



Mémoire de fin d'étude

PRÉSENTÉ EN VUE D'OBTENTION
DU DIPLÔME DE : MASTER

Filière : Physique

Option : Physique des Matériaux et Modélisation Numérique

THÈME

Étude des pertes d'énergie sous bombardement ionique
dans le Silicium

Préparé par : Hiloul Hakima
Guettari Siham

Soutenu le : 03-07-2017

Devant le jury :

Président :	Pr : A. Kahoul	Professeur	U. de BBA
Rapporteur :	Dr : K. Akmoum	Maitre de conférences	U. de BBA
Examineur :	Dr : A. Bentabet	Professeur	U. de BBA
Examineur :	Dr : N. Lebgaâ	Maitre de conférences	U. de BBA
Invité :	Dr : S. Daoudi	Maitre de conférences	U. de BBA

Année Universitaire : 2016-2017

REMERCIEMENTS

Nous tenons tout d'abord à remercier ALLAH le tout puissant, qui nous a donné le courage, la volonté et la patience pour la réalisation de ce mémoire.

Nos profonds remerciements à notre encadreur Dr:AKMOUM KHEMISTI pour ses conseils et sa disponibilité tout au long de la réalisation de ce travail

Nous tenons à remercier vivement tout les enseignants de l'université qui nous ont aidé à l'accumulation des connaissances nécessaires durant le cursus universitaire.

Finalement, Nos remerciements s'adressent aussi aux membres de jury qui ont accepté de juger ce travail.

MERCI.

TABLE DES MATIÈRES

Table des matières

Liste des tableaux	
Liste des figures	
Introduction générale.....	1
Chapitre I : Phénomènes d'interaction ion-matière	
Introduction.....	2
I. Les effets du bombardement sur la cible.....	2
I.1. La perte d'énergie.....	2
I.1.a. La perte d'énergie nucléaire.....	3
I.1.b. La perte d'énergie électronique.....	4
II. Les collisions.....	5
II.1. La collision nucléaire.....	6
II.2. La collision inélastique.....	7
II.3. Pouvoir d'arrêt des ions dans la matière.....	8
II.3.a. Pouvoir d'arrêt électronique.....	9
II.3.b. Pouvoir d'arrêt nucléaire.....	10
II.3.c. Pouvoir d'arrêt global.....	11
III. Distribution des ions implantés.....	13
III.1. Parcours des ions dans le solide.....	13
III.1.a. Cas d'une distribution Gaussienne.....	14
III.1.b. Cas d'une distribution à 3 moments.....	14
III.1.c. Cas d'une distribution Pearson IV.....	15
IV. Dommage d'irradiation dans les solides.....	16
IV.1. Mécanisme de génération de défauts.....	16

Table des matières

IV.2. Distribution de l'énergie de dommage.....	17
V. Quelques problèmes d'irradiation dans les solides.....	18
L'implantation ionique.....	18
V.1. L'amorphisation du matériau.....	18
V.2. Erosion de la surface.....	19
V.3. Canalisation.....	19
Conclusion.....	20

Chapitre II : Généralités sur les semi-conducteurs

Introduction.....	21
I. Classification des matériaux.....	21
I.1. Isolant.....	21
I.2. Métal.....	21
I.3. Semi-conducteur.....	21
II. Propriétés générales des semi-conducteurs.....	22
II.1. Structure du semi-conducteur.....	22
II.2. Composition chimique.....	23
II.2.1. Semi-conducteurs simples.....	23
II.2.2. Semi-conducteurs composés.....	23
II.3. Différents types des semi-conducteurs.....	24
II.3.1. Semi-conducteur intrinsèque.....	24
II.3.2. Semi-conducteur extrinsèque.....	25
a) Semi-conducteur extrinsèque de type N.....	25
b) Semi-conducteur extrinsèque de type P.....	26

Table des matières

II.3.3. Equation de neutralité.....	27
II.3.4. Loi d'action de masse.....	28
II.3.5. Niveau de Fermi.....	29
II.3.6. Gap d'énergie.....	31
II.3.7. La jonction PN.....	31
III. Structure et applications du silicium.....	32
III.1. Différents types du silicium.....	33
III.1.1. Le silicium monocristallin.....	33
III.1.2. Le silicium poly-cristallin.....	34
III.1.3. Le silicium amorphe.....	35
III.2. Applications.....	35
III.2.1. En automobile et aéronautique.....	35
III.2.2. Photovoltaïque.....	35
III.2.3. Composants électroniques.....	35
III.2.4. Synthèse des silicones.....	36
Conclusion.....	36

Chapitre III : Résultats des simulations

Introduction.....	37
I.Présentation du logiciel SRIM.....	37
II.Détermination des pouvoirs d'arrêt et des moments.....	38
II.1. Effets de l'énergie et de la masse de l'ion incident.....	39
II.1.1.Effet de l'énergie de l'ion incident.....	39
II.1.2.Effet de la masse de l'ion incident.....	44

Table des matières

III. Détermination des pertes d'énergie.....	47
III.1. Effet de l'énergie de l'ion incident.....	48
III.2. Effet de la masse de l'ion incident.....	52
IV. Détermination du taux d'érosion.....	58
IV.1. Effet de l'angle d'incidence du faisceau.....	58
IV.2. Effet de l'énergie de l'ion incident.....	60
IV.3. Effet de la masse de l'ion incident.....	61
Conclusion.....	62
Conclusion générale.....	63
Bibliographie	
Annexe	
Résumé	

LISTE DES TABLEAUX

Liste des Tableaux

Tableau II.1: Quelques propriétés du silicium.....	33
Tableau III.1: Regroupe les résultats du système B dans Si.....	39
Tableau III.2: Regroupe les résultats du système Ge dans Si.....	39
Tableau III.3: Regroupe les résultats du système Si dans Si.....	40
Tableau III.4: Regroupe les résultats du système O dans Si.....	40
Tableau III.5: Regroupe les résultats du système Xe dans Si.....	40
Tableau III.6: Regroupe les résultats du système Bore, germanium, Silicium, Oxygène et Xénon dans le Si à 150 keV.....	45
Tableau III.7: Valeurs du taux d'érosion (S) en fonction de l'angle d'incidence (θ) pour le système Bi à 5 keV dans Si.....	58
Tableau III.8: Valeurs du taux d'érosion (S) en fonction de l'énergie (E) pour le système Bi à $\theta = 80^\circ$ dans Si.....	60
Tableau III.9: Valeurs du taux d'érosion (S) en fonction de différentes masses pour les systèmes (B ¹¹ , O ¹⁶ , Si ²⁸ , Ge ⁷⁴ , Xe ¹³² , Bi ²⁰⁹) dans Si, E = 5 keV, $\theta = 80^\circ$	61

LISTE DES FIGURES

Liste des Figures

Figure I.1: Représentation de la perte d'énergie (ΔE) d'un faisceau de particules dans la matière...	3
Figure I.2.: Différentes interactions dans le matériau cible.....	4
Figure I.3. : Schéma de l'évolution d'un ion dans la matière solide.....	5
Figure I.4: Schéma d'une collision élastique entre deux particules. La cible de masse m_2 est initialement au repos soit $E_2=0$	6
Figure I.5: Processus inélastiques pendant l'interaction projectile chargé-atome.....	8
Figure I.6: Les sections efficaces d'arrêts nucléaires et électroniques en coordonnées réduites.....	12
Figure I.7: Parcours des ions dans le solide.....	13
Figure I.8: Régions perturbées le long de la trajectoire de l'ion incident pour des faibles et grandes énergies d'incidence (relatives à la masse de l'ion).....	17
Figure I.9: Distribution des ions implantés dans différents cas de canalisation.....	20
Figure II.1: Diagramme de bande d'énergie d'un conducteur, d'un isolant et d'un semi-conducteur.....	22
Figure II.2: Semi-conducteur intrinsèque.....	25
Figure II.3 : Semi-conducteur de type N.....	26
Figure II.4 : Diagramme de bande d'énergie pour un semi-conducteur de type N.....	26
Figure II.5 : Semi-conducteur de type P.....	27
Figure II.6 : Diagramme de bande d'énergie pour un semi-conducteur de type P.....	27
Figure II.7: Position du niveau de fermi intrinsèque.....	29
Figure II.8 : Position du niveau de Fermi d'un semi-conducteur extrinsèque de type N.....	30
Figure II.9 : Position du niveau de Fermi des dopants dans un semi-conducteur de type P.....	30
Figure II.10 : Gap d'énergie.....	31

