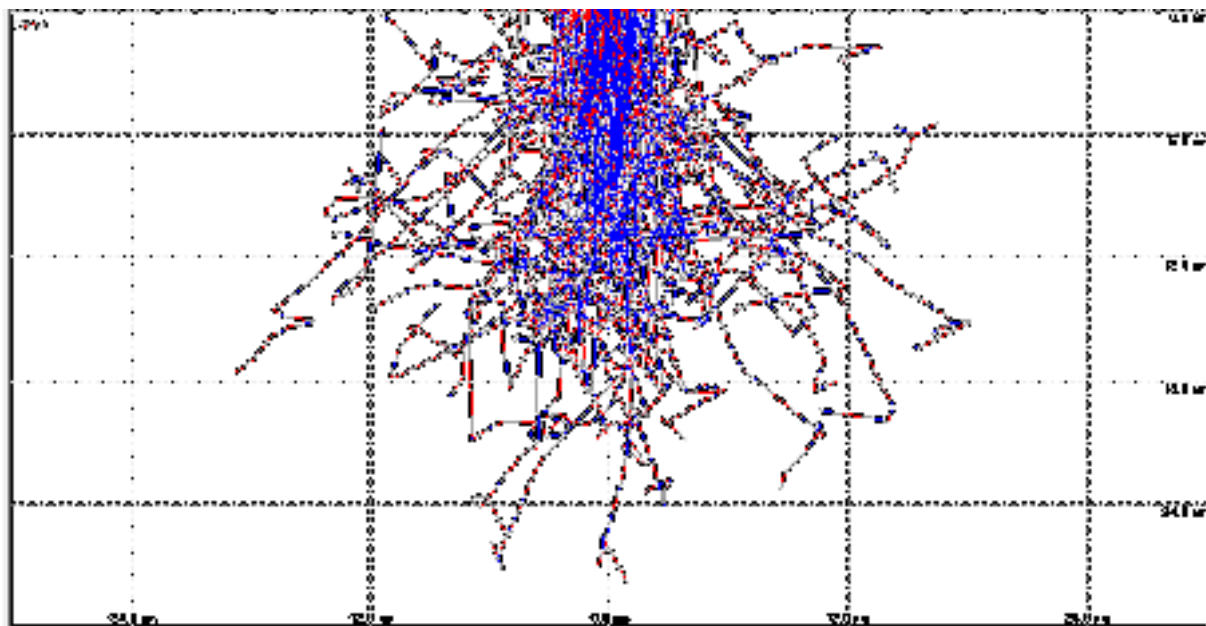


Figure III.9 :Trajectoire des électrons d'énergie 20 keV dans la cible GaAs
(5000nm)

Note : les électrons primaires pénétrants sont en bleu et les électrons rétrodiffusés sont en rouge

D'après les figures (III.8 et III.9) on constate que :

Les trajectoires des électrons s'arrêtent à une profondeur maximale d'environ R_e (900-1100) nm de la surface irradiée pour la cible de Ge par contre ; dans le cas d'une cible GaAs on trouve que la profondeur de pénétration maximale des électrons est d'environ R_e (500-600) nm .

- ✓ Cette différence entre les volumes d'interaction du Ge et de GaAs est due à la différence de numéro atomique Z et la densité ρ des deux matériaux ,qui jouent un grand rôle dans la relation de parcours électronique .
- ✓ Les électrons pénétrant dans la cible GaAs perdu leur énergie à cause des chocs successives avec les atomes cible sont s'arrêtent rapidement à une profondeur moins que celle dans la cible Ge.
- ✓ 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[4].

Pour mieux visualiser la redistribution des figures (III.8 et III.9), nous reportons sur les deux figures (III.10 et III.11) Distribution normalisée des électrons en fonction de la profondeur pour les deux cibles Ge et GaAs respectivement.

Les deux figures montre que la distribution des électrons

Les deux figures montre que la distribution des électrons dans les deux matériaux est gaussien centré à 400 nm pour Ge et à 210 nm pour GaAs. La pénétration maximale des électrons dans les cibles Ge et GaAs sont 900 nm et 600 nm respectivement .

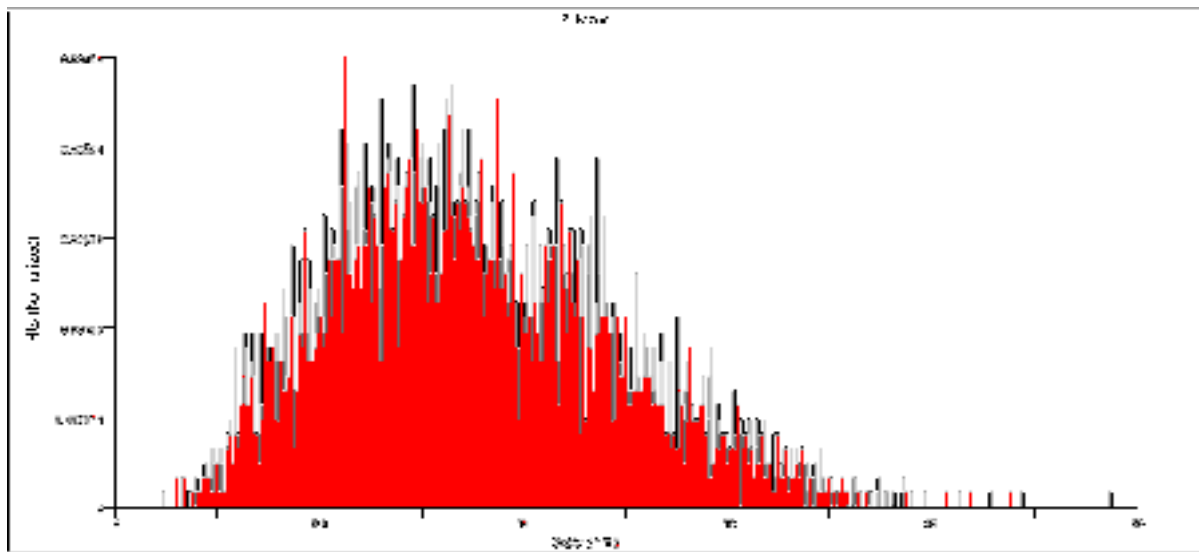


Figure III.10 :Distribution normalisée des électrons dans la cible Ge en fonction de la profondeur.

