

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE «Abbès LAGHROUR» DE KHENCHELA  
FACULTE DES SCIENCES ET DE TECHNOLOGIE

Département de Science de la matière

# Mémoire de fin d'études

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

**Spécialité : Physique**  
**Option : Physique des matériaux**

***Les interactions des particules chargées avec la  
matière***

**Réalisé par :** -Djallal Eddine Mellah  
-Abed Razzak Mebarki

**Membres de jury :**

Mr. H.Moula

Université de khenchela

Président

Mr. M.Ghaunnoch

Université de khenchela

Examineur

Dr.M.Zouieouiche

Université de khenchela

Rapporteur

**Présenté le 25/ 06 /2019**



# Remerciements

Au terme de ce travail, nous tenons à exprimer notre gratitude et notre remerciements pour le bon dieu, le tout puissant, de nos avoir donné autant de courage, pour atteindre ce but .et toutes les personnes qui ont contribué a sa réalisation.

Nous tenons tout d abord à remercier Dr. M.Zouioueche enseignant à l'université de khenchela, encadreur de ce mémoire pour ses conseils, son encouragement, sa patience, son aide précieuse. Et nous lui exprime ici notre attachement et notre profonde reconnaissance de nos avoir proposé un sujet de recherche très riche.

Notre remerciements s'adressent ensuite aux membres du jury. Nous remercions vivement Mr.H.Moulla. pour l'honneur qu'il nos ferait en acceptant la présidence de ce jury. Nous exprimons nos remerciements au Mr.M.Guenouche qui a bien voulu accepter d'être d'examineur de ce travail. Nous adressons nos sincères remerciements à tous les enseignants, intervenants et toutes les personnes à l'université de khenchela.

## Dédicace

Après toutes ces années de travail du sérieux et de concentration je dédie ce travail : A mes très chères parents pour toute l'aide qu'ils m'ont procuré, pour leur amour, leur patience et leur soutien durant toutes mes années d'études car sans eux je ne serais pas la personne que je suis aujourd'hui Et a toute la famille

À mes chers amis et collègues de l'Université Abbes lagheroure ou d'ailleurs  
Merci beaucoup a mon encadreur «Dr. M.Zouioueche» aus mes enseignants de Département de science et technologie A tout qui ambitionne à une touche modifiante

Abed Razzak Mebarki

## Dédicace

Je dédie ce travail : A mes chers parents qui ont tout sacrifié pour moi.

A mes chers amis et collègues : Mostafa ,Hamza ,Rachid,Amara ,Radwan,Adil,Housseem,Issam,Wissam,Aicha ,Chamse , et a tous ceux que j'aime.

Enfin, j'exprime tous mes vœux de voir la paix et la prospérité dans notre beau pays.

Djallal Eddine Mellah

# Liste Des Figures

Figure I.1 : Structure cristalline diamant de silicium ( $a = 5.66\text{\AA}$ ).....	4
Figure I.2 : Formation des bandes d'énergie du silicium.....	5
Figure I.3 :(a) Structure cristalline zinc blende du GaAs. (b) Positions atomique dans la maille zinc blende en projection sur une face.....	6
Figure I.4 : Structure de bande d'énergie du GaAs.....	6
Figure I.5: les différents types de rayonnements.....	8
Figure I.6 : Effet photoélectrique.....	9
Figure I.7 : phénomènes de fluorescence et émissions Auger.....	10
Figure I.8 : Diffusion Compton.....	10
Figure I.9 : Direction entre l'électron et le photon diffusé.....	11
Figure I. 10 : production de paire.....	12
Figure I.11: Les trois étapes de la diffusion Rayleigh.....	13
Figure I.12 : Les étapes de la diffusion Thomson.....	13
Figure I.13 : atténuation d'un faisceau de N photons dans une épaisseur de matière dx.....	14
Figure I.14 : Illustration du domaine de prédominance de l'effet photoélectrique, la diffusion Compton et de la production de paire.....	16
Figure I.15 : Schématisation des composantes nucléaire et électronique du pouvoir d'arrêt en fonction de la vitesse de l'ion incident.....	18
Figure I.16 : Interaction entre deux corps en fonction du paramètre d'impact.....	19
Figure I.17 : Echange d'énergie par interaction inélastique avec les électrons.....	21
Figure I.18 : Variation des pertes d'énergie nucléaire et électronique en fonction de la vitesse d'ion.....	22
Figure I.19: Illustration des différents phénomènes se produisant au cours d'un bombardement ionique dans un matériau solide.....	24
Figure I.20 : Distribution des ions en profondeur de la cible.....	25
Figure I.21 : Un graphique montrant les deux paramètres $\gamma$ et $\beta$ pour la distribution de gaussien.....	26

Figure I.22 : Illustration le volume de génération et la résolution spatiale des différents phénomènes qui ont lieu suite à l'interaction électrons-matière.....	28
Figure I.23 : Schéma représentant la diffusion élastique et inélastique.....	29
Figure (I.24):Les effets produits suite au bombardement d'un échantillon par les électrons...	30
Figure I.25 : émission RX (rayonnement de freinage) à partir d'une collision élastique.....	34
Figure I.26 : Un spectre global d'émission des rayons X.....	35
Figure I.27: Les différentes façons pour calculer la génération des rayons X en profondeur et en largeur à partir d'un volume d'interaction.....	36
Figure II.1 : tableau de bord du code TRIM et SRIM.....	3
Figure II.2 : Tableau des données TRIM pour le bombardement ionique.....	40
Figure II.3 : Simulation des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique des ions Ar+, dans la cible Si, en fonction de l'énergie incidente des ions.....	39
Figure II.4 : Simulation des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique des ions Xe+, dans la cible Si, en fonction de l'énergie incidente des ions.....	40
Figure II.5 : les profile de distributions des ions Ar+ (10 KeV) dans la cible Si (500A <sup>0</sup> ).....	41
Figure II.6 : les profile de distributions des ions Xe+ (10 KeV) dans la cible Si (500A <sup>0</sup> ).....	41
Figure II.7: le profil de redistribution des ions en profondeur de la cible de silicium : a) pour les ions Ar+ ; b) pour les ions Xe+.....	42
Figure II.8 : Influence de l'énergie d'accélération des ions primaires sur le parcours projeté R <sub>p</sub> , la déviation standard ΔR <sub>p</sub> et la déviation standard latérale ΔR <sub>⊥</sub> .....	44
Figure II.9 : Cascade de déplacements induite par l'ion projectile.....	46
Figure (II-10) : Perte d'énergie par ionisation :a) par les ions Ar+ ; b) par les ions Xe+.....	47
Figure II.11 : la perte d'énergie par phonon du aux Ar+(a) et Xe+(b) dans Si.....	48
Figure II.12 : distribution des lacunes dans la cible Si qui créent par Ar+(a) ; Xe+(b).....	49
Figure II.13 : Simulation des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique des ions Ar+, dans la cible GaAs, en fonction de l'énergie incidente des ions.....	51
Figure II.14 : profile de distribution des ions Ar+ dans une cible GaAs.....	52
Figure II.15 : le profil de redistribution des ions Ar+ en profondeur de la cible GaAs.....	53

Figure II.16 : la variation des paramètres de distribution en fonction de l'énergie incidence des ions.....	54
Figure II.17 : perte d'énergie par ionisation des ions Ar <sup>+</sup> dans la cible GaAs.....	55
Figure II.18 : la perte d'énergie par phonon des ions Ar <sup>+</sup> dans la cible GaAs.....	56
Figure II.19 : la distribution des lacunes en profondeur de la cible.....	57
Figure III.1 : la boîte de dialogue "Edite layer " de CASINO.....	64
Figure III.2 : la boîte COMPOSITION EDIT BOX.....	65
Figure III.3 : la boîte "Microscope and Simulation".....	66
Figure III.4 : la boîte de dialogue «Distributions».....	66
Figure III.5 : la boîte de dialogue «options».....	67
Figure III.6 : la boîte de "Choosing Physical Models".....	68
Figure III.7 : l'fin de simulation des trajectoires des électrons	68
Figure III.8 : Trajectoire des électrons d'énergie 10 keV dans la cible Si (5000nm).....	69
Figure III.9 : Trajectoire des électrons d'énergie 10 keV dans la cible GaAs (5000nm).....	70
Figure III.10 : Distribution normalisée des électrons dans la cible Si en fonction de la profondeur.....	71
Figure III.11 : Distribution normalisée des électrons dans la cible GaAs en fonction de la profondeur.....	71
Figure III.12 : Répartition des électrons dans la poire d'interaction électrons-matière pour Si.....	72
Figure III.13 : Répartition des électrons dans la poire d'interaction électrons-matière pour GaAs.....	73
Figure III.14 : Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés dans la cible Si en fonction de la profondeur.....	74
Figure III.15 : Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés dans la cible GaAs.....	74
Figure III.16 : Variation du coefficient de rétrodiffusion en fonction Z.....	75
Figure III.17 : les phénomènes de Cathodoluminescence.....	75
Figure III.18 : les variations de l'intensité CL (%) émis par Si en fonction de la Profondeur.....	76

Figure III.19 : les variations de l'intensité CL (%) émis par GaAs en fonction de la profondeur.....	77
Figure 20 : les phénomènes lie a l'émission des rayon X.....	77
Figure III.20 : variation des intensités RX émis par l'atome Si.....	78
Figure III.21 : variation des intensités RX émis par l'atome Ga.....	79
Figure III.22 : variation des intensités RX émis par l'atome d'arsenic As.....	79



## Liste des Tableau

Tableau (II.01) : Les résultats des pouvoirs d'arrêts de l'Ar <sup>+</sup> dans Si.....	41
Tableau (II.02) : Les résultats des pouvoirs d'arrêts de l'Xe <sup>+</sup> dans Si.....	41
Tableau (II.03) Tableau 03: les pertes des énergies en pourcentage.....	53
Tableau (II.04) Les résultats des pouvoirs d'arrêts de l'Ar <sup>+</sup> dans GaAs .....	53
Tableau (II.05) les paramètres de distribution dans Si et GaAs.....	56
Tableau (II.06) la perte d'énergie par ionisation des ions primaire et des atomes de recul en pourcentages dans la cible GaAs.....	59
Tableau (II.07) la perte d'énergie par phonon des ions primaire et des atomes de recul en pourcentages dans la cible GaAs.....	60
Tableau (II.08) la perte d'énergie par production des lacunes des ions primaire et des atomes de recul en pourcentages dans la cible GaAs.....	61

# SOMMAIRE

Liste des figures

Liste des tableaux

Introduction générale ..... 1

## Partie : étude bibliographique

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

I.1 Introduction .....	3
I.2 La méthode de Monté Carlo (MC) .....	3
I.3 Quelques propriétés des cibles choisies.....	3
a) Propriétés structurales de composés semi-conducteurs Si.....	3
b) Propriétés structurales de composés semi-conducteurs GaAs.....	5
I.4 Généralité sur les interactions des rayonnements avec matière.....	7
I.4.1 Les Différents Rayonnements Ionisants.....	7
I.4.2 Interaction des rayonnements EM (indirectement ionisant) avec la matière.....	8
a) L'effet photoélectrique.....	9
b) L'effet Compton.....	10
c) Effet de Création de paire.....	11
d) La diffusion Rayleigh.....	12
e) La diffusion Thomson.....	13
I.4.2.1 Atténuation d'un faisceau de photons dans la matière.....	14
I.4.2.2 Domaine de prédominance de chacun de ces effets.....	15
I.4.3 Interaction des particules chargées (directement ionisant) avec la matière.....	16
I.4.3.1 Interaction ion-matière.....	16
A) Principaux processus d'interaction.....	16
B) Pouvoir d'arrêt.....	17
C) Théories de ralentissement et de l'arrêt des ions dans un matériau.....	23
D) Distribution des ions en profondeur de la cible.....	24
E) Répartition des défauts dans le matériau après un bombardement ionique.....	26
I.4.3.2 Interaction électron-matière.....	27
A) Notion sur l'électron.....	27

B) Volume d'interaction.....	27
C) Les différent collision entre les électrons et les atomes de cible.....	28
D) Volume de Dissipation de l'Energie du Faisceau Electronique par Chocs Inélastiques.....	31
E) Pénétration en profondeur.....	32
F) La production des rayons X.....	34
G) génération des rayons X en profondeur.....	35
Conclusion.....	36

## ***Partie : simulation***

### **Chapitre 02 : Simulation de l'interaction ion-matière par SRIM**

II.1 Introduction.....	38
II.2 Présentation de notre travail (condition de simulation).....	38
II.3 Présentation du logiciel SRIM.....	38
II.4 Etude du pouvoir d'arrêt des ions (Ar <sup>+</sup> et Xe <sup>+</sup> ) dans la cible Si.....	41
II.5 Simulation de la distribution d'ions Xe <sup>+</sup> et Ar <sup>+</sup> dans Si.....	43
II.6 Influence de l'énergie des ions sur les paramètres de distribution.....	46
II.7 Processus de perte d'énergie des ions projectile.....	48
A) La Perte d'énergie par ionisation.....	49
B) La perte d'énergie par phonon.....	50
C) Production des lacunes.....	51
II.8 Etude du pouvoir d'arrêt des ions (Ar <sup>+</sup> ) dans la cible GaAs.....	53
II.9 Simulation de la distribution d'ions Ar <sup>+</sup> dans GaAs.....	54
II.10 Influence de l'énergie des ions Ar <sup>+</sup> sur les paramètres de distribution.....	56
II.11 Processus de perte d'énergie des ions projectile Ar <sup>+</sup> sur la cible GaAs.....	58
A. La Perte d'énergie par ionisation.....	58
B. La perte d'énergie par phonon.....	59
C. Production des lacunes.....	60
Conclusion.....	61

III.1 Introduction .....	63
III.2Présentation du logiciel Casino.....	63
III.3 Comment créer une simulation par“CASINO” .....	63
III.4 Présentation de notre travail (condition de simulation).....	69
III.5 Résultats et discussions.....	69
A) La distribution des électrons dans les cible Si et GaAs.....	69
B) La distribution des électrons rétrodiffusés.....	73
C) Phénomène de Cathodoluminescence (CL).....	75
D) Production de RX par les électrons sur la surface de l'échantillon.....	77
Conclusion.....	81
Conclusion générale.....	82

# Introduction générale

---

## Introduction générale :

L'interaction des particules chargées avec la matière est un phénomène qui se trouve principalement dans l'industrie des semi-conducteurs pour l'implantation ionique à la profondeur des ces dernier. Actuellement, elle est appliquée dans plusieurs domaines tels que la métallurgie, les céramiques, la biologie, etc. Son principe se résume à bombarder la cible par des ions accélérés lesquels vont pénétrer dans les couches superficielles avec une quantité contrôlable [1-3].

Notre travail consiste à étudier la méthode de Monte Carlo en vue de simuler les trajectoires des particules (électrons, ions ( $Ar^+$  et  $Xe^+$ )) dans la matière. Les cibles choisies sont des semi-conducteurs tels que le silicium Si et l'Arsenic de galium GaAs qui très utilisés en énergie solaire photovoltaïque, en l'électronique et en optoélectronique [1]. Les techniques de Monte Carlo sont couramment utilisées en physique des particules, où des simulations probabilistes permettent d'estimer la forme d'un signal ou la sensibilité d'un détecteur. La comparaison des données mesurées à ces simulations peut permettre de mettre en évidence des caractéristiques semblables à celle des caractéristique réalisées par des systèmes de mesure expérimentaux.

Le véritable développement des méthodes de Monte-Carlo s'est effectué sous l'impulsion de John Von Neumann et Stanislaw Ulam notamment, lors de la seconde guerre mondiale et des recherches sur la fabrication de la bombe atomique. Notamment, ils ont utilisé ces méthodes probabilistes pour résoudre des équations aux dérivées partielles dans le cadre de la Monte-Carlo N-Particule transport (MCNP) [2].

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

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 en utilisant le logiciel TRIM (Transport and Range of Ions in Mater) et SRIM (Stopping and Range of Ions in Mater) élaborés par le savant allemand James Ziegler [5].

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

# Introduction générale

---

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) [6]. Cette simulation va se faire avec le logiciel Casino élaboré par le savant canadien D. Drouin [4].

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

Dans un premier chapitre : nous donnons un rappel sur la théorie de la méthode de Monte Carlo et quelques propriétés des cibles choisies concernant l'interaction rayonnement-matière et en particulier avec les rayonnements EM, les électrons, les ions. Les formules fondamentales relatives aux deux interactions électrons-matière et ions-matière seront rappelées

Dans un deuxième chapitre : on utilise le logiciel TRIM et SRIM permettant de simuler les interactions ions-matière. Les différents phénomènes comme les défauts Frenkel les vacances créés par les faisceaux d'ions ( $\text{Ar}^+$  et  $\text{Xe}^+$ ), 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 des composants semi-conducteurs de notre choix comme le Si et le GaAs [7-8].

Le troisième chapitre :

Le troisième chapitre sera consacré au logiciel casino qui en plus de la description de son emploi, nous enregistrons les différentes courbes des trajectoires des électrons et des 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 Si et GaAs.

# CHAPTER:01

*Généralité sur les interaction rayonnement- matière*

### **I.1 Introduction :**

Les interactions rayonnement-matière sont l'un des intérêts de la physique nucléaire, notamment celles liées au bombardement d'une substance par des particules chargées. Dans ce chapitre, nous avons étudié les différentes interactions entre différents types de rayonnement (directement ionisant et indirectement ionisant) avec la matière et nous avons essayées de formuler les différents phénomènes résultant sous forme des équations mathématiques qui

### **II.2. La méthode de Monté Carlo (MC) :**

Le mode usuel pour la résolution d'un problème consiste à trouver un algorithme (une succession d'opérations) qui permet de trouver la valeur exacte ou avec une précision donnée pour un certain problème posé [9]. Néanmoins, il existe des cas où la construction des algorithmes s'avère très compliquée voire même impossible. On a alors recours, souvent, à la simulation du principe mathématique ou physique du problème et on applique les lois des grands nombres de la théorie des probabilités, et des estimations de la grandeur cherchée s'obtiennent, par traitement statistique des données fournies par les résultats de certaines expériences aléatoires multiples [10-11]. Les modes de résolution des problèmes faisant appel aux variables aléatoires sont connus sous le nom de méthode de Monté Carlo MC [12]. Les méthodes de MC font parties des mathématiques expérimentales qui s'intéressent aux expériences sur les nombres aléatoires. Elles ont trouvées, depuis quelques décennies, une vaste utilisation dans le domaine de la recherche opérationnelle, de la physique nucléaire et dans de nombreux autres domaines de la science, y compris la chimie, la biologie et la médecine [13].

### **II.3. Quelque propriété des cibles choisies**

#### **a) Propriétés structurales de composés semi-conducteurs Si :**

L'atome de silicium est tétravalent il est au centre de quatre liaisons covalentes et donc tétra coordonné selon une géométrie tétraédrique. Lorsqu'il est cristallisé, le silicium est donc solidifié de telle sorte que les atomes de silicium soient disposés les uns par rapport aux autres selon cette géométrie tétraédrique, chaque atome de silicium étant entouré par quatre autres atomes de silicium. Le silicium amorphe est caractérisé par le fait que ses atomes sont solidifiés de façon désordonnée : chaque atome de silicium est entouré par un nombre variable d'autres atomes de silicium, selon une disposition aléatoire qui ne respecte pas la géométrie tétraédrique du silicium. Il s'ensuit que certaines liaisons covalentes sont « pendantes », c'est-

à-dire qu'elles demeurent ouvertes dans le cristal, aucun autre atome de silicium ne venant les fermer. Ces liaisons pendantes sont autant de défauts cristallins susceptibles d'altérer les propriétés électroniques du matériau. . [14-15]

Le silicium comme le germanium se cristallise suivant la structure diamant comme le montre la figure I.1.

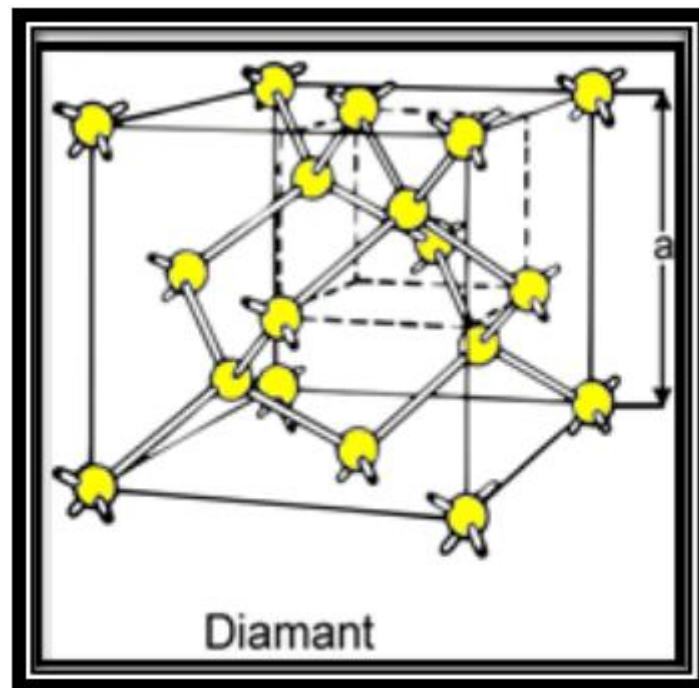


Figure I.1 : Structure cristalline diamant de silicium ( $a = 5.66\text{\AA}$ )

Chaque atome du réseau est entouré de quatre proches voisins équidistants, formant un tétraèdre, avec lesquels il échange ses quatre électrons de valence. Dans ce réseau, La distance intra-atomique est de l'ordre de  $2.35\text{\AA}$ . Elle correspond à la distance entre les premiers proches voisins [16].

### ❖ Structure de bande d'énergie :

Le rapprochement des atomes est lié à la distance interatomique  $d$ , Lorsqu'on considère les atomes du silicium arrangés suivant un réseau périodique, constituant une maille très grande de telle manière que les atomes puissent être considérés comme isolés. Les deux niveaux les plus énergétiques sont repérés par  $E_c$  et  $E_v$ , comme le montre le figure (I.2), le rapprochement des atomes jusqu'à la distance interatomique permet la formation de bande continues appelées bande de conduction(BC) et bande de valence(BV) séparées par une bande interdite appelée « gap ». La valeur de l'énergie du gap dépend de la nature du matériau [14-16].

La largeur de la bande interdite (gap) à 300°K est de l'ordre de  $E_g = 1.1\text{eV}$  est donnée par le calcul en considérant la zone de Brillouin, comme le montre le figure I.2, elle correspond à un gap indirect.

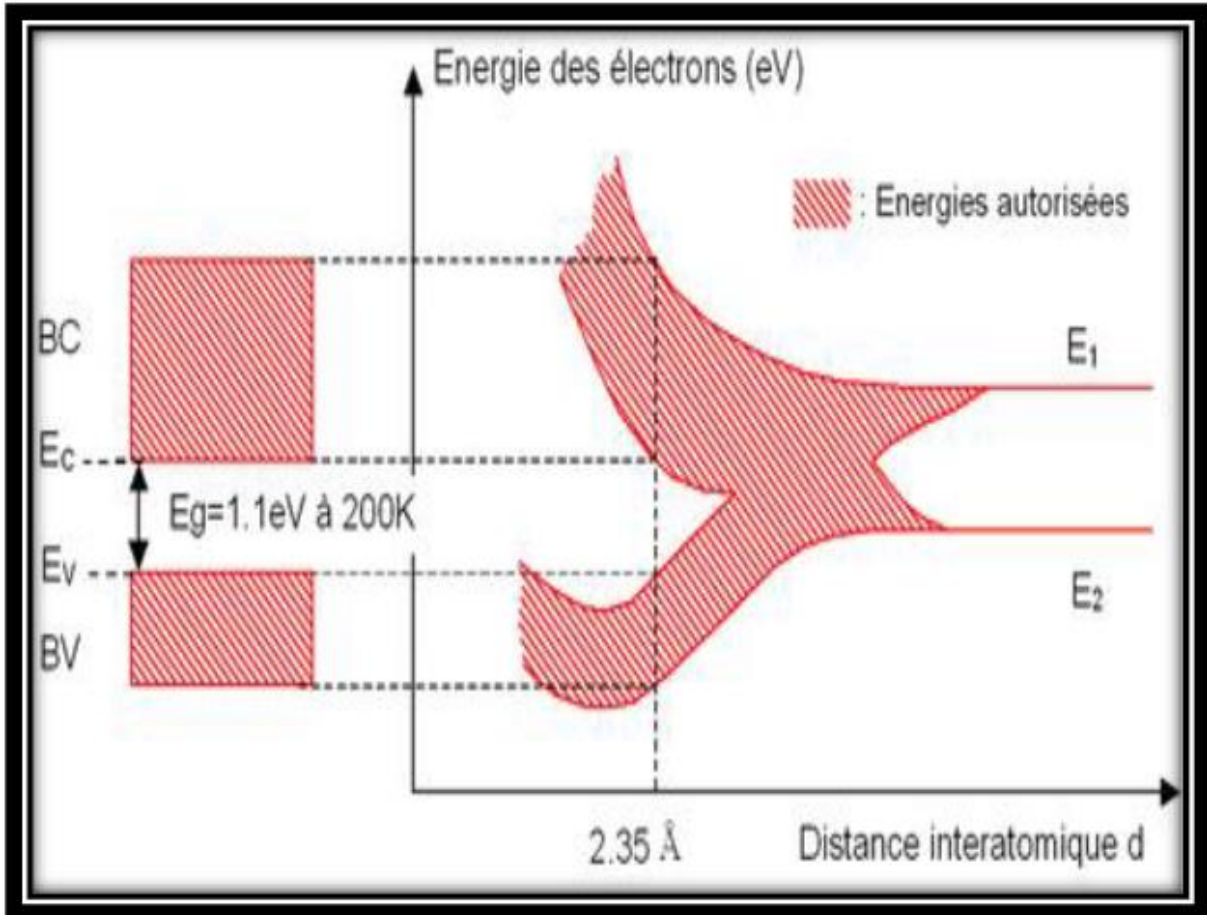


Figure I.2 : Formation des bandes d'énergie du silicium

**b) Propriétés structurales de composés semi-conducteurs GaAs:**

Le réseau cristallin du GaAs est de type zinc blende [10-11], cette structure est représentée soit en perspective (figure I.3.a) soit en projection sur plan formé par une des faces du cube (figure I.3.b), une manière de le faire et de présenter une projection de ce cristal sur le plan, en indiquant les coordonnées. Chaque atome se trouve au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre espèce. Ceci signifie que la liaison est de type tétraédrique et chaque atome à quatre plus proches voisins. Le paramètre du réseau est  $a = 5,65 \text{ \AA}$ ; et la distance de l'adjacent plus proche  $4/3a = 2,44 \text{ \AA}$  [12-17].

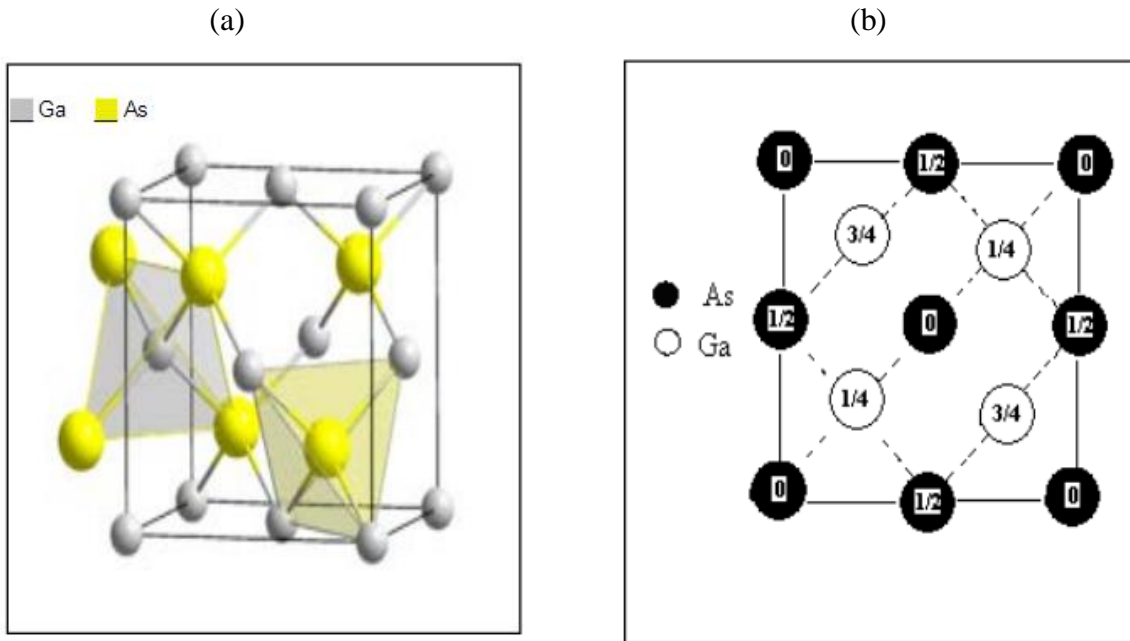


Figure I.3 :(a) Structure cristalline zinc blende du GaAs [13]. (b) Positions atomique dans la maille zinc blende en projection sur une face [17].

❖ **Structure de bande d'énergie :**

Comme le GaAs est caractérisé par une bande interdite directe à l'inverse du Silicium (Si), qui admet une bande interdite indirecte (figure I.4) La largeur de la bande interdite (gap) à 300°K est de l'ordre de  $E_g = 1.43 \text{ eV}$  comme le montre la figure I.4

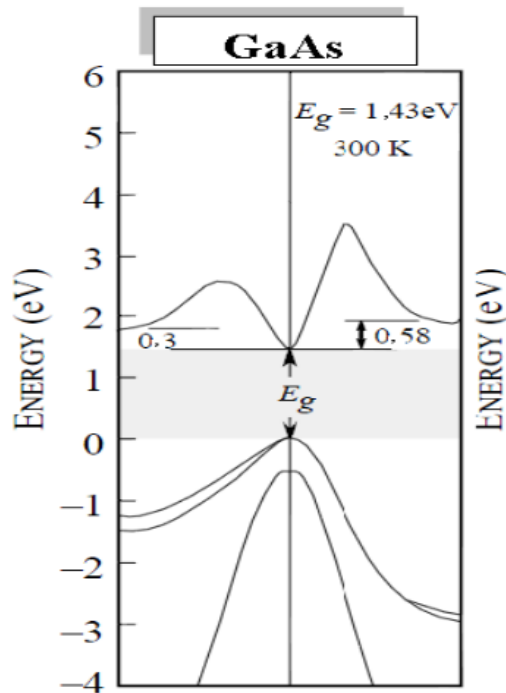


Figure I.4 : Structure de bande d'énergie du GaAs [5-18]

### **I.4 Généralité sur les interactions des rayonnements avec matière :**

D'une manière générale, on peut définir un rayonnement ou radiation comme un mode de propagation de l'énergie dans l'espace, sous forme d'ondes électromagnétiques ou de particules. Les rayonnements ne peuvent être détectés et caractérisés que grâce à leurs interactions avec la matière dans laquelle ils se propagent. Ils peuvent céder au milieu qu'ils traversent, la totalité ou une partie de leur énergie au cours de ces interactions [19].