Liste des Figures

Figure II.11 : Jonction PN.....	32
Figure II.12 : Zone de déplétion dans une jonction PN.....	32
Figure II.13: Structure du silicium (diamant).....	34
Figure III.1 : Présentation de l'interface du logiciel SRIM.....	38
Figure III.2: L'évolution des pouvoirs d'arrêt électronique des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de l'énergie dans l'intervalle [50 à 200 keV].....	41
Figure III.3: L'évolution des pouvoirs d'arrêt nucléaire des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de l'énergie dans l'intervalle [50 à 200 keV].....	42
Figure III.4.a: L'évolution du parcours projeté des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de l'énergie dans l'intervalle [50 à 200 keV].....	43
Figure III.4.b: L'évolution de la déviation longitudinale des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de l'énergie dans l'intervalle [50 à 200 keV].....	43
Figure III.4.c: L'évolution de la déviation latérale des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de l'énergie dans l'intervalle [50 à 200 keV].....	44
Figure III.5: L'évolution des pouvoirs d'arrêt électronique des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de la masse de ces ions.....	45
Figure III.6: L'évolution des moments de distribution (a) R_p , b) ΔR_p , c) σ_p) pour des ions incidents différents à une énergie de 150 keV dans la cible de silicium.....	47
Figure III.7: Distribution des ions oxygène implantés dans le Si pour différentes énergies :	
a) 50 keV , b) 100 keV , c) 150 keV , d) 200 keV.....	48
Figure III.8: La distribution de l'énergie d'ionisation des ions incidents (en rouge) et des atomes de reculs (en bleu) pour le système O→Si pour des différentes énergies d'ions incidents :	
a) 50 keV , b) 100 keV , c) 150 keV , d) 200 keV.....	49
Figure III.9: La distribution de l'énergie absorbée par les atomes de Si (énergie de reculs et l'énergie des phonons) pour le système O→Si pour des différentes énergies d'ions incidents :	
a) 50 keV , b) 100 keV , c) 150 keV , d) 200 keV.....	50

Liste des Figures

Figure III.10: La distribution de l'énergie des phonons des atomes de reculs pour le système O→Si pour des différentes énergies d'ions incidents :

a) 50 keV , b) 100 keV , c) 150 keV , d) 200 keV51

Figure III.11: Distribution des ions implantés pour différents systèmes pour une énergie incidente de 50 keV dans le Silicium

a) Bore, b) Oxygène, c) Silicium, d) Germanium, e) Xénon.....53

Figure III.12: La distribution de l'énergie d'ionisation des ions incidents (en rouge) et des atomes de reculs (en bleu) pour une énergie incidente de 50 keV dans le Si

a) Bore, b) Oxygène, c) Silicium, d) Germanium, e) Xénon.....54

Figure III.13: La distribution de l'énergie absorbée par les atomes de Si (énergie de reculs et l'énergie des phonons) à 50keV pour différents types d'ions incidents dans le Si

a) Bore, b) Oxygène, c) Silicium, d) Germanium, e) Xénon.....56

Figure III.14: La distribution de l'énergie des phonons des atomes de reculs pour différents types d'ions incidents dans le Si pour une énergie incidente de 50 keV

a) Bore, b) Oxygène, c) Silicium, d) Germanium, e) Xénon.....57

Figure III.15: Variation du taux d'érosion (S) en fonction de l'angle d'incidence (θ) pour le système Bi à 5 keV dans le Si.....59

Figure III.16: Variation du taux d'érosion (S) en fonction en fonction de l'énergie incidente E pour le système Bi dans le Si à $\theta = 80^\circ$ 60

Figure III.17: Variation du taux d'érosion (S) en fonction en fonction de la masse des ions incidents pour le système Bi dans le Si à $\theta = 80^\circ$ 62

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Introduction générale

L'implantation ionique modifie les propriétés électriques, magnétiques, optiques et structurales des matériaux.

Lorsqu'un ion incident pénètre un solide, il perd son énergie cinétique avec les atomes de la cible à travers de nombreuses collisions.

Lors des collisions des ions avec les atomes de la cible, des endommagements de la surface apparaissent, et des régions de la cible peuvent devenir amorphes.

De nombreuses méthodes de calcul sont utilisées pour déterminer les différentes pertes d'énergie des ions dans un solide.

Parmi ces méthodes, le calcul Monte-Carlo qui génère toutes les distributions en suivant pas à pas le parcours de l'ion incident dans le matériau en choisissant un paramètre d'impact tiré par un générateur.

Le but de ce travail est l'étude des pertes d'énergie sous bombardement ionique dans le silicium.

Ce mémoire est composé de trois chapitres :

Dans le premier chapitre nous rappelons les phénomènes d'interaction ion-solide, les différentes pertes d'énergie des ions incidents et leur distribution dans le matériau. Nous étudions également les mécanismes de génération des défauts d'irradiation et quelques problèmes liés à l'implantation dans les matériaux.

Le deuxième chapitre est consacré aux généralités sur les semi-conducteurs. Un semi-conducteur monoatomique le silicium est revu avec plus de détails, nous terminons le chapitre par quelques applications de ce matériau.

Le dernier chapitre regroupe tous les résultats des calculs des pouvoirs d'arrêt, des moments des distributions des systèmes étudiés, les différentes pertes d'énergie et le taux d'érosion sous bombardement ionique dans le silicium générés par le logiciel SRIM. les résultats des simulations sont également commentés.

Nous terminerons ce travail par une conclusion générale.

CHAPITRE I :
PHENOMENES
D'INTERACTION
ION-MATIERE

INTRODUCTION :

Lorsque des ions incidents pénètrent dans un solide, ces derniers transfèrent leur énergie cinétique aux atomes de la cible à travers de nombreuses collisions. Lors de la collision, si l'énergie cinétique totale est conservée ainsi que la quantité de mouvement on parle de collision élastique par contre si l'énergie est transférée aux électrons du milieu on parle de collision inélastique. De plus, le long du passage de l'ion, des endommagements de la surface apparaissent, leur nature et leur importance sont fortement liées à l'énergie linéique déposée ($-dE/dX$) lors de l'interaction du projectile avec le solide. En traversant la matière, les particules incidentes perdent leurs énergies sur leurs parcours, le pouvoir d'arrêt définit la perte moyenne d'énergie de la particule par distance parcourue [1].

I. LES EFFETS DU BOMBARDEMENT SUR LA CIBLE :

Lorsqu'un solide est bombardé par des ions, il subit des modifications. En plus de l'apparition de dégâts dus à l'implantation de l'ion et aux déplacements des atomes, la composition et la morphologie vont changer [2].

I.1. La perte d'énergie :

Pendant l'interaction ion-solide, l'ion incident transmet son énergie à la cible tout au long de son passage dans le matériau. La quantité d'énergie perdue par l'ion pendant son ralentissement dans le solide constitue alors un paramètre important appelé pouvoir d'arrêt de la cible, il est défini comme étant l'énergie perdue de l'ion par unité de longueur ($-dE/dX$) [3].

$$P_E = - \frac{dE}{dx} = - \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta E}{\Delta x} \right). \quad (I.1)$$

$- \frac{dE}{dx}$: est l'énergie perdue par l'ion par l'unité de longueur.

Ce concept peut être défini en ramenant (en considérant) l'interaction de la particule avec un constituant élémentaire de la cible comme par exemple ses atomes. On définit dans ce cas la section efficace d'arrêt [4] :

$$S_E = \frac{1}{N} P_E. \quad (I.2)$$

Avec N : la concentration atomique du matériau cible

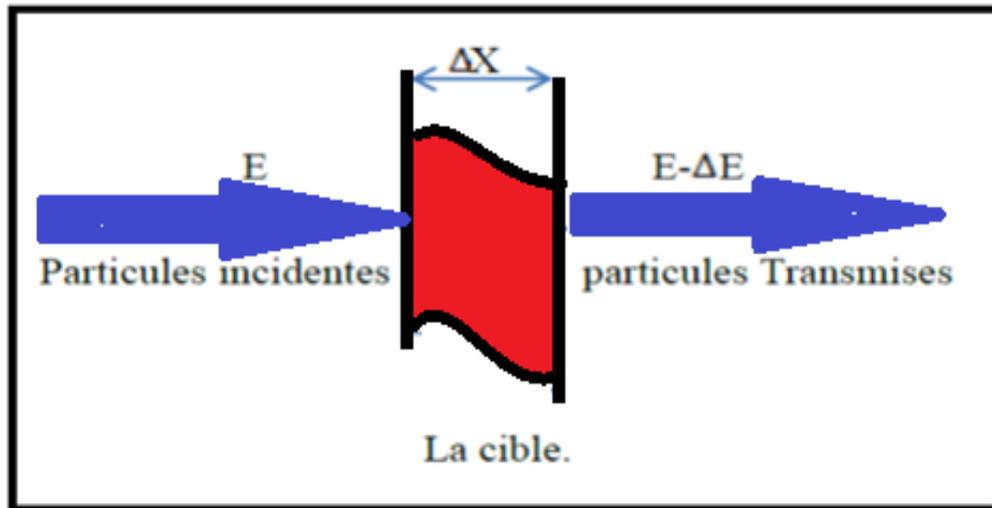


Figure I.1: Représentation de la perte d'énergie (ΔE) d'un faisceau de particules dans la matière [5].

La perte d'énergie est due aux différents types d'interactions avec le matériau cible:

I.1.a. La perte d'énergie nucléaire :

Il s'agit des collisions élastiques des ions pénétrant à faible vitesse avec les noyaux des atomes du matériau cible [6] qui va définir par le pouvoir d'arrêt nucléaire $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{nucl}$ [7].

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \frac{\pi^2 N Z_1 Z_2 e^2 a m_1}{2(m_1 + m_2)} \quad (I.3)$$

$$a = \frac{0.8853 a_0}{\sqrt{Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}}}} \quad (I.4)$$

- a_0 : est le rayon de Bohr.
- Z_1 : est le numéro atomique du projectile.
- Z_2 : est le numéro atomique de l'atome cible.
- m_1 : La masse de l'ion incident.
- m_2 : La masse de l'atome cible.