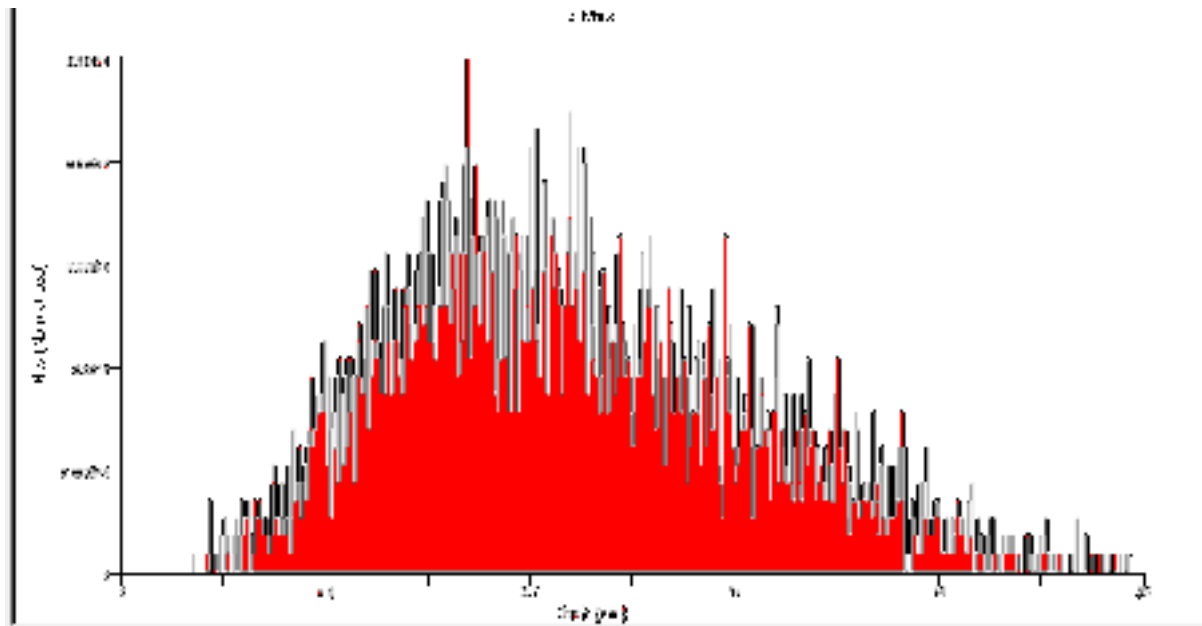


Figure III.11 : Distribution normalisée des électrons dans la cible GaAs en fonction de la profondeur

La figure III.12 et la figure III.13 montre la répartition en pourcentage des électrons bombardant la surface des cibles Ge et GaAs respectivement à une incidence normale. Cette répartition forme la poire d'interaction rayonnement électronique – matière. A l'énergie de 20 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 Ge.

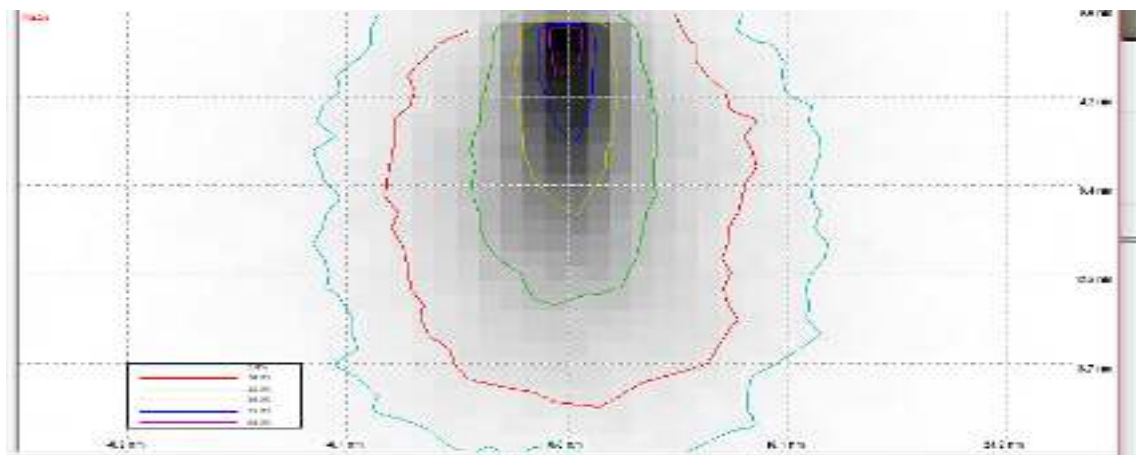


Figure III.12 : Répartition des électrons dans la poire d'interaction électrons-matière pour GaAs

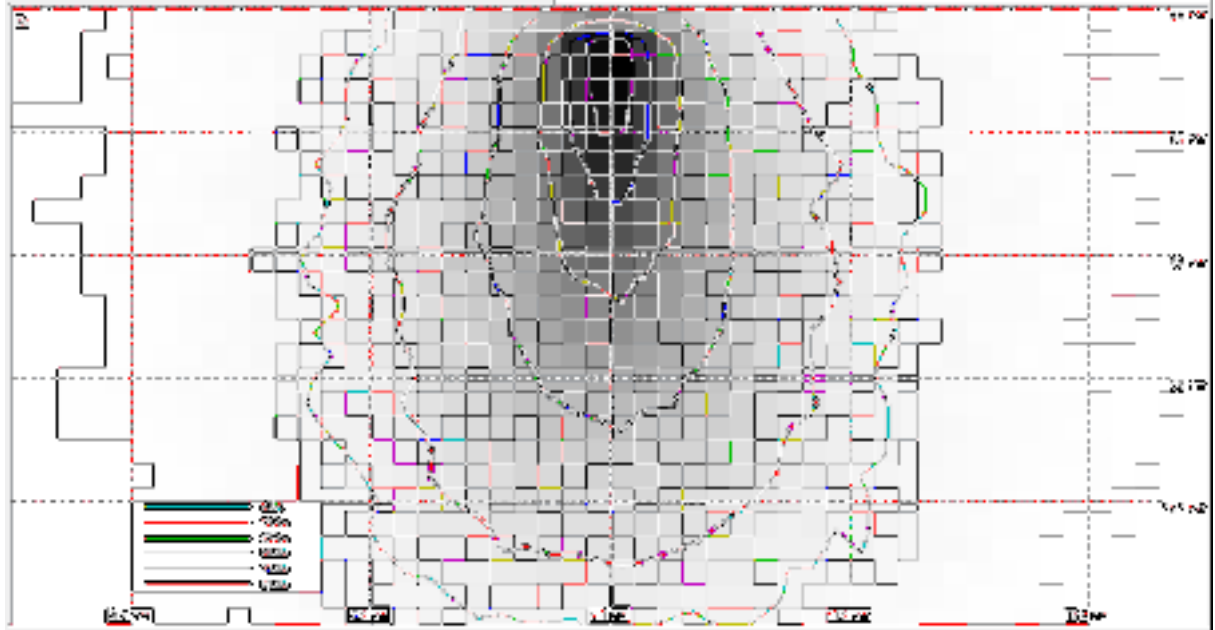


Figure III.13 :Répartition des électrons dans la poire d'interaction électrons-matière pour Ge

B) 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 [5]. 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 laDistribution normalisé des électrons rétrodiffusés en profondeur des cibles Ge et GaAsComme décrit ci-dessous sur les figure III.14 et III.15 respectivement D'après ces figures :

Pour la cible Ge :

- ✓ la distribution des électrons rétrodiffusés est quasi-gaussien centré a une profondeur environ de 400 nm
- ✓ les électrons rétrodiffusés sont positionné à une profondeur maximale environ de 800 nm .