Un rayonnement est dit ionisant quand il est susceptible d'arracher des électrons à la matière.

Une définition plus exhaustive est donnée: « un rayonnement ionisant est un transport d'énergie sous la forme des particules ou d'ondes électromagnétiques d'une longueur d'ondes inférieure ou égale à 100 nanomètres, soit d'une fréquence supérieure ou égale à  $3 \times 10^{15}$  hertz, pouvant produire des ions directement ou indirectement. ». L'équivalent en énergie correspond à 12,4 eV. Parmi ces rayonnements, on distingue ceux qui sont directement ionisants, particules chargées, de ceux qui sont dits indirectement ionisants car n'étant pas chargés [20].

#### **I.4.1 Les Différents Rayonnements Ionisants:**

##### **➤ Indirectement ionisants:**

Ils comprennent les neutrons et les rayonnements électromagnétiques (photons X, et  $\gamma$ ) qui déposent l'énergie au milieu par deux étapes [21]:

-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.

##### **➤ Directement ionisants:**

Ils comprennent les particules chargées légères (les électrons), et les particules chargées lourdes (les protons, les particules  $\alpha$ , 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 [21].

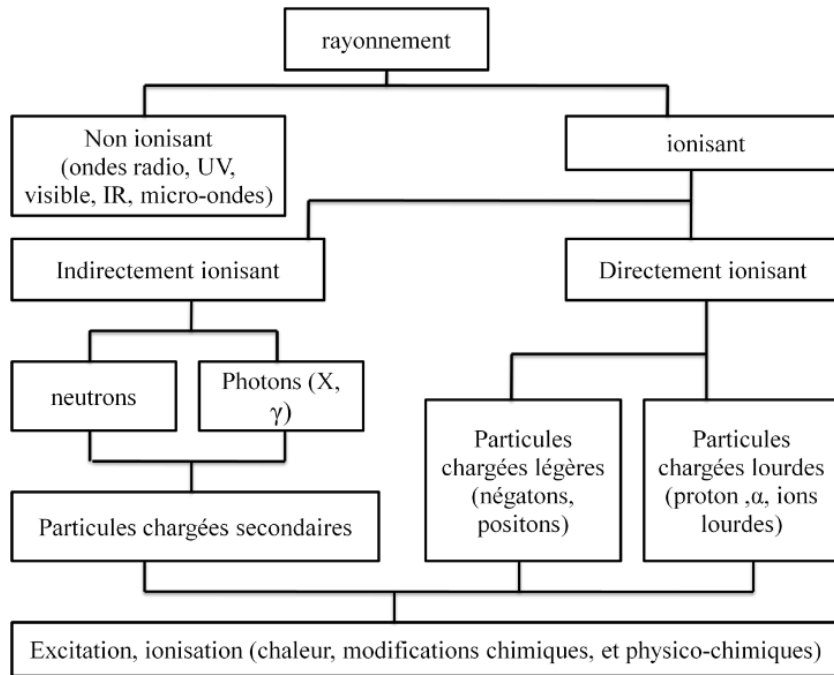


Figure I.5: les différents types de rayonnements [20].

#### **I.4.2 Interaction des rayonnements EM (indirectement ionisant) avec la matière [22] :**

Le comportement des rayonnements électromagnétiques dans la matière est fondamentalement différent de celui des particules chargées. En une seule interaction, le photon peut être complètement absorbé et disparaître. Mais, à l'inverse, il est susceptible de traverser des quantités importantes de matière (par exemple un centimètre d'épaisseur de plomb) sans interagir du tout, ce qui est exclu pour les particules chargées qui, en pénétrant dans un milieu, cèdent immédiatement de l'énergie à un grand nombre d'électrons du milieu. Les photons dans cette gamme d'énergie transfèrent leur énergie aux molécules du milieu traversé, selon différents mécanismes d'interaction:

- l'effet photoélectrique
- l'effet Compton
- la production de paires
- La diffusion Rayleigh
- La diffusion Thomson

Les trois premiers mécanismes (effet photoélectrique, diffusion Compton et production de paires) jouent un rôle majeur. Il résulte de ces trois effets la mise en mouvement de particules secondaires (électrons, positons). Les électrons secondaires énergétiques sont appelés rayons

delta, et représentent une façon indirecte pour la particule initiale de transférer son énergie au milieu.

### a) L'effet photoélectrique :

L'effet photoélectrique est le mode dominant d'interaction pour les photons de basse énergie et le mécanisme dominant de transfert d'énergie aux électrons secondaires, Lors de ce processus, un photon incident  $\gamma$  d'énergie  $E_\gamma$  interagit avec un électron d'un atome cible X [23].

Dans cette interaction le photon est absorbé totalement en donnant lieu à un cation et un électron éjecté, suivant cette équation :  $\gamma + X \rightarrow X^+ + e^-$

Et l'énergie cinétique transférée à l'électron atomique, est égale à:

$$T_e = E_\gamma - E_1 = h\nu - E_1 \quad (\text{I.1})$$

Où  $E$  est l'énergie de liaison d'un électron atomique et  $h\nu$  l'énergie initiale du photon incident

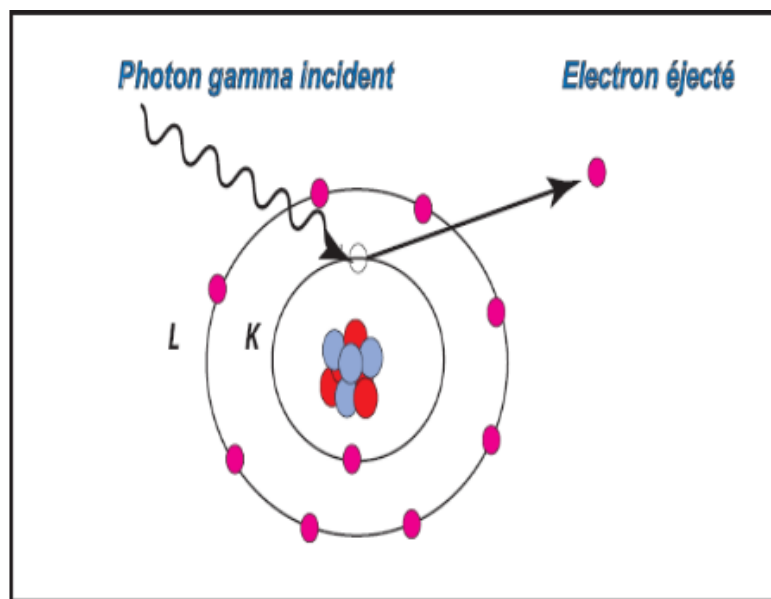


Figure I.6 : Effet photoélectrique [23]

Comme les énergies de liaison sont relativement faibles, l'énergie de l'électron secondaire est à peu près égale à celle du photon incident.

L'atome se trouve alors dans un état excité et son retour dans l'état fondamental peut se faire par deux processus [22]:

-Le mode de désexcitation radiatif correspond à l'émission d'un rayonnement de fluorescence, dont le spectre de raies discontinu est caractéristique du matériau cible.

-Le mode de désexcitation non radiatif ou électronique est également connu sous le nom "d'effet Auger".

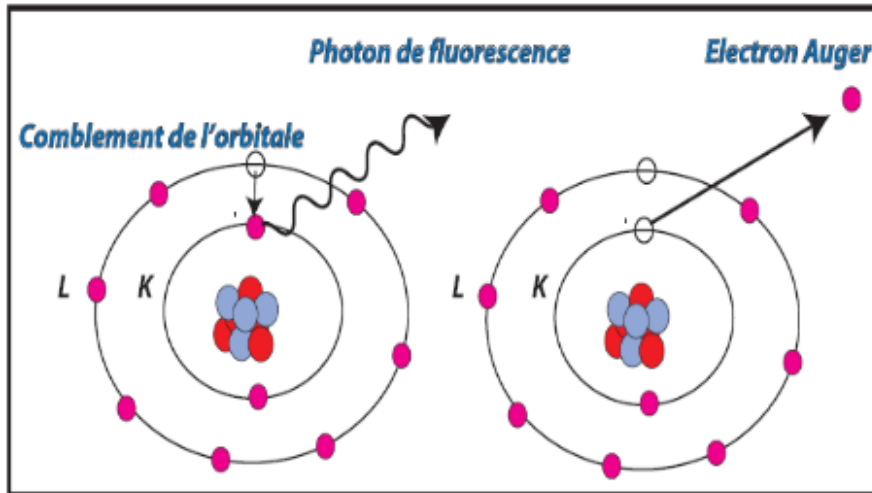


Figure I.7 : phénomènes de fluorescence et émissions Auger [23]

La désexcitation non radiative est prépondérante dans le cas d'atomes cibles légers (C, N, O) qui subissent principalement des photo-ionisations en couche K et deviennent donc émetteur d'électrons Auger.

**b) L'effet Compton :**

L'effet Compton résulte de l'interaction entre un photon incident  $\gamma$  et un électron quasi-libre (très peu lié) du cortège atomique [23]. Au cours de cette collision, l'électron cible, dit électron Compton, acquiert une énergie cinétique  $h\nu$  et est expulsé dans une direction donnée (figure I.8)

$$\gamma + \text{atome} \rightarrow \gamma' + e^- + \text{atom}^*$$

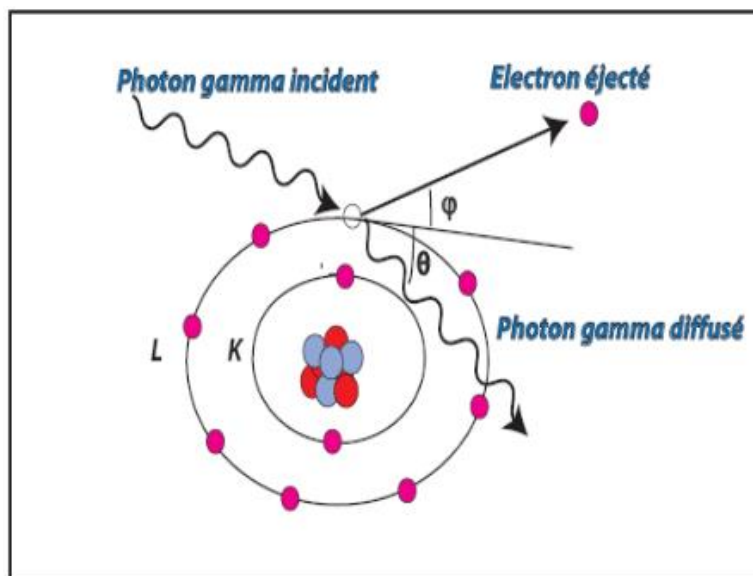


Figure I.8 : Diffusion Compton [23]

Le photon incident est diffusé dans une direction faisant un angle  $\theta$  avec la direction du photon incident. (Figure I.9)

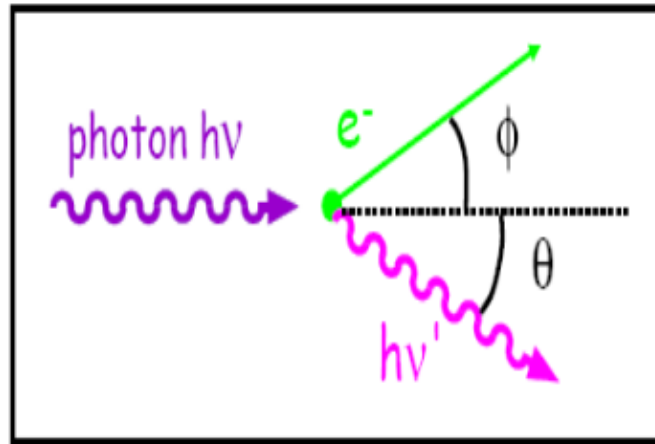


Figure I.9 : Direction entre l'électron et le photon diffusé

[23]

La diffusion Compton domine dans le domaine des énergies intermédiaires (quelques dixièmes de MeV à quelques MeV) [22]. L'énergie  $T_e$  de l'électron Compton après interaction avec le photon incident d'énergie  $h\nu$  est égal à :

$$T_e = h\nu - \frac{h\nu}{1 + \left(\frac{h\nu}{m_0c^2}\right)(1 - \cos \theta)} \quad (\text{I.2})$$

Où :

$\theta$ : est l'angle de diffusion de photon incident.

$h\nu$  : l'énergie des photon,  $m_0$ =la masse au repos d'électron.

**c) Effet de Création de paire :**

L'effet de matérialisation se produit à une énergie du photon élevée ( $E > 2m_0 c^2$  ). Le photon pénètre dans le champ Coulombien du noyau (voir figure I.6), et se matérialise sous forme d'une paire électron-positron ( $e^-, e^+$ ) [24].

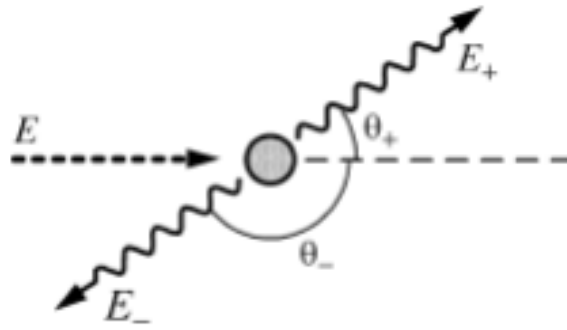


Figure I. 10 : production de paire [24]

La loi de conservation de l'énergie nous donne:

$$E_{\gamma} = 2E_0 + E_{e^+} + E_{e^-} \quad (I.3)$$

Où :

$E_{\gamma}$  : est l'énergie de photon incident

$E_0$  : est l'énergie au repos de l'électron et du positron.

$E_{e^-}$  et  $E_{e^+}$  : sont respectivement les énergies cinétiques de l'électron et du positron formés.

D'après l'équation précédente on déduit que :

- ❖ Le processus de la création de paire n'est possible que si l'énergie du photon est au moins égale à l'énergie nécessaire pour créer la paire électron-positron.
- ❖ Le phénomène de matérialisation ne peut se produire qu'au voisinage du champ du noyau.
- ❖ L'effet de production de paire donne lieu à l'émission d'un électron et d'un positron dans des directions opposées. En fin de ralentissement, le positron s'annihile avec un électron du milieu, en émettant deux photons d'annihilation d'énergie chacun d'énergie 511 keV.

**d) La diffusion Rayleigh :**

Cette diffusion est aussi appelée diffusion cohérente. Le photon incident interagit avec tous les électrons de l'atome (**a**) qui se mettent à osciller en phase (**b**) avant d'émettre un photon de même énergie que le photon incident mais dans une direction quelconque (**c**). Ce phénomène est équivalent à un simple changement de direction du photon incident [23]. (Figure I.11)

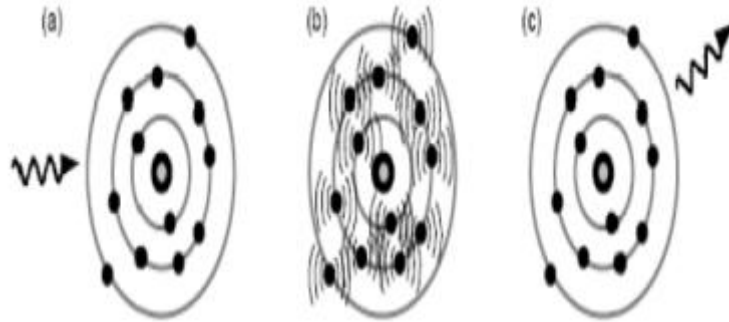


Figure I.11: Les trois étapes de la diffusion Rayleigh

[23]

Ce processus de diffusion se produit essentiellement aux petits angles à des énergies faibles ( $E < 100 \text{ keV}$ ) pour les éléments de numéro atomique  $Z$  élevé [24].

L'énergie du photon reste inchangée du fait que le photon est diffusé par l'ensemble de l'atome sans transfert d'énergie.

**e) La diffusion Thomson :**

Ce type de diffusion concerne les photons de faible énergie. Le photon incident fait un choc élastique avec un électron fortement lié à l'atome. L'énergie du photon est totalement absorbée par cet électron (a). Ce dernier est mis en oscillation sans avoir une énergie suffisante pour quitter l'atome (b) puis, par relaxation, il réémet un photon de même énergie que le photon incident, mais pas forcément dans la même direction (c) [23-24]. (Figure I.12).



Figure I.12 : Les étapes de la diffusion Thomson [23]

Les diffusions Thomson et Rayleigh sont très semblables et sont souvent considérées de manière globale sous le nom de diffusion Thomson-Rayleigh.

### I.4.2.1 Atténuation d'un faisceau de photons dans la matière :

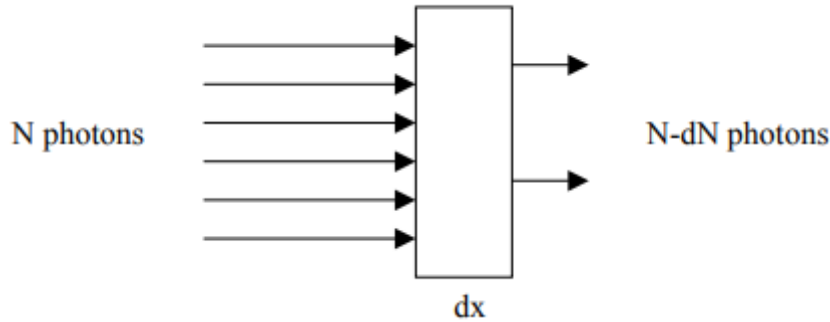


Figure I.13 : atténuation d'un faisceau de N photons dans une épaisseur de matière dx

L'absorption des photons dans la matière dépend de la nature du milieu et de l'énergie des photons incidents. L'atténuation des photons s'exprime par le coefficient d'atténuation qui présente la fraction des photons incidents interagissant par unité de longueur. Ce coefficient tient compte des sections efficaces des quatre processus d'interaction décrits précédemment. Pour  $N_0$  photons incidents, le nombre  $N_0$  de photons qui traversent une épaisseur  $x$  du matériau sans interagir [24] (figure I.13) est donnée par la relation suivante :

$$N(x) = N_0 e^{-\mu x} \quad (\text{I.4})$$

$N$  : Le flux de photons sortant d'un milieu absorbant d'épaisseur  $x$

$N_0$  : Le flux de photons du faisceau incident

$\mu$  : Le coefficient d'atténuation linéaire (g/cm) qui est proportionnel à la section efficace d'interaction, il est donné par l'expression (I.5).

$$\mu = n\sigma_{tot} \quad (\text{I.5})$$

Avec  $n = \frac{N_A \rho}{A}$  est le nombre d'atomes ou molécules par unité de volume

On définit aussi un coefficient massique d'atténuation  $\mu_m$  qui dépend de la densité de matière

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho} \quad (\text{I.6})$$

$$\text{Alors : } \mu_m = \frac{N_A}{A} (\sigma_{Ra} + \sigma_{co} + \sigma_{ph} + \sigma_{pp}) \quad (\text{I.7})$$

Où:

$\rho$  : représente la densité du milieu traversé (g/mol)

$\sigma$  : la section efficace (cm<sup>2</sup>/atome)

$N_A$  : est le nombre d'Avogadro (atome/mole)

$A$  : est la masse atomique du milieu (g/mole)

### ❖ Couche de demi-atténuation :

On peut caractériser la pénétration d'un rayonnement dans la matière non seulement par un coefficient d'atténuation, mais aussi par la demi-épaisseur  $L_{1/2}$  ou couche de demi-atténuation CDA [23]. Le libre parcours moyen est relié au coefficient d'atténuation linéique par cette formule :

$$\lambda = 1/\mu \quad (\text{I.8})$$

La couche de demi-atténuation représente l'épaisseur de matière nécessaire pour diminuer à la moitié les photons incident du faisceau.

$$\text{Tel que: } N(L_{1/2}) = N_0/2 \quad (\text{I.9})$$

Appliquant la relation (I.4) pour  $x = L_{1/2}$ , on obtient :

$$L_{1/2} = \ln 2 / \mu \quad (\text{I.10})$$

### I.4.2.2 Domaine de prédominance de chacun de ces effets :

L'effet photoélectrique prédomine à basse E et Z élevé.

L'effet Compton prédomine à Z bas.

La création de paires prédomine à hautes énergie et Z élevé (pour des énergies supérieures à 4MeV, l'effet de matérialisation domine et sa probabilité d'interaction devient de plus en plus importante pour les matériaux lourds.) [23]. Figure(I.14)

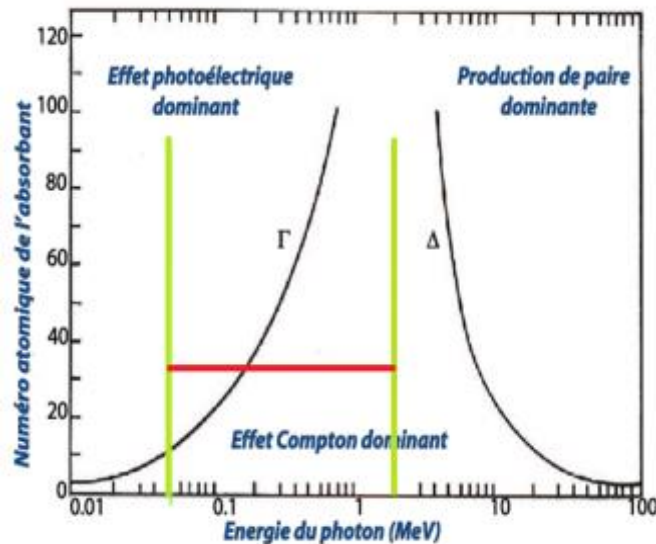


Figure I.14 : Illustration du domaine de prédominance de l'effet photoélectrique, la diffusion Compton et de la production de paire [23]

### I.4.3 Interaction des particules chargées (directement ionisant) avec la matière :

#### I.4.3.1 Interaction ion-matière :

Le bombardement d'une surface solide par des ions primaires s'accompagne, si l'ion n'est pas réfléchi, d'une séquence d'interactions au cours desquelles 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 [25].

#### A) Principaux processus d'interaction:

Le passage de particule à travers la matière génère une zone endommagée tout le long de sa trajectoire. Selon que la particule subit une collision élastique ou inélastique sur un électron ou un noyau, on peut imaginer quatre types principaux d'interaction :

✓ *Collisions inélastiques avec les électrons atomiques:* Ce sont des collisions entre les électrons du matériau et le champ électrique de l'ion incident. Dans ce cas, la particule incidente a une trajectoire rectiligne puisque la masse des électrons est négligeable devant la masse de cette dernière.

C'est le mécanisme prépondérant qui conduit à l'ionisation ou l'excitation du milieu traversé. Elles sont prédominantes pour des ions ayant une énergie supérieure à quelques dizaines de keV par unité de masse atomique (uma).

- ✓ **Collisions inélastiques avec un noyau:** La particule est déviée par les forces coulombiennes et son ralentissement se manifeste par l'émission d'un rayonnement de freinage (bremsstrahlung). Elle peut aussi céder de l'énergie au noyau et amener celui-ci dans un état excité. C'est l'excitation coulombienne du noyau. Ces processus sont négligeables dans l'estimation de la perte d'énergie des particules (p, d, t,  $\alpha$ ).
- ✓ **Collisions élastiques avec les électrons:** Ces interactions ne sont observées que pour des particules de très faible énergie (<100 eV)
- ✓ **Collisions élastiques avec les noyaux:** C'est la diffusion élastique entre la particule incidente et les noyaux des atomes. La particule incidente est diffusée sans rayonner ni exciter les noyaux, mais en revanche, les noyaux subissent des déplacements. Ce processus est majoritaire pour des énergies de quelques keV/uma ou lors de la fin de parcours d'un ion ayant une énergie plus importante [26-27].

Donc l'altération du matériau est principalement due à deux interactions entre la particule incidente et la cible, collisions inélastiques avec les électrons et collisions élastiques avec les noyaux. Les contributions de ces deux types d'interactions vont dépendre de l'énergie de la particule incidente, de sa masse (et donc de sa vitesse), de sa charge et de la nature du matériau cible. Dans ces processus, les ions incidents subissent un ralentissement qui est caractérisé par le pouvoir d'arrêt.

### **B) Pouvoir d'arrêt:**

Une particule se déplaçant dans un milieu perd son énergie par une combinaison de chocs élastiques et inélastiques avec les noyaux et les électrons du milieu, et ralentit de plus en plus, jusqu'à ce qu'elle perd toute son énergie cinétique et s'arrête. Le pouvoir d'arrêt représente la perte moyenne d'énergie de la particule par distance parcourue. Il dépend du type de particule, de son énergie et des propriétés de la matière traversée. En première approximation, le pouvoir d'arrêt des ions est la somme des pertes d'énergies nucléaire et électronique [28], lors de collisions élastiques et inélastiques, considérées comme indépendantes. On peut écrire le pouvoir d'arrêt (ou perte d'énergie si on parle de la cible comme référence) [29]

$$S(E) = \frac{1}{N} \frac{dE}{dX} = S_n + S_e \quad (I.11)$$

Où

$S_n$  : le pouvoir d'arrêt nucléaire

$S_e$  : le pouvoir d'arrêt électronique

$N$  : concentration atomique de la cible

Sur la figure I.15, on représente les variations du pouvoir d'arrêt total en fonction de la vitesse de l'ion incident. La forme générale de ces courbes est valable pour n'importe quel ion dans n'importe quel matériau [30]

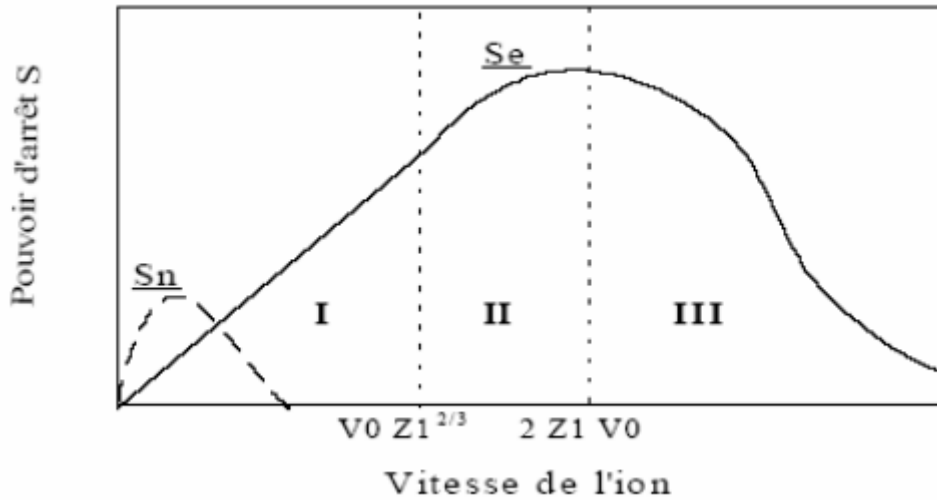


Figure I.15 : Schématisation des composantes nucléaire et électronique du pouvoir d'arrêt en fonction de la vitesse de l'ion incident [31].  $Z_1$  est le numéro atomique de l'ion incident ;  $V_0$  est la vitesse de Bohr

On distingue trois régions différentes :

**Zone I :** dominée par l'arrêt nucléaire, cette contribution nucléaire est d'autant plus importante que l'ion est lourd.

**Zone II :** dominée par l'arrêt électronique.

**Zone III:** dite de Bethe-Block est la zone où le pouvoir d'arrêt décroît quand l'énergie augmente.

**B.1) Pouvoir d'arrêt nucléaire :**

Au cours de la collision nucléaire, Les ions et les atomes rentrent en collision et diffusent élastiquement. Il s'agit d'un transfert de la quantité de mouvement des ions incidents aux atomes contenus dans le matériau-cible. Les ions incidents sont donc ralentis au fil des collisions. Le freinage nucléaire est quantifié par le pouvoir d'arrêt nucléaire [32-33].

Le processus de ralentissement nucléaire est prédominant pour des ions lourds et de faible vitesse. Si  $E$  est l'énergie cinétique de l'ion incident et  $N$  le nombre d'atome par unité de volume du matériau cible, le pouvoir d'arrêt nucléaire (section efficace de ralentissement nucléaire) est défini par la relation suivante [34]:

$$S_n(E) = \frac{1}{N} \frac{dE}{dx} = \int T d\sigma \tag{I.12}$$

Où

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

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

Soit une particule incidente de masse  $M_1$ , de charge  $Z_1e$  et d'énergie cinétique  $E$  se dirigeant avec un paramètre d'impact  $p$  vers un atome cible au repos de masse  $M_2$ , de charge  $Z_2e$ . La particule 1 subit une répulsion coulombienne qui la dévie d'un angle  $\theta$ .

D'après la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement, la relation qui lie le paramètre d'impact à l'angle de diffusion est [19] (figure I.16) :

$$p = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E} \cot\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (I.13)$$

✓ La distance minimale d'approche,  $d$ , s'écrit :

$$d = 2p \times \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (I.14)$$

✓ L'énergie transférée au cours de la collision avec l'atome cible est :

$$T = T_{\max} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (I.15)$$

Où

$T_{\max}$  est l'énergie maximale transférée lors d'un choc frontal ( $b = 0$ ,  $\theta = 180^\circ$ ) :

$$T_{\max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (I.16)$$

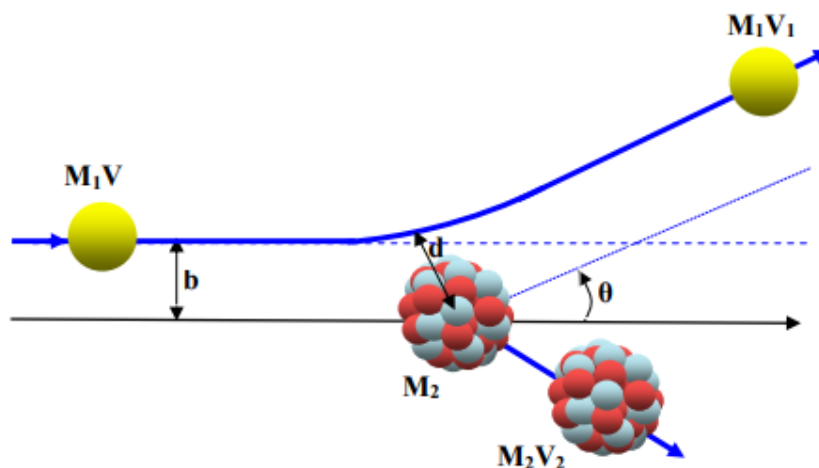


Figure I.16 : Interaction entre deux corps en fonction du paramètre d'impact.