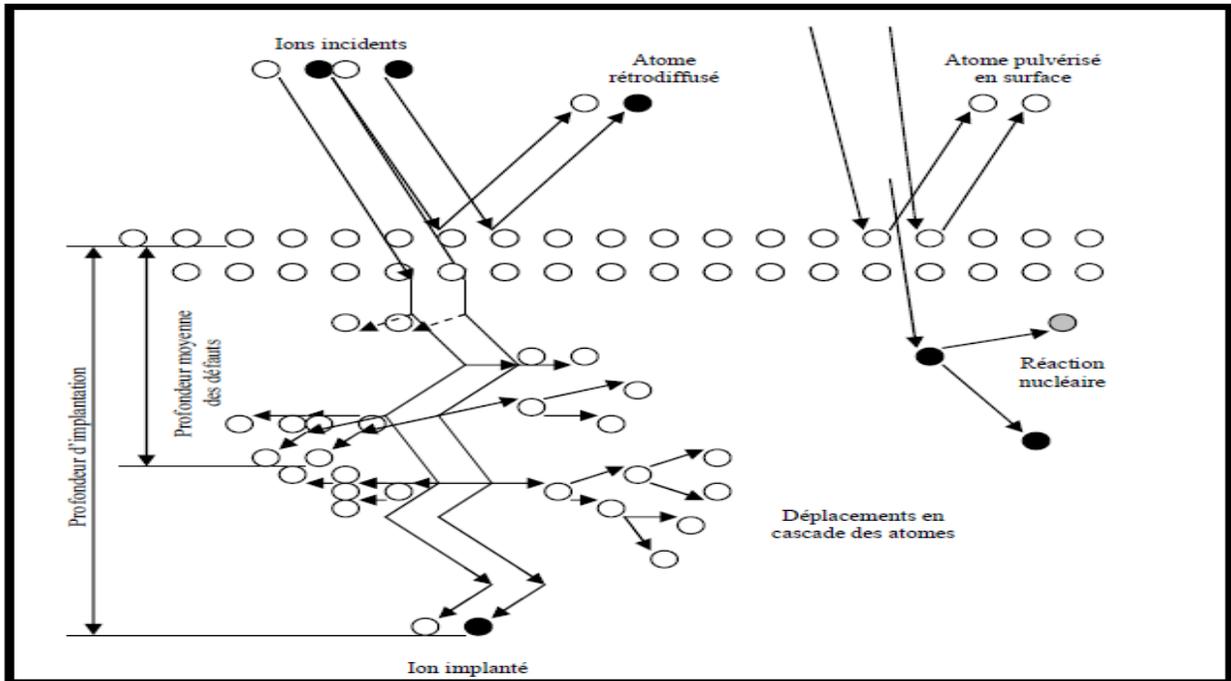


Figure I.2: La figure illustre les différentes interactions dans le matériau cible [8].

I.1.b. La perte d'énergie électronique :

Les ions pénétrant à grande vitesse dans le matériau cible transfèrent leur énergie aux électrons des atomes du matériau, en existant ou ionisant ses atomes. On a donc des processus inélastiques de transfert d'énergie [9] qui vont définir par le pouvoir d'arrêt électronique $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{ele}$.

A partir de potentiel écrané, LSS (Lindhard, Scharff, Schiott) ont élaboré une théorie qui permet d'aboutir à une expression analytique de la perte d'énergie électronique [10].

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{ele} = 8 e^2 a_0 \frac{N Z_2 Z_1^{7/6}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \cdot \frac{v}{v_0} \quad (I.5)$$

Avec :

- v_0 : la vitesse de l'électron dans l'atome de Bohr.
- v : la vitesse du projectile.
- a_0 : le rayon de Bohr.
- Z_1 : le numéro atomique du projectile.

- Z_2 : le numéro atomique de l'atome cible.
- N : la concentration atomique de la cible.

Cette expression montre que la perte d'énergie électronique varie de manière linéaire en fonction de la vitesse du projectile [11].

II. LES COLLISIONS :

On dit qu'il y a collision quand deux ou plusieurs objets se rapprochent et subissent une interaction mutuelle sans forcément qu'un impact ait eu lieu [6].

Lorsqu'un ion rentre dans le matériau il perd son énergie cinétique par des chocs nucléaires (ou élastiques) lors des collisions avec les noyaux des atomes de la cible et par des chocs électroniques (ou inélastiques) lors des collisions avec leurs électrons [12].

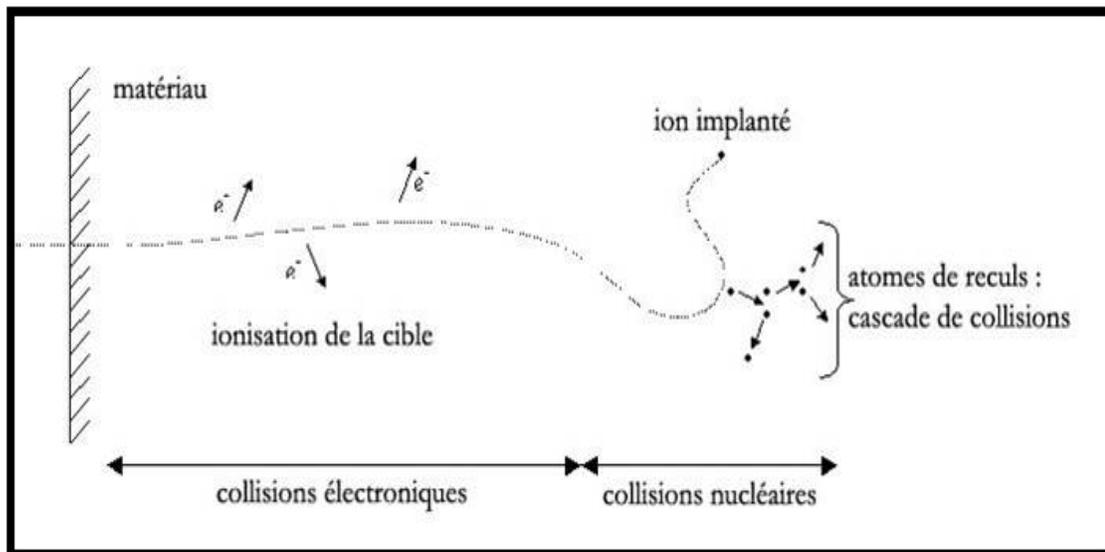


Figure I.3: Schéma de l'évolution d'un ion dans la matière solide. L'ion perd progressivement son énergie par une suite de collisions électroniques et nucléaires jusqu'à son l'ion arrêt [13].

A l'intérieur du solide, dissipe son énergie selon deux mécanismes :

II.1. La collision nucléaire :

Elle est plus importante en fin de parcours dans la matière c'est-à-dire pour les énergies faibles. Une collision nucléaire entre un ion et un atome peut se comparer à un choc entre deux corps [12]. L'énergie cinétique reste conservée ce qui se traduit par un transfert d'énergie entre la particule incident et la cible : on parle alors de collision élastique.

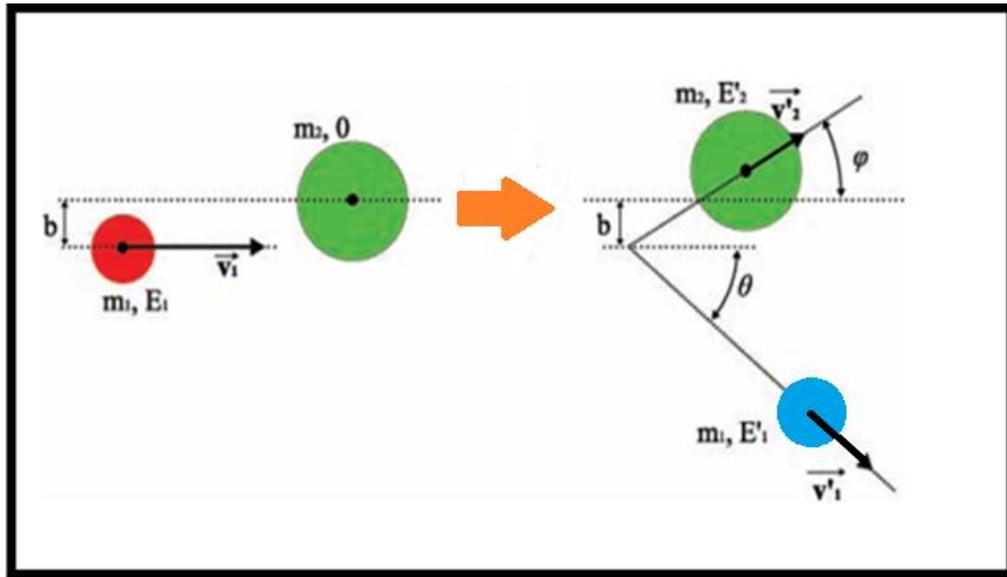


Figure I.4: Schéma d'une collision élastique entre deux particules. La cible de masse m_2 est initialement au repos soit $E_2=0$ [13].

La figure I.4 présente la géométrie et les paramètres qui gouvernent le processus de collision dans le repère. (m_1, E_1, \vec{V}_1) représentent la masse, l'énergie et la vitesse de l'ion projectile, m_2 la masse de l'atome.