Pour la cible GaAs :

- ✓ la distribution des électrons rétrodiffusés est quasi-gaussien centré a une profondeur environ de 70 nm .

- ✓ les électrons rétrodiffusés sont positionné à une profondeur maximale environ de 240 nm.

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 descollisions élastique avec la cible qui donne naissance à des électrons rétrodiffusés.

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

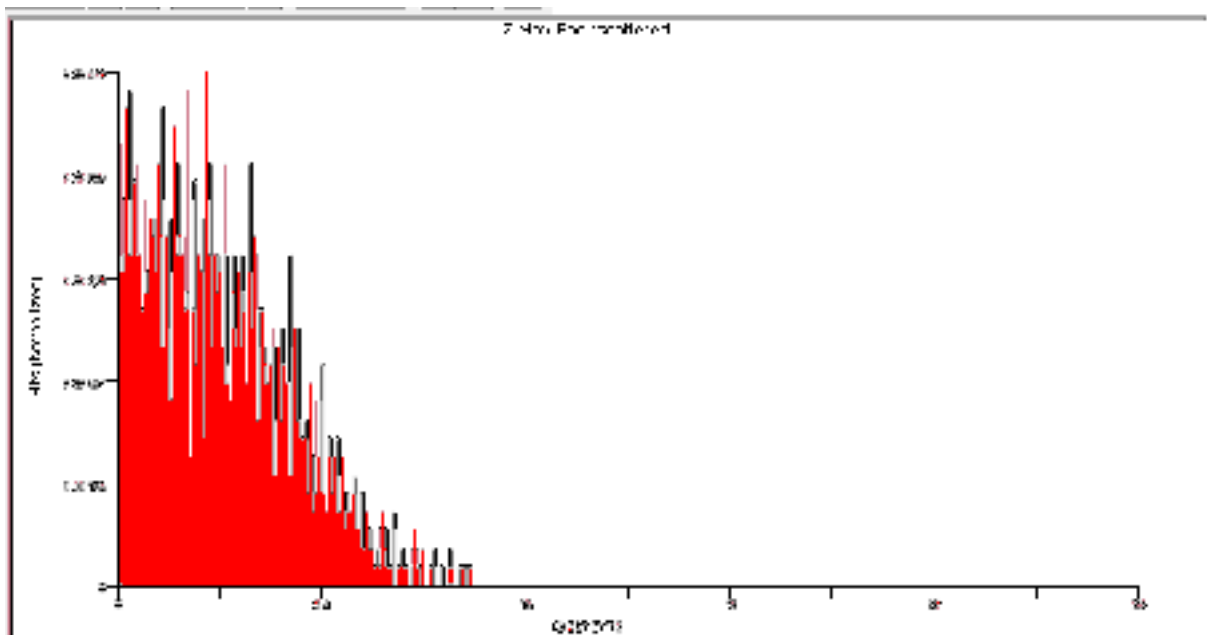


Figure III.14 :Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés dans la cible Ge en fonction de la profondeur.

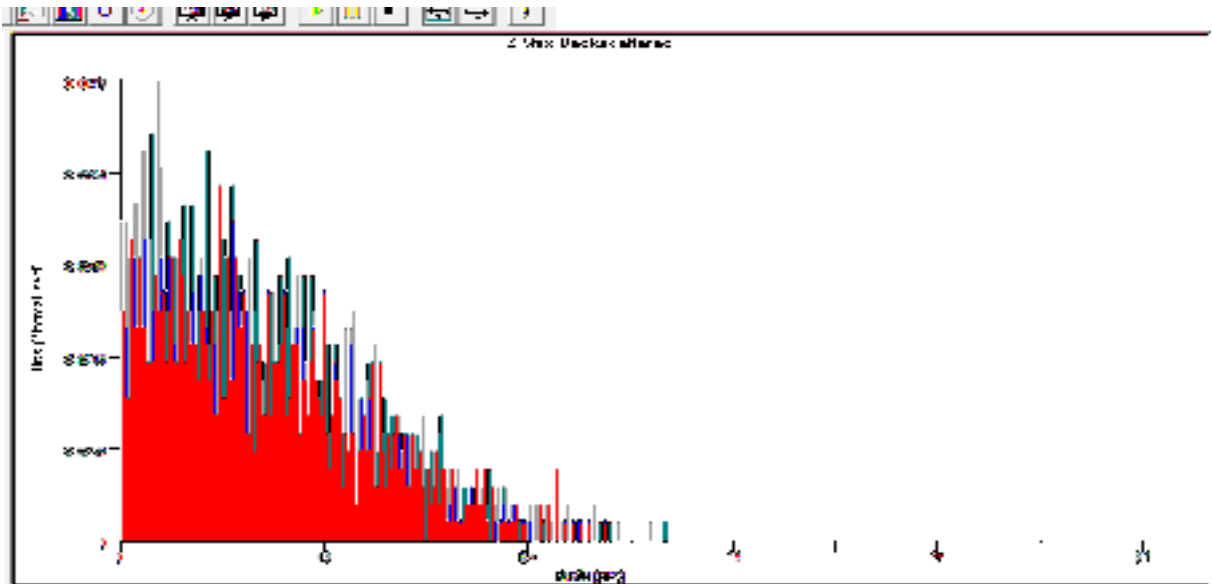
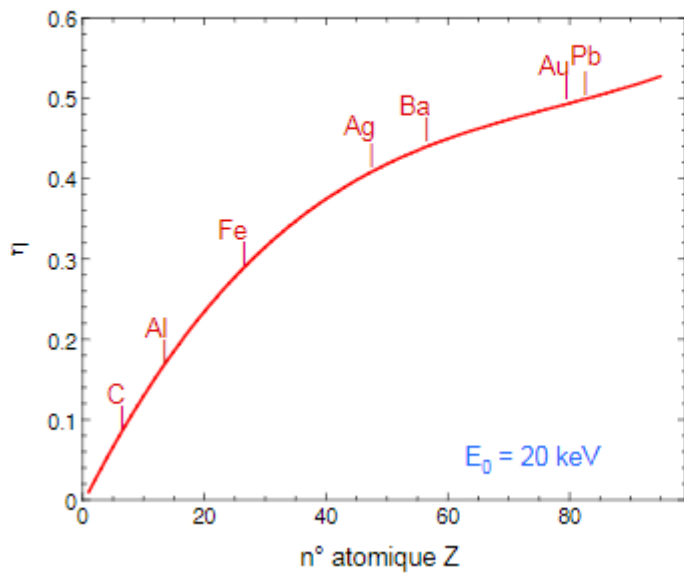