L'énergie transférée peut être exprimée en fonction du paramètre d'impact  $b$  et de la distance minimale d'approche  $d$  par la relation :

$$T = \frac{T_{\max}}{1 + \left(\frac{2p}{d}\right)^2} \quad (\text{I.17})$$

La section efficace différentielle de collision  $d\sigma$  a pour expression :

$$d\sigma = 2\pi p dp \quad (\text{I.18})$$

La perte d'énergie par choc nucléaire s'écrit comme l'équation (I.12), et en intégrant entre les valeurs minimale et maximale de l'énergie transférée, nous obtenons la relation suivante [26]:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{nuc} = 2\pi N \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{M_2 V^2} \ln\left(\frac{T_{\max}}{T_{\min}}\right) \quad (\text{I.19})$$

**A faible vitesse** : la vitesse de l'ion est inférieure à celle de ses électrons. Dans ces conditions, la probabilité qu'a l'ion de se neutraliser est importante et les collisions entre le projectile et les électrons périphériques sont quasi élastiques. Ceci conduit à utiliser un potentiel coulombien écranté de type Thomas-Fermi :

$$V\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{Z_1 Z_2}{r} \phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (\text{I.20})$$

Où :  $Z_1$  et  $Z_2$  sont les numéros atomiques du projectile et de la cible respectivement.

$\phi\left(\frac{r}{a}\right)$  : est la fonction d'écrantage tel que :  $\phi\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{a}{2r}$

$a$  : est le rayon d'écrantage de Thomas-Fermi que l'on exprime sous la forme :

$$a = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} a_0 (Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}})^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.21})$$

Avec  $a_0 = 0.53 \text{ \AA}$  rayon de Bohr

D'où le potentiel d'interaction :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2 a}{2r^2} \quad (\text{I.22})$$

Et La perte d'énergie par choc nucléaire s'écrit donc :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{nuc} = \frac{\pi^2 N Z_1 Z_2 e^2 a M_1}{2(M_1 + M_2)} \quad (\text{I.23})$$

Lindhard, Scharff et Schiott (théorie LSS) ont exprimé le freinage nucléaire dans un système de coordonnées dites «réduites» où l'énergie réduite  $\varepsilon$  et la longueur réduite  $\rho$  valent [32].

$$\varepsilon = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{4\pi\varepsilon_0 a}{Z_1 Z_2 e^2} \quad E_\rho = N M_2 4\pi a^2 \frac{M_1}{(M_1 + M_2)^2}$$

La perte d'énergie avec ces variables devient :

$$\frac{dE}{dx} = aNZ_1Z_2e^2 \frac{M_1}{M_1 + M_2} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \quad (I.24)$$

Où  $\rho \, d\varepsilon/d\rho$  dépend de la forme du potentiel  $V(r)$  utilisé et donc de la forme de la fonction de Fermi.

Selon l'approximation de Kalbitzer et al. [32-35-36], cette perte d'énergie peut s'écrire:

$$\frac{d\varepsilon}{d\rho} = \frac{1.7\varepsilon^{\frac{1}{2}} \log(\varepsilon + e)}{1 + 8.6\varepsilon + 3.4\varepsilon^{\frac{3}{2}}} \quad (I.25)$$

Cette relation reste la même quel que soit le couple projectile-atome cible. C'est une fonction universelle de la perte d'énergie nucléaire [26].

**B.2) Pouvoir d'arrêt électronique :**

Le pouvoir d'arrêt électronique correspond au ralentissement de l'ion projectile par interaction avec les électrons de la cible (figure I.17) tel que La plupart des projectiles ne frappent pas de plein fouet les atomes du matériau, mais passent plutôt au voisinage de ceux-ci. Etant donné que les ions restent chargés tant qu'ils possèdent une certaine vitesse, il se produira une interaction électrostatique entre ceux-ci et les électrons et charges nucléaires des atomes du matériau (collisions inélastiques). Les atomes de la cible sont excités ou ionisés Ceci va également provoquer le ralentissement des ions incidents. Il est quantifié par le « pouvoir d'arrêt électronique » [32-35].

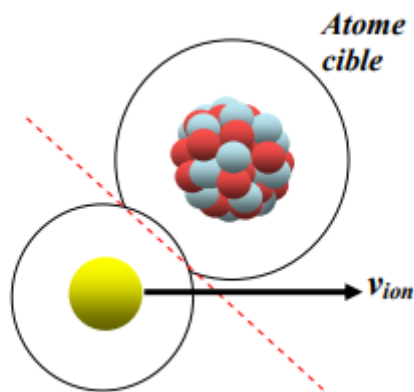


Figure I.17 : Echange d'énergie par interaction inélastique avec les électrons.

Les approximations précédentes restent valables dans ce cas, à savoir une collision entre charges ponctuelles. L'équation (I-12) est modifiée, la masse  $M_2$  est remplacée par celle de l'électron ainsi que la charge qui devient  $e$  au lieu de  $Z_2e$  [19].

La perte d'énergie électronique pour  $Z_2$  électrons devient :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = 2\pi N \frac{Z_2 Z_1^2 e^4}{M_e v^2} \ln\left(\frac{T_{\max}}{T_{\min}}\right) \quad (I.26)$$

L'énergie maximale transférée aux électrons est d'après l'équation (I.1) :

$$T_{\max} \cong 2m_e v^2 \quad (I.27)$$

Car le rapport des masses entre un ion et un électron,  $M/m_e$ , est  $\gg 1$ .

Le rapport entre les pertes d'énergie nucléaire et électronique (en négligeant les variations logarithmiques puisque on considère des vitesses élevées du projectile) s'exprime par :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{nuc} / \left(\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{Z_2 m_e}{M_2} \approx \frac{1}{3600} \quad (I.28)$$

et par conséquent :  $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{nuc} \ll \left(\frac{dE}{dx}\right)_e$

La perte d'énergie nucléaire est négligeable devant la perte d'énergie électronique aux grandes vitesses. Les collisions inélastiques sont majoritaires et la perte d'énergie totale est inversement proportionnelle à l'énergie de la particule incidente [26].

**A faible vitesses** : à partir de le potentiel écranté (équation I.20) Lindhard, Scharff et Schiott ont élaboré une théorie (dite théorie LSS) [37] qui permet de donner une expression analytique de la perte d'énergie électronique :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{8N\pi e^2 a_0 Z_1^{7/6} Z_2 v_1}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{2/3} v_0} \quad (I.29)$$

(I.29)

Cette formule montre que la perte d'énergie varie comme la vitesse du projectile  $V_1$  et donc comme  $E^{1/2}$  [4].

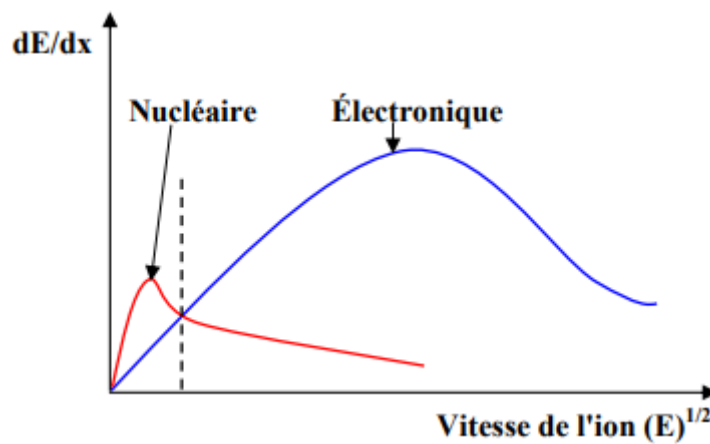


Figure I.18 : Variation des pertes d'énergie nucléaire et électronique en fonction de la vitesse d'ion

### **C) Théories de ralentissement et de l'arrêt des ions dans un matériau :**

Lors de le bombardement ionique dans un solide, quatre phénomènes physiques très différents peuvent avoir lieu par interaction de la particule chargée incidente avec les électrons et les noyaux des atomes cibles.

D'après la figure I.19, ces phénomènes peuvent être :

- des chocs élastiques ayant lieu par transfert de la quantité de mouvement aux atomes-cibles
- des chocs inélastiques par excitation-ionisation de la cible
- une production de photons;
- apparition de diverses réactions nucléaires.

La probabilité d'apparition de chacun de ces phénomènes dépend des caractéristiques de la particule incidente telles que la masse, la charge et l'énergie. Cependant, on doit signaler que les deux derniers processus se déroulent lors des implantations à très hautes énergies (généralement supérieures au GeV) [38]. Par ailleurs, d'après la figure I.19, il est clair que des phénomènes supplémentaires peuvent également avoir lieu, il s'agit de :

- la création de défauts dans le matériau cible qui a lieu, si l'énergie transférée par collisions nucléaires aux atomes du matériau cibles est supérieure à l'énergie de liaison du solide. Chaque atome peut alors, à son tour, déplacer d'autres atomes par un processus en cascade d'où l'endommagement de la cible
- la pulvérisation de la cible ayant lieu en surface (i.e. des noyaux peuvent être éjectés du matériau)
- la rétrodiffusion des ions incidents ayant lieu si la masse de la particule incidente est trop faible par rapport à la masse de l'atome cible. La particule incidente peut alors rebondir sur les noyaux du solide jusqu'à ce qu'elle sera rétrodiffusée
- éjection de produits des réactions nucléaires : électron, photon, particule légère et/ou lourde.

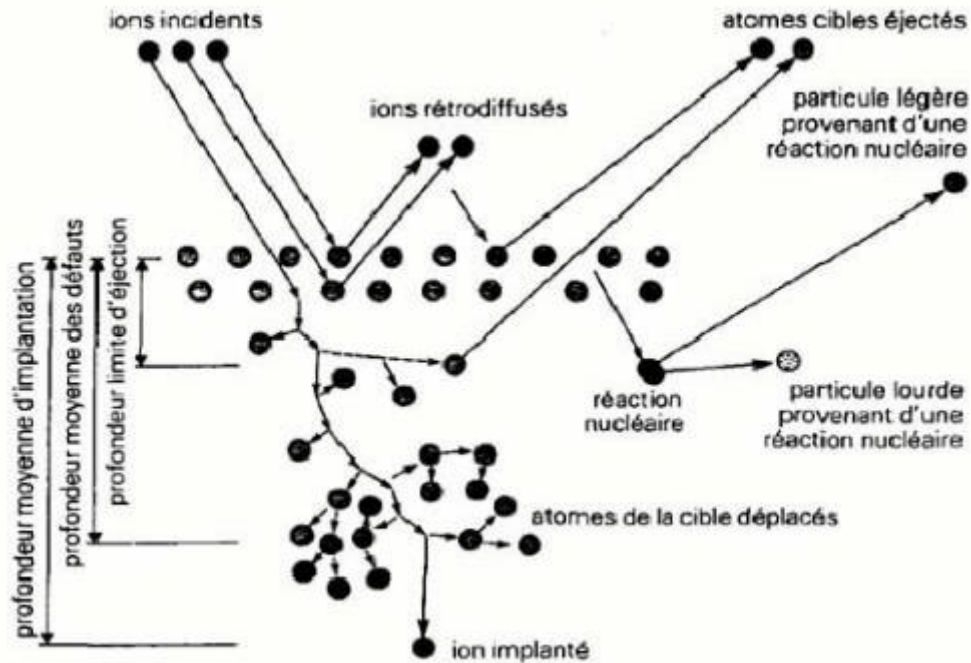


Figure I.19: Illustration des différents phénomènes se produisant au cours d'un bombardement ionique dans un matériau solide [39]

**D) Distribution des ions en profondeur de la cible :**

L'étude de la profondeur de distribution des ions est souvent basée sur l'hypothèse d'un solide amorphe. Selon la théorie L.S.S (Lindhard, Scharff et Schiott), l'arrêt des ions présente une distribution de type Gaussienne. [1- 37- 40-18].

$$n(x) = n_0 \exp\left(\frac{-(x - R_p)^2}{2(\Delta R_p)^2}\right) \tag{I.30}$$

$$n_0 = \frac{\phi}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \tag{I.31}$$

Cette distribution est caractérisée par quatre premiers moments physiques qui sont :

- ✓ Le  $R_p$  est défini comme étant la profondeur où les ions implantés s'arrêtent avec un maximum de concentration

$$R_p = \frac{1}{\phi} \int xn(x)dx \tag{I.32}$$

$\phi$  : la dose totale (ion/cm<sup>2</sup>)

$n(x)$  : Répartition en profondeur de tous les ions implanté

✓  $\Delta R_p$ , il caractérise la répartition statistique des ions en profondeur autour de  $R_p$

$$\Delta R_p^2 = \frac{1}{\phi} \int (x - R_p)^2 N(x) dx \quad (I.33)$$

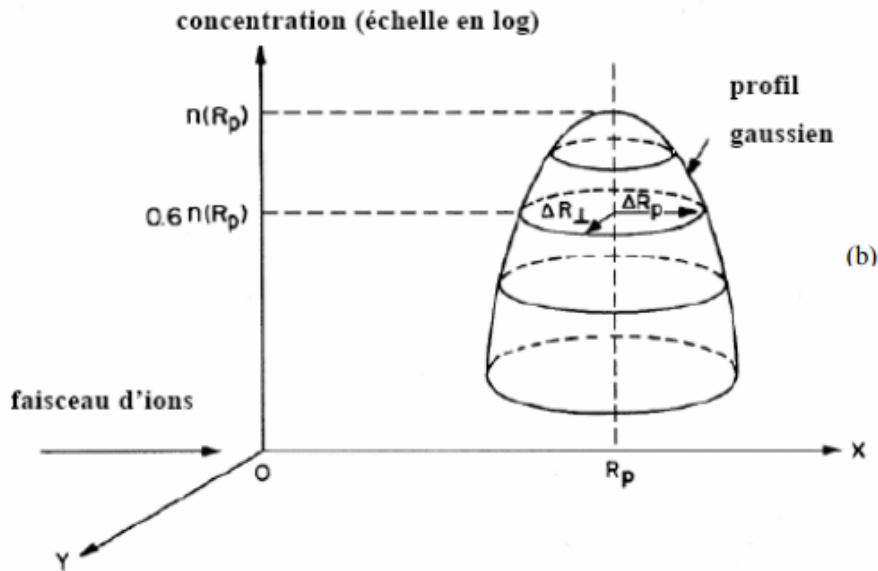


Figure I.20 : Distribution des ions en profondeur de la cible [41]

Un autre paramètre physique inévitable est la déviation latérale souvent exprimée par  $\Delta R_{\perp}$  (Figure I.20). Il caractérise la dispersion latérale des ions, c'est un paramètre très important surtout dans le cas de l'utilisation des masques pour la conception (architecture) des composants.

✓ L'obliquité  $\gamma$  (ou skewness) qui mesure l'asymétrie de la distribution ou le positionnement du sommet de la courbe par rapport à  $R_p$  [42-43]

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

(I.34)

✓ Le kurtosis  $\beta$  qui mesure l'écrasement du pic (ou bien l'extension de la queue de distribution en volume) [42-43].

$$\beta = \frac{1}{\phi \Delta R_p^4} \int_0^{+\infty} (x - R_p)^4 N(x) dx \quad (I.35)$$

Les deux derniers paramètres sont reliés par l'expression universelle suivante:

$$\beta = 2.91 + 1.56 \gamma^2 + 0.59 \gamma^4 \quad (I.36)$$

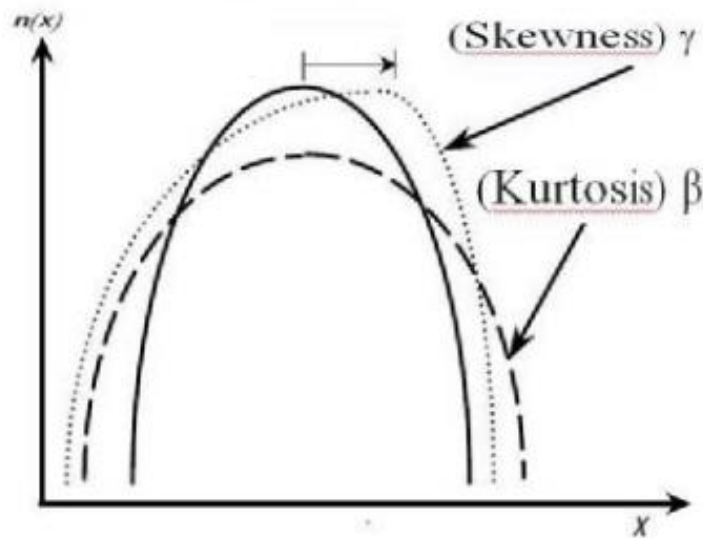


Figure I.21 : Un graphique montrant les deux paramètres  $\gamma$  et  $\beta$  pour la distribution de gaussien [42]

**E) Répartition des défauts dans le matériau après un bombardement ionique :**

Seules les collisions nucléaires sont responsables de la création des défauts, soit à la suite des collisions initiales avec des ions primaires incidents, soit à la suite des collisions secondaires avec des atomes cibles. [44] Donc, si nous voulons déterminer la concentration des dommages résultant par les ions légers ou lourds, on dit que ces derniers pénètrent dans l'échantillon aux profondeurs plus petites et produisent des gros défauts locaux qui sont situés plus proches de la surface que les ions légers [45]. Cette couche est appelée la région amorphe.

### **I.4.3.2 Interaction électron-matière :**

#### **A) Notion sur l'électron**

Electron, particule élémentaire constitutive, avec les protons et les neutrons, des atomes. L'électron est l'un des constituants fondamentaux de la matière, au même titre que les quarks. Il fait partie de la famille des leptons, qui comprend également le muon, le tauon, et les neutrinos. De plus, les électrons sont des fermions car leur spin est de  $1/2$ . Le concept de spin est lié à la théorie quantique, que nous devons au physicien allemand Max Planck, qui a découvert la discontinuité de l'énergie en introduisant la notion de quanta, ainsi qu'au physicien français Louis de Broglie, prix Nobel en 1929 pour avoir découvert, en 1924, la nature ondulatoire des électrons [46]. Les électrons ont une masse d'environ  $9,1083 \times 10^{-28}$  g et une charge électrique élémentaire de  $1,602 \times 10^{-19}$  C (coulombs). La charge de l'électron est l'unité de base en électricité. Les électrons possèdent un moment magnétique qui est égal à  $0,92827 \times 10^{-23}$  A.m<sup>2</sup>, et un spin demi-entier caractéristique des fermions. Aussi, l'électron satisfait au principe d'exclusion de Pauli, qui permet la construction d'édifices atomiques stables et qui est à l'origine de la classification périodique des éléments. L'antiparticule de l'électron est le positron (ou positon), qui se manifeste dans la radioactivité bêta, ou dans l'annihilation des rayons gamma par création de paires électron-positron

#### **B) Volume d'interaction :**

Les électrons incidents pénètrent dans la matière en empruntant un parcours aléatoire jusqu'à la perte de leur énergie cinétique. Cette pénétration s'accompagne d'un élargissement du faisceau qui crée un volume appelé familièrement « volume d'interaction » (figure I.22). Les dimensions du volume d'interaction dépendent fortement de l'énergie du faisceau incident et le nombre atomique du matériau. Ce volume est d'autant plus allongé que l'énergie est élevée ou que le nombre atomique est faible [6].

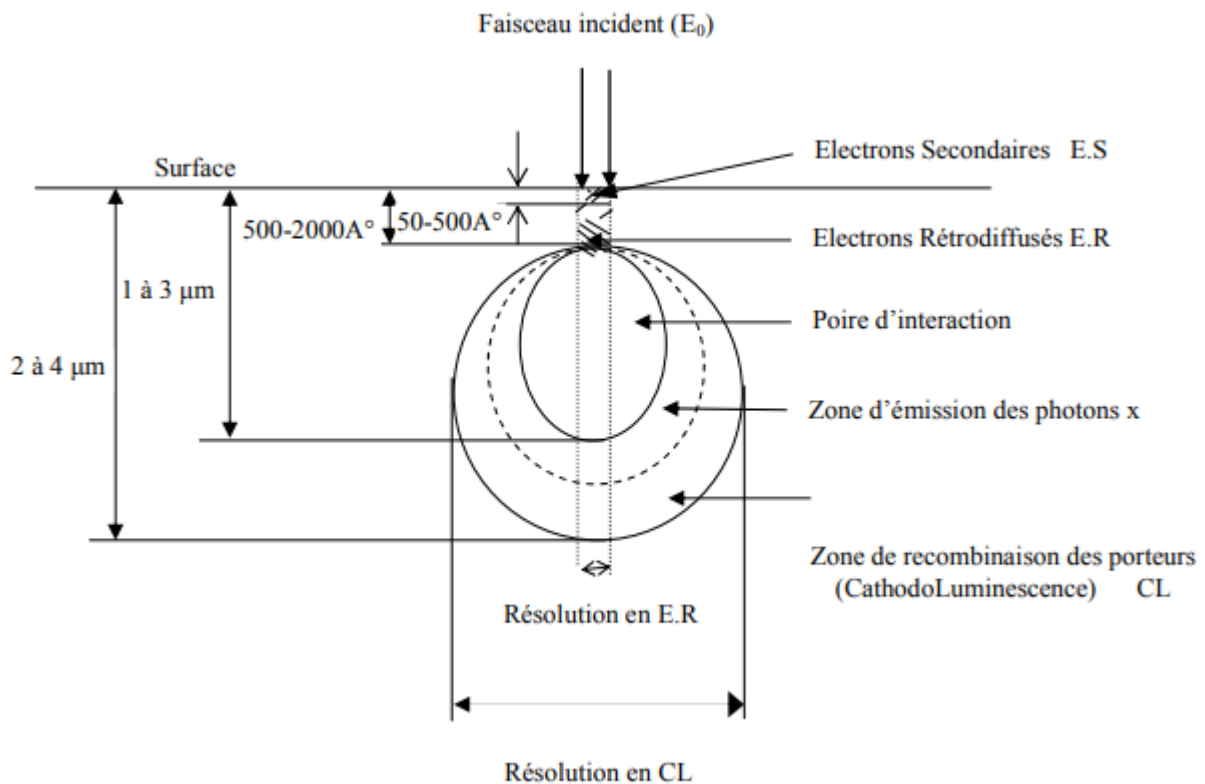


Figure I.22 : Illustration le volume de génération et la résolution spatiale des différents phénomènes qui ont lieu suite à l'interaction électrons-matière [47-48]

**C) Les différents collision entre les électrons et les atomes de cible :**

Le bombardement d'un semi-conducteur par un faisceau d'électrons donne naissance à divers phénomènes [49], tels que l'émission électronique secondaire ou de photons X et le phénomène de rétrodiffusion. La grande variété des signaux émis dépend de l'énergie des électrons primaires et de la composition chimique du matériau irradié. Les interactions entre ces électrons incidents et les atomes/molécules de l'échantillon peuvent être classés en deux catégories :

**C.1) Les collisions élastiques :**

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

Cette interaction entre ces deux particules chargées est de type coulombienne où le potentiel positif du noyau interagi directement avec le potentiel négatif de l'électron. En conséquence, aucune énergie n'est transférée (ou peu d'énergie) de l'électron à l'atome de l'échantillon

analysé. En plus, cette interaction fait dévier la trajectoire de l'électron à chaque collision (l'électron suit un trajet de type zig-zag) pour donner naissance à des électrons rétrodiffusés, c'est le phénomène de rétrodiffusion où il est utilisé dans le MEB pour le contraste du nombre atomique et les effets de diffraction [6] (figure I.23).

### C.2) Les collisions inélastiques :

L'interaction inélastique provient de la collision entre l'électron énergétique incident et l'électron constituant l'atome de l'échantillon qui sont soit éjectés de leurs orbites, avec une perte d'énergie et un faible transfert de vitesse, provoque une dispersion inélastique qui donne naissance à une grande variété de signaux de processus utiles suivant les caractéristiques de l'échantillon et du faisceau primaire tel que : (Electrons secondaires , Rayons X , Electrons absorbés , Electrons Auger , les photon de Cathodoluminescence ....etc) [6-32] (figure I.24).

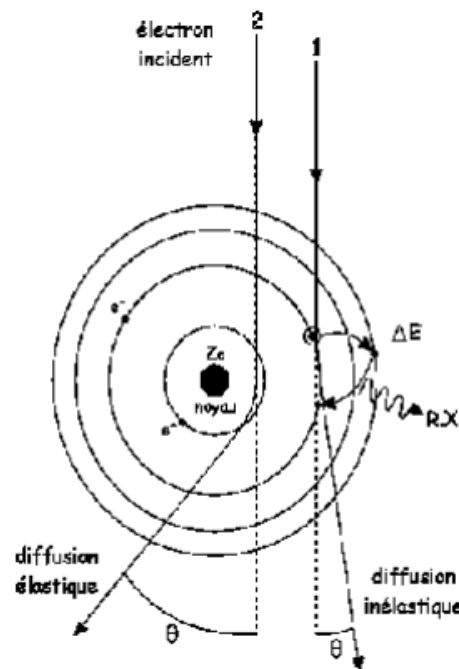


Figure I.23 : Schéma représentant la diffusion élastique et inélastique [32]

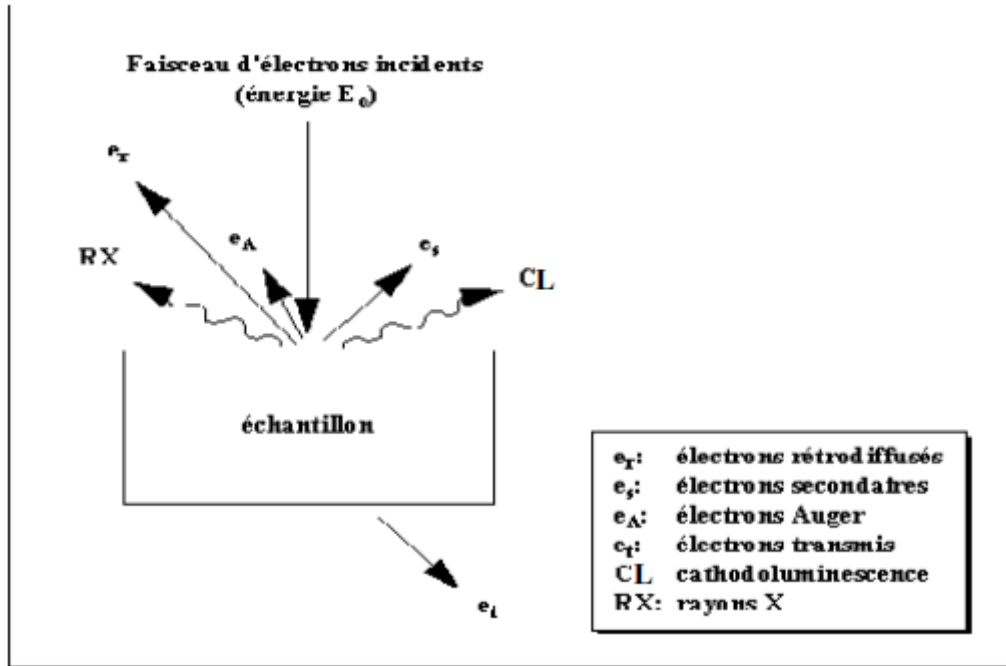


Figure (I.24) : Les effets produits suite au bombardement d'un échantillon par les électrons

✓ **Electron rétrodiffusés :**

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

✓ **Electrons Auger :**

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

✓ **Electrons secondaires :**

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

Donc, ces électrons donnent des informations spécifiques dans la zone d'interaction avec la matière.

### ✓ **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 étant donc lié au gap du semi-conducteur et à la présence d'éléments étrangers, que l'on peut identifier et connaître leur répartition au sein du matériau [50], où chaque processus est déterminé par sa probabilité de production qui est décrite par une section efficace.

### **D) Volume de Dissipation de l'Energie du Faisceau Electronique par Chocs Inélastiques :**

Les électrons incidents subissent des chocs inélastiques ou élastiques avec les atomes qui composent le matériau, c'est à dire avec ou sans perte d'énergie. La diffusion élastique peut être analysée en employant le modèle de Rutherford. La section efficace totale de diffusion relativiste de Rutherford est donnée par [50-32]:

$$\sigma = (5.21 \times 10^{-21}) \left(\frac{Z}{E}\right)^2 \frac{4\pi}{\delta(\delta+1)} \left(\frac{E+m_0c^2}{E+2m_0c^2}\right)^2 \quad (I.37)$$

Où :

Z : est le nombre atomique de l'atome diffusé.

E : est l'énergie des électrons en KeV.

$m_0$  et  $c$  : sont respectivement la masse élémentaire de l'électron et la vitesse de la lumière dans le vide ( $3.10^8$ ).

$\delta$  : est un paramètre donné par la relation [32-50] :

$$\delta = (3.4 \times 10^{-3}) Z^{0.67} / E \quad (I.38)$$

Les chocs inélastiques des électrons incidents avec les électrons des couches profondes et de valence des atomes, engendrent une perte d'énergie des électrons incidents au cours de leur trajectoire [51] ; Ce processus statistique, peut être décrit de façon continue par la formule de

Bethe (1933) [50-52-53].cette formule traduit la perte d'énergie moyenne  $dE$  par unité de longueur  $dS$ .

$$\frac{dE}{dS} = -2\pi e^4 N_A \frac{\rho Z}{EA} \ln\left(\frac{1.166E}{j}\right) \quad (\text{I.39})$$

Où :

$e$  : est la charge électronique,  $N_A$  : est nombre d'Avogadro,  $\rho$  : est la densité du matériau.

$A$  : est le poids atomique,  $E$  : est l'énergie moyenne d'électron,  $J$  : est le potentiel moyen d'ionisation. Ce dernier est la dissipation d'énergie moyenne par interaction (pour indisposer les processus possibles de dissipation d'énergie) est donné par [50-54] :

$$j = (9.76Z + 58.5Z^{-0.19})10^{-3} \quad (\text{KeV}) \quad (\text{I.40})$$

Pour les basses énergies d'électron ( $E < 6.34\text{J}$ ), la modification empirique à l'expression de Bethe par Rao-Sahib et Wittry devrait être employé [55]

D'autre part l'interaction électrons-matière est caractérisée par d'autres paramètres tel que le parcours électronique, l'énergie de formation d'une paire électrontrou qui vont être analysés un par un dans ce qui suit.