V est la vitesse de recul de ce dernier après collision. Θ est l'angle de diffusion du projectile, ϕ l'angle de recul de l'atome cible et b le paramètre d'impact qui correspond à la distance d'approche entre le noyau du projectile et de la cible.

$$\mathbf{K} = \frac{E'_1}{E_1} = \left[\frac{m_1 \cos \theta \pm m_2 \sqrt{1 - \frac{m_1^2}{m_2^2} \sin^2 \theta}}{m_1 + m_2} \right]^2 \quad (\text{I.6})$$

K : le facteur cinématique.

m_1 : la masse de l'ion incident.

m_2 : la masse de l'atome cible.

E_1 : l'énergie de l'ion incident.

E'_1 : l'énergie du projectile après la collision.

Ainsi que le transfert maximum d'énergie T_{max} sont exprimés par les relations suivantes [12] :

$$T = E'_2 - E_2 = E_1 - E'_1 = \frac{4 m_1 m_2 \cos^2 \varphi}{(m_1 + m_2)^2} E_1 \quad (I.7)$$

$$\text{Avec : } \text{tag}(\varphi) = \left(\frac{m_1 + m_2}{m_1 - m_2} \right) \text{tag}(\theta) \quad (I.8)$$

II.2. La collision inélastique :

Ce processus de ralentissement domine à haute vitesse. Les collisions inélastiques sont des collisions entre l'ion incident et les électrons de la cible, l'énergie cinétique totale du système de particules n'est pas conservée. Ainsi l'énergie interne noyau cible-électrons est modifiée au cours de l'interaction. Dans le cas d'une collision ion atome, chacun des deux partenaires peut voir sa population électronique modifiée.

- Dans le cas de l'excitation, le transfert d'énergie peut laisser le projectile ou l'atome cible dans un état excité.
- Dans le cas de l'ionisation, un électron est arraché à un atome cible ou au Projectile [13].

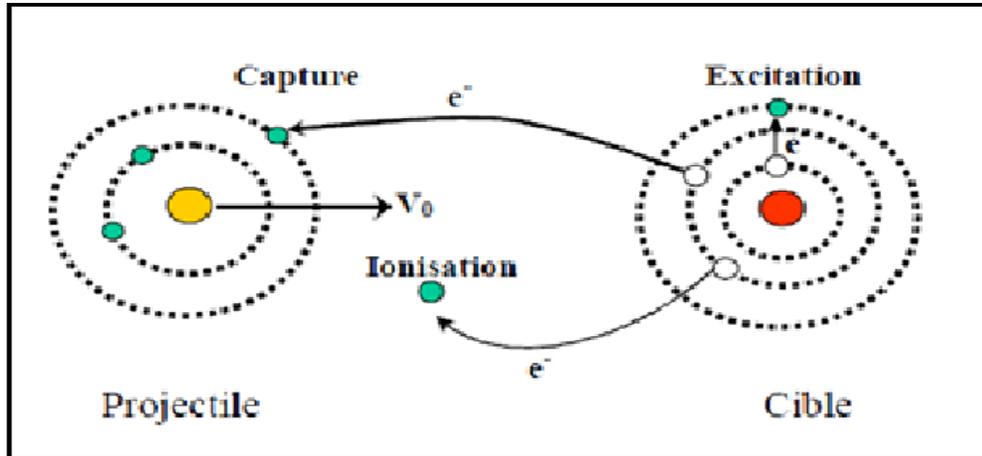


Figure I.5: Processus inélastiques pendant l'interaction projectile chargé-atome.

II.3. Pouvoir d'arrêt des ions dans la matière :

La perte d'énergie par unité de profondeur (longueur) (*i.e* le pouvoir d'arrêt ou section efficace de ralentissement). Il traduit la diminution de l'énergie cinétique pendant la pénétration des ions dans le solide selon la théorie **LSS** (Lindhard, Scharff et Schiott) [10]. Deux processus décrivent cette perte d'énergie. En fonction du domaine d'énergie utilisé et de la masse atomique de l'ion, l'un des deux processus devient dominant par rapport à l'autre. Le premier processus est la collision nucléaire (**S_n**) traduisant le choc élastique direct des ions avec les atomes du matériau. Quant au deuxième, il est dit collision électronique (**S_e**). Il décrit l'interaction inélastique des ions avec le cortège électronique des atomes cibles. La superposition des deux processus donne le pouvoir d'arrêt total qui est proportionnel à la perte énergétique de l'ion rapportée à la distance parcourue ($\frac{dE}{dX}$). Par conséquent, la perte d'énergie par unité de longueur peut être écrite comme suit :

$$\left(\frac{dE}{dX}\right)_{\text{total}} = \left(\frac{dE}{dX}\right)_{\text{nucléaire}} + \left(\frac{dE}{dX}\right)_{\text{électronique}} \quad (I.9)$$

Le pouvoir d'arrêt d'ion est la somme des pertes d'énergies nucléaire et électronique. Il est exprimé par :

Le pouvoir d'arrêt total $S_t(E)$ a pour expression :

$$S_t(E) = \frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dX}\right) = S_n + S_e \quad (I.10)$$

Où :

- **E** : l'énergie cinétique de l'ion incident.
- **Sn** : le pouvoir d'arrêt nucléaire.
- **Se** : le pouvoir d'arrêt électronique.
- **N** : la concentration atomique de la cible.

On distingue deux types des pouvoir d'arrêt :

II.3.a. Pouvoir d'arrêt électronique :

Lorsque la vitesse moyenne de l'ion incident reste inférieure à la vitesse moyenne des électrons des atomes cible, ce qui correspond à une limite supérieure en énergie de l'ordre de quelques MeV, Lindhard et Scharff et Firsov ont montré que le pouvoir d'arrêt électronique est proportionnel à la vitesse de l'ion incident.

Le modèle de Firsov : il considère le projectile et l'atome-cible comme une quasi molécule, dans laquelle les états électroniques deviennent des orbitales moléculaires dont l'énergie dépend de la distance entre les noyaux. L'interaction entre les deux corps donne lieu à des échanges électroniques qui produisent un ralentissement de la vitesse de l'ion. Ce phénomène est gouverné par le potentiel interatomique de Thomas-Fermi [14].

Le modèle LSS : il utilise l'approximation de la collision binaire ; c'est-à-dire que les chocs ne sont pas corrélés, étant supposés indépendants les uns des autres. Cette approximation est presque toujours utilisée dans les logiciels de simulation de l'implantation ionique. D'autre part, la proportionnalité entre les pertes d'énergie électronique et la vitesse de l'ion a conduit Lindhard [15] à modéliser l'interaction pour **n** projectiles de charge **Z₁.e** se déplaçant dans un gaz électronique.

Dans le système des paramètres réduits le pouvoir d'arrêt électronique s'écrit :

$$S_e = \left(- \frac{d\varepsilon}{d\rho} \right) = K\varepsilon^{\frac{1}{2}}. \quad (I.11)$$

K: une constante tabulée théoriquement par Lindhard et Al.

ε et **ρ** sont les paramètres réduits de la théorie L.S.S.

ε : est appelé énergie réduite, il dépend du système (ion-cible-énergie) et est lié au rayon d'écran de thomas Fermi par la relation suivante :

$$\varepsilon = \frac{\alpha_{TF} M_2}{Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2)} E. \quad (I.12)$$

α_{TF} : Rayon de Thomas-Fermi.

$$\alpha_{TF} = \frac{0.8853}{Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}} a_0. \quad (I.13)$$

a_0 : Rayon de Bohr, $a_0 = \frac{h^2}{m e^2} = 0.529 \text{ \AA}. \quad (I.14)$

$Z_1 Z_2$: Numéros atomique de l'ion et de la cible respectivement.

$$\rho = 4N\pi\alpha_{TF}^2 \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} R. \quad (I.15)$$

R : le parcours de l'ion incident dans le matériau cible.

$$R = \int_0^R dX = \int_{E_{ion,0}}^0 \frac{dE}{\frac{dE}{dX}} = \int_0^{E_{ion,0}} \frac{dE}{-\left(\frac{dE}{dX}\right)_n - \left(\frac{dE}{dX}\right)_e} = \frac{1}{N} \int_0^{E_{ion,0}} \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)} \quad (I.16)$$

II.3.b. Pouvoir d'arrêt nucléaire :

Le transfert d'énergie par collisions élastiques entre projectile et les atomes cible est appelé perte d'énergie nucléaire.

Dans le cas de faibles énergie, la surface de collision devient grande et les sections efficaces d'interaction entre l'ion et l'atome deviennent considérables [1].

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \frac{\pi^2 N Z_1 Z_2 e^2 a m_1}{2(m_1 + m_2)} \quad (I.17)$$

La section efficace de ralentissement nucléaire est définie comme étant :

$$S_n(E) = \left(\frac{dE}{dX}\right) = N \int_0^{T_{max}} T d\sigma(E, T) \quad (I.18)$$

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

$$d\sigma = 2\pi b db \quad (I.19)$$

Où :

b : le paramètre d'impact ou la distance minimale entre les centres des noyaux.

N : la densité atomique de la cible.