Figure III.15 :Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés dans la cible GaAs

Les coefficients de rétrodiffusion η des électrons pour les deux cible Ge et GaAs sont : 0.140400 et 0.322500 respectivement ce qui est en bon accord avec le résultat expérimental du littérateur (voire figure III.16).



Le coefficient de rétrodiffusion augmente avec le numéro atomique

Figure III.16 :Variation du coefficient de rétrodiffusion en fonction du numéro atomique Z[6]

C) 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 [7]

Les rayons émis (la gamme s'étend de l'U.V à l'I.R) s'appelés Les rayons deCathodoluminescence (figure III.17).

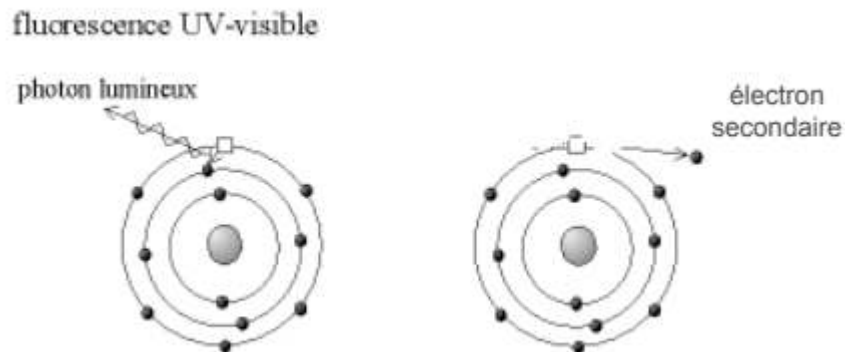


Figure III.17 : les phénomènes de Cathodoluminescence[8]

Sur les Figure (III.18 et III.19) on montre l'existence des rayons CL (%) émis en fonction de la profondeur pour les deux matériaux Ge et GaAs respectivement.

D'après les deux figure on constat que :

- ❖ Pour la cible Ge : la distribution des photons émis par les atomes de cible est gaussien centré a une profondeur 400 nm qui correspondre au une proportion maximale d'intensité (4.6%)
- ❖ Pour la cible GaAs : la distribution des photons émis par les atomes de cible est gaussien centré a une profondeur 90 nm qui correspondre au une proportion maximale d'intensité (4.7 %)
- ✓ La différence des intensités émis des photons CL dans GaAs et Ge est due a la différence de l'énergie de gap E_g talque : $E_g(\text{GaAs}) > E_g(\text{Ge})$, mais la distribution des intensités de ces photons en profondeur est plus grande pour Ge car l'électron pénètre plus profondément dans cette cible que GaAs

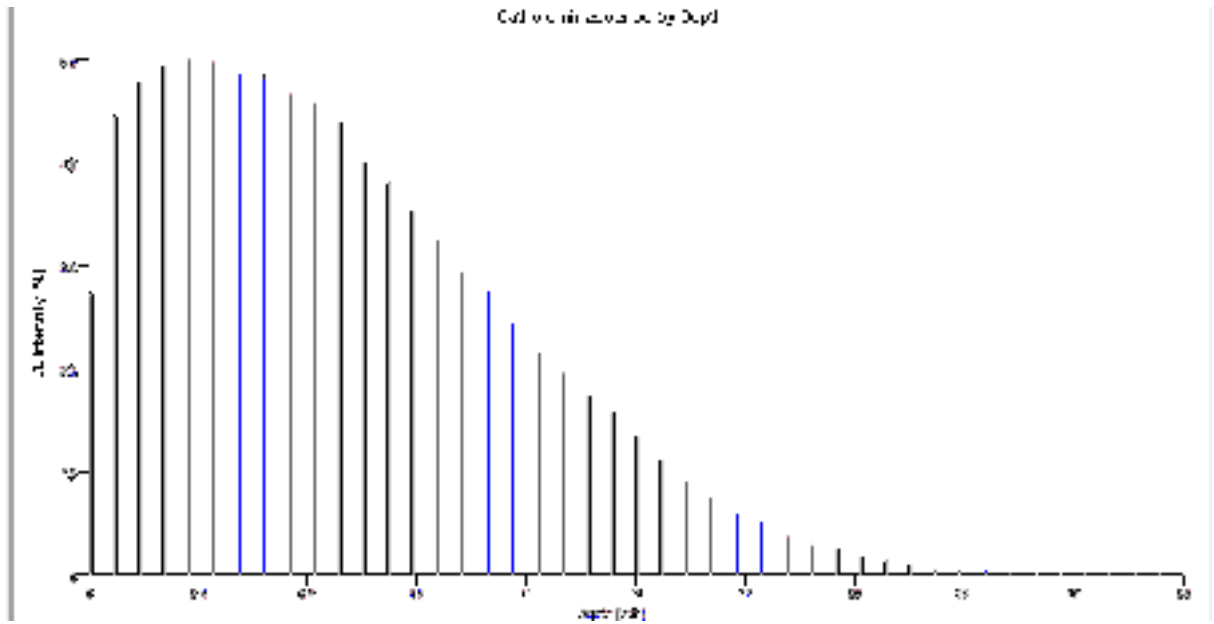


Figure III.18 : les variations de l'intensité CL (%) émis par Ge en fonction de la profondeur