### **E) Pénétration en profondeur :**

Actuellement, il n'existe pas de consensus dans la littérature pour calculer la profondeur de pénétration maximale « penetration range » des électrons primaires dans le solide. En général, la profondeur de pénétration maximale  $R_e$  est donnée par l'expression [6]:

$$R_e = \frac{K}{\rho} E_0^n \quad (\text{I.41})$$

Où :

$\rho$  : est la densité du matériau.

$K$  : dépend du nombre atomique du matériau et également formules ont été également proposées par d'autres auteurs.

$n$  : est choisi en fonction du modèle de diffusion donnée.

En 1957, les travaux de Gruen ont conduit à un parcours électronique donné par [50-56] :

$$R_G = 4.57E_0^{1.75} \quad (\text{I.42})$$

## Chapitre 01 : Généralité sur les interactions rayonnements - matière

Où  $R_G$  est en  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$  et  $E_0$  est en keV.

Et selon Everhart et Hoff :

$$R_e = (0.0398 / \rho) E_0^{1.75} \quad [53] \text{ (I.43)}$$

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

Ces deux résultats ((I.42) et (I.43)) 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 [57] est utilisée plus tard :

$$R(\text{g} / \text{cm}^2) = 2.56 \times 10^{-3} \left( \frac{E_0}{30} \right)^{1.7} \quad \text{(I.44)}$$

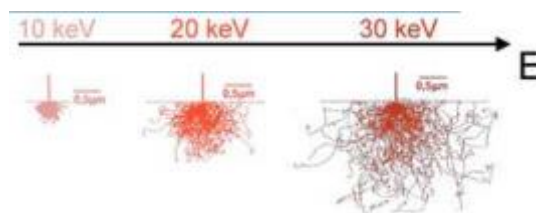
L'exposant 1.7 dans cette dernière équation n'est pas précis à basse énergie [50].

Une expression plus générale dérivée par Kanaya et Okayama s'est avérée pour être conforme bien aux résultats expérimentaux. D'après Kanaya et Okayama [50-58] est :

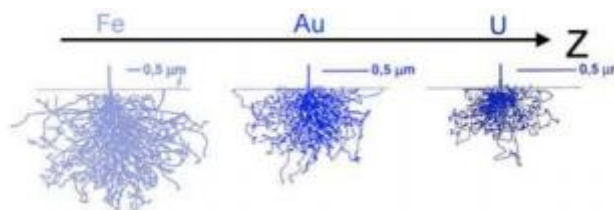
$$R_e (0.0276 / \rho Z^{0.889}) E_0^{1.67} \quad \text{(I.45)}$$

Là où  $E_0$  est en KeV,  $A$  est le poids atomique en  $\text{g}/\text{mol}$ ,  $\rho$  est en  $\text{g}/\text{cm}^3$ , et  $Z$  est le nombre atomique.

Influence de l'énergie de l'électron : Plus l'électron est énergétique, plus il pénètre profondément dans le matériau.



Influence du numéro atomique : Plus le matériau est lourd, plus il arrête le parcours de l'électron.



### F) La production des rayons X :

Imaginez un électron ayant une énergie cinétique initiale  $E_0$  qui heurte (interagit avec) un des atomes de la cible, comme l'illustre la figure I.25. 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 ou (Bremsstrahlung) [59].

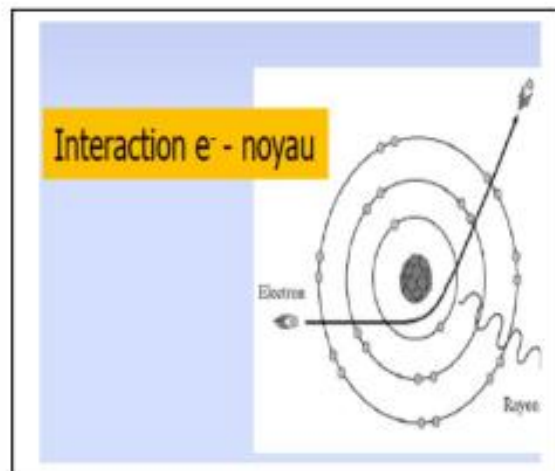


Figure I.25 : émission RX (rayonnement de freinage) à partir d'une collision élastique [59]

L'étude spectrale du rayonnement X émis montre qu'il est formé de la superposition d'un spectre continu et d'un spectre de raies (figure I.26). Ces deux composantes correspondent à deux mécanismes d'émission bien distincts :

- ❖ Interaction des électrons accélérés avec les noyaux de la cible (spectre continu ou spectre de Bremsstrahlung).
- ❖ Ionisation (collision inélastique) des couches profondes des atomes de la cible (spectre de raies).

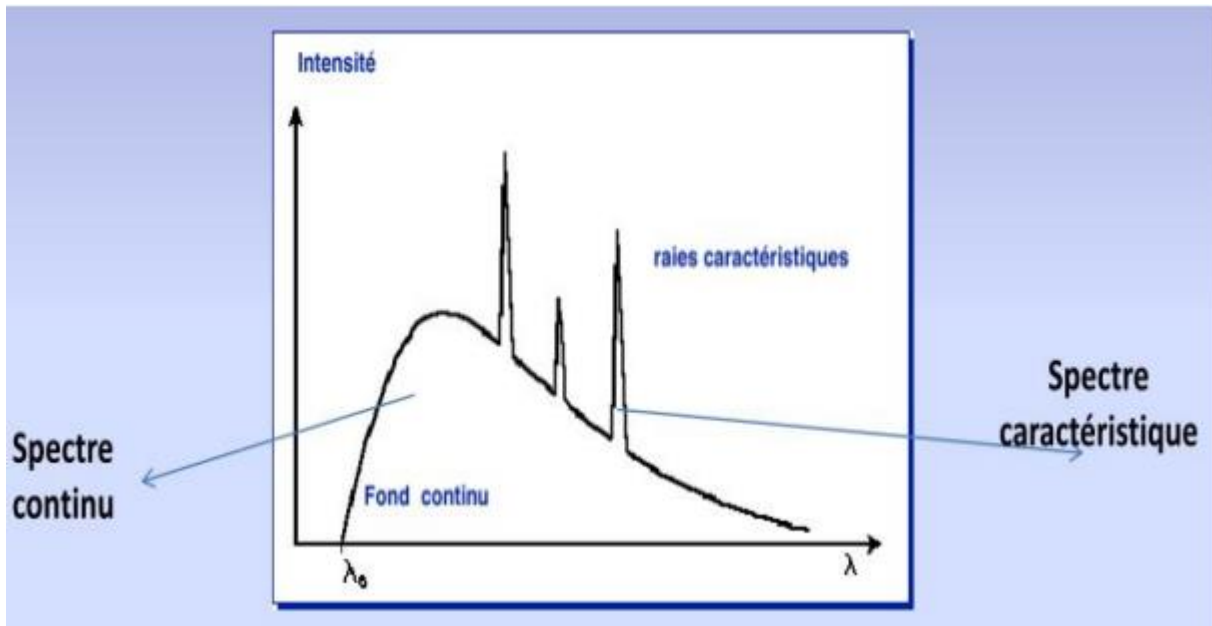


Figure I.26 : Un spectre global d'émission des rayons X [59]

**G) La génération des rayons X en profondeur:[6]**

La prédiction de la profondeur de génération (production) des rayons X dépend de la profondeur de pénétration des électrons tel que la profondeur de génération de rayons X caractéristiques ou ceux issus de rayonnement continu de freinage est toujours plus petite que la profondeur de pénétration des électrons. Les rayons X caractéristiques ne peuvent être produits que dans l'enveloppe qui contient des électrons avec des énergies supérieures ou égales à l'énergie critique d'ionisation  $E_c$ .

En se basant sur le modèle de pénétration d'électrons de Kanaya-Okayama ([Kanaya and Okayama, 1972](#)), la profondeur de la production des rayons X caractéristiques et de fond continu par les électrons incidents à une énergie spécifiée est donnée par l'équation suivante:

$$R_x = \frac{27.6A}{\rho Z^{0.89}} (E_0^{1.67} - E_c^{1.67}) \quad (I.46)$$

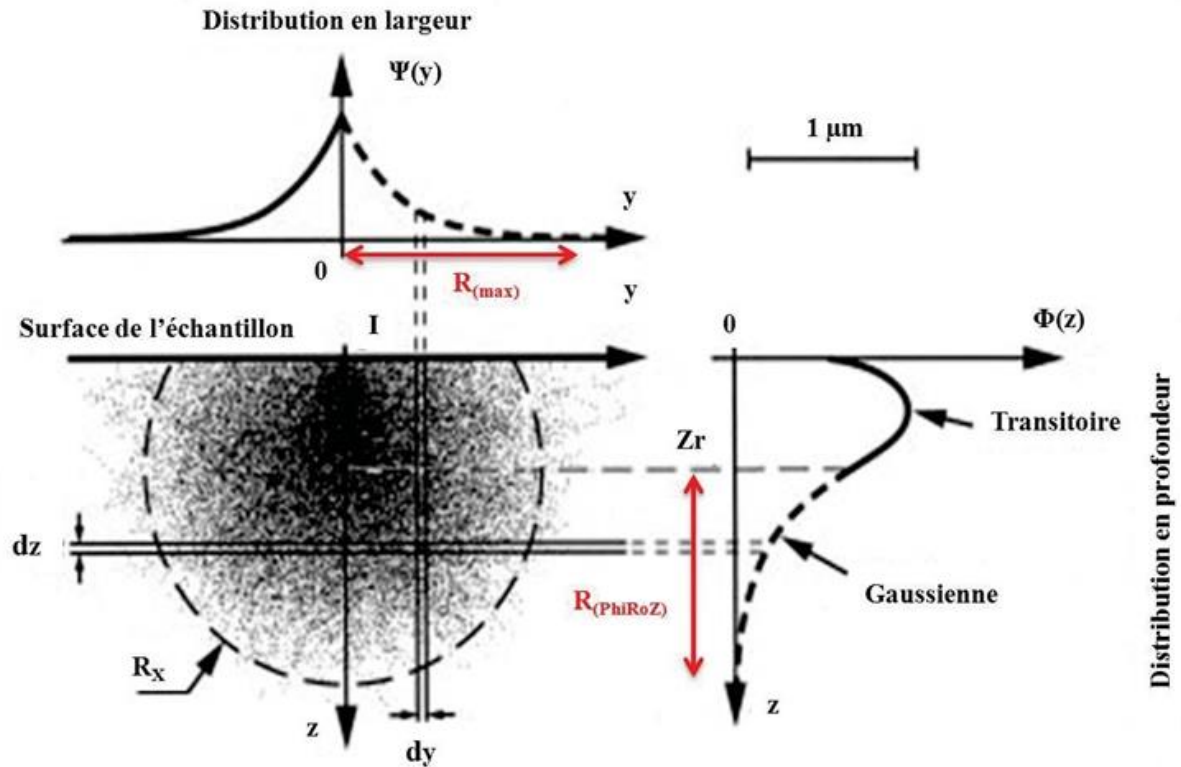
Où :  $E_c$  : est l'énergie critique d'ionisation pour les rayons X caractéristiques

$\rho$  : est la densité du matériau.

$Z$  : le numéro atomique

$A$  : le poids atomique

la fonction de distribution latérale des rayons X qui est une fonction gaussienne. Par contre la fonction de distribution en profondeur des rayons X qui est généralement composée de deux fonctions transitoires et gaussienne. (Figure I.27)



**Figure I.27:** Les différentes façons pour calculer la génération des rayons X en profondeur et en largeur à partir d'un volume d'interaction (Adapté de (Arnould and Hild, 2003)).

**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 tout 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.

## *Liste des références :01*

1. A. Bensaada, Technologie des Semi-conducteurs, Office des Publications Universitaires, Alger, (1994).
2. D. N. Baker, "Satellite Anomalies due to Space Storms," in I.A. DAGLIS. ed.
3. S. Blanqué, "Optimisation de l'implantation ionique et du recuit thermique pour SiC", Thèse de doctorat, Univ. Montpellier II, (2004).
4. 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)
5. F. Zeigler, J.P. Beirsack, U. Littman, 1985, The Stopping and Range of Ions in Solids, Pergamon Press, New York, version 2013
6. A.Zoukel, étude des phénomènes d'interaction faisceau d'électron gaz –matière dans un MEB, Thèse Doctorat ,Université LilleI (2013)
7. Xuan Truong NGUYEN, Étude de matériaux irradiés sous faisceau d'électrons, thèse Doctorat, Université de Toulouse (2014)
8. Alexandre Fafin, Modélisation numérique de l'interaction onde-matière dans des matériaux nanostructures, Thèse de doctorat, Université de Caen Basse-Normandie (2014)
9. J. L. Thobel, Thèse d'habilitation à diriger des recherches en Sciences Physique, Université de Lille (2000).
10. S. Galdin, Thèse de Doctorat, Université de Paris-Sud, Centre d'Orsay(1992).
11. J. H. Curtiss et al, Monte Carlo méthode, National Bureau of Standards Applied Mathematics, 12 (1951) 32.
12. J. F. Gibbons, Proc. Of the IEEE, 60 (1972) 1062-1080.
13. J. Kelvin, Ninetieth century clouds over the dynamical theory of heat and light, Phil-Mag. 2 (1901) 1.
14. B. AMANA, Ch. RICHTER et O. HECKMANN, étude des cristaux par les rayons X, Université de Cergy-Pontoise, <https://www.u-cergy.fr>
15. Romain Clauzel, étude de la passivation du silicium dans des conditions d'irradiation électronique de faible énergie, Université Claude Bernard Lyon, thèse Doctorat (2006)
16. 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).
17. N. Belabed, Thèse de Magister, Université Mentouri de Constantine, Algérie
18. Lindhard, scharff, Energy Dissipation by Ions in the keV Region, Phy. Rev., 124(1), (1961), p. 128.
19. Mr. Ammari Hocine" Calculs des effets induits par les rayonnements de protons Dans les cristaux semi-conducteurs de type A<sup>III</sup> B<sup>V</sup>", Thèse de MAGISTER, Univ. 08 mai 1945, (2008)
20. D.el hadj et M.Lamia" Système de double calcul dosimétrique", MÉMOIRE de MASTER en Physique Médicale, Univ. Abou Bekr Belkaid Tlemcen(2011)
21. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY "Radiation oncology physics: a handbook for teachers and students", ISBN 92–0–107304–6 (Vienna, 2005).

22. Ziad Francis. Simulations Monte-Carlo et étude microdosimétrique pour des irradiations cellulaires à faibles doses en neutrons de 14 MeV. Chimie-Physique [physics.chem-ph]. Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II, 2007. Français. .
23. Aloine Selmi " L'influence des impuretés sur les coefficients des transports ", MÉMOIRE de MASTER en physique, Univ.TUNIS-EL MANAR (2011)
24. Dr. BETKA Abderrahim " Modélisation Numérique des Rayonnements Ionisants ", COURS MASTER en physique médicale, UNIVERSITE DE SETIF 1, ELBEZ
25. Rudy Tuani, Dossier > Les Interactions Ions-Plasma Futura-Sciences, (2002)
26. Catherine Sabathier. Thèse de doctorat. Effets de l'irradiation dans une Perovskite : utilisation de cette matrice pour un conditionnement des actinides. Université Paris Orsay (2003).
27. Mihia Bogdan Lazar. Thèse de Doctorat .Etude du dopage par implantation Ionique d'Aluminium dans le Carbure de Silicium pour la réalisation de composants de puissance. Centre de Génie Electrique de Lyon (CEGEL) (2002)
28. V.V. Balashov Interaction of particles and radiation with matter, Springer, (1997).
29. Balanzat E., Bouffard S., Solid State Phenomena, 31-32 (1993) 7.
30. L. Ottaviani, "Réalisation de Jonctions pn dans le Carbure de Silicium 6H par Implantation Ionique d'Aluminium", Thèse de doctorat, Lyon, (1999).
31. G. Dearnaley, J. H. Freman, R. S. Nelson and J. Stephen, Ion Implantation, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, (1973).
32. 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)
33. Kunihiro Suzuki, applications of Monte Carlo Method in Science and Engineering, Published in print edition (Japan), 2011
34. . N. Bohr, Kgl. Danske Videnskab. Mat-Fys. Medd., 18(8), (1948).
35. 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
36. Kalbitzer S., Oetzman H., Grahmann H., Feuerstein A., Z. Phys., A 278, (1976), 3,223, A simple universal fit formula to experimental nuclear stopping power data.
37. Lindhard J., Scharff M. and Shiott H. E., Mat. Phys. Medd., 33 (1963), 14, Range concepts and heavy ion ranges.
38. L. Ottaviani, "Réalisation de Jonctions pn dans le Carbure de Silicium 6H par Implantation Ionique d'Aluminium", Thèse de doctorat, Lyon, (1999)
39. Mr. Serrar Hamza" etude theorique et experimentale de l'implantation ionique de sb dans si", Thèse de MAGISTER, Univ. 08 mai 1945, (2008)
40. <http://www.ion-beam-services.com>
41. S. Wolf, R.N. Tauber, Laser Microfabrication, edited by Lattice Press, (1986).
42. A. Baudrant, "Silicon Technologies: Ion Implantation and Thermal Treatment", ISTE Ltd, London, (2011).
43. D. Fink, "Fundamentals of Ion-Irradiated Polymers, Materials Science", SpringerVerlage Berlin Heidelberg,(2004).

44. H. Bernas, "Materials Science with Ion Beams", Springer Verlag Berlin Heidelberg, (2010).
45. K. Esmark, H. Gossner, W. Stadler, "Advanced Simulation Methods for ESD Protection Development", Elsevier.Ltd,(2003).
46. Y.Sayad, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 2003
47. M.Hadef, Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 1999
48. K.Guergouri, Thèse d'état, Université paris 6, 1987
49. Frederik Faure, interaction entre le rayonnement et la matière, Notes de cours, Université Joseph Fourier (2003)
50. B.G.Yacobi and D.B.Holt, "Cathodoluminescence Microscopy of Inorganic Solids",Edition Plenum Press, New York and London, 1990
51. R.Shimizu, Ze-Jun. D.Rep.Prog.Phys, 55, 1992
52. H.E.Bishop, Brit.J.Appl.Phys, Vol 18, 1967
53. T.E.Everhart and P.H.Hoff, J. Appl. Phys. 42(13), 1971
54. G.Fontaine «Emission Electronique et Contrastes », Proceeding de l'Ecole d'Eté de Saint-Martin-d'Hères, Les Editions de Physique, Orsay, 123, 1978
55. T.S.Rao-Sahib and D.B.Wittry, J.Appl.Phys. 40(9), 3745, 1969
56. A.E.Gruen and Z.Naturforsh, 12A, 89, 1957
57. D.B.Wittry and D.F.Keyser, J. Appl. Phys., 38,375, 1967
58. K.Kanaya, S.Okayama, J. Phys. D: Appl. Phys. 5, pp. 43, 1972
59. <http://fac.umc.edu.dz/vet/documents/Cours%20et%20Td/Chapitre%20III-Rayons-X.pdf>

# CHAPTER:02

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

### **II.1. Introduction :**

Le procédé idéal pour résoudre un problème demande beaucoup d'opérations successives pour obtenir des valeurs exactes ou des valeurs qui ont une signification physique réelle [1]. Dans la plupart des cas, il est difficile de trouver un procédé qui mène à des résultats convenables, c'est pourquoi on utilise la simulation par méthode Monté Carlo à cause de son caractère complètement aléatoire et fortement statistique et probabiliste [2-3].

Dans ce 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 de notre choix comme l'Ar<sup>+</sup> et Xe<sup>+</sup> sur la surface de différents composants semi-conducteurs de notre choix comme le Si et le GaAs

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

Dans tout ce travail les résultats sont obtenus par le logiciel SRIM 2003, On utilise les ions de l'xénon Xe<sup>+</sup> et Ar<sup>+</sup> pour l'interaction avec les composés semi conducteur tell que : GaAs, Si (cible amorphe)

- Les différentes caractéristiques des ions implantés (Xe<sup>+</sup> et Ar<sup>+</sup>) et les cible bombardé (Si et GaAs) sont représentées dans le tableau
- Les ions d'xénon Xe<sup>+</sup> et les ions d'argon Ar<sup>+</sup> ont des énergies cinétiques de 10 KeV.
- Le nombre des ions incidents est 9999.
- L'épaisseur de la cible est de (500Å<sup>0</sup>).
- L'angle incident égal à 0<sup>0</sup>(pour un pénétration maximale en profondeur est maximal) .

### **II.3. Présentation du logiciel SRIM :**

*SRIM* (The Stopping and Range of Ion in Matter) est un programme qui suit le programme standard TRIM (Transport of Ion in Matter) [4] , Dans ces programmes, l'énergie transférée à un atome-cible est analysée pour donner les résultats suivants: l'ionisation induite par les atomes repoussés, le nombre de lacunes et d'interstitiels créés suite à une cascade de collisions, et également le nombre de collisions transférant des énergies inférieures à  $E_d$  (énergie de déplacement), et qui produisent des phonons. Le code de ces programmes couple

## Chapitre 02 : Simulation de l'interaction ion-matière par SRIM

---

deux méthodes: celle de *Kinchin-Pease* modifiée pour les calculs locaux, et celle de la cascade de collisions (suivi des atomes individuels reculés jusqu'à ce que leur énergie devienne inférieure à  $E_d$ ). Cette dernière donne directement la distribution spatiale des défauts [5].

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

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

- $E_1 > E_d$  et  $E_2 > E_d$  : L'ion incident peut déplacer un atome cible de son site qui devient à son tour une particule incidente pouvant subir d'autres chocs. Il peut déplacer d'autres atomes cibles et constituer des lacunes
- $E_1 > E_d$  et  $E_2 < E_d$  : L'énergie de l'atome cible est insuffisante, il reste alors dans son site et son énergie  $E_2$  sera dissipée dans le réseau pour la création des phonons (vibration de réseau). Quant à la particule incidente, elle continue son mouvement
- $E_1 < E_d$  et  $E_2 > E_d$  : L'atome cible est éjecté de son site et devient une particule incidente pour subir d'autres chocs. la particule incidente occupe des sites vides (substitutionnels) et son énergie est dissipée dans le réseau par des vibrations (création de phonons)
- $E_1 < E_d$  et  $E_2 < E_d$  : L'atome cible continue à vibrer dans sa position d'équilibre sans quitter son site. L'ion incident peut occuper seulement des sites interstitiels et son énergie est dissipée dans le réseau pour la création de phonons. [3-5-6-7].

La figure II.1. Représente le tableau de bord permettant de choisir le mode de calcul désiré. En premier approche notre choix est porté sur la technique de bombardement ionique des ions sur les deux cibles ( GaAs et Si ). Donc on choisit la fonction « TRIM calculassions » se trouvant à droite du tableau de commande du logiciel.



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

Une fois ce choix fait, il apparaît un autre tableau représenté sur figure II.2 sur lequel on fixe des données comme l'ion (ici  $\text{Ar}^+$  et  $\text{Xe}^+$ ) le logiciel donne les propriétés de cette ion. Puis la cible qui est le composé ( $\text{GaAs}$  et  $\text{Si}$ ) avec toutes ces caractéristiques physiques telles que la densité, la surface l'énergie de liaison etc.

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

Les résultats numériques présentés visent à étudier l'interaction faisceau d'ions avec les surfaces semi-conductrices. C'est une simulation dénommée TRIM (Transport and Range de Ion à Mater) et SRIM (Stopping and range of Ions in Mater) pour caractériser l'interaction des ions avec des cibles échantillons en gaz ou en solide [8]. (Voire figure II.2)

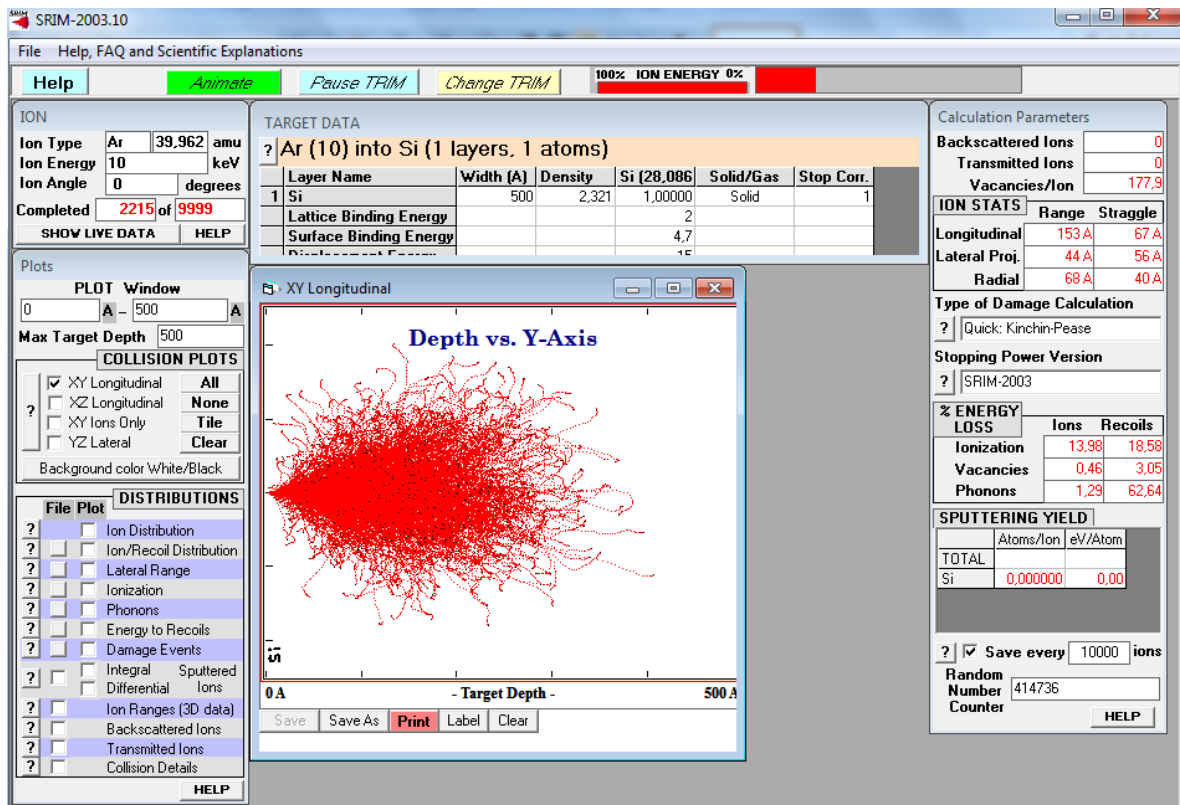


Figure II.2 : Tableau des données TRIM pour le bombardement ionique

## II.4 Etude du pouvoir d'arrêt des ions (Ar+ et Xe+) dans la cible Si :

Les résultats sont obtenus par logiciel SRIM 2003 dans un tableau et leurs graphiques sont tracés par logiciel origine 8.5

Energie des ions (Ar+) (Kev)	dE/dx Elec(Kev/ $\mu$ m)	dE/dx Nucl(Kev/ $\mu$ m)
10, 00	1,103E+02	5,508E+02
27, 50	1,830E+02	5,803E+02
450, 00	6,674E+02	2,538E+02

Tableau.01:Les résultats des pouvoirs d'arrêts de l'Ar+ dans Si (les point principaux)

Energie des ions (Xe+) (Kev)	dE/dx Elec(Kev/ $\mu$ m)	dE/dx Nucl(Kev/ $\mu$ m)
10, 00	9,195E+01	1,218E+03
200,00	4,112E+02	2,134E+03
2000	1,224E+03	1,257E+03

Tableau.02:Les résultats des pouvoirs d'arrêts de l'Xe+ dans Si (les point principaux)

Sur les figures(II.3 ; II. 4) , on représente les variations des pertes d'énergie, électronique et nucléaire, des ions (Ar+ et Xe+) respectivement en fonction de son énergie d'incidente.

A partir des deux figures suivantes plusieurs domaines sont à distinguer :

## Chapitre 02 : Simulation de l'interaction ion-matière par SRIM

- Pour les énergies d'accélération inférieures à 450 Kev pour Ar+ et à 2000 Kev pour Xe+ le pouvoir d'arrêt nucléaire est prédominant, c'est à dire les collisions élastique est prédominant En plus, ils passes par une valeur maximale de 580 kev/micron à E=27.5 Kev et de 2134Kev/micron à 200 Kev pour Ar+ et Xe+ respectivement.
- Au point critique (l'intersection), le freinage des ions Ar+ et Xe+ est assuré par les deux mécanismes à parts égales.
- A partir de 450 keV pour Ar+ et 2000 Kev pour Xe+, le freinage d'origine électronique devient prépondérant par rapport à l'arrêt nucléaire.
- ❖ Rappelons que le pouvoir d'arrêt électronique est une interaction inélastique qui se fait avec les électrons orbitaux du milieu ralentisseur. Il est responsable de l'excitation et l'ionisation des atomes cibles [9]. La quantité d'énergie transférée lors de chaque collision est une très faible portion de l'énergie cinétique de la particule incidente.

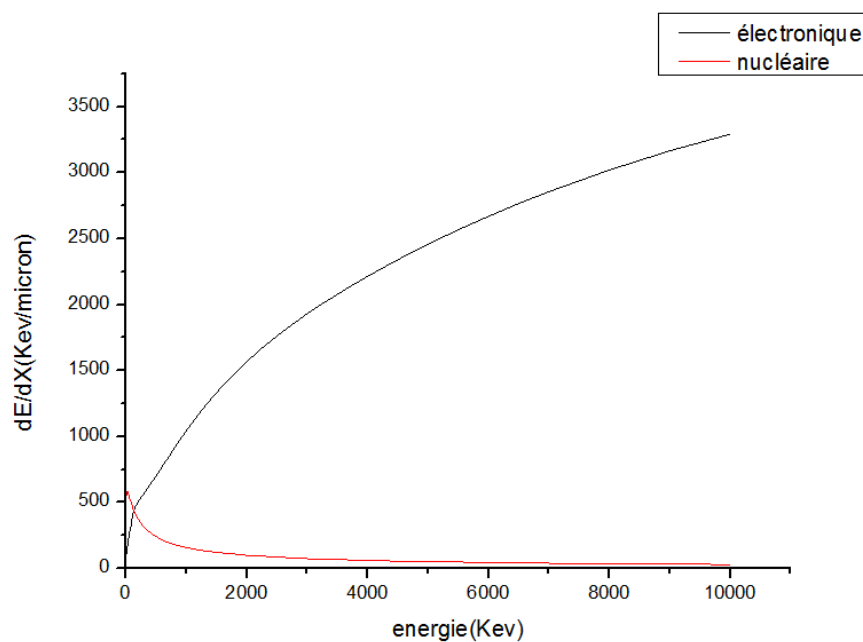


Figure II.3 : Simulation des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique des ions Ar+, dans la cible Si, en fonction de l'énergie incidente des ions.