T : l'énergie transmise par un ion de masse M_1 et de charge Z_1 d'énergie E lors d'une collision individuelle avec un atome de masse M_2 et de charge Z_2 au repos.

$$T = T_{max} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (I.20)$$

T_{max} : l'énergie transmise maximale.

$$T_{max} = \frac{4m_1m_2}{(m_1+m_2)^2} E \quad (I.21)$$

II.3.c. Pouvoir d'arrêt global :

La perte d'énergie électronique par transfert d'énergie aux électrons de l'atome cible est beaucoup plus importante que la perte d'énergie nucléaire, surtout pour les ions implantés à forte énergie. En considérant les pertes d'énergie électroniques et nucléaires indépendantes et additives, la perte d'énergie totale s'exprime comme des deux processus [6] :

D'après Lindhard, la perte totale de l'énergie dans le solide est la somme des contributions nucléaire et électronique, on aura [12].

$$S_t = S_n(E) + S_e(E) = -\frac{1}{N} \left[\left(\frac{dE}{dx} \right)_n + \left(\frac{dE}{dx} \right)_e \right] \quad (I.22)$$

S_t : le pouvoir d'arrêt de l'ion dans le matériau cible (MeV/cm ou eV/Å).

-- dE/dx : l'énergie perdue par l'ion par unité de longueur.

S_n : l'énergie perdue lors des chocs nucléaires (ou élastiques).

S_e : l'énergie perdue lors des chocs électroniques (ou inélastiques).

$$\frac{d\mathcal{E}}{d\rho} = \left(\frac{d\mathcal{E}}{d\rho} \right)_e + \left(\frac{d\mathcal{E}}{d\rho} \right)_n \quad (I.23)$$

Avec :

\mathcal{E} : Notion d'énergie ρ : longueur réduite

Les différents mécanismes qui contribuent à la perte d'énergie totale sont représentés dans la figure suivante :

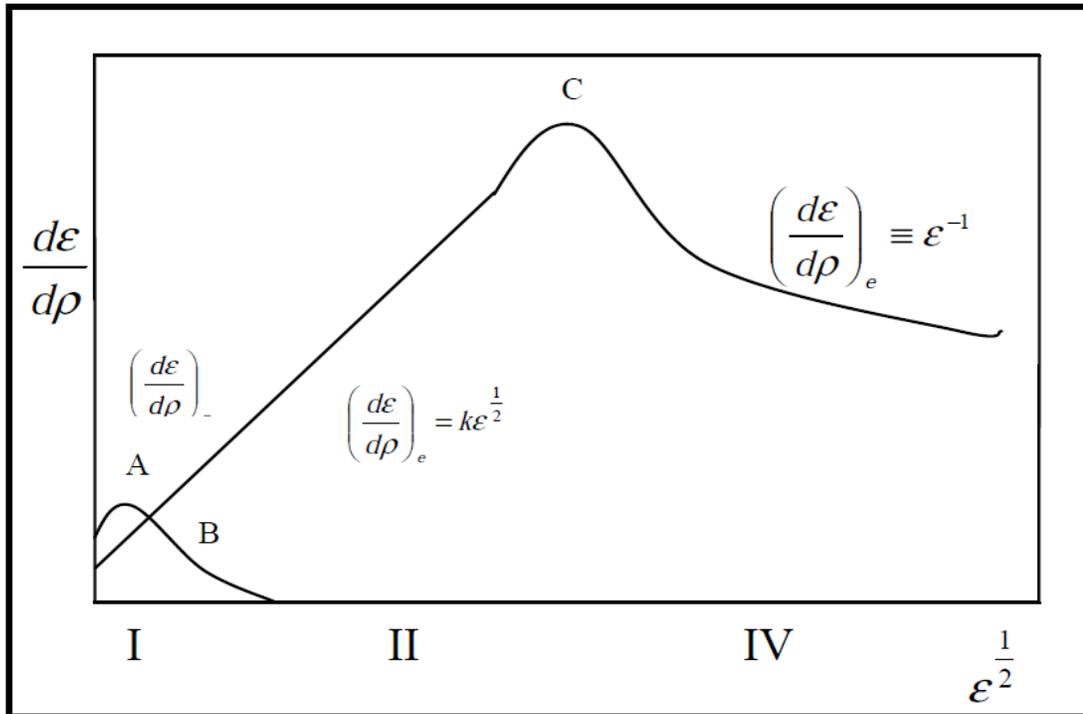


Figure I.6: Les pouvoirs d'arrêt nucléaires et électroniques en coordonnées réduites [9].

Les points A, B, C correspondent respectivement au maximum du pouvoir d'arrêt nucléaire, à l'égalité entre les pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique, et au maximum du pouvoir d'arrêt électronique. Ces points délimitent approximativement les différents mécanismes d'arrêt [16].

III. DISTRIBUTION DES IONS IMPLANTÉS :

III.1. Parcours des ions dans le solide :

Lorsqu' un ion rentre dans un solide, il interagit par des chocs avec les atomes de la cible.

A travers de nombreuses collisions la perte d'énergie par unité de distance parcourue s'écrit sous la forme suivante :

$$-\frac{dE}{dX} = S_n + S_e \dots \quad (I.24)$$

S_n : Le pouvoir d'arrêt nucléaire.

S_e : Le pouvoir d'arrêt électronique.

Par intégration de l'équation (I.24) il est alors possible de déterminer le parcours moyen de l'ion à l'intérieur de la cible.

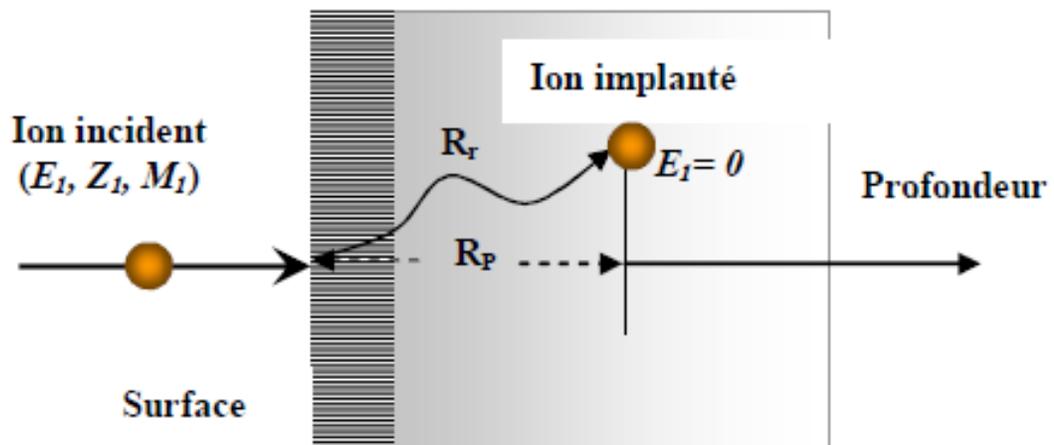


Figure I.7: Parcours des ions dans le solide [3].

Tous les ions n'ont pas le même parcours (R) ni le même parcours projeté (R_p). La statistique du phénomène fait que ces ions sont répartis dans le matériau selon une certaine distribution qui définit alors une distribution des parcours projetés. La connaissance de la concentration des impuretés dopantes lors de l'implantation est importante en technologie des semi-conducteurs.

III.1.a. Cas d'une distribution Gaussienne:

La première approximation considère que les ions sont distribués dans le matériau, après implantation selon une gaussienne, la distribution des parcours projetés s'écrit comme suit [17] :

$$F(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_P} \exp - \left(\frac{X - R_P}{\sigma_P} \right)^2 \quad (I.25)$$

Avec:

- $F(X)$: la distribution, et R_P et σ_P sont des moments de la distribution.
- R_P : le parcours projeté moyen des ions, il donne la position du maximum de la distribution.
- σ_P : la déviation standard projetée, elle caractérise la dispersion des parcours projetés autour de R_P .

La concentration des ions implantés dans le cas d'un profil gaussien est alors donnée par :

$$N(X) = D \cdot F(X) = \frac{D}{\sqrt{2\pi \sigma_P}} \exp - \frac{1}{2} \left(\frac{X - R_P}{\sigma_P} \right)^2 \quad (I.26)$$

Où :

D : la dose d'ions par unité de surface.

Le maximum de concentration si l'on néglige la rétrodiffusion est donné par :

$$N(X) = \frac{D}{\sqrt{2\pi \sigma_P}} \quad (I.27)$$

Nous allons discuter le cas d'une fonction de distribution à 3 moments et le cas d'une fonction à 4 moments.

III.1.b. Cas d'une distribution à 3 moments:

Il existe plusieurs distributions à 3 moments, le troisième moment tient compte de la dissymétrie de la distribution par rapport à R_P . en général la fonction de la distribution $F(X)$ s'écrit sous la forme d'un produit d'un polynôme $P(X)$ par une fonction Gaussienne $G(X)$.

Le polynôme s'écrit sous la forme suivante :

$$P(X) = 1 + \frac{\sqrt{B_1}}{6} (X^2 - 3X) + \frac{B_2 - 3}{24} (X^4 - 6X^2 + 3) + \frac{B_1}{72} (X^6 - 15X^4 + 45X^2 - 15) \quad (I.28)$$

X : est une variable normalisée pour simplifier l'écriture :

$$X = \frac{X' - R_P}{\sigma_P} \quad (I.29)$$

β_1 : le troisième moment.