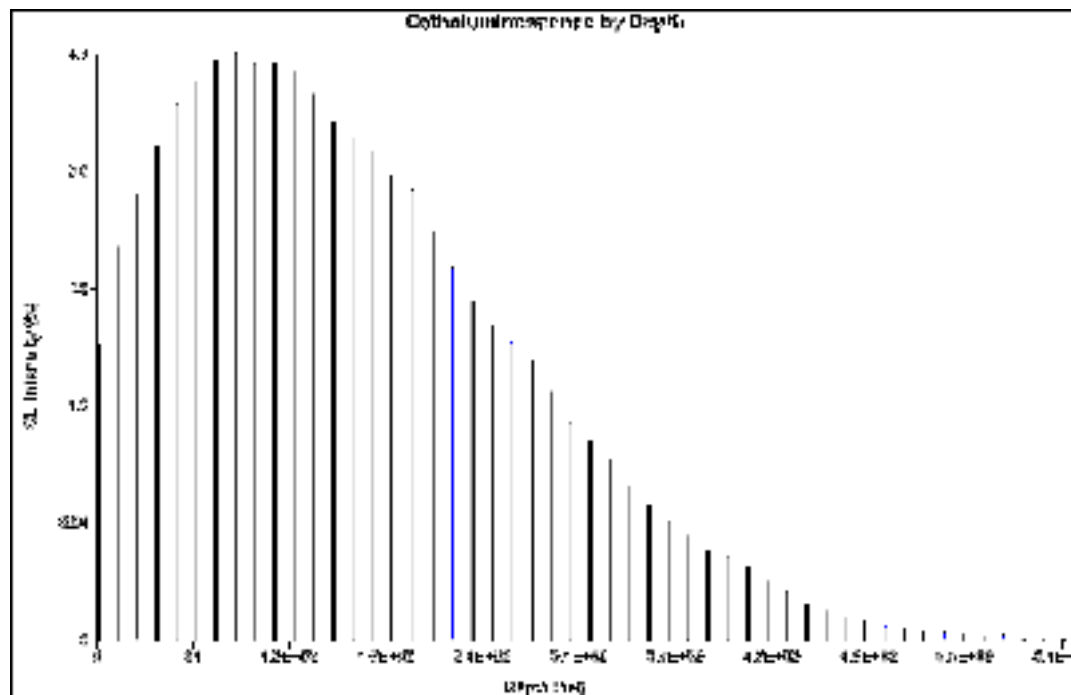


Figure III.19 : les variations de l'intensité CL (%) émis par GaAs en fonction de la profondeur

D) 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.20).

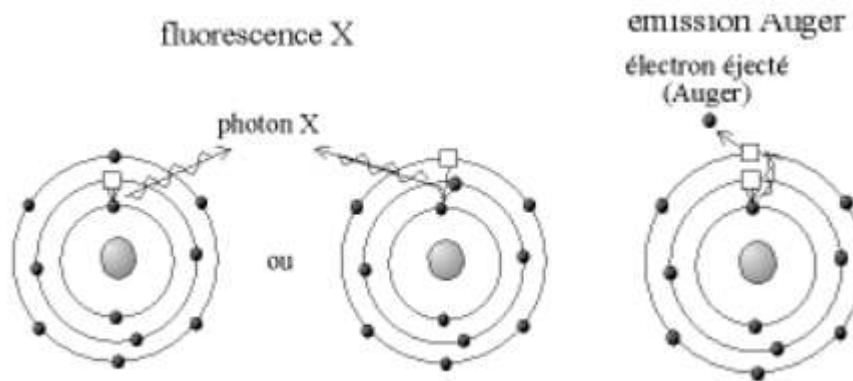


Figure 20 : les phénomènes lie a l'émission des rayon X [8]

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.21 et III.22 et III.23) 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 Ga et GaAs à une énergie cinétique 20 KeV et émis par chacun des trois atomes constituant à savoir le Ge ; le gallium Ga et l'arsenic As en fonction de la profondeur de pénétration.