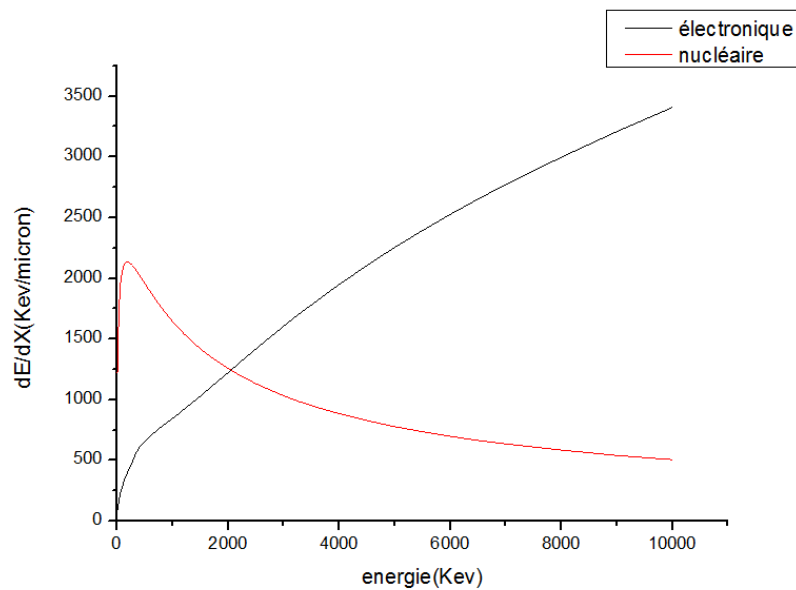


Figure II.4 : Simulation des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique des ions Xe+, dans la cible Si, en fonction de l'énergie incidente des ions.

**Note :** les résultats sont obtenus par logiciel SRIM 2003 dans un tableau et leur graphique sont tracé à l'aide de logiciel origine 8.5.

### II.5 Simulation de la distribution d'ions Xe+ et Ar+ dans Si :

Les programmes SRIM sont compliqués puisqu'il présente plusieurs détails de ce qui se passe dans toutes les étapes de d'implantation. Ils permettent de présenter une image complète de la trajectoire des ions dans la cible.

Sur les figures (II.5 ; II.6), nous reportons la distribution à deux dimensions des ions d'argon et d'xénon (10 KeV et sous angle d'incidence  $0^0$ ) délivrée par le logiciel SRIM2003 dans la cible de Si.

Chaque ion est représenté par sa trajectoire (en trait rouge) et par sa position finale (en point noir).

A partir de la figure suivant on remarque que : La redistribution finale de tous les ions est sous la forme d'une poire centrée à une profondeur d'environ  $R_p = 150 \text{ \AA}$  pour les ions d'argon (Ar+) et d'environ  $R_p = 120 \text{ \AA}$  pour les ions d'xénon (Xe+), ce qui est en bon accord avec la littérature qui dit : Lorsqu'une particule chargée pénètre dans le matériau cible, celle-

## Chapitre 02 : Simulation de l'interaction ion-matière par SRIM

ci ralentit graduellement dans la matière par une série de collisions successives. Plus le numéro atomique de la particule sera élevé plus la cible subira de collisions (varie selon  $Z^2$  de la cible) et plus la particule s'arrêtera rapidement dans la matière [10-11], c'est pourquoi on trouve que :

$R_p(\text{Ar}^+) > R_p(\text{Xe}^+)$  (nous rappelons que :  $Z(\text{Ar}^+) < Z(\text{Xe}^+)$ ).

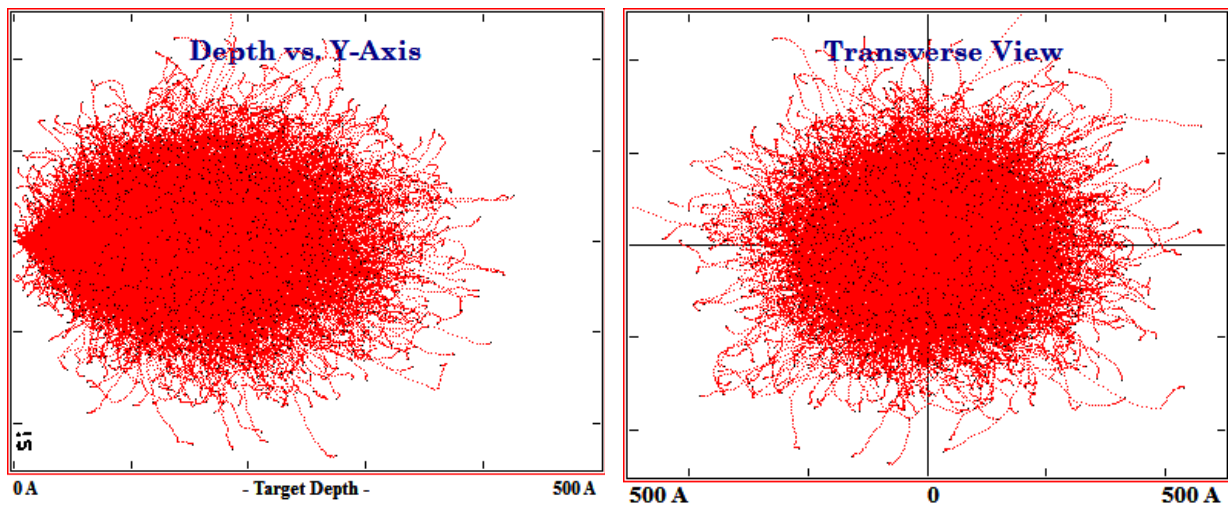


Figure II.5 : les profile de distributions des ions  $\text{Ar}^+$  (10 KeV) dans la cible Si ( $500\text{Å}^0$ )

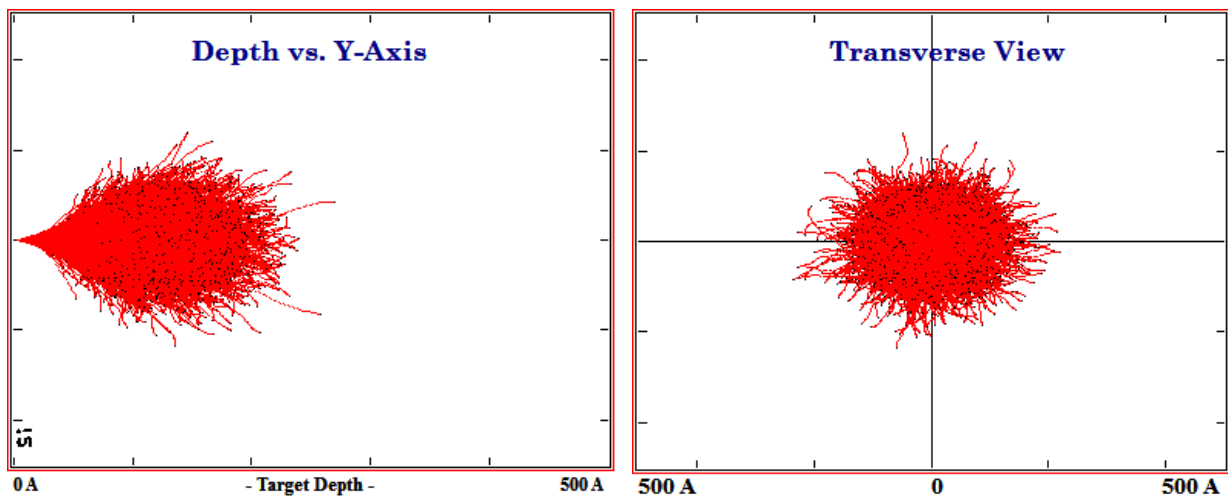


Figure II.6 : les profile de distributions des ions  $\text{Xe}^+$  (10 KeV) dans la cible Si ( $500\text{Å}^0$ )

Aussi Logiciel SRIM permet de simulé la Distribution des ions en profondeur de la cible sous forme des courbes avec des résultats plus précis que celles aux les figures (II.5 ; II.6).

Sur la figure II.7, on représente le profil de redistribution des ions  $\text{Ar}^+$  et  $\text{Xe}^+$  en profondeur de la cible de silicium. Il est clair que la forme des deux courbes est gaussienne, ce qui est en bon accord avec la théorie L.S.S [12-13] relative à la pénétration des ions dans un solide

## Chapitre 02 : Simulation de l'interaction ion-matière par SRIM

amorphe. Le profil, montre également un pic de concentration à une profondeur  $R_p$  approximativement égale à 154 Å Pour  $Ar^+$  et 121 Å pour  $Xe^+$ .

Concernant la largeur à mi-hauteur, qui représente l'élargissement du profil autour de la concentration maximale, nous avons obtenu que  $\Delta R_p \cong 67$  Å pour  $Ar^+$  et  $\Delta R_p \cong 31$  Å pour  $Xe^+$ .

S'agissant des deux autres moments qui sont le skewness ( $\gamma$ ) et le Kurtosis ( $\beta$ ), ils ont été estimés à (0.4292 et 2.957) respectivement pour  $Ar^+$  et (0.4696 et 3.1425) pour  $Xe^+$ . Il est clair que les valeurs trouvées ne sont pas très éloignées par rapport à celles reportées dans le cas de la distribution gaussienne (i.e.  $\gamma \sim 0$  et  $\beta \sim 3$ ). Toutefois, le signe positif de  $\gamma$ , indique que le profil simulé n'est pas parfaitement symétrique et que la queue de distribution est légèrement décalée vers la profondeur de la cible. Ce résultat a également été reporté dans la littérature pour les éléments lourd, le contraire dans le cas des ions léger tel que  $\gamma < 0$  [14-15]. D'autre part, le fait que  $\beta$  soit, tout de même, différent de 3 ceci signifie que le pic du profil de concentration n'est pas parfaitement pointu. Malgré le léger décalage de la redistribution simulée. Nous estimons que les deux profils de distributions des ions  $Ar^+$  et  $Xe^+$ , est mieux décrit par une loi gaussienne, dans la cible de Si.

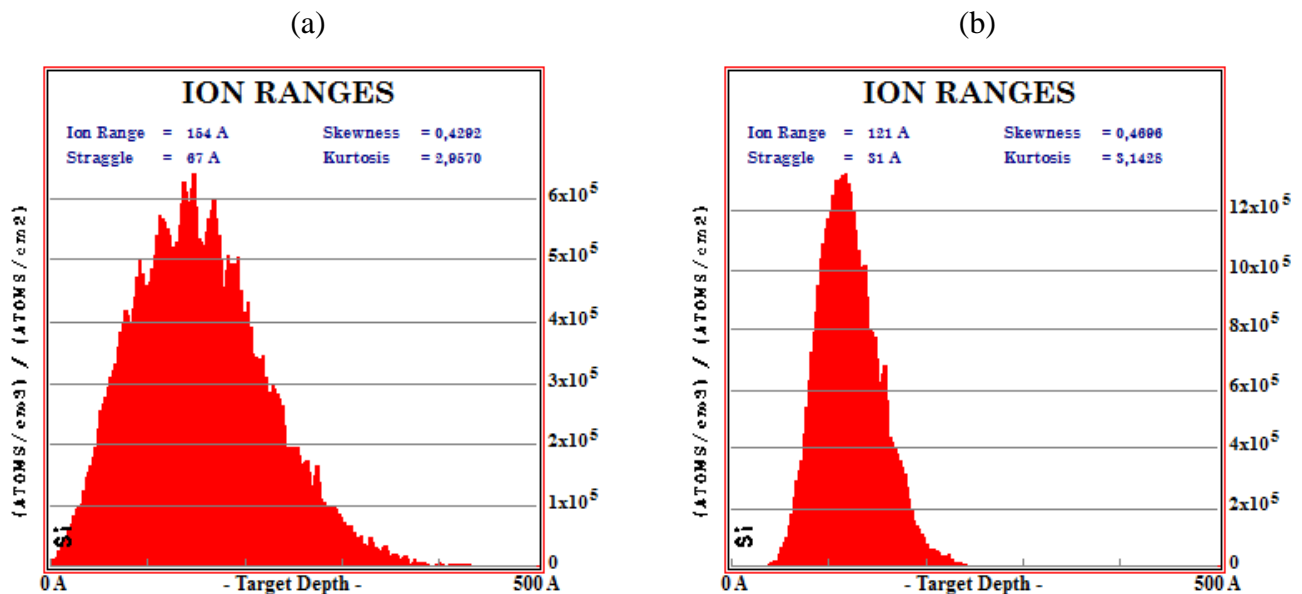


Figure II.7: le profil de redistribution des ions en profondeur de la cible de silicium : a) pour les ions  $Ar^+$  ; b) pour les ions  $Xe^+$

### II.6 Influence de l'énergie des ions sur les paramètres de distribution :

Les différents paramètres qui définissent le bombardement ionique d'un matériau sont le parcours projeté  $R_p$  (profondeur de pénétration ionique), la déviation standard  $\Delta R_p$  (la largeur mi-hauteur) et la redistribution latérale  $\Delta R_{\perp}$ . Dans cette partie, nous sommes intéressés à l'étude de l'influence de l'énergie incidente des ions sur ces paramètres.

D'après la figure II.8, il est clair que plus l'énergie d'accélération n'est élevée, plus les valeurs obtenues ne sont importantes dans les deux cas soit pour les ions  $Ar^+$  ou  $Xe^+$ .

On constate que les dimensions augmentent d'une manière quasi proportionnelle avec l'énergie cinétique des ions  $Ar^+$  et  $Xe^+$  incident sur la surface du matériau Si. Par contre le parcours projeté  $R_p$  augment rapidement suivi par la largeur mi-hauteur.

Comme la technologie actuelle (des circuits intégrés) exige leur minimisation, on déduit que les faibles énergies produisent les meilleurs résultats. Ceci justifie le choix de la valeur 10 keV que nous avons utilisés dans la partie expérimentale.

Par comparaison entre le parcours projeté  $R_p$  des ions  $Ar^+$  et  $Xe^+$ , on trouve que :

pour n'importe quel énergie incident  $R_p(Ar^+) > R_p(Xe^+)$  et C'est ce que nous obtiennons déjà dans la distribution des ions précédemment

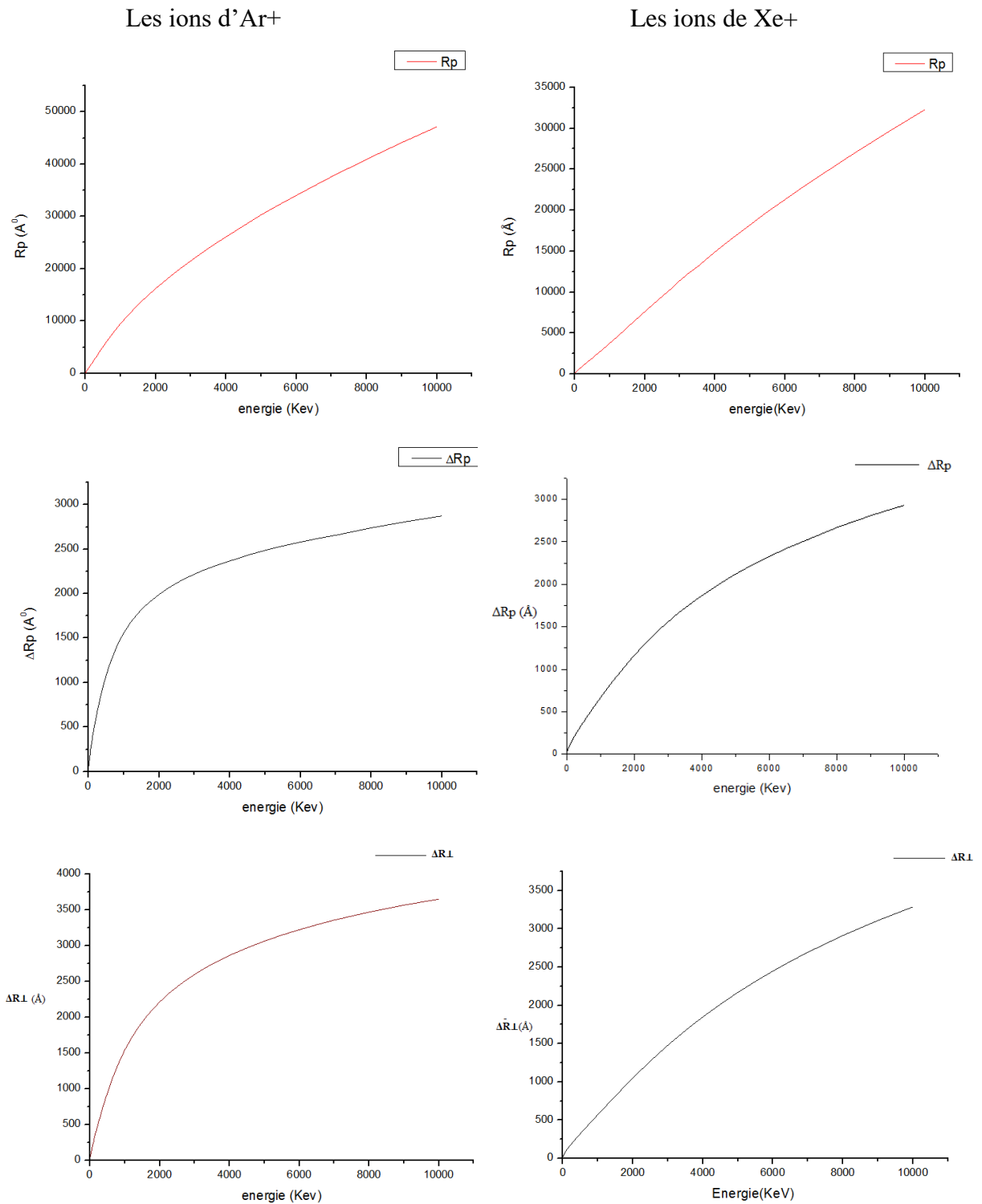


Figure II.8 : Influence de l'énergie d'accélération des ions primaires sur le parcours projeté  $R_p$ , la déviation standard  $\Delta R_p$  et la déviation standard latérale  $\Delta R_{\perp}$

### II.7 Processus de perte d'énergie des ions projectile :

Au cours du bombardement ionique, plusieurs effets secondaires sont générés dans la cible à cause des collisions élastiques et inélastique successive. Ces effets sont dits perturbations et ils se résument à : la formation de lacunes, phénomènes d'ionisation, production de phonons etc. [16]

Lorsque les ions primaires heurtent la cible, ces ions perdent leur énergie par chocs successifs avec les atomes du matériau. Ainsi, plusieurs perturbations sont générées et chaque ion primaire peut extraire un atome cible de son site. Ce dernier est dit atome de recul et peut à son tour extraire d'autres atomes de leurs sites. Les phénomènes de collisions progressent jusqu'à épuisement de l'énergie incidente des ions primaires [9].

#### ❖ Cascade de collision [17] :

Lors de sa pénétration dans la cible, l'ion provoque plusieurs collisions d'atomes qui se mettent en mouvement et se déplacent jusqu'à percuter d'autres atomes qui eux-mêmes se déplacent, et ainsi de suite. L'énergie de l'ion incident est de l'ordre de dizaine ou centaine de KeV, tandis que l'énergie minimale nécessaire au déplacement d'un atome dans la matrice cristalline est de l'ordre de dizaine d'eV.

Il y a production d'un très grand nombre de déplacements dans la cible, on parle alors de 'cascade de collisions' ou 'cascade de déplacements'. Ceci est illustré dans la figure (II.9).

Les atomes déplacés terminent leur mouvement dès qu'ils n'ont plus suffisamment d'énergie pour se déplacer. Tous les ions n'ont pas la même trajectoire.

L'ensemble des déplacements entraîne d'importantes modifications structurales. En effet, les atomes de la cible sont éjectés de leurs positions initiales et la structure cristallographique est fortement perturbée. Les dommages sont d'autant plus importants que la masse de l'ion incident est élevée. En effet, plus la masse atomique de l'ion est élevée, moins il est sensible au ralentissement électronique et il cause donc plus de chocs nucléaires tout au long de son parcours dans le matériau.

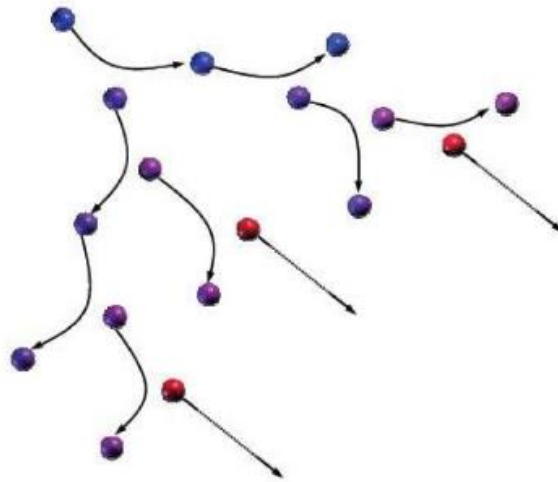


Figure II.9 : Cascade de déplacements induite par l'ion projectile [17].

### **A) La Perte d'énergie par ionisation :**

La figure (II-10) montre les résultats de la simulation du phénomène de perte d'énergie par ionisation du aux  $\text{Ar}^+$  et  $\text{Xe}^+$  une fois introduit dans Si, En d'autres termes, quand un atome cible est soumis à une collision, si l'énergie transférée est suffisante, il peut perdre des électrons selon des collisions inélastique ou bien peut déplacer un atome cible de son site selon des collisions élastique.

Ce phénomène peut avoir lieu aussi bien par les ions primaires que par les atomes de recul D'après cette figure, on s'aperçoit que le phénomène est plus important dans le cas relatif aux atomes de recul. En effet, le nombre de ces derniers est toujours plus important que le nombre d'ions incidents dans les deux cas ( $\text{Ar}^+$  ou  $\text{Xe}^+$ ) ces résultats montré que :

Pour une masse atomique et une énergie d'incidence de (39.96 g/mol ; 10Kev) et (131.9 g/mol ; 10Kev) qui corresponde a les ions  $\text{Ar}^+$  et  $\text{Xe}^+$  respectivement :

- Les collisions élastiques entre les ions  $\text{Ar}^+$  et  $\text{Xe}^+$  avec la cible Si est prédominant que les collisions inélastique surtout pour le 2ème ion  $\text{Xe}^+$ , ces pour ca que la perte d'énergie pour ionisation est plus utilisable par les atomes de recule qui résultant au cours des collisions élastique
- D'autre part les collisions inélastique des atomes de recule et prédominant que celle des ions primaires tell que :
- ❖ Dans les premières moments :  $E_1 > E_d$  et  $E_2 > E_d$  c'est à dire L'ion incident peut ioniser ou déplacer un atome cible de son site qui devient à son tour une particule incidente

pouvant subir d'autres chocs inélastique donc l'ionisation se fait par les deux (l'ion incident et l'atome de recule)

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

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

$E1$  : l'énergie de la particule incidente ( $\text{Ar}^+$ ,  $\text{Xe}^+$ ) après la collision

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

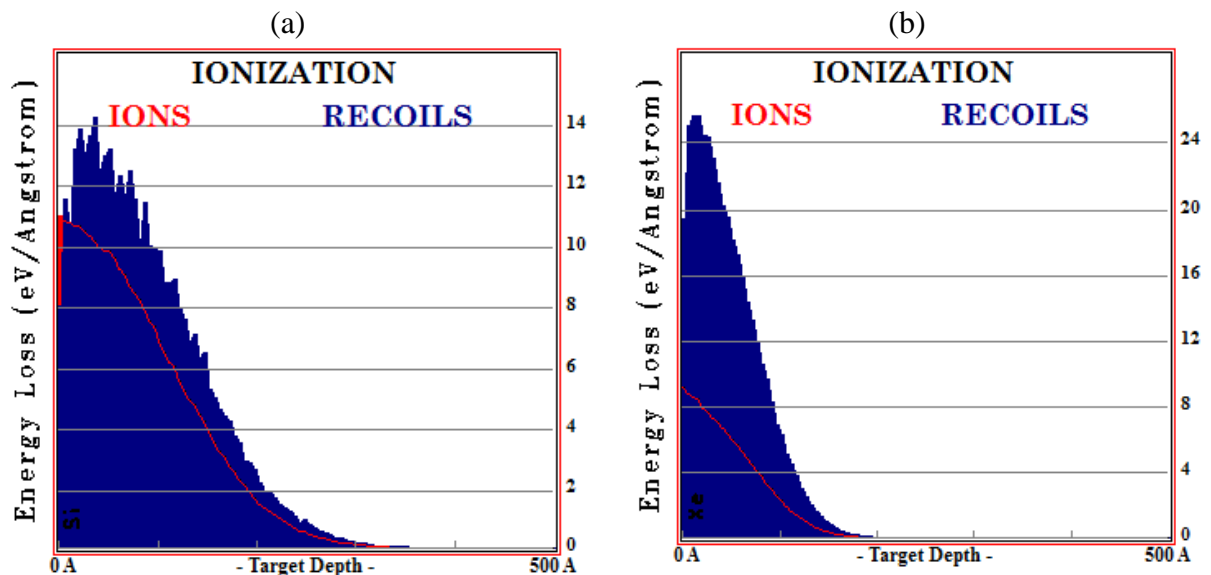


Figure (II-10) : Perte d'énergie par ionisation : a) par les ions  $\text{Ar}^+$  ; b) par les ions  $\text{Xe}^+$

### **B) La perte d'énergie par phonon :**

Au cours de l'interaction ion-matière, la cible est chauffée suite aux différentes perturbations qui ont lieu. Ceci se traduit par agitation thermique et création de phonons si l'énergie transférée à l'atome cible est inférieure à l'énergie de seuil de déplacement.

La figure (II-11) montre les résultats de la simulation du phénomène de perte d'énergie par phonon du aux  $\text{Ar}^+$  et  $\text{Xe}^+$  une fois introduit dans Si

D'après cette figure, on s'aperçoit que le phénomène est plus important dans le cas relatif aux atomes de recul. En effet, le nombre de ces derniers est toujours plus important que le nombre d'ions incidents dans les deux cas ( $\text{Ar}^+$  ou  $\text{Xe}^+$ ).

## Chapitre 02 : Simulation de l'interaction ion-matière par SRIM

Où les collisions élastique est toujours prédominant pour une énergie de 10KeV dans le cas de bombardement ionique d'un cible Si par les ions Ar<sup>+</sup> et Xe<sup>+</sup> ces résultats montré que :

- Quand  $E1 < Ed$  et  $Ed < E2$  : la particule incidente occupe des sites vides (substitutionnels) et son énergie est dissipée dans le réseau par des vibrations (création de phonons), d'autre parte les atomes de recul ils continuent à entrer en collision (élastique-inélastique) avec les autres atomes
- Parallèlement juste que  $E2 < Ed$  : L'énergie de l'atome cible devient insuffisant pour déplacé, il continue à vibrer dans sa position d'équilibre sans quitter son site (création des phonons) .d'autre parte L'ion incident peut occuper seulement des sites interstitiels et son énergie est dissipée dans le réseau pour la création de phonons aussi mais avec des proportions plus faible que les atomes de recul

$Ed$  : l'énergie de déplacement de la cible ( $Ed=15\text{ev}$  pour Si) ;  $E1$  : l'énergie de la particule incidente (Ar<sup>+</sup>, Xe<sup>+</sup>) après la collision ;  $E2$  : l'énergie des atomes de cible après la collision

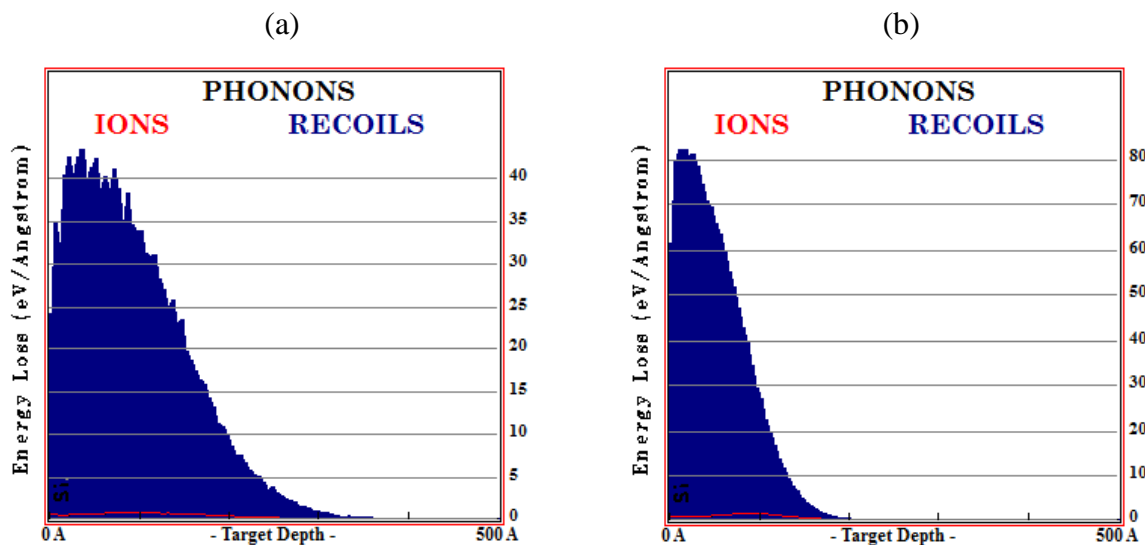


Figure II.11 : la perte d'énergie par phonon du aux Ar<sup>+</sup>(a) et Xe<sup>+</sup>(b) dans Si

### C) Production des lacunes :

Comme nous l'avons mentionné au début de ce chapitre, si l'énergie communiquée à l'atome cible (par les ions de Ar<sup>+</sup>, Xe<sup>+</sup>) est supérieure à l'énergie seuil de déplacement  $Ed$ , l'atome de silicium est éjecté suffisamment loin de son site et n'y revient pas immédiatement. Notons que la valeur reportée de l'énergie de déplacement est égale 15 eV pour tous les semi-conducteurs. De plus, si l'énergie transférée à cet atome est suffisamment grande, l'atome cible peut à son tour déplacer d'autres atomes dits atomes de recul. La densité de lacunes

produites est maximale quand la perte d'énergie nucléaire est maximale. C'est à dire La création des lacunes dans la cible est résulte seulement à cause des collisions nucléaire soit entre les ions primaire incident et les atomes-cible ou biens a partir des collisions secondaire des atomes de recul avec les atomes cible [18], Les études expérimentales montré que :

- ❖ Les ions lourds pénètrent dans la matière à des profondeurs inférieures à celles pénétrées par des ions légers, mais créent des espaces vides avec une concentration supérieure à celle de ces derniers. [19]
- ❖ la distribution des lacunes dans la cible en fonction de la profondeur est très différent que la distribution des ions tell que la distribution des lacunes va être Concentré en profondeur  $R_d$  plus faible que  $R_p$  [20] La figure II.12 représenté la distribution d'événements ou de postes vacants appelés communément les lacunes crée par  $Ar^+$  et  $Xe^+$  dans la cible Si (en lacune /ion/ Å).