β_2 : le quatrième moment qui d'après Winterbon est lié à β_1 par la relation suivante :

$$\beta_2 = 3 + \frac{5}{3}\beta_1 \quad (I.30)$$

La distribution finalement $F(X)$ s'écrit sous la forme suivante :

$$F(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} e^{-\frac{X^2}{2}} \left[1 + \frac{\sqrt{\beta_1}}{6}(X^2 - 3X) + \frac{5\beta_1}{72}(X^4 - 6X^2 + 3) + \frac{\beta_1}{72}(X^6 - 15X^4 + 45X^2 - 15 \dots) \right] \quad (I.31)$$

III.1.c. Cas d'une distribution Pearson IV :

C'est une distribution à quatre moments, elle est donnée par formule suivante [18] :

$$F(X) = K[b_2(X - R_p)^2 + b_1(X - R_p) + b_0]^{\frac{1}{2b_2}} \quad (I.32)$$

$$F(X) = \exp \left[-\frac{b_1/b_2 + 2a}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \operatorname{arctg} \frac{2b_2(X - R_p) + b_1}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \right] \quad (I.33)$$

Où :

K : est une constante donnée par la relation de normalisation.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(X) dX = 1 \quad (I.34)$$

Et les autres constantes a , b_0 , b_1 , et b_2 sont données par :

$$a = \frac{\sigma_p \gamma (\beta + 3)}{A} \quad (I.35)$$

$$b_0 = \frac{-\sigma_p^2 (4\beta - 3\gamma^2)}{A} \quad (I.36)$$

$$b_1 = a \quad (I.37)$$

$$b_2 = \frac{-2\beta - 3\gamma^2 - \gamma}{A} \quad (I.38)$$

$$A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18 \quad (I.39)$$

Les moments M_i d'ordre $i = 1, 2, 3, 4$ de la distribution $F(X)$ sont reliés aux paramètres R_p, σ_p, γ et β par la relations [11] :

$$R_p = M_1, \gamma = M_3 / \sigma_p^3, \sigma_p^2 = M_2, \beta = M_4 / \sigma_p^4 \quad (I.40)$$

IV. DOMMAGE D'IRRADIATION DANS LES SOLIDES :

IV.1. Mécanisme de génération de défauts :

Lorsque du bombardement d'un solide cristallin des défauts sont générés à l'intérieur du réseau atomique. Contrairement aux matériaux isolants pour lesquels les collisions inélastiques peuvent créer des défauts [19] pour les semi-conducteurs il est admis que seules les collisions élastiques de l'ion incident avec les noyaux du substrat sont à l'origine de la création de défauts.

Lors de sa pénétration dans le matériau cible, le long de sa trajectoire, l'ion incident produit un nombre important de collisions avec les atomes du matériau cible. Si l'énergie transmise est suffisante, des atomes du matériau cible seront déplacés de leurs sites, et à leur tour, ils pourront par collisions successives produire des délocalisations d'atomes en cascades (**figure I.7**). Ainsi, une région perturbée est produite par génération de défauts structuraux de type lacunes interstitielles (paires de Frenkel).

Cette couche perturbée peut être considérée comme une région très désordonnée localisée autour de la trajectoire de l'ion incident [20].

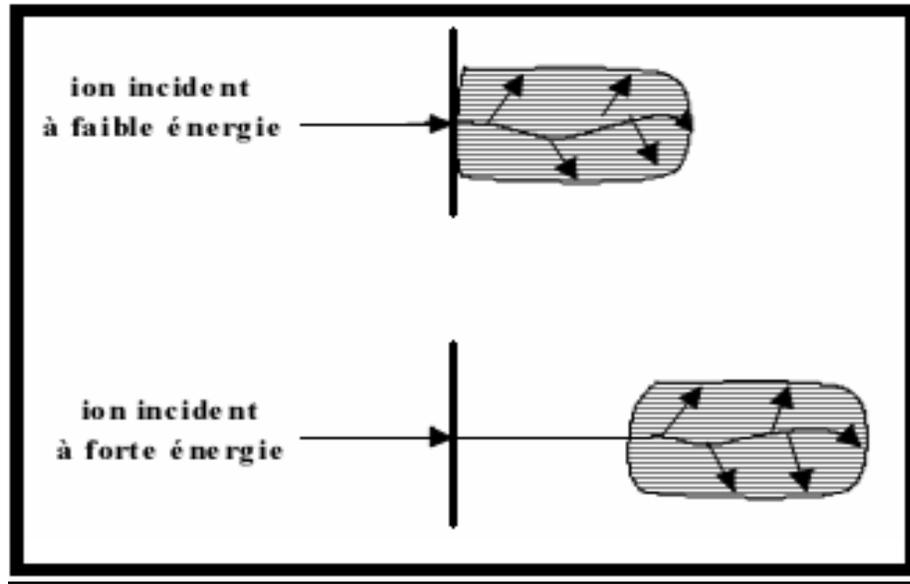


Figure I.8: Schéma des régions perturbées le long de la trajectoire de l'ion incident pour des faibles et grandes énergies d'incidence (relatives à la masse de l'ion) [21].

IV.2. Distribution de l'énergie de dommage :

On utilisant trois méthodes pour calculer les distributions de l'énergie de dommage :

- 1- Les méthodes de Monte-Carlo [22] sont couramment utilisées, citons entre autre le programme **SRIM**.
- 2- Les méthodes indirectes basées sur la résolution d'une équation de transport de type Boltzmann développées par Gibbons et al. Sigmund et Winterbon. Des tables ont été publiées.
- 3- Les méthodes directes basées sur un traitement statistique, dans la mesure où l'on part de la distribution des parcours projetés et l'aide d'un certains nombres d'approximation on déduit la distribution de l'énergie déposée.

V. QUELQUES PROBLEMES D'IRRADIATION DANS LES SOLIDES :

On rencontre plusieurs problèmes dans l'implantation des matériaux. Les uns sont liés à la structure du matériau et les autres au phénomène du bombardement. Nous allons citer trois de ces problèmes : l'amorphisations du matériau, l'érosion de la surface et la canalisation [11].

L'implantation ionique :

L'implantation ionique est un procédé inventée à la fin des années 1940 par William Shockley. Cette technique consiste à implanter des ions dans une cible afin de modifier ses propriétés. Initialement développée pour doper les semi-conducteurs, c'est au cours des années 1970 que l'implantation ionique a été détournée de son utilisation initiale pour améliorer les propriétés des métaux et des polymères.

L'implantation ionique consiste à bombarder un matériau avec des ions et à des énergies variables. Un ion pénétrant dans un solide va perdre son énergie par chocs avec les atomes de la cible avant de s'arrêter dans le matériau [23].

V.1. L'amorphisation du matériau :

Un solide amorphe est un solide sans organisation atomique à longue distance. Par opposition avec les solides cristallins, un amorphe n'a pas de périodicité.

Pendant le bombardement ionique le matériau subit une destruction du réseau qui permet au matériau de passer de l'état de cristal à celui d'amorphe.

Dans le cas des semi-conducteurs tel que le Si, cette amorphisation permet d'obtenir de meilleurs composants dans le processus de dopage par implantation ionique.

Par contre, pour d'autres semi-conducteurs tel que GaAs il s'est avéré que la formation d'une couche amorphe gêne la guérison du matériaux et ne donne pas un cristal de bonne qualité après recuit [11].

V.2. Erosion de la surface :

C'est un phénomène rencontré lors de l'implantation d'ion lourds avec des concentrations élevées. Ce phénomène est quantifiée par le taux d'érosion S qui représente le nombre moyen d'atomes pulvérisés par ion incident. Il est généralement exprimé en atomes par ion [24].

$$S = \frac{\text{Atomes érodés}}{\text{Ions incidents}} \quad (\text{I.41})$$

$$S = \frac{3 E d(X=0)}{4 N \pi^2 C_0 U_0} \quad (\text{I.42})$$

N : la densité de la cible.

C_0 : est une constante.

U_0 : l'énergie de liaison des atomes de surface.

L'érosion ionique est utilisée dans de nombreuses techniques (nettoyage des surfaces, amincissements ionique).

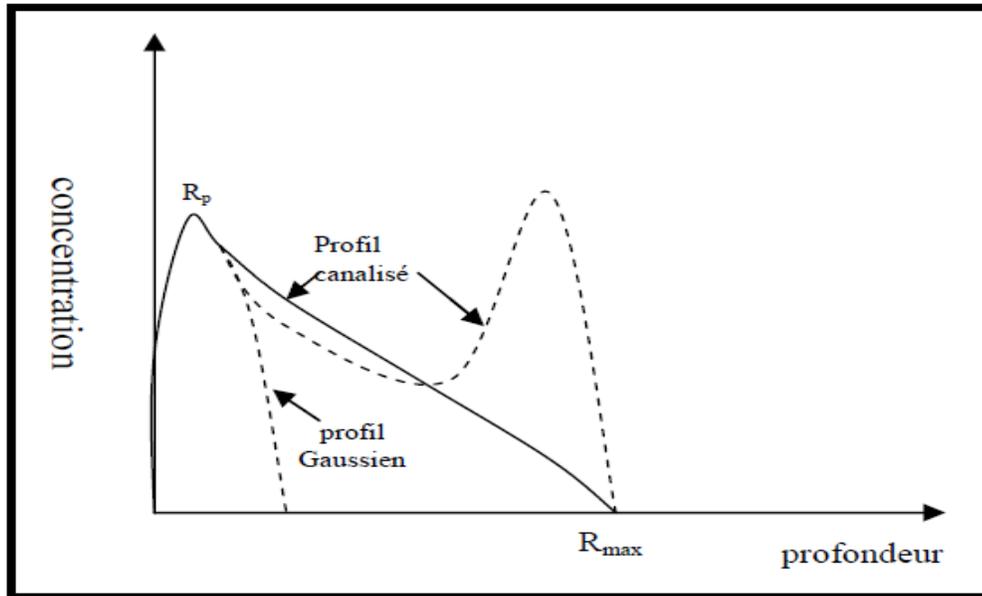
V.3. Canalisation :

Dans un cristal, les atomes sont organisés de façon régulière et périodique. Dans le cas où le faisceau est parallèle à une direction ou à un plan cristallographique, les rangées atomiques peuvent confiner les ions dans des 'canaux' matérialisés entre les directions ou les plans du cristal. C'est le phénomène de canalisation [25].