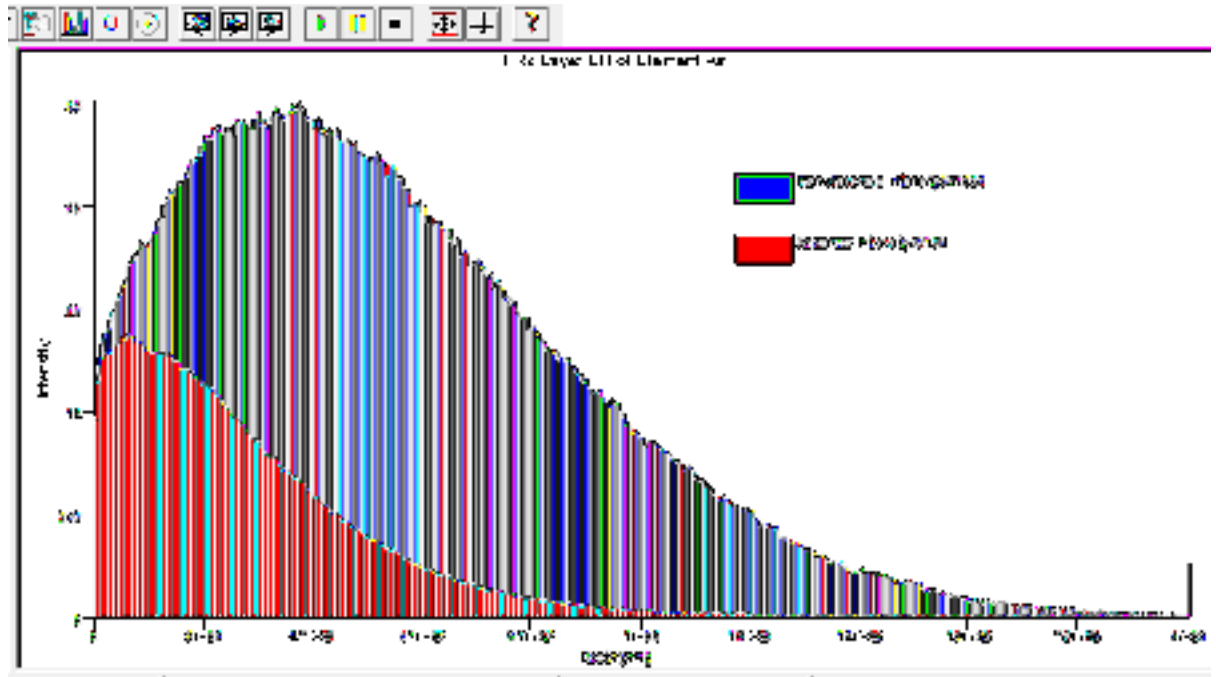


Figure III.21 :variation des intensités RX émises par l'atome d'arsenic As

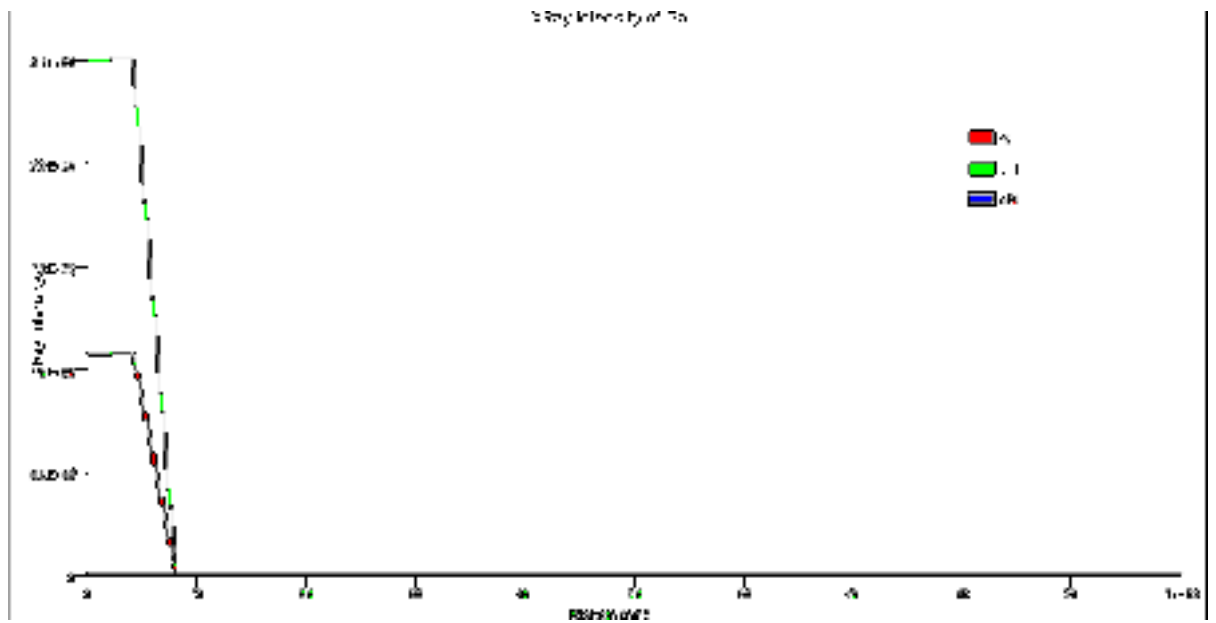


Figure III.22 :variation des intensités RX émises par l'atome d'arsenic Ga

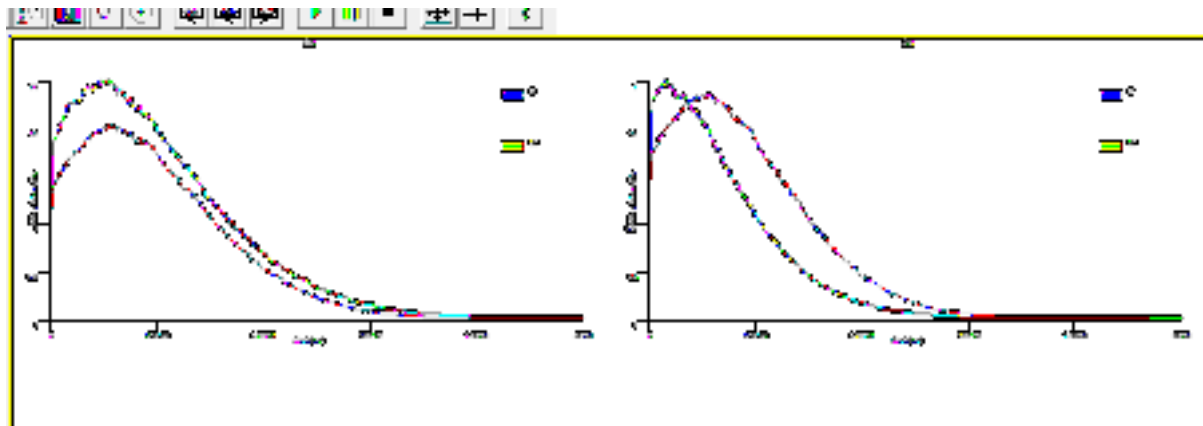


Figure III.23 :variation des intensités RX émis par l'atome GaAs

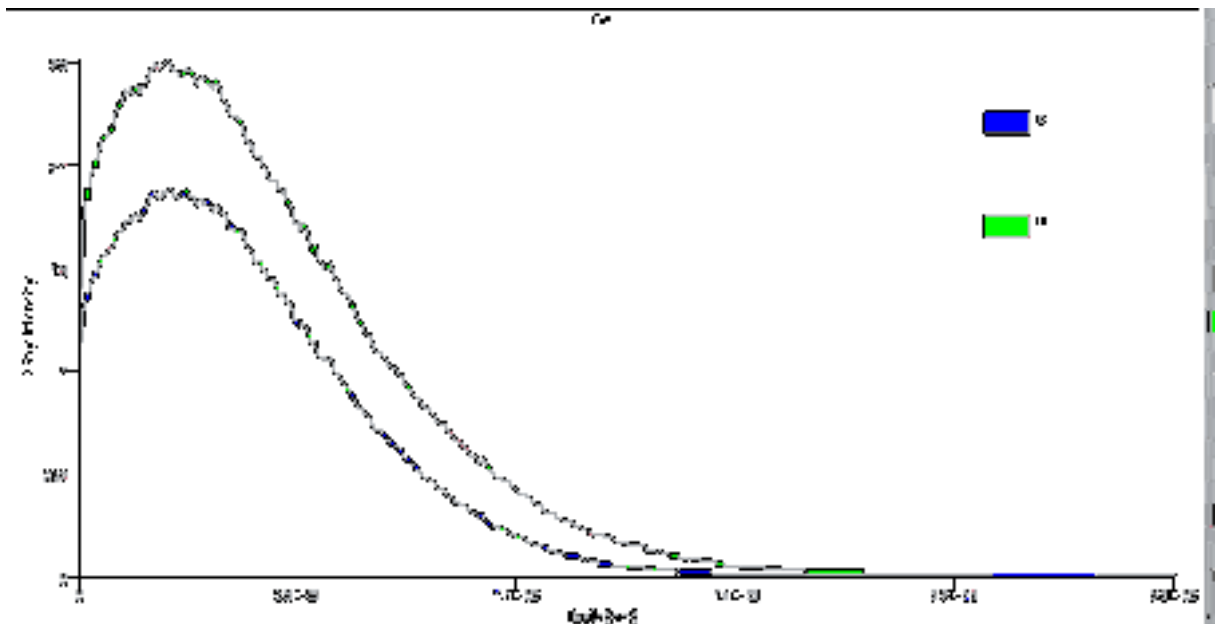


Figure III.24 :variation des intensités RX émis par l'atome Ge

- ❖ **Analyse et discussion** :d'après les figures précédentes on trouve que la fonction de distribution en profondeur des rayons X qui est gaussienne pour les trois atomes (Ge -Ga-As) sachant que les intensités maximales ,ce rayons est situé à des profondeurs des collisions successives maximales :

Ge : 150nm

Ga : 90nm

As : 90nm

les électrons incident va interagie avec les électrons orbitales des atomes qui situées dans les niveau de cœur , cette interaction provoque l'éjection de ce dernier hors de l'atome (ionisation), Une lacune apparaît sur le niveau interne et l'atome se trouve dans un état excité,Il revient à un état d'équilibre par le déplacement d'un électron d'un niveau moins énergétique vers le niveau instable,Cette désexcitation s'accompagne d'une perte d'énergie égale à la différence d'énergie des deux niveaux mis en jeu. Cette libération d'énergie s'accompagne de l'émission d'un photon X dont l'énergie est caractéristique de l'atome ionisé.