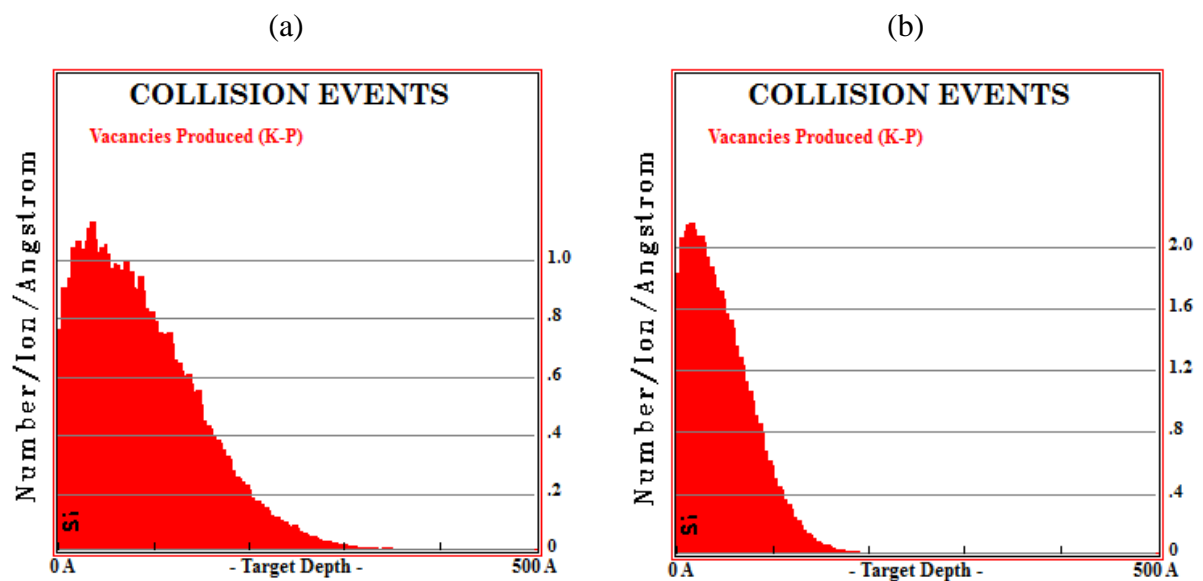


Figure II.12 : distribution des lacunes dans la cible Si qui créent par  $Ar^+$ (a) ;  $Xe^+$ (b)

Ceci on trouve les lacunes se produit à une profondeur  $R_d$  autour de laquelle le profil de défauts est quasiment gaussien mais On peut assimiler les distributions obtenues par des lois gaussiennes centrées à une profondeur  $R_d \cong 50 \text{ \AA}$  et  $\cong 25 \text{ \AA}$  pour les ions  $Ar^+$  et  $Xe^+$  respectivement , mais avec une concentration plus grand dans le cas des ions  $Xe^+$  que  $Ar^+$  et ce qui est en bon accord avec les études expérimentales obtenue dans les référence [19-21-22-23] où  $Z(Xe^+) > Z(Ar^+)$  en plus a partir des résultats obtenus précédemment dans l'études des pouvoirs d'arrêt ces déjà on trouve que le nombre des collision inélastiques qui provoque les existence des lacunes est plus important dans le cas des ion  $Xe^+$  que celles relative aux ions

## Chapitre 02 : Simulation de l'interaction ion-matière par SRIM

d'Ar<sup>+</sup> : c'est pourquoi on trouve la concentration des lacunes qui créent par Xe<sup>+</sup> en profondeur Rd est supérieur a celle créée par Ar<sup>+</sup> mais a une faible profondeur .

On peut obtenus des résultats de la parte d'énergie en pourcentage a l'aide de SRIM

La parte d'énergie (%)	Ar <sup>+</sup>		Xe <sup>+</sup>	
	Ions	Recul	Ions	recul
Par ionisation	14.05	18.53	6,56	19,11
Par phonon	1.29	62.62	1,51	68,96
Production des lacunes	0.46	3.05	0,58	3,29

Tableau 03: les pertes des énergies en pourcentage

Les résultats obtenus a partir de cette tableau montré que tout les phénomènes est plus important dans le cas relatif aux atomes de recul.

- ❖ Comme nous avons étudié les phénomènes résultant du bombardement ionique d'un cible(Si) par des ions (Ar<sup>+</sup>, Xe<sup>+</sup>), il suffit dans cette partie d'étudier le bombardement ionique de GaAs par des ions d'Ar<sup>+</sup> uniquement pour que simulé l'effet de la masse atomique de la cible sur les différents phénomènes.

### II.8 Etude du pouvoir d'arrêt des ions (Ar<sup>+</sup>) dans la cible GaAs :

Les résultats obtenus a partir de SRIM :

Energie des ions (Ar <sup>+</sup> ) (Kev)	dE/dx Elec(Kev/μm)	dE/dx Nucl(Kev/μm)
10, 00	1,059E+02	5,724E+02
37, 50	2,051E+02	6,509E+02
200, 00	4,797E+02	5,008E+02

Tableau.04:Les résultats des pouvoirs d'arrêts de l'Ar<sup>+</sup> dans GaAs (les point principaux)

Les ions qui heurtent la cible sont freinés suite à deux types d'interactions : électronique et nucléaire. A partir de la figure II.13, correspondant au cas de l'interaction des ions Ar<sup>+</sup> avec une cible (GaAs), nous distinguons que l'évolution du pouvoir d'arrêt électronique est différent que celle relative au pouvoir d'arrêt nucléaire. En effet :

- le pouvoir d'arrêt électronique (Fig. II-13 (—)) est caractérisé par une allure sensiblement proportionnelle à l'énergie de l'ion. Notons que ce type d'interaction inélastique ne produit pas directement le déplacement d'atomes
- le pouvoir d'arrêt nucléaire (Fig. II-13 (—)) est caractérisé par deux zones distinctes.

## Chapitre 02 : Simulation de l'interaction ion-matière par SRIM

A basses énergies ( $E < 200$  KeV), le ralentissement nucléaire est plus important que le ralentissement électronique, Notons que ce type d'interaction élastique peut entraîner une cascade de chocs secondaires pouvant induire des déplacements d'atomes dans le matériau cible. Sur la figure II.13, on indique trois points particuliers délimitant approximativement les différents mécanismes d'arrêt :

- Le premier point A correspond au maximum du pouvoir d'arrêt nucléaire. (  $650 \text{ KeV}/\mu\text{m}$ ) avec un energies cinétique incident de  $37.5 \text{ KeV}$
  - Au point B, on s'aperçoit que les pouvoirs d'arrêts électronique et nucléaire sont similaires, il correspond à une énergie de  $200 \text{ KeV}$ .
  - Finalement, pour la zone indiquée par le point C, le pouvoir d'arrêt des ions est principalement gouverné par les interactions inélastiques provenant des interactions électroniques.
- ❖ A  $10 \text{ keV}$  on trouve que la perte d'énergie nucléaire est supérieure que celle relative au pouvoir d'arrêt électronique.

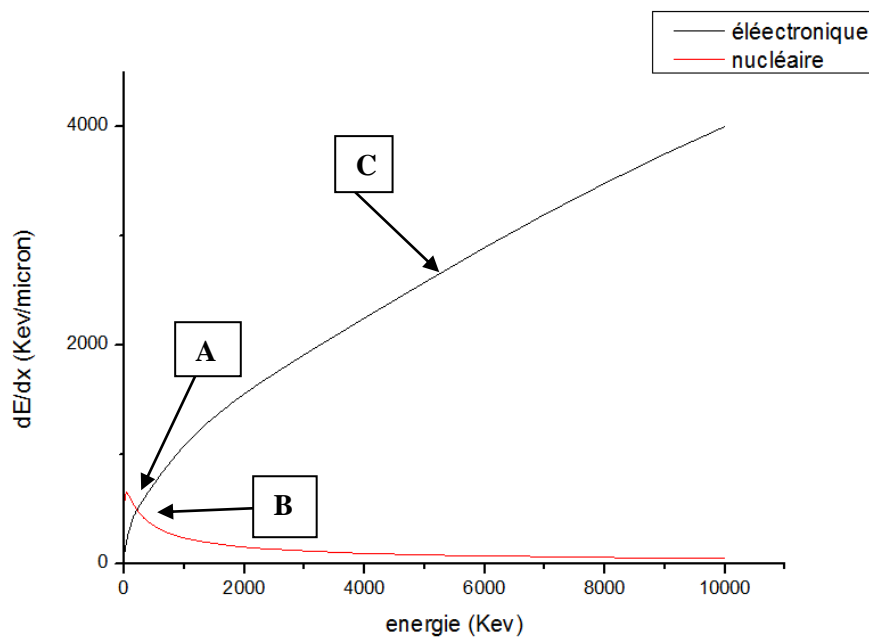


Figure II.13 : Simulation des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique des ions  $\text{Ar}^+$ , dans la cible GaAs, en fonction de l'énergie incidente des ions.

### II.9 Simulation de la distribution d'ions Ar<sup>+</sup> dans GaAs :

Sur la figure II.14, nous reportons la distribution à deux dimensions des ions d'argon (10 KeV) délivrée par le logiciel SRIM2003 dans la cible de GaAs. Chaque ion est représenté par sa trajectoire (en trait rouge) et par sa position finale (en point noir). La redistribution finale de tous les ions est sous la forme d'une poire centrée à une profondeur d'environ 110 Å

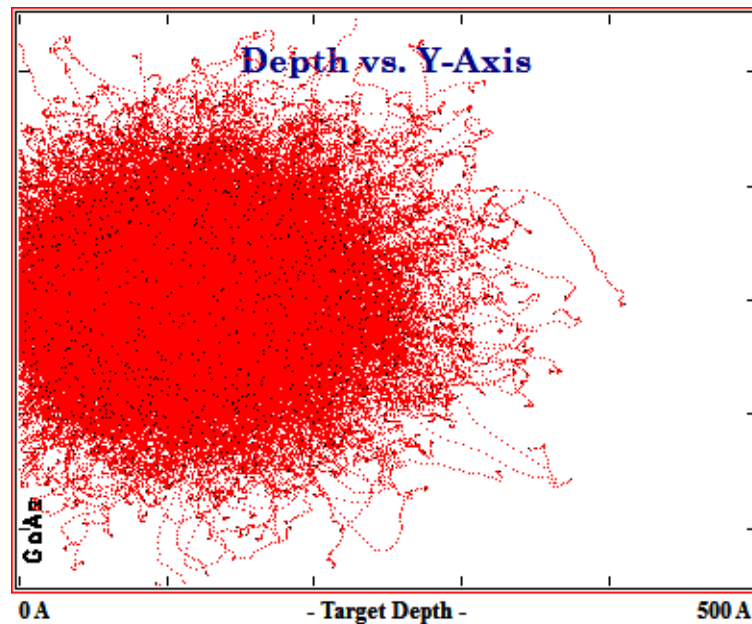


Figure II.14 : profile de distribution des ions Ar<sup>+</sup> dans une cible GaAs

Pour mieux visualiser la redistribution de la figure II.14, nous reportons sur la figure II.15 la probabilité de présence de chaque ion dans la cible de GaAs. Nous notons que le profil de la figure II.15 est fourni directement par l'interface du logiciel. En plus, les paramètres essentiels sont déclarés directement sur la figure. Ainsi, on conclut que les ions d'argon sont répartis selon une loi gaussienne dans le substrat de GaAs.

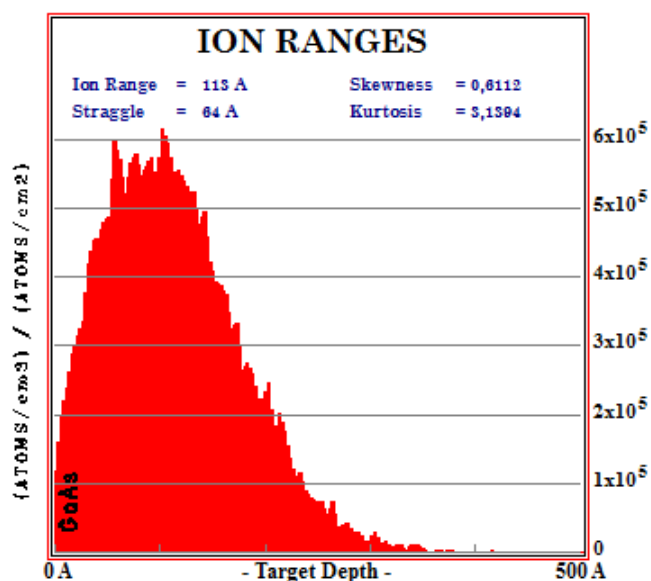


Figure II.15 : le profil de redistribution des ions Ar+ en profondeur de la cible GaAs

on peut lire à partir de cette figure les paramètres suivants :  $R_p=113\text{A}$ ,  $\Delta R_p=64\text{A}$ , Skewness ( $\gamma$ ) = 0.6112, Kurtosis ( $\beta$ ) = 3.13194.

	$R_p$	$\Delta R_p$	Skewness ( $\gamma$ )	Kurtosis ( $\beta$ )
GaAs	113	64	0.6112	3.13194
Si	154	67	0.4292	2.9570

Tableau 05 : les paramètres de distribution dans Si et GaAs

- $R_p(\text{GaAs}) < R_p(\text{Si})$  : parce que  $Z(\text{GaAs}) < Z(\text{Si})$
- $\Delta R_p(\text{GaAs}) \cong \Delta R_p(\text{Si})$  : l'élargissement du profil autour des concentrations maximales presque égales pour les deux cas

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

Sur la figure II.16, nous reportons les variations des paramètres de distribution des ions Ar+ ( $R_p, \Delta R_p, \Delta R_{\perp}$ ) en fonction de son énergie incident. D'après cette figure on constate que les dimensions augmentent d'une manière quasi proportionnelle avec l'énergie cinétique des ions Ar+ et incident sur la surface du matériau GaAs. Par contre le parcours projeté  $R_p$  augmente rapidement suivi par la largeur mi-hauteur.

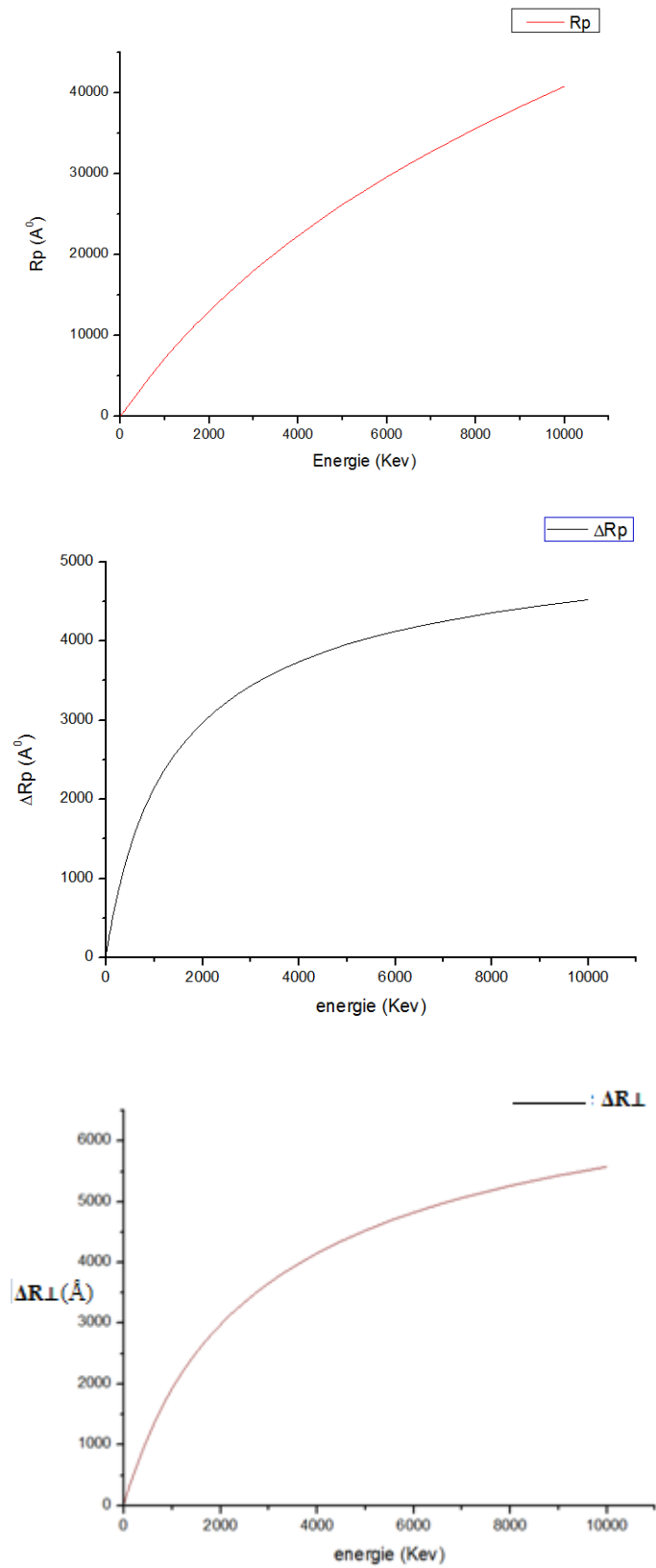


Figure II.16 : la variation des paramètres de distribution en fonction de l'énergie incidence des ions

## Chapitre 02 : Simulation de l'interaction ion-matière par SRIM

Par comparaison entre les paramètres de distribution dans le cas d'un cible GaAs et Si on trouve que les paramètres ( $R_p, \Delta R_p, \Delta R_{\perp}$ ) pour le première cible (GaAs) est inférieure a celles au cible Si et ce qui est en bon accord avec les résultats obtenus dans la littérature tels que : 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

Nous rappelons que :  $Z(\text{GaAs}) > Z(\text{Si})$ .

### II.11 Processus de perte d'énergie des ions projectile Ar<sup>+</sup> sur la cible GaAs :

#### A. La Perte d'énergie par ionisation :

sur la figure II.17 nous reportons la perte d'énergie par ionisation sous l'effet des ions incident et par les atomes des recul, on constat toujours que le phénomène est plus important dans le cas relatif aux atomes de recul, parce que les collision élastique entre les ions Ar<sup>+</sup> et les atomes de cible (GaAs) est prédominant que celles au collision inélastique pour une énergie de 10 Kev , a cause de ca on trouve que le nombre des atomes de recul est toujours plus important que le nombre d'ions incidents,, alors la probabilité que l'ionisation se fait par les atomes des recul est supérieure a celles aux ions primaire

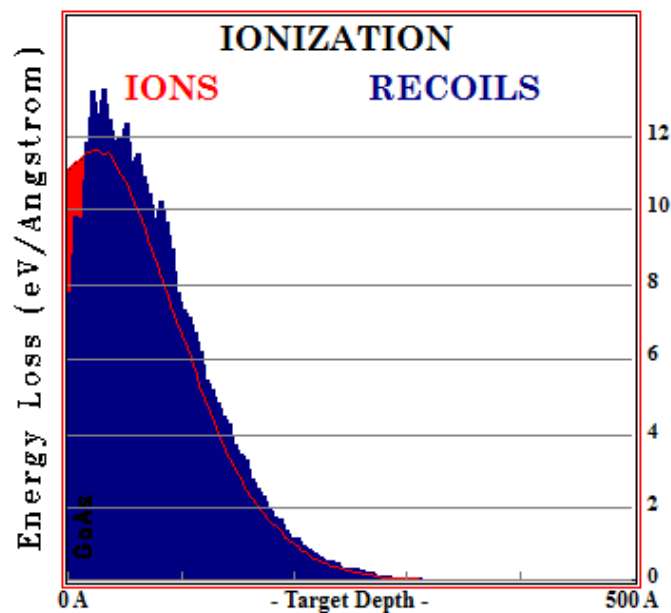


Figure II.17 : perte d'énergie par ionisation des ions Ar<sup>+</sup> dans la cible GaAs

Le tableau suivant indique la perte d'énergie par ionisation en pourcentage obtenus par SRIM dans les deux cas de cible GaAs et Si

La perte d'énergie par ionisation (%)	ions	recul
Cible(GaAs)	13.60	14.90
Cible(Si)	14.05	18.53

Tableau 06: la perte d'énergie par ionisation des ions primaire et des atomes de recul en pourcentages dans la cible GaAs

A partir de cette tableau on constat que l'énergie transféré par les ion d'Ar+ pour l'ionisation au atomes de cible Si (soit par l'énergie cinétique des ions primaire ou bien par l'énergie transféré par atomes du recul) est supérieure a celles transféré au atomes de cible GaAs , Ceci est dû au grand nombre de collisions inélastique dans le cas de la cible (Si) par rapport à l'état cible(GaAs),et ceci a été étudié précédemment .

### **B. La perte d'énergie par phonon :**

Sur la figure II.18 nous reportons la perte d'énergie par phonon sous l'effet des ions incident et par les atomes des reculs, on constat a partir de cette figure que : le phénomène est plus important toujours dans le cas relatif aux atomes de recul. En effet, le nombre de ces derniers est toujours plus important que le nombre d'ions incidents (Ar+).Comme nous avons discuté précédemment dans l'étude de pouvoir d'arrêt, Où nous avons trouvée : pour des énergies inférieures à 10 Kev la cible devient sensible au ralentissement nucléaire, ce qui crée un grand nombre des atomes de recul par rapport a celles de les ions primaire, alors l'énergie perdue sous forme de phonons par les atomes de recul est supérieure à celle perdue par les ions primaires.

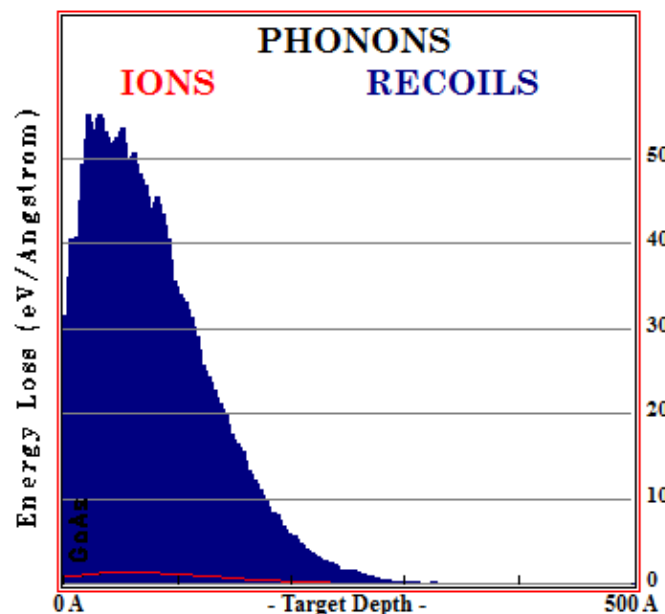


Figure II.18 : la perte d'énergie par phonon des ions Ar+ dans la cible GaAs  
Le tableau suivant indique la perte d'énergie par phonon en pourcentage obtenus par SRIM dans les deux cas de cible (Si, GaAs).

La perte d'énergie par phonon (%)	Ions	Recul
Cible (GaAs)	1.82	65.95
Cible (Si)	1.29	62.62

Tableau 07: la perte d'énergie par phonon des ions primaire et des atomes de recul en pourcentages dans la cible GaAs

A partir de cette tableau on constat que : le pourcentage de la perte d'énergie par phonon dans le cas d'un cible de GaAs est supérieure a celles perdu au cas d'un cible Si

Comme l'énergie transféré par (les ions ,atomes de recul ) d'Ar+ pour ionisé la cible Si est supérieure a celles transféré pour ionisé la cible GaAs ,c'est très logique que la perte d'énergie par phonon dans le cas de ce dernière est supérieure a celles perdu dans le cas d'un cible Si

### C. Production des lacunes :

Sur la figure II.19 nous montrons les résultats de simulation de la production des lacunes dans la cible GaAs en fonction de la profondeur, Ceci on trouve les lacunes se produit à une profondeur Rd autour de laquelle le profil est quasiment gaussien mais on peut assimiler les distributions obtenues par des lois gaussiennes centrées à une profondeur  $Rd \cong 30 \text{Å}$

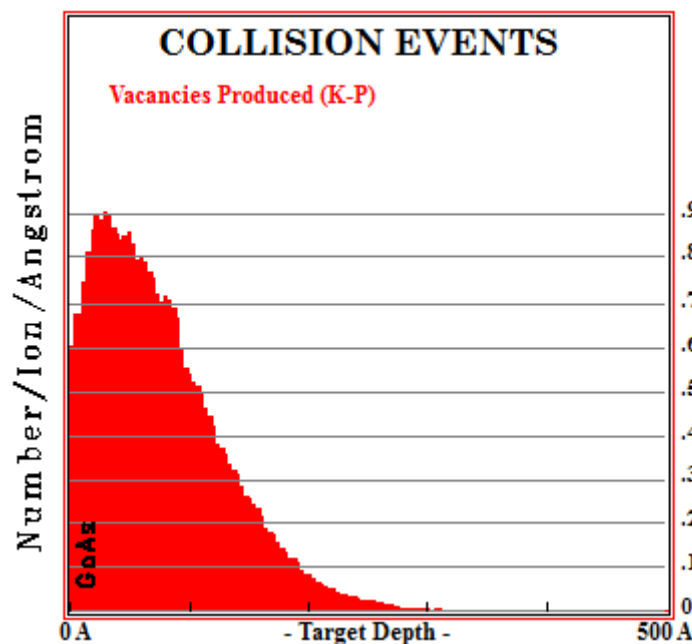


Figure II.19 : la distribution des lacunes en profondeur de la cible

A l'aide de logicielle SRIM on peut indiquer les résultats de la perte d'énergie en pourcentage pour la production des lacunes dans les cibles GaAs et Si

## Chapitre 02 : Simulation de l'interaction ion-matière par SRIM

Production des lacunes (%)	ions	Recul
Cible (GaAs)	0.58	3.15
Cible (Si)	0.46	3.05

Tableau 08: la perte d'énergie par production des lacunes des ions primaire et des atomes de recul en pourcentages dans la cible GaAs

A partir de cette tableau et par comparaison entre les pourcentage des énergie perdu pour la production des lacunes dans les cible GaAs et Si on trouve que :le pourcentage de l'énergie perdu pour produire des lacunes dans la cible GaAs est supérieure a celle perdu dans la cible Si Ceci est dû au grand nombre de collisions élastique dans le cas de la cible (GaAs) par rapport a l'état d'un cible Si et ceci a été étudié précédemment dans l'étude des pouvoirs d'arrêts où la perte d'énergie nucléaire des ions Ar+ dans la cible GaAs est supérieur a celle au perte d'énergie nucléaire dans la cible Si

### **Conclusion :**

Au cours de ce chapitre, plusieurs résultats ont été obtenus par simulation en utilisant le code SRIM 2003 qui est basé sur les méthodes de Monté Carlo. Les phénomènes de collision entre les ions utilisés et les cibles de Si et GaAs amorphe ont été prédits Les différentes redistributions des ions (en profondeur, latérale) ont été obtenues et plusieurs paramètres ont été estimés : le parcours projeté  $R_p$ , la déviation standard  $\Delta R_p$ , le parcours latéral  $\Delta R_L$ , etc. L'étude de la formation de défauts a également été prise en considération. Nous avons pu obtenir les différentes redistributions possibles, à savoir : la production de lacunes, le phénomène d'ionisation et la création de phonons.

## *Liste des références :02*

1. R. Bouterblat Kherief, Thèse de Magister, Université d'Oran, Algérie (2009).
2. S. Merabet, Thèse de Doctorat, Université Mentouri de Constantine, Algérie (2009).
3. N. Belabed, Thèse de Magister, Université Mentouri de Constantine, Algérie.
4. J. Kelvin, Ninetieth century clouds over the dynamical theory of heat and light , Phil-Mag. 2 (1901) 1.
5. J. Lindard, M. Scharff, H.E. Schiff and K. Dan, Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 33 (1963) 1-39.
6. M. Ledra, Thèse de Magister, Université de Constantine, Algérie (1995).
7. K. Antoshchenkova, Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique, Paris (2010).
8. F. Zeigler, J.P. Beirsack, U. Littman, 1985, The Stopping and Range of Ions in Solids, Pergamon Press, New York, version 2013
9. 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).
10. B. Schmidt, K. Wetzig, "Ion Beams in Materials Processing and Analysis", Springer-Verlag Wien, (2013).
11. Reed Business Information, "New Scientist", Vol. 116, N. 1587, IPC Magazines, USA, (1987).
12. Lindhard, Scharff, Schiott, Range Concepts and Heavy Ion Ranges, Mat. Fys. Medd., 33, (1963).
13. Lindhard, scharff, Energy Dissipation by Ions in the keV Region, Phy. Rev., 124(1), (1961), p. 128.
14. M.B. Lazar, "Etude du Dopage par Implantation Ionique d'Aluminium dans le Carbure de Silicium pour la Réalisation de Composants de Puissance", Thèse de doctorat, Lyon, (2002).
15. Profile Code, version 3.18, Implant Science Corporation, (1991).
16. H.Serrar, étude théorique et expérimentale de l'implantation ionique de Sb dans Si, Thèse de Magister, Université Constantine 2007
17. F.Z. Sator «Application de la spectroscopie de photoacoustique dans l'analyse des propriétés optiques des effets d'implantation de Ne<sup>+</sup> et de Xe<sup>+</sup> dans CuInSe<sub>2</sub>», thèse de doctorat, université Ferhat Abbas–Sétif, Algérie, 2012.