La figure (I.9) représente cet effet de canalisation. On remarque un profil d'implantation atteignant R_{\max} . Un deuxième pic dans le profil des impuretés peut apparaître si cet effet de canalisation deviendrait très important.

La distribution des ions implantés dépend de l'orientation du faisceau d'ions par rapport à la structure cristalline du matériau cible, de la température de la cible (vibrations thermiques du réseau), de l'état de surface de la cible et de la dose d'implantation (amorphisation).

Lorsque l'ion pénètre sous un petit angle par rapport aux rangées atomiques du réseau cristallin, il sera guidé par ces atomes grâce à des collisions successives sous faibles angle. L'ion reste à une distance considérable ($r > r_{\min}$) des atomes du réseau [9].



FigureI.9: Distribution des ions implantés dans différents cas de canalisation.

CONCLUSION :

Dans ce chapitre nous avons présenté les notions fondamentales qui caractérisent les phénomènes d'interaction ion- solide, les différentes pertes d'énergie ainsi que les différents distributions des ions implantés lors du processus de bombardement ionique.

Nous avons également étudié les mécanismes de génération des défauts d'irradiation et quelques problèmes liés à l'implantation.

CHAPITRE II :
GÉNÉRALITÉS SUR LES
SEMI-CONDUCTEURS

INTRODUCTION:

Les semi-conducteurs prennent une place de plus en plus importante dans les systèmes que nous trouvons autour de nous ou que nous utilisons chaque jour. Ils sont primordiaux en technologie micro électronique. Le silicium a été l'un des premiers matériaux utilisés (avec le germanium) pour fabriquer des transistors puis des diodes, ensuite les circuits intégrés et enfin les micro-processeurs.

Dans ce chapitre on va présenter une étude bibliographique sur les semi-conducteurs (structure, composition chimique, types, quelques propriétés, et en particulier l'élément de base : le silicium).

I. CLASSIFICATION DES MATÉRIAUX :

Les matériaux solides peuvent être classés en trois catégories qui sont : les isolants, les métaux et les semi-conducteurs.

I.1. Isolant :

Les matériaux qui ont une résistivité supérieure de $10^8 \Omega \text{ cm}$ sont des isolants, la largeur de la bande interdite est grande ($\approx 5 \text{ eV}$) donc il n'y a pas de niveaux d'énergie accessibles et donc pas de conduction.

I.2. Métal:

La dernière bande des métaux est partiellement remplie, il existe beaucoup de niveaux disponibles et la conduction s'effectue essentiellement par les électrons libres. Les métaux ont une résistivité inférieure de $10^{-5} \Omega \text{ cm}$.

I.3. Semi-conducteur :

Cette classe de matériaux se situe entre les métaux et les isolants, à $T = 0 \text{ K}$ un semi-conducteur se comporte comme un isolant. Néanmoins, il conduit l'électricité dès que la température augmente. La résistivité des semi conducteurs varie entre $10^{-3} \Omega \text{ cm}$ et $10^4 \Omega \text{ cm}$, la conduction électrique se fait par les électrons libres et les trous mobiles.

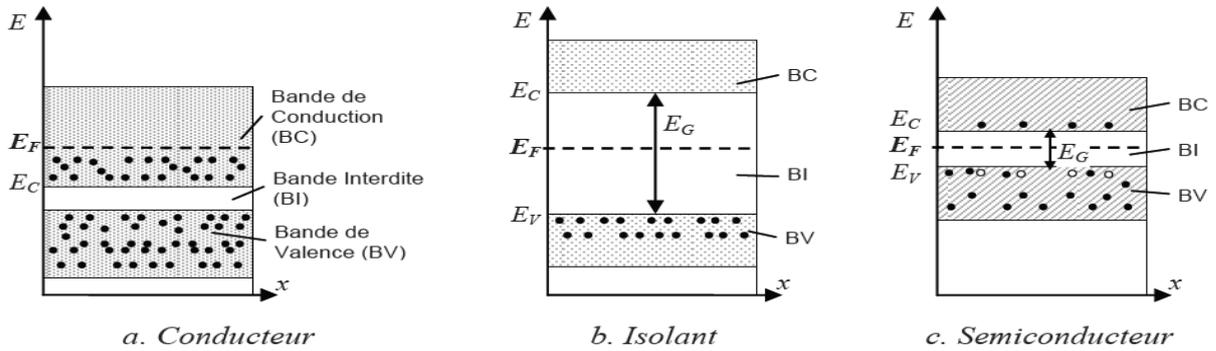


Figure II.1: Diagramme de bandes d'énergie d'un conducteur, d'un isolant et d'un semi-conducteur.

II. PROPRIÉTÉS GÉNÉRALES DES SEMI-CONDUCTEURS :

II.1. Structure du semi-conducteur :

Les semi-conducteurs monoatomiques (le silicium "Si" et le germanium "Ge") ont une structure cristalline, cette structure est la même que celle du diamant. Chaque atome est lié à quatre voisins placés aux sommets d'un tétraèdre par une liaison covalente, ces éléments sont « tétravalents ».

Les semi-conducteurs sont caractérisés par une bande de valence entièrement pleine qui est séparée d'une bande de conduction par une bande interdite ou gap. Si on apporte une énergie thermique ou lumineuse suffisante à un électron, il peut passer de la bande de valence à la bande de conduction avec une probabilité P :

$$P \propto \exp\left(-\frac{\Delta E}{KT}\right) \quad (II.1)$$

ΔE : l'écart en énergie séparant les deux bandes.

T : la température en degré Kelvin.

K : la constante de Boltzmann ; $K = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$.

II.2. Composition chimique :

L'un des critères utilisés dans la classification des semi-conducteurs est la composition chimique.

II.2.1. Semi-conducteurs simples :

Un semi-conducteur simple est constitué d'un seul élément tels que les semi-conducteurs de la colonne IV de la classification périodique par exemple ; le silicium (Si) et le Germanium (Ge).

II.2.2. Semi-conducteurs composés :

Dans cette catégorie, le semi-conducteur est constitué d'au moins de deux types d'atomes différents. Les semi-conducteurs binaires de la classe (II-VI) sont constitués d'un élément de la colonne II et d'un autre élément de la colonne VI de la classification périodique. Les semi-conducteurs de la classe (III-V) sont composés d'un élément de la colonne III et d'un autre élément de la colonne V de la classification périodique. De même avec les semi-conducteurs de la classe (IV-VI) [26].

Exemples :

- **Semi-conducteurs binaires de la classe (II-VI) :** Oxyde de zinc (ZnO).

- **Semi-conducteurs binaires de la classe (III-V) :** Arséniure de gallium (GaAs).

- **Semi-conducteurs binaires de la classe (IV-VI) :** Sulfure de germanium (GeS).

Il existe aussi d'autres types de semi-conducteurs composés de trois atomes différents (ternaires) et même de quatre atomes (quaternaires).

Exemples :

- **Semi-conducteurs ternaires :** Phosphure de gallium-indium (InGaP) et Arséniure-phosphure de gallium (GaAsP).

- **Semi-conducteurs quaternaires :** Phosphure de gallium-indium-aluminium (AlGaInP), Arséniure-phosphure de gallium-aluminium (AlGaAsP) [26].

II.3. Différentes types des semi-conducteurs :

On distingue deux types de semi-conducteurs.

II.3.1. Semi-conducteur intrinsèque :

Un semi-conducteur est dit intrinsèque lorsqu'il est à l'état pur (le silicium et le germanium). Dans ce type de semi-conducteur le nombre d'électrons est égal au nombre de trous.

$$P = n = n_i \quad (II.2)$$

$$n = n_c \cdot \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{KT}\right) \quad (II.3)$$

$$P = n_v \cdot \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{KT}\right) \quad (II.4)$$

Sachant que $np = n_i^2$ (loi d'action de masse) et donc :

$$n_i^2 = n_c n_v \exp\left(-\frac{E_g}{KT}\right) \quad (II.5)$$

$$n_i = \sqrt{n_c n_v} e^{(-E_g/2kT)} \quad (II.6)$$

n_i : la concentration intrinsèque.

p : la densité de trous.

n : la densité des électrons.

n_c : la densité effective d'états des électrons dans la bande de conduction.

n_v : la densité effective d'états des électrons dans la bande de valence.

E_c : l'énergie de la bande de conduction.

E_v : l'énergie de la bande de valence.

E_F : l'énergie de fermi.

E_g : la largeur de la bande d'interdite.

T : la température en degré Kelvin.

K : la constante de Boltzmann ; $K = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$.