Les rayons X résultant de cette interaction peuvent interagie avec les atomes de la cible par trois types de mécanisme : la diffusion Rayleigh, la diffusion Compton et l'effet photoélectrique tell que une partie de ces rayon 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 a la différence entre deux niveau d'énergie il sera absorbé sinon va émis hors de la cible

L'énergie de 20 KeV peut arracher la série L de l'élément Ge pour arrache le même série pour les éléments (Ga As) c'est pour ca on trouve que les électrons arrachant pour les deux derniers éléments sont les électrons de la série L_{III} puisque l'énergie minimale pour arracher les série dans chaque élément augment par l'augmentation de numéro atomique de même élément.

- Comme les électrons incidents (20 KeV) peuvent arracher les électrons de la couche L pour l'atome Ge 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 mais comme un element arracer 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 couche externe et la couche L va produire des rayonnements X en profondeur avec faible quantité par rapport a l'autre transition (vers la couche K) ex le silicium.

III.6 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 Ga, 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 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

Conclusion générale

Ce travail nous permis de nous familiariser avec deux logiciels simulant l'interaction des électrons et l'interaction des ions avec la matière. Ces deux logiciels utilisent la méthode de Monte Carlo qui est un puissant outil mathématique permettant de résoudre beaucoup de problèmes liés aux phénomènes aléatoires comme les trajectoires des ions et des électrons dans la matière solide de certains cible a bas de semi-conducteur étudiés dans le présent mémoire, les techniques de simulation des électrons et des ions bombardant une surface des matériaux est connue expérimentalement soit dans les MEB en tant que microscopie électronique ou dans le nettoyage des surfaces par les ions argon comme c'est le cas pour la majorité des échantillons semi-conducteurs avant de les introduire dans la chambre d'analyse pour les caractériser avec les techniques spectroscopiques, ce travail nous permis aussi de comprendre beaucoup des phénomènes physiques et leur théorie pour les deux type d'interactions et nous donné un aperçu sur les applications des cours que j'ai appris auprès de mes enseignants de la physique des matériaux . Les trois chapitres traités dans ce mémoire nous donne une idée claire sur la recherche scientifique et en particulier celle relative à la simulation des phénomènes physiques en relation étroites avec la physique théorique.

En conclure que Ce travail nous permis en particulier de m'initier à la recherche scientifique que je compte aborder, dans un futur proche, avec une grande persévérance si l'occasion me sera donnée pour préparer une thèse de doctorat.

Résumé

ملخص:

محاكاة المسارات العشوائية للأيونات والالكترونات خلال قذفها على سطح مركبات أشباه النواقل بواسطة حزمة من الأشعة الأيونية أو الالكترونونية، على العموم تتم باستخدام طريقة مونتج كارلو. في البداية تحدثنا عن الجانب النظري لهاته الطريقة ثم استعملنا برامج TRIM (نقل وجمع الأيونات والمادة) من أجل محاكاة تفاعل الأيونات في المادة، واستخدمنا كذلك برامج (CASINO محاكاة مسار الالكترون في المواد الصلبة) لمحاكاة التفاعل مع المادة. هذه البرامج تسمح بتمثيل نتائج المحاكاة على شكل جداول ومنحنيات من أجل دراسة ظواهر مختلفة نذكر: السلطة المطلقة، المسافة بين الأيونات والمادة وآثار الأشعة X بواسطة حزمة من الاشعة الالكترونونية، تتم مقارنة النتائج باستخدام المجاهر MEB وتنشط المواد أشباه النواقل لصناعة المكونات الالكترونونية وخاصة الكهروضوئية.

Résumé :

La simulation des trajectoires aléatoires des ions et d'électrons, au cours du bombardement ionique et électronique de la surface de composés semi-conducteurs, en utilisant un faisceau d'ions ou un faisceau d'électrons. Elle est généralement faite en utilisant une méthode très importante, qui est la méthode de Monte Carlo, au début on a fait le coté théorique de la technique de Monte Carlo. Après on a utilisé le logiciel TRIM (Transport and Range of Ions in Mater) pour la simulation de l'interaction des ions avec la matière et logiciel CASINO (Monte Carlo Simulation of electroNtrajectory in Solid) ce dernier est utiliser pour simuler l'interaction des électrons avec la matière, ces deux logiciels permet de donner les résultats de la simulation sous formes de tableaux et de courbes, au but d'étudiées différents phénomènes comme le pouvoir d'arrêt, la distance parcourue des ions dans la matrice des semi-conducteurs, les effets de génération de rayon X par les faisceaux des électrons, c'est résultats sont comparées avec ceux si on utilise des Microscope MEB, et du dopage des matériaux semi-conducteurs dans le domaine de fabrication des composants électronique et particulièrement optoélectronique.

Abstract :

The simulation of random trajectories of ions and electrons when the surface of semi-conductor compounds were submitted to ions and electron beams bombardment. It is usually done using a very important method which is the Monte Carlo method, At the beginning we did the theoretical side of the technique after we used the software TRIM and CASINO for the simulation of the interactions of ions and electrons respectively with the material. these two software allows to give the results in the form of tables and curves, with the aim of studying different phenomena such as the stopping power, distance traveled by the ions in the matrix of the semiconductors and the effects beam.the results were compared with TEM microscopy and doping of materials for the manufacturing of electronic and optoelectronic devises.