18. H. Bernas, "Materials Science with Ion Beams", Springer Verlag Berlin Heidelberg, (2010).
19. K. Esmark, H. Gossner, W. Stadler, "Advanced Simulation Methods for ESD Protection Development", Elsevier.Ltd,(2003).
20. H. F. Etienne, "étude de l'implantation ionique dans les miroirs multi-couches Mo/Si : applications aux optiques diffractives", thèse de l'institut national des sciences appliquées, Toulouse, (2005).
21. P. N. Favennec, "L'Implantation Ionique pour la Microélectronique et l'Optique", Collection Technique et Scientifique des Télécommunications, ENST, Ed. Masson, Paris, (1993).
22. O. Manasreh, "III-Nitride Semiconductors: Electrical, Structural and Defects Properties", Elsevier Science B.V, Netherlands, (2000).
23. M. D. McCluskey, E. E. Haller, "Dopants and Defects in Semiconductors", Taylor & Francis Group, LLC, London, (2012).

# Chapiter:03

**Simulation de l'interaction electron-matière  
par logiciel CASINO**

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

---

### 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 logiciel 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 Si et GaAs, respectivement Nous décrirons les parcours théoriques des électrons dans le volume de l'échantillon. Les calculs des trajectoires et des profondeurs de pénétration des électrons primaires et rétrodiffusés sont effectués par Casino.

### III.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.
2. 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

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

---

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

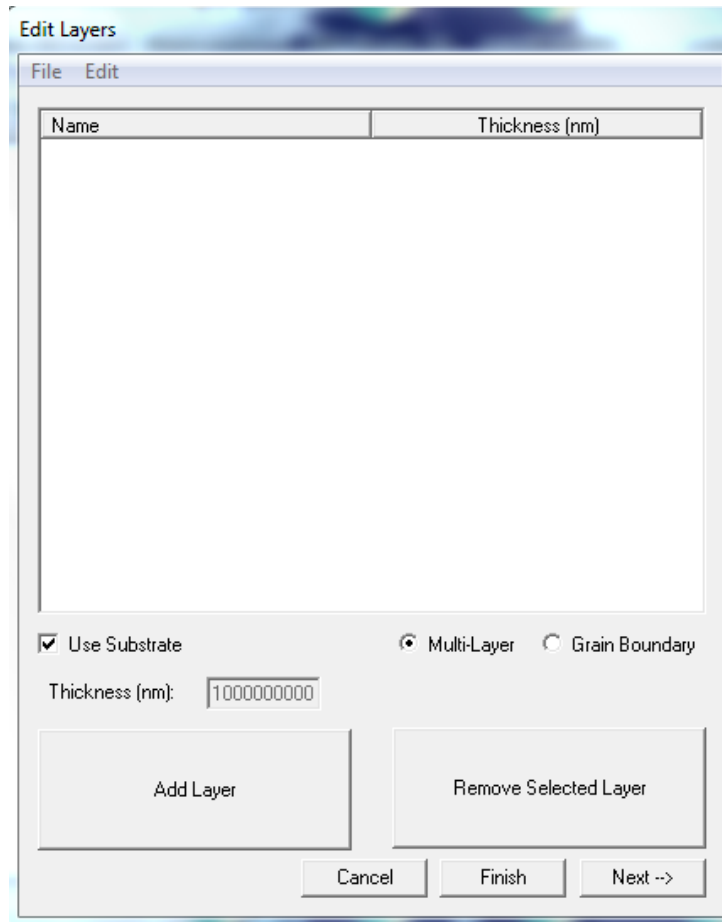


Figure III.1 : la boîte de dialogue "Edite layer " de CASINO

3. 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.
4. 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).

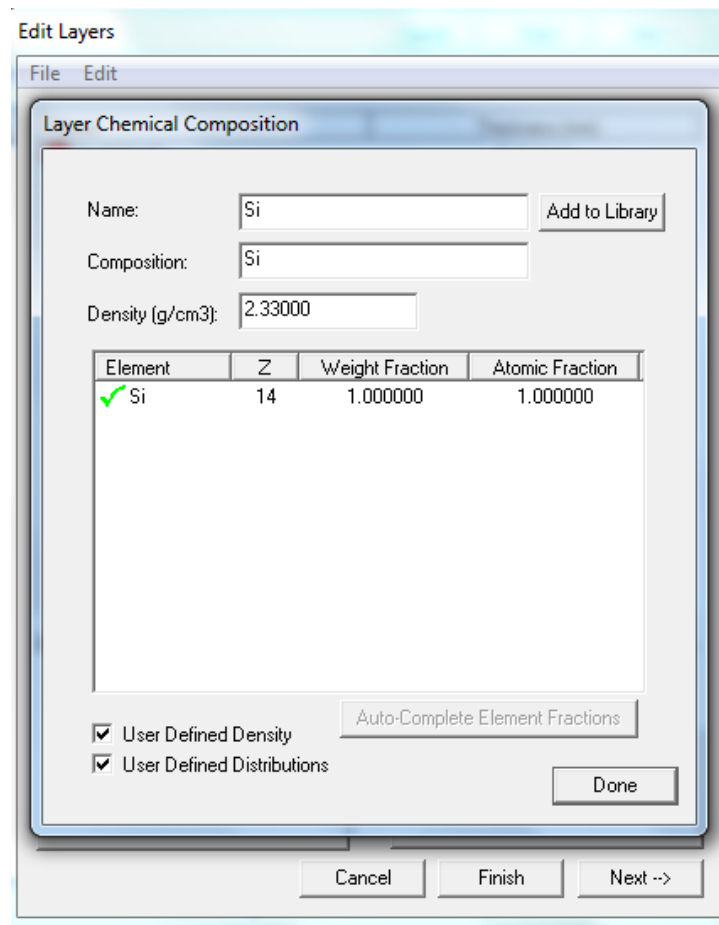


Figure III.2 : la boîte COMPOSITION EDIT BOX.

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

#### 5. 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.

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

- ✓ 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.

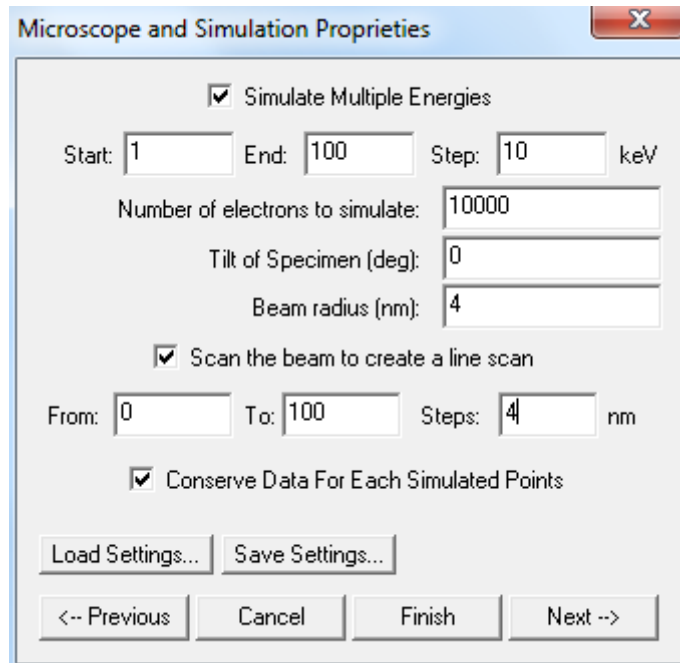


Figure III.3 : la boîte ‘Microscope and Simulation’

6. 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.

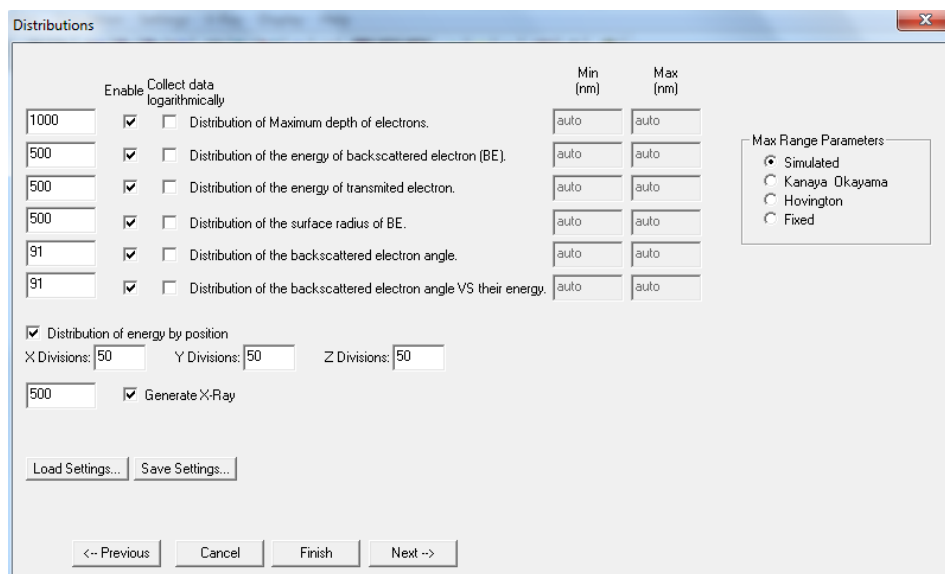


Figure III.4 : la boîte de dialogue «Distributions»

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

---

7. 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.

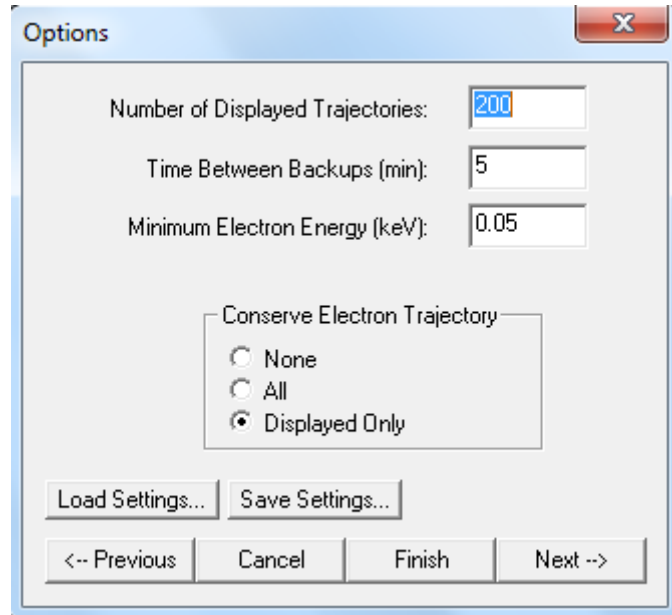


Figure III.5 : la boîte de dialogue «options»

8. Voici la boîte de “Choosing Physical Models” (Figure III.6) : Si vous ne savez pas quel modèle fait quoi, passez à l’étape suivante

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

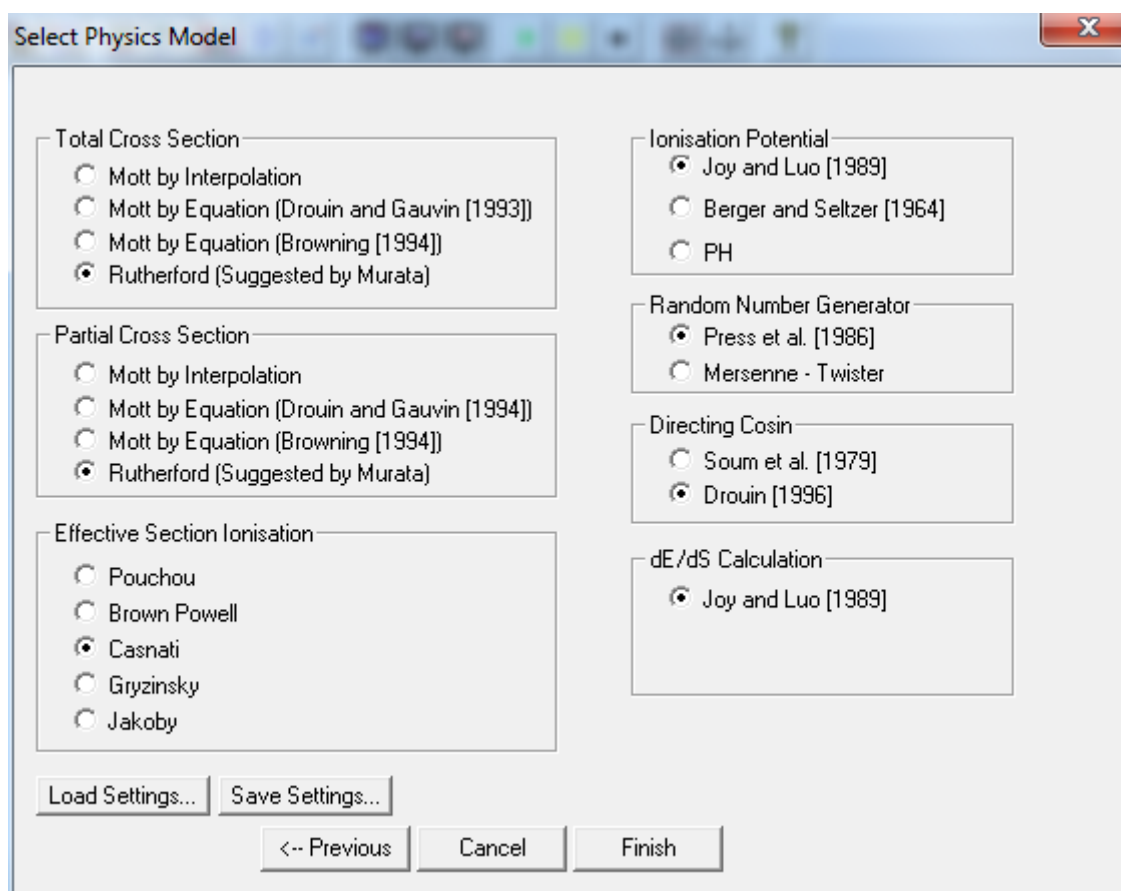


Figure III.6 : la boîte de "Choosing Physical Models"

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

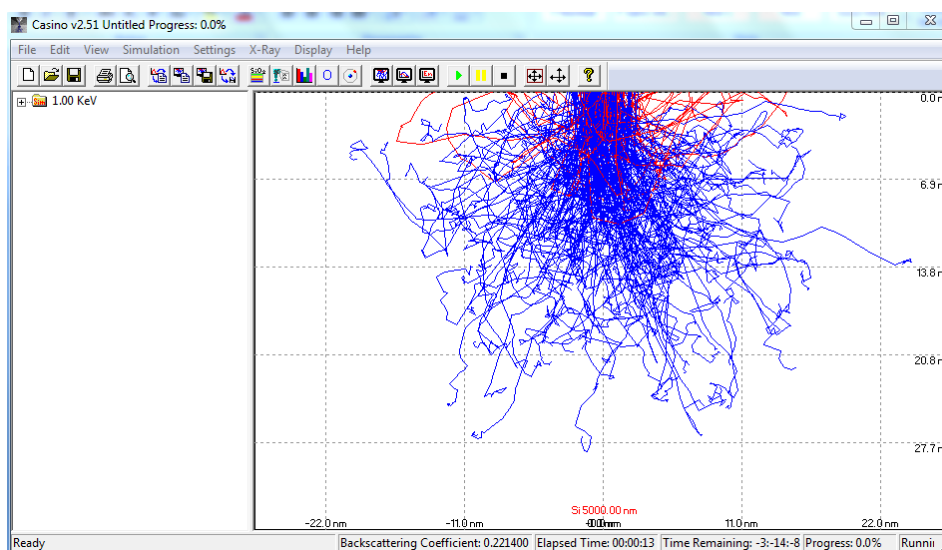


Figure III.7 : l'fin de simulation des trajectoires des électrons

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

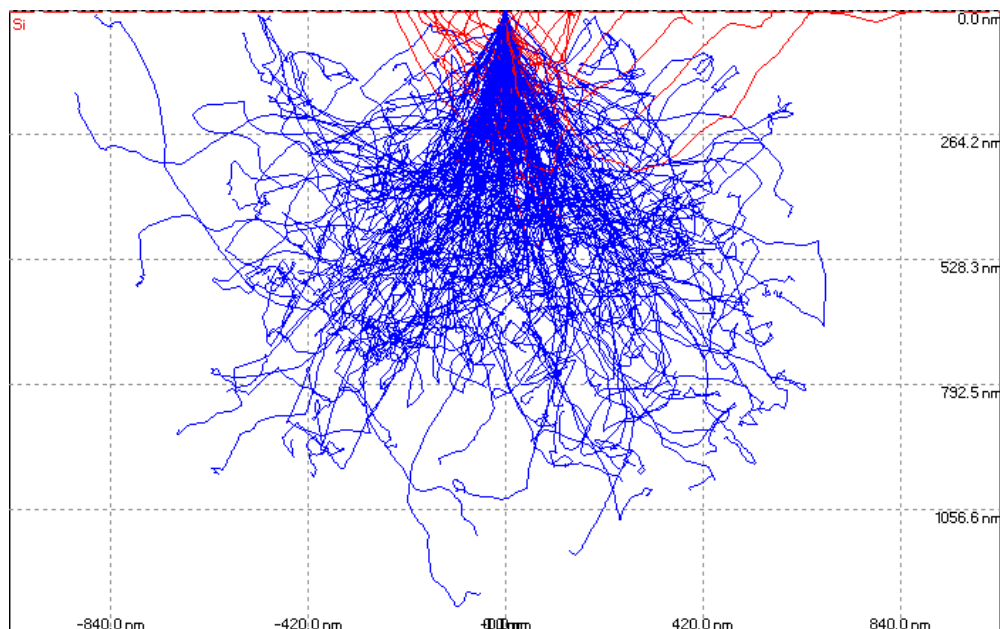
Dans notre travail, nous allons faire des calculs avec :

- ✓ 10000 électrons incidents
- ✓ L'énergie des électrons est 10 keV dans notre simulation
- ✓ Les cibles choisies sont toujours silicium (Si) et Arsenic de galium (GaAs)
- ✓ L'angle d'incidence est  $0^0$  (la profondeur de pénétration de la trajectoire est maximale et le volume d'interaction est symétrique)
- ✓ L'épaisseur des cibles est 5000 nm
- ✓ Le rayon du faisceau d'électron est 4 nm
  - Le choix de différents modèles physiques est effectué comme suit :
    - La section efficace différentielle élastique « mott par interpolation »
    - La section efficace totale élastique : « mott par interpolation »
    - La section efficace d'ionisation : « Castani »
    - Le potentiel d'ionisation « joy et luo »

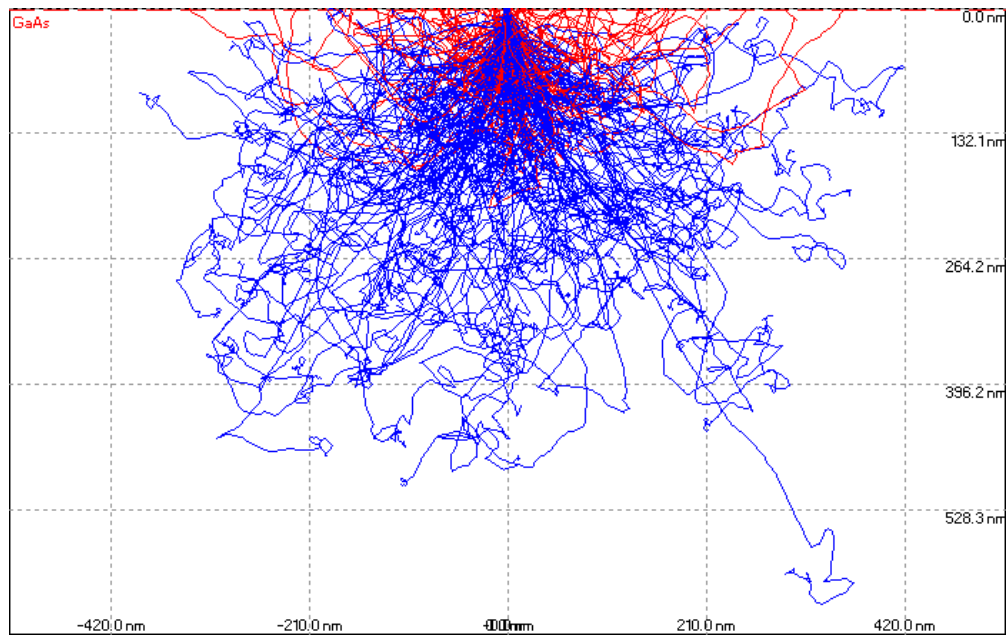
## III.5 Résultats et discussions :

### A) La distribution des électrons dans les cibles Si 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 différents électrons dans le matériau Si 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 10 keV dans la cible Si (5000nm)



**Figure III.9 :** Trajectoire des électrons d'énergie 10 keV dans la cible GaAs (5000nm)

Not : 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  $R_e$  (1200-1300) nm de la surface irradiée pour la cible de Si 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

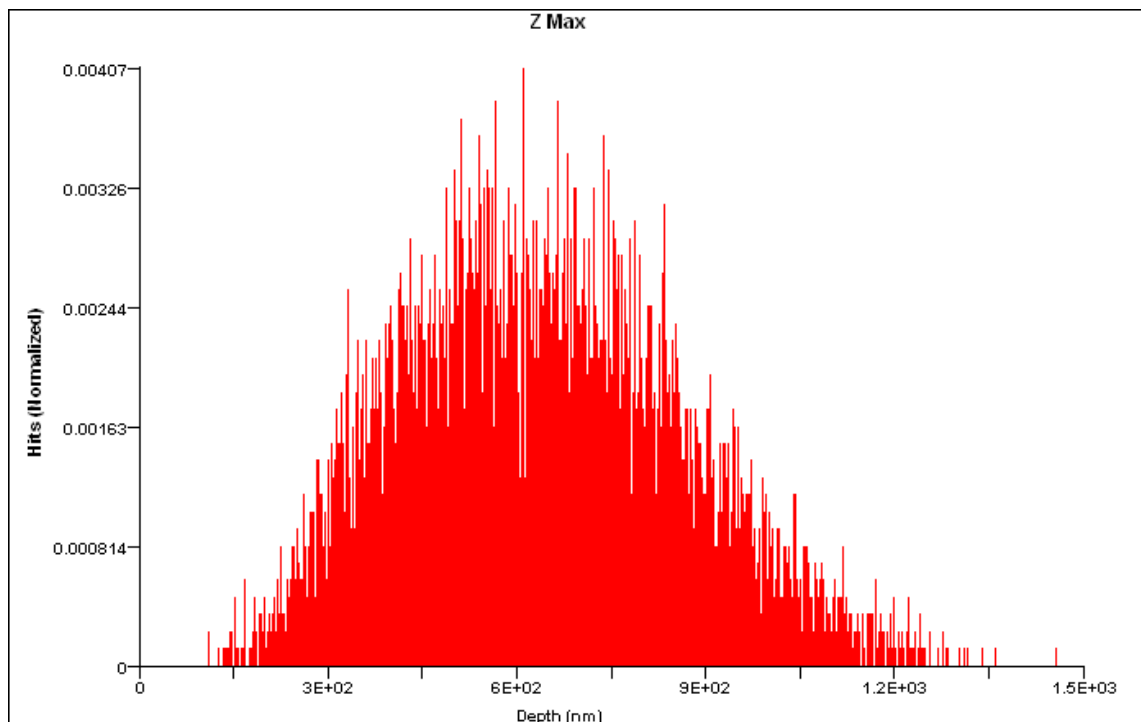
- ✓ Cette différence entre les volumes d'interaction du Si et de GaAs est due à la différence de numéro atomique  $Z$  et la densité  $\rho$  des deux matériaux qui jouent un grand rôle dans la relation de parcours électronique comme nous avons vu au (chapitre 01)
- ✓ Les électrons pénétrant dans la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

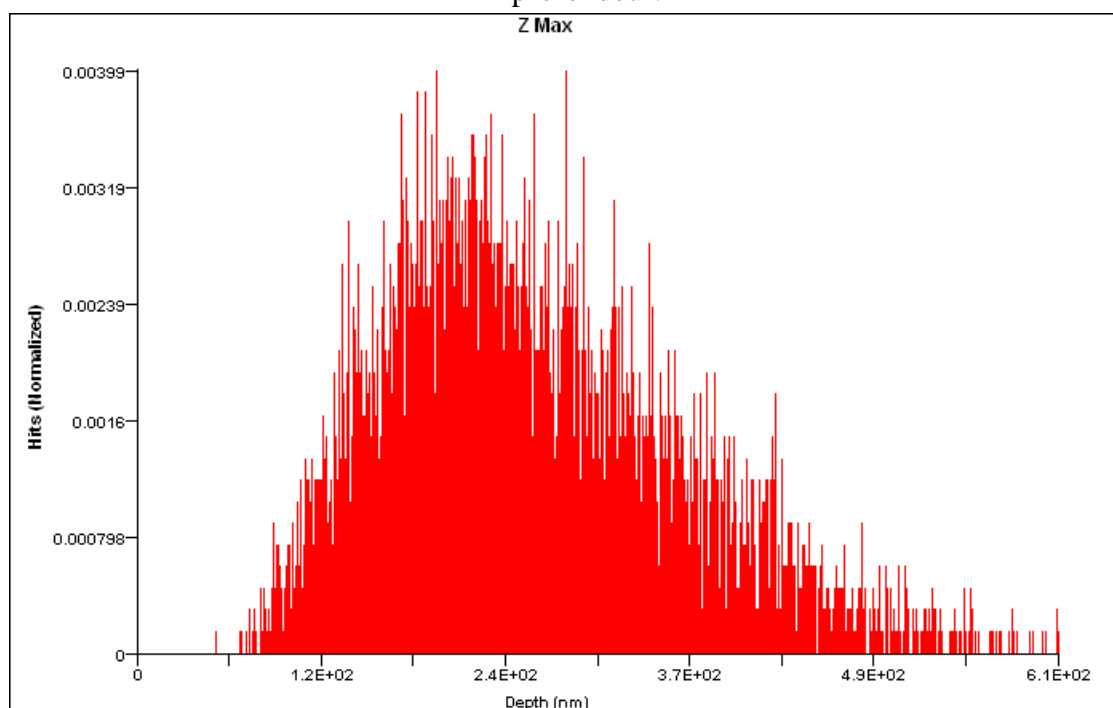
## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

---

Les deux figures montre que la distribution des électrons dans les deux matériaux est gaussien centré à 600 nm pour Si et à 210 nm pour GaAs. La pénétration maximale des électrons dans les cibles Si et GaAs sont 1300 nm et 600 nm respectivement



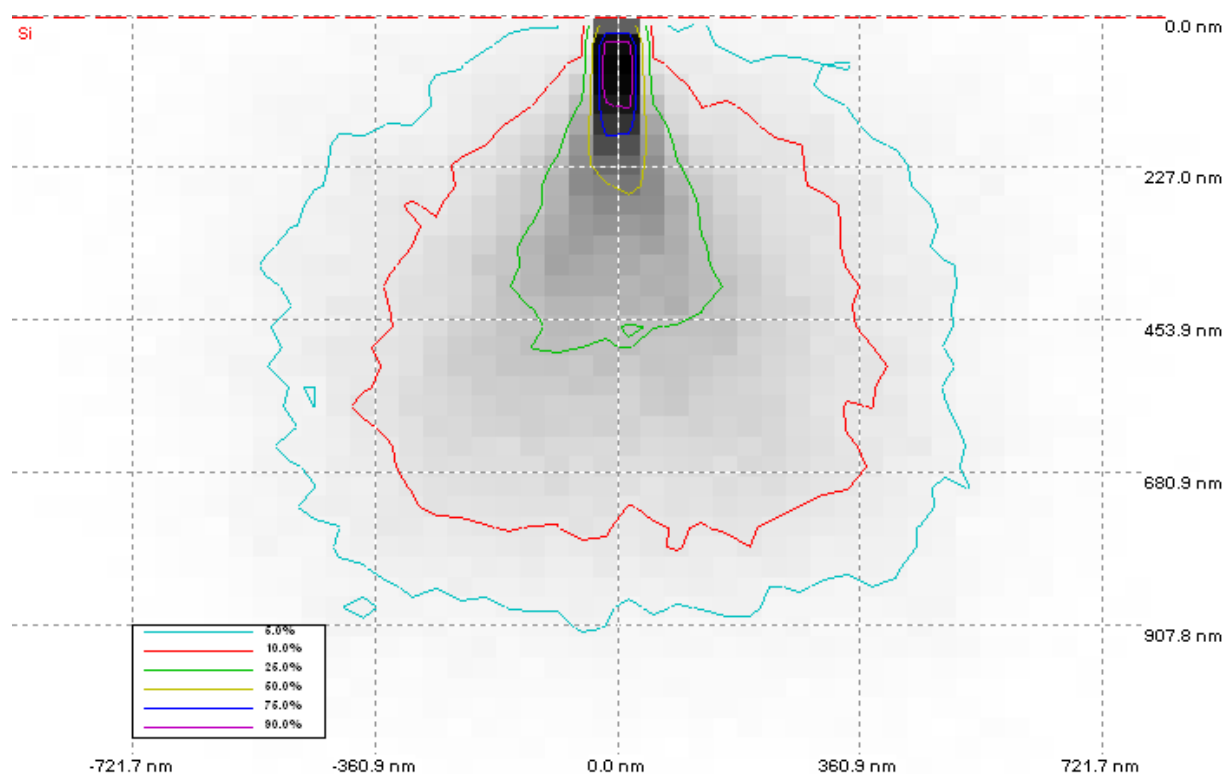
**Figure III.10 :** Distribution normalisée des électrons dans la cible Si en fonction de la profondeur.