Références Bibliographique

Références :

•Référence Bibliographique du premier chapitre :

- [1] Alexis MAS.13 décembre 2013. L'Université de Nantes Angers Le Mans.Mesure de la production des photons isolés dans les collisions p-p à $\sqrt{s} = 7$ TeV avec le détecteur ALICE. Page 1
- [2] Stanford Linear Accelerator Center (SLAC) : <http://www.slac.stanford.edu>.
- [3] Richard P. Feynman : Very high-energy collisions of hadrons. *Phys.Rev.Lett.*, 23:1415–1417, 1969.
- [4] J.E. Augustin et al. : Discovery of a Narrow Resonance in $e^+ e^-$ Annihilation. *Phys.Rev.Lett.*, 33:1406–1408, 1974.
- [5] ZarkiAbdErazzek «transport dans les semi-conducteurs» thèse de master université larbi Ben m'hidi (Oum ELBouaghi) 2011
- [6] Y.Sayad, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 2003
- [7] BENCHARIF MOHAMMED FAKHRI. 09/07/2005. UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE. ETUDE DE L'INTERACTION ELECTRON-MATIERE PAR LA METHODE MONTE CARLO.APPLICATION SUR LE GaAs TYPE P. Page 4.
- [8] O.CAUDRELIER, interaction des Rayonnements Ionisants avec la matière.
- [9] A.Nouiri, Thèse d'état, Université Mentouri Constantine, 2000.
- [10] B.G.Yacobi and D.B.Holt, "Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids", Edition Plenum Press, New York and London, 1990
- [11] Frederik Faure, interaction entre le rayonnement et la matière, Notes de cours, Université Joseph Fourier(2003)
- [12] 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)
- [13] 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.
- [14] B.G. Yacobi, D.B.Holt, *J. Appl. Phys.*59(4) R1 1986
- [15] K.Kanaya, S.Okayama, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 5, pp. 43, 1972

Références Bibliographiques

[16] MECHAI Fazia. Etude et simulation des structures photovoltaïques à base de chalcogénures de métaux de transition MX_2 ($M = W, Mo$; $X = S, Se$). MEMOIRE DE MAGISTER. UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI DE TIZI-OUZOU.

[17] Nadjim Merabet, Djaouida Sadaoui, Malek Benslama, contribution à l'étude du phénomène de Latchup induit dans les circuits intégrés embarqués dans un environnement radiatif spatial, Rom. Journ. Phys., Vol. 52 (2007)

[18] N. BENAHMED-BENABDALLAH, Propriétés physiques des semi-conducteurs (Si monocristallin et Ge) et Simulation des cellules solaires à base de Si et SiGe, thèse de magister, université ABOU BEKR BELKAID-TLEMCEM, 2006.

[19] P. A. Schultzl, O. Anatole von Lilienfeld, "Simple intrinsic defects in gallium arsenide", Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. Vol 17, No 084007, 2009, p.35.

[20] C. G. VandeWalle, M. Choi, J. R. Weber, J. L. Lyons, A. Janotti, "Defects at Ge/oxide and III-V/oxide interfaces", Microelectronic Engineering, vol 109, 2013, p.211.

[21] A. H. Belbachir USTO \ Département de Physique Master SRI & PM
Interaction Rayonnement-Matière 2010/2011

[22] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY

[23] 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.

[24] Nobuyuki Kanematsu. Alternative scattering power for Gaussian beam model of heavy charged particles. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms, 266(23) :5056–5062, 2008.

[25] Bernard Gottschalk. On the scattering power of radiotherapy protons. Medical physics, 37(1) :352–367, 2009.

[26] Sami Hissoiny, Benoît Ozell, Hugo Bouchard, and Philippe Després. GPUMCD : A new GPU-oriented Monte Carlo dose calculation platform. Medical Physics, 38(2) :754–764, 2011c. arXiv : 1101.1245v1.

- [27] ICRU. Elastic Scattering of Electrons and Positrons. ICRU report. International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, Md., U.S.A, 2007.
- [28] C Champion, Sébastien Incerti, H. Aouchiche, and D. Oubaziz. A free-parameter theoretical model for describing the electron elastic scattering in water in the geant4 toolkit. *Radiation Physics and Chemistry*, 78(9) :745 – 750, 2009. ISSN 0969-806X.
- [29] Sébastien Incerti, G Baldacchino, M Bernal, R Capra, C Champion, Z Francis, P Gueye, A Mantero, B Mascialino, P Moretto, et al. The geant4-dna project. *International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing*, 1(02) :157–178, 2010.
- [30] H. Bethe. «Zur Theorie des Durchgangsschneller Korpuskularstrahlendurch Materie.» *Annalen der Physik*, vol. 397(3) pp. 325–400 (1930)
- [31] W. Leo. *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments : A How-to Approach* (Springer London, Limited, 1994)
- [32] Y. Kumazaki et al. «Determination of the mean excitation energy of water from proton beam ranges.» *Radiation Measurements*, vol. 42(10) pp. 1683 – 1691 (2007)

•Référence bibliographique du deuxième chapitre :

- [1] J. Kelvin, Ninetieth century clouds over the dynamical theory of heat and light *Phil-Mag.* 2 (1901) 1.
- [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] F. Zeigler, J.P. Beirsack, U. Littman, 1985, *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Pergamon Press, New York, version 2013
- [4] L.S, T.S, « Interactions des particules chargées avec la matière », thèse Master, université ABBAS LAGHROR KHENCHLA, 2019/2020.
- [5] F.Z. satour « Application de la spectroscopie de photoacoustique dans l'analyse des propriétés optiques des effets de l'implantation de Ne^+ et Xe^+ dans $CuInSe_2$ », thèse de doctorat, université Ferhat Abbas-Setif, Algérie, 2012.
- [6] K. Esmark, H. Gossner, W. Stalder, «Advanced simulation Methods for ESD protection Development», Elsevier.Ltd, 2003.

Références Bibliographiques

[7] P.N.Favennec, « l'implantation ionique pour la microélectronique et l'optique » collection technique et scientifique des télécommunications, ENST, Ed.Masson, paris, 1993.

[8] O. Manasreh, « III-Nitride semiconductors, Electrical, structural and defects properties », Elsevier Science B.V, Netherlands, 2000.

[9] M.D. McCluskey, E.E. Haller, « Dopants and defects in semi-conductors », Taylor & Francis group, LLC, London, 2012.

•Référence bibliographique du troisième chapitre :

[1] P. Sigmund, Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets, Physical Review, Vol 184, Number 2, 1969.

[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] http://www.gel.usherbrooke.ca/casino/tutorial/tutorial_frames.html

[4] 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).

[5] Frederik Faure, interaction entre le rayonnement et la matière, Notes de cours, Université Joseph Fourier (2003).

[6] Nicolas Menguy, Polycopié A Interaction rayonnement – Matière, institue minéralogie physique des milieux condensé Paris

[7] 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).

[8] <http://spiralconnect.univ-lyon1.fr/spiral-files/download?mode=inline&data=1420506>