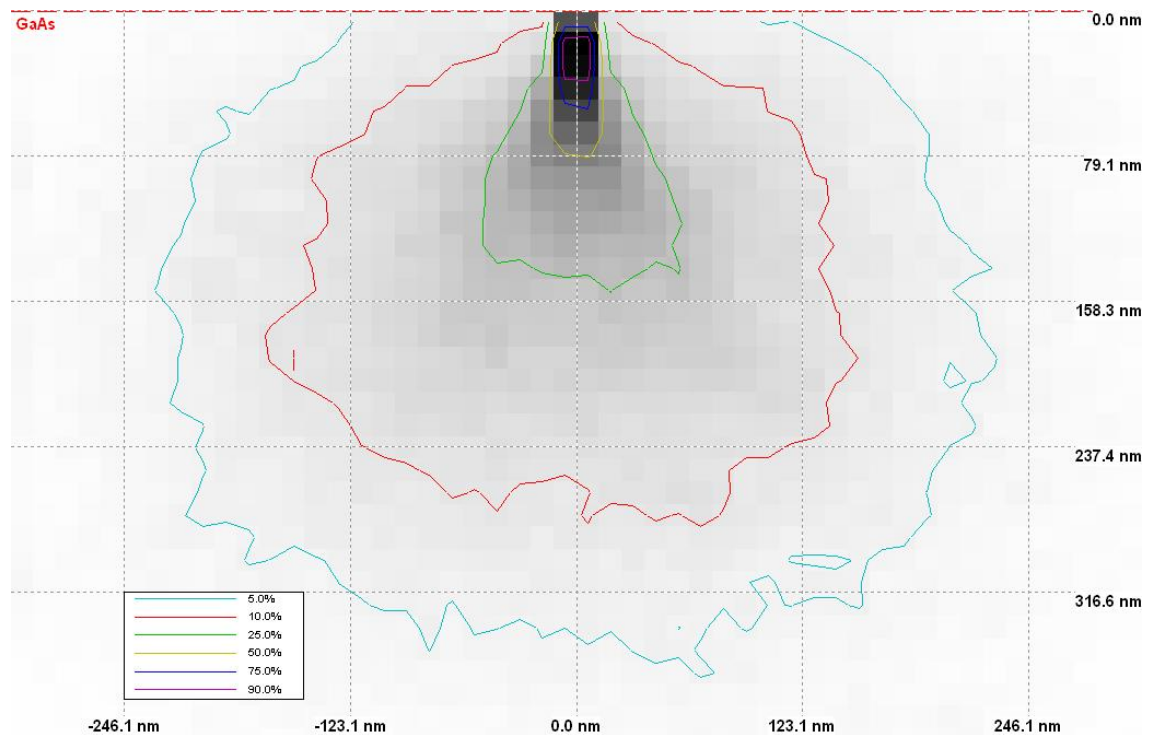
**Figure III.11 :** Distribution normalisée des électrons dans la cible GaAs en fonction de la profondeur

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

La figure III.12 et la figure III.13 montre la répartition en pourcentage des électrons bombardant la surface des cibles Si et GaAs respectivement à une incidence normale. Cette répartition formé la poire d'interaction rayonnement électronique –matière. A L'énergie de 10 keV représentant l'énergie cinétique du faisceau d'électrons, on voit que les majeures parties de ces électrons sont localisés sur les profondeur près de la surface du matériaux en particulier pour GaAs, où les électrons pénètrent dans la cible à une profondeur inférieure à celle du silium.



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



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

## **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 simuler la Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés en profondeur des cibles Si et GaAs Comme décrit ci-dessous sur les figure III.14 et III.15 respectivement D'après ces figures :

### Pour la cible Si :

- ✓ la distribution des électrons rétrodiffusés est quasi-gaussien centré a une profondeur environ de 220 nm
- ✓ les électrons rétrodiffusés sont positionné à une profondeur maximale environ de 600 nm

### Pour la cible GaAs :

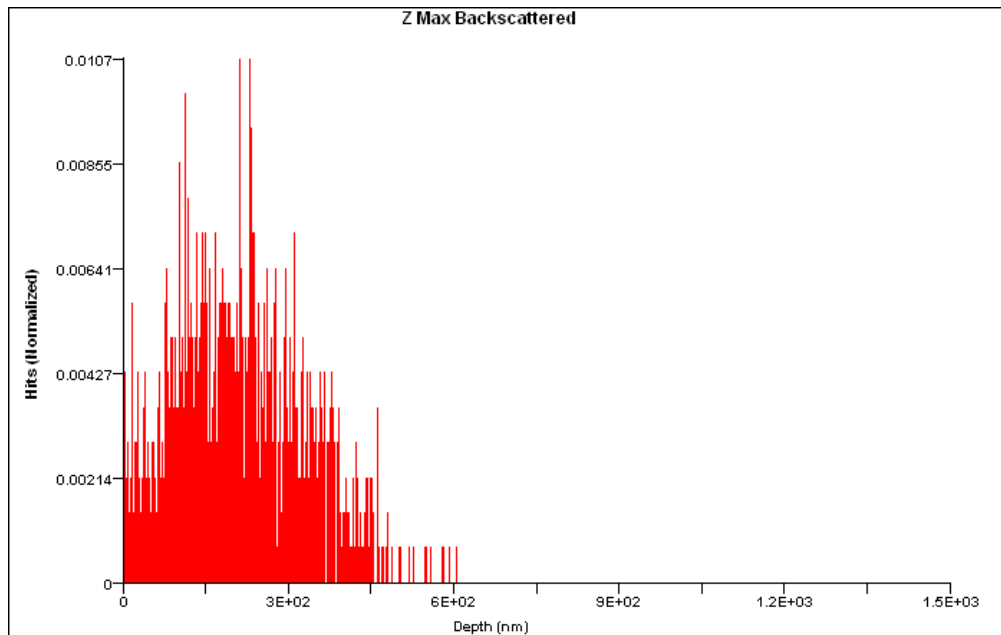
- ✓ la distribution des électrons rétrodiffusés est quasi-gaussien centré a une profondeur environ de 70 nm
- ✓ les électrons rétrodiffusés sont positionné à une profondeur maximale environ de 240 nm

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

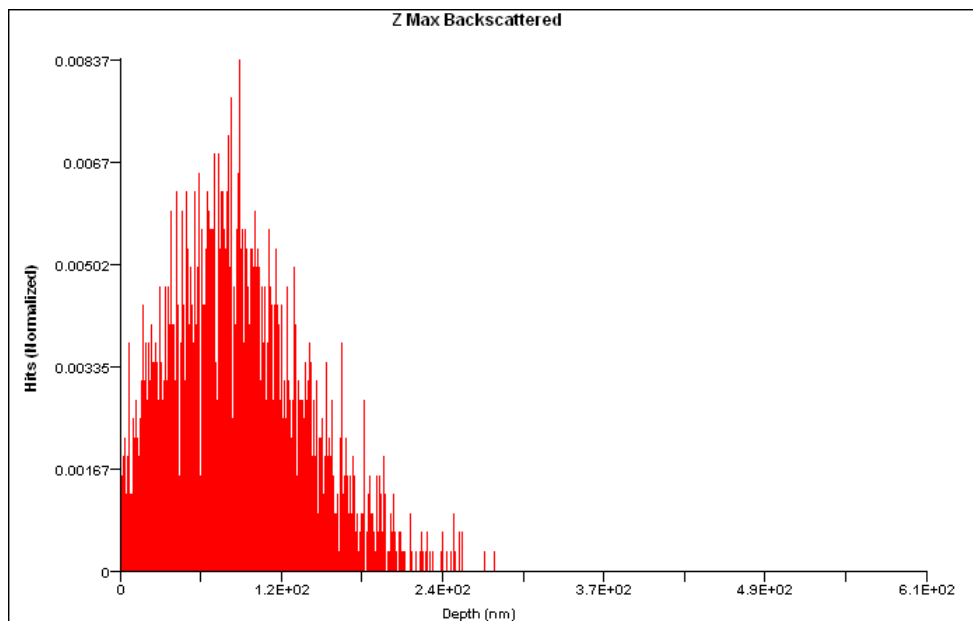
---

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

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



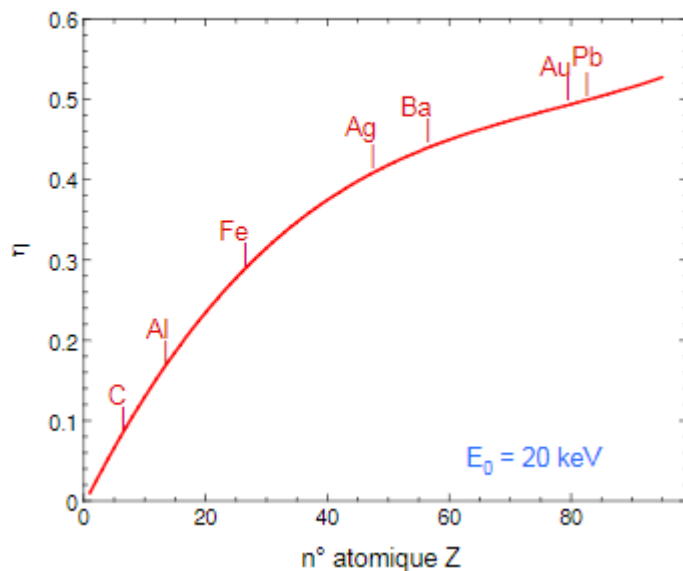
**Figure III.14 :** Distribution normalisée des électrons rétrodiffusés dans la cible Si en fonction de la profondeur.



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

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

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

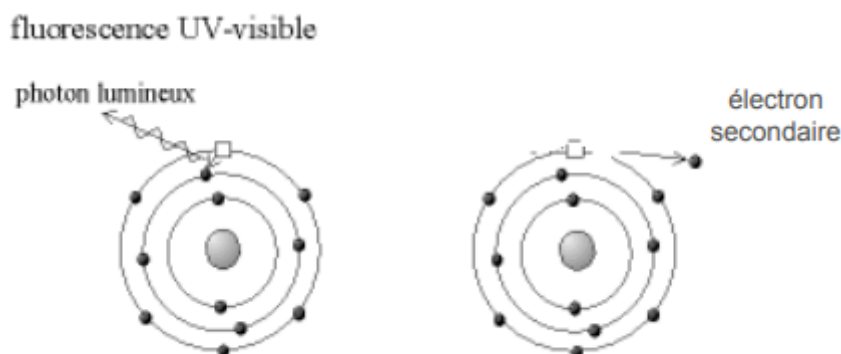


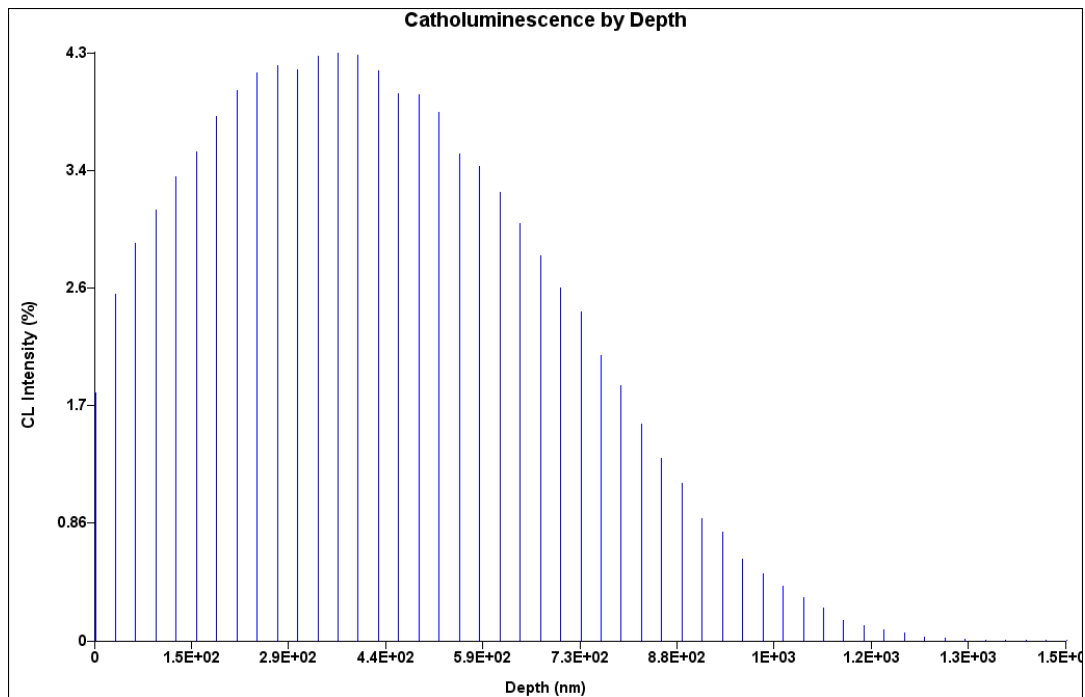
Figure III.17 : les phénomène de Cathodoluminescence [8]

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 Si et GaAs respectivement.

D'après les deux figure on constat que :

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

- ❖ Pour la cible Si : la distribution des photons émis par les atomes de cible est gaussien centré a une profondeur 360 nm qui corresponde au une proportion maximale d'intensité (4.3%)
- ❖ Pour la cible GaAs : la distribution des photons émis par les atomes de cible est gaussien centré a une profondeur 90 nm qui corresponde au une proportion maximale d'intensité (4.7 %)
- ✓ La différence des intensités émis des photons CL dans GaAs et Si est due a la différence de l'énergie de gap  $E_g$  talque :  $E_g(\text{GaAs}) > E_g(\text{Si})$ , mais la distribution des intensités de ces photons en profondeur est plus grande pour Si car l'électron pénètre plus profondément dans cette cible que GaAs



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

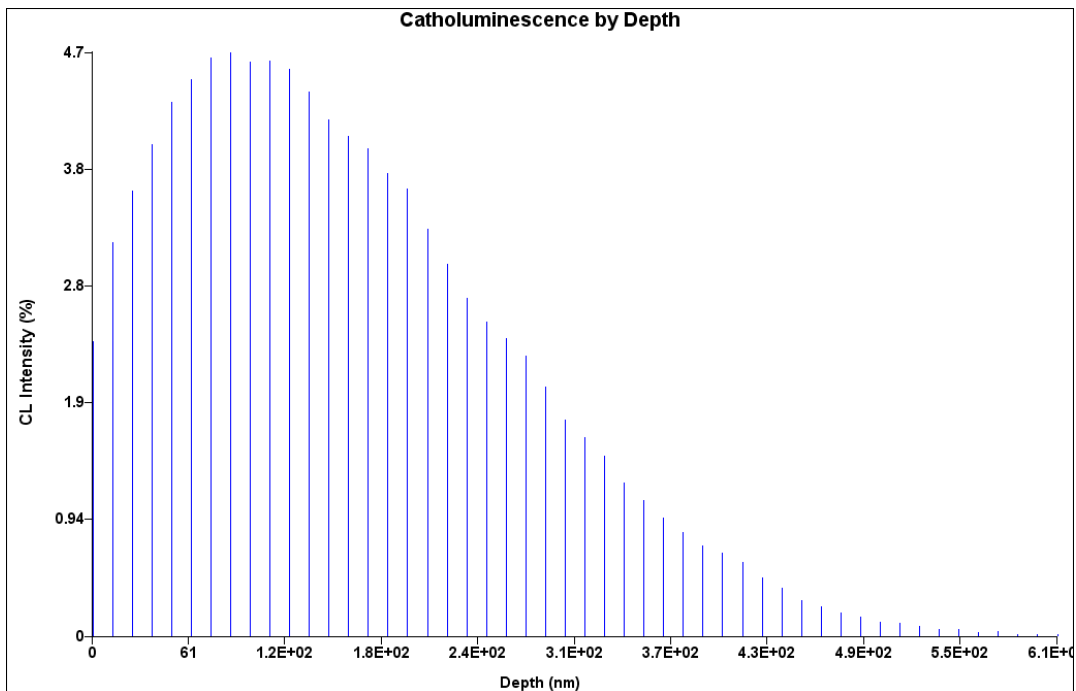


Figure III.19 : les variations de l'intensité CL (%) émis par GaAs en fonction de la profondeur

**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).

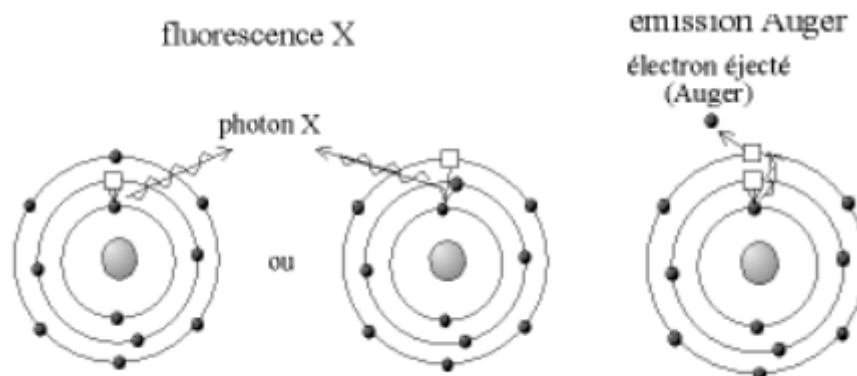


Figure 20 : les phénomènes lie a l'émission des rayon X [8]

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**" [1].

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 Si et GaAs à une énergie cinétique 10 KeV et émis par chacun des trois atomes constituant à savoir le silicium Si ; le gallium Ga et l'arsenic As en fonction de la profondeur de pénétration.

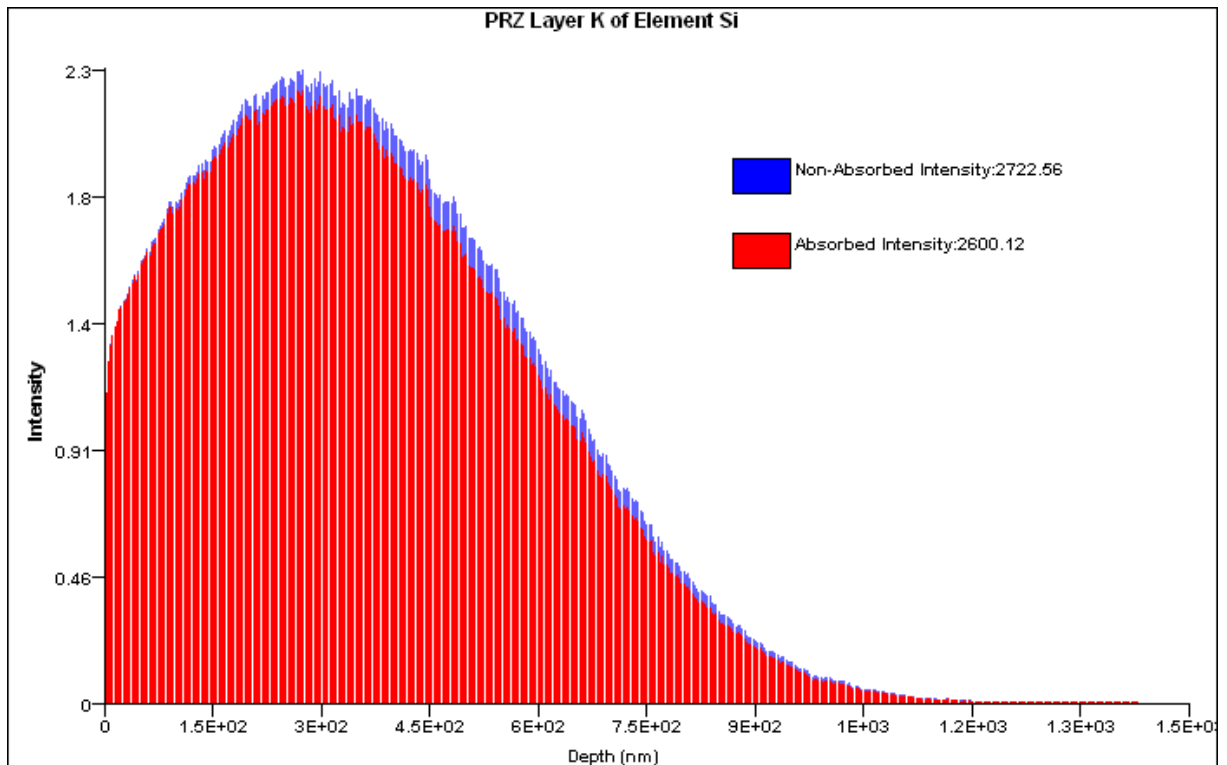


Figure III.20 : variation des intensités RX émis par l'atome d'arsenic As

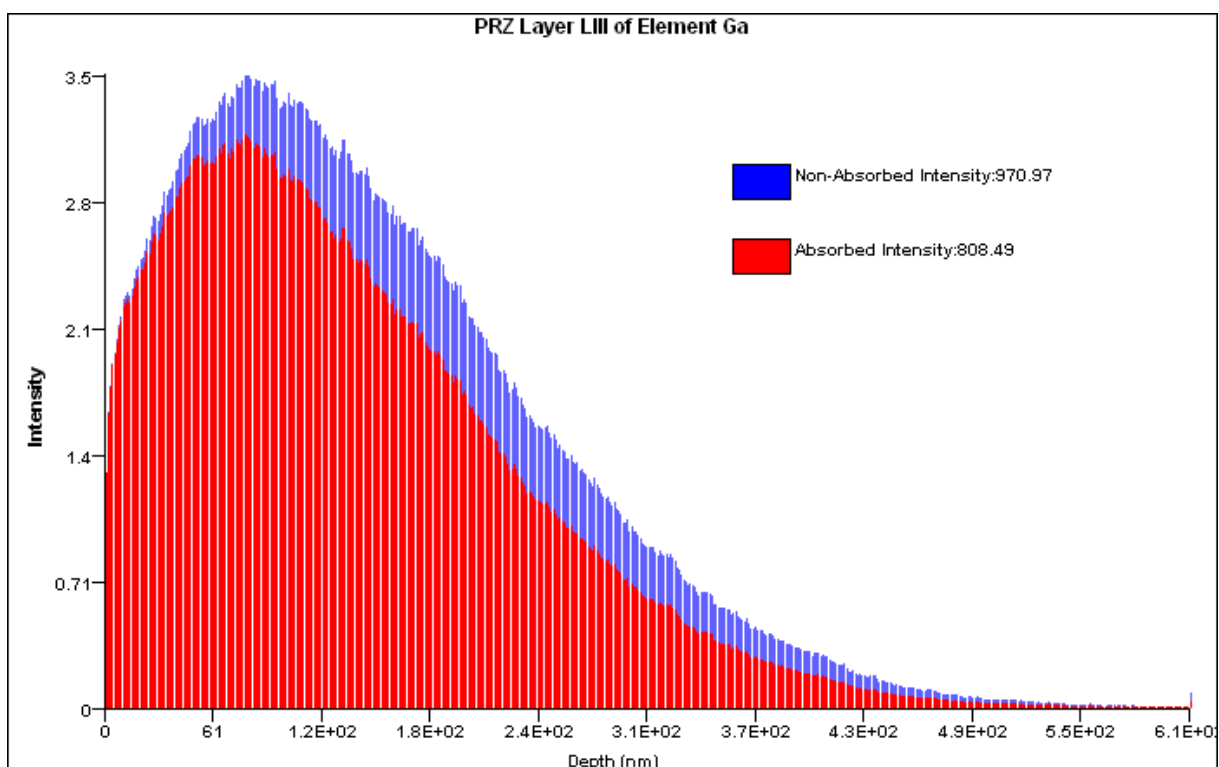


Figure III.21 : variation des intensités RX émis par l'atome d'arsenic Ga

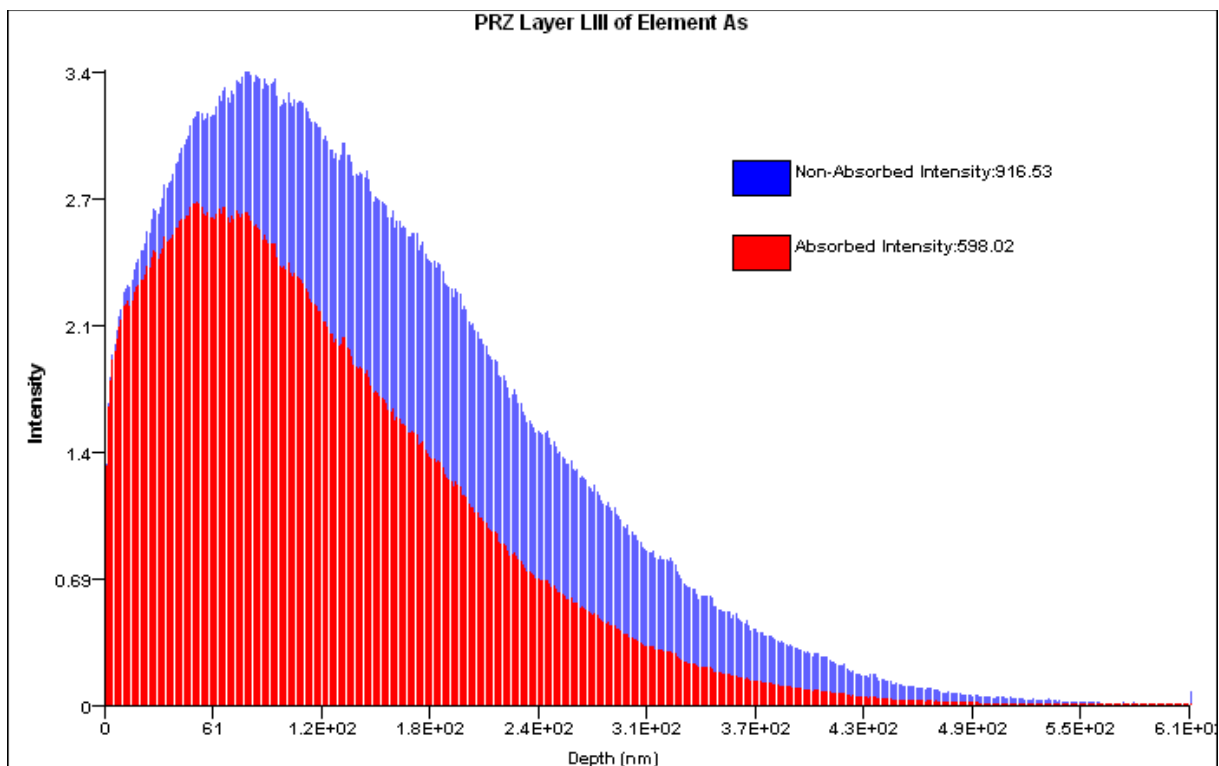


Figure III.22 : variation des intensités RX émis par l'atome d'arsenic As

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

---

❖ **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 (Si-Ga-As) sachant que les intensités maximales de ces rayons est située à des profondeurs des collisions successives maximales :

Si : 300nm

Ga : 90nm

As : 90nm

Les électrons incidents vont interagir avec les électrons orbitales des atomes qui sont situés dans les niveaux 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 interagir avec les atomes de la cible par trois types de mécanisme : la diffusion Rayleigh, la diffusion Compton et l'effet photoélectrique tel que une partie de ces rayons sera absorbée et l'autre partie n'est pas absorbée sachant que le processus d'absorption est effectué en fonction des niveaux d'énergie des atomes c'est-à-dire : si l'énergie d'un photon X est égale à la différence entre deux niveaux d'énergie il sera absorbé sinon va émis hors de la cible

L'énergie de 10 KeV peut arracher la série K de l'élément Si mais insuffisante pour arracher la même série pour les éléments Ga et As, c'est pour ça on trouve que les électrons arrachant pour les deux derniers éléments sont les électrons de la série L<sub>III</sub> puisque l'énergie minimale pour arracher la série dans chaque élément augmente par l'augmentation de numéro atomique de même élément

- Comme les électrons incidents (10 KeV) peuvent arracher les électrons de la couche K pour l'atome Si et de la couche L pour les atomes Ga et As, c'est-à-dire l'intégrale de la fonction de distribution des rayons X en profondeur est plus grande pour la cible Si, parce que la transition des électrons de la couche externe vers la couche K provoque l'émission d'une grande quantité des rayonnements par contre la transition électronique entre les couches externe et la couche L va produire des rayonnements X en profondeur avec faible quantité par rapport à l'autre transition (vers la couche K)

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

---

### **Conclusion :**

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

## Chapitre 03 : Simulation de l'interaction électron-matière par CASINO

---

### 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 matrice 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 comme :

- ❖ Les effets des collisions nucléaire et électronique sur l'ionisation et la production des lacunes ou bien des phonons dans les cibles bombardées Si et GaAs par les ions Ar<sup>+</sup> et Xe<sup>+</sup>
- ❖ Les effets des collisions nucléaire et électronique sur le phénomène de rétrodiffusion et la production des rayons X dans les mêmes cibles précédentes qui bombardées par les électrons
- ❖ Les effets de la densité et du numéro atomique des cibles bombardées sur la distance de pénétration ionique et électronique

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.

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.

## *Liste des références :03*

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](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>

## ملخص

طريقة مونتني كارلو هو أداة فعالة لمحاكاة مسارات عشوائية من الأيونات والإلكترونات في قذف سطح مركبات أشباه النواقل بواسطة حزمة من الأشعة الأيونية أو الإلكترونية. بعد تذكير نظري يصف تقنية مونتني كارلو على قذف الأيونات و الإلكترونات وترجمتها إلى معادلات رياضية يتبين من خلالها مدى تأثير خصائص القذائف و الأهداف التي يتم قذفها على مختلف الظواهر الفيزيائية الناتجة من التفاعلات ، قمنا باستخدام برنامج TRIM ( نقل وجمع الأيونات في المادة ) (مونتني كارلو لمحاكاة مسار الإلكترونات في المادة الصلبة ) لمحاكاة التفاعل مع المادة، على التوالي أي محاكاة تفاعل الأيونات مع المادة وتفاعل الإلكترونات مع المادة. و النتائج التي تم الحصول عليها في جداول ومنحنيات كما قمنا بسرد الظواهر المختلفة المتعلقة بقوة الإيقاف النووي والإلكتروني ، المسافة بين الأيونات والمادة وآثار الأشعة بواسطة حزمة من الأشعة الإلكترونية

## Résumé

La méthode de Monte Carlo est un outil efficace pour la simulation des trajectoires aléatoires des ions et des électrons lors des bombardements de la surface de composés semi-conducteurs par des faisceaux d'ions ou d'électrons. Après un rappel théorique décrivant la technique de Monte Carlo relative au bombardement ionique et électronique par des équations mathématique qui montrent les effet des différents caractéristiques des particules projetées et les cibles bombardés sur les différents phénomènes physique résultant on a utilisé des logiciels TRIM (Transport and range of Ions in Mater) et CASINO (Monte Carlo Simulation of electroN trajectory in sOlid) pour simuler respectivement l'interaction ions avec la matière et l'interaction des électrons avec matière. Les résultats obtenus sont donnés sous formes des tableaux et sous formes des courbes relatant les différents phénomènes liés au pouvoir d'arrêt, la distance parcourue des ions dans la matière et les effets de génération de rayon X par les faisceaux des électrons

## Abstract

The Monte Carlo method is an effective tool for the simulation of random trajectories of ions and electrons during the bombardment of the surface of semiconductor compounds by ion or electron beams. After a theoretical reminder describing the Monte Carlo technique for ion and electron bombardment by mathematical equations that show the effect of the different characteristics of the projected particles and the bombarded targets on the resulting different physical phenomena, we used the software TRIM (Transport and range of Ions in Matter) as well as CASINO (Monte Carlo Simulation of electroN trajectory in sOlid) to respectively simulate the ion interaction with matter and the interaction of electrons with matter. The results obtained are given in the form of tables and in the form of curves relating the different phenomena associated with stopping-power, the distance travelled by ions in the material, and the effects of X-ray generation by electron beams.