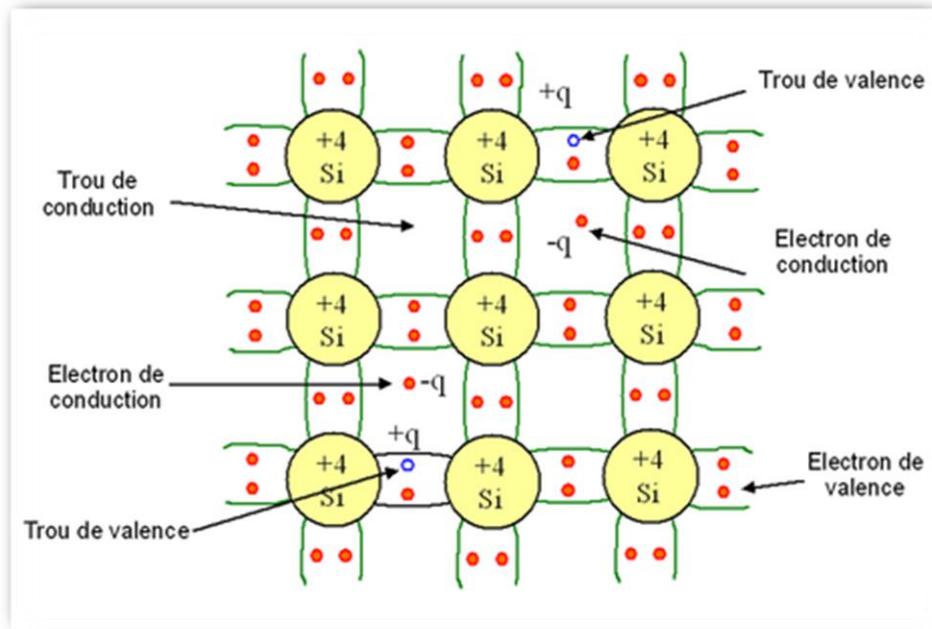


Figure II.2: Semi-conducteur intrinsèque.

II.3.2. Semi-conducteur extrinsèque :

Au départ un semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur intrinsèque, mais à l'équilibre thermodynamique, la concentration en électrons n est différente de la concentration en trous p . Cette différence est obtenue en introduisant dans un semi-conducteur pur de manière intentionnelle une faible concentration d'impuretés de nature contrôlée. Cet ajout est appelé dopage.

Selon la nature des impuretés il existe deux types des semi conducteurs.

a) Semi-conducteur extrinsèque de type N :

Si on introduit un atome d'impureté ayant cinq électrons de valence (phosphore P, arsenic As, antimoine Sb...) dans un semi-conducteur tétravalent tels que Si ou Ge, les quatre électrons de l'impureté participeront aux liaisons avec les voisins et le cinquième restera célibataire.

Dans un semi-conducteur extrinsèque de type n, la concentration en trous est largement négligeable devant celle des électrons : $n \gg p$. Les électrons sont appelés porteurs majoritaires et les trous porteurs minoritaires et l'atome dopant est appelé donneur.

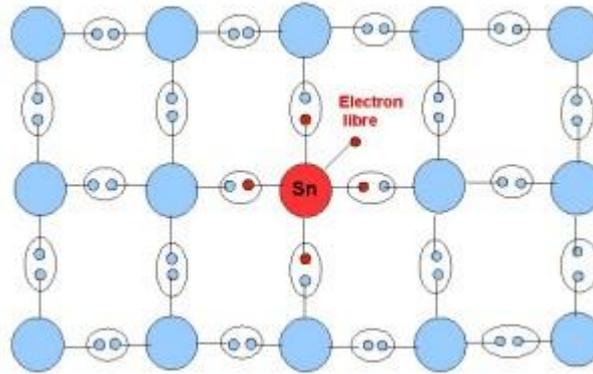


Figure II.3: Semi-conducteur de type N.

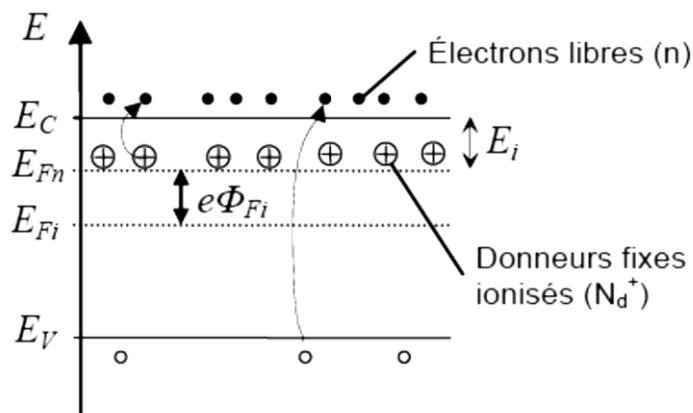


Figure II.4: Diagramme de bande d'énergie pour un semi-conducteur de type N.

b) Semi-conducteur extrinsèque de type P :

Les dopants sont les atomes trivalents de la classification périodique des éléments comme le bore (B) et le gallium (Ga).

Le dopage d'un semi-conducteur, le silicium par exemple par les atomes de bore permet, d'une part la création d'un trou dans la bande de valence et d'autre part l'apparition d'une charge négative excédentaire autour de l'atome de bore.

Dans un semi-conducteur de type p, les porteurs majoritaires sont les trous et les porteurs minoritaires sont les électrons de conduction : $n \ll p$. L'atome dopant est dans ce cas appelé accepteur.

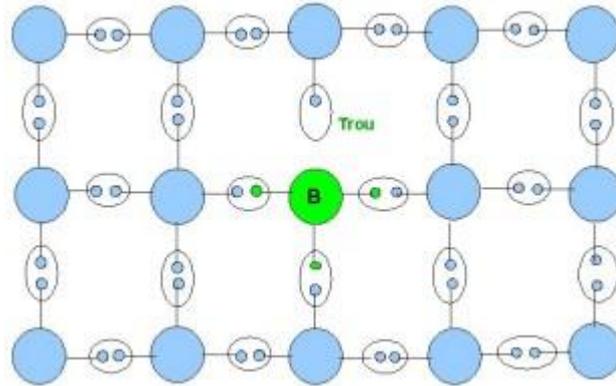


Figure II.5: Semi-conducteur de type P.

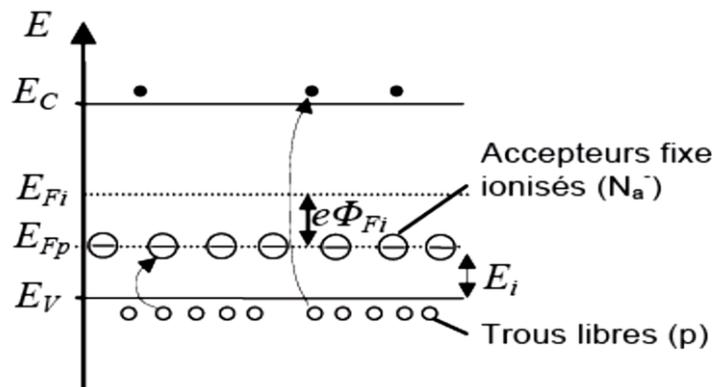


Figure II.6: Diagramme de bande d'énergie pour un semi-conducteur de type P.

II.3.3. Equation de neutralité :

Le matériau semi-conducteur étant globalement neutre, l'équation de la neutralité électrique s'écrit

$$N_A^- + n = p + N_D^+ \tag{II.7}$$

N_A^- : Le nombre d'accepteurs ionisés.

N_D^+ : Le nombre de donneurs ionisés.

N_A et N_D : Sont les densités d'accepteurs et donneurs.

• **Semi-conducteur dopé n:**

$N_A = 0$ et $N_D \gg p \Rightarrow n \approx N_D$: Les électrons sont les porteurs majoritaires.

La densité des donneurs ionisés N_D^+ s'écrit:

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_D}{kT}\right)} \tag{II.8}$$

E_D : Le niveau d'énergie donneur.

- **Semi-conducteur dopé p:**

$N_D = 0$ et $N_A \gg n \Rightarrow p \approx N_A$: Les trous sont les porteurs majoritaires.

La densité d'accepteurs N_A^- s'écrit :

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + \frac{1}{4} \exp\left(\frac{E_A - E_F}{kT}\right)} \quad (II.9)$$

E_A : Le niveau d'énergie accepteur.

II.3.4. Loi d'action de masse :

C'est la loi d'action qui relie, à une température (T), la densité de porteurs (électrons et trous) à la densité intrinsèque du semi-conducteur. Elle s'exprime par:

$$n \cdot p = n_i^2 \quad (II.10)$$

n , p respectivement la concentration de porteurs minoritaires de Semi-conducteurs dopés n et dopés p .

- **Trous dans un semi-conducteur dopé n:**

La concentration des trous dans un semi-conducteur de type n est donnée par :

$$p_n = \frac{n_i^2}{N_D} \quad (II.11)$$

- **Electrons dans un semi-conducteur dopé p:**

La concentration des électrons dans un semi-conducteur de type p est donnée par :

$$n_p = \frac{n_i^2}{N_A} \quad (II.12)$$

II.3.5. Niveau de Fermi :

La position du niveau de Fermi s'obtient à partir de $n = p$:

$$N_c e^{-(E_c - E_{Fi})/KT} = N_v e^{(E_v - E_{Fi})/KT} \quad (II.13)$$

Soit :

$$E_{Fi} = \frac{(E_c + E_v)}{2} + \frac{k_B T}{2} \log \left[\frac{n_v}{n_c} \right] \quad (II.14)$$

Le niveau de fermi d'un système intrinsèque est proche du milieu de la bande interdite

$$E_{Fi} = \frac{(E_c + E_v)}{2} \quad (II.15)$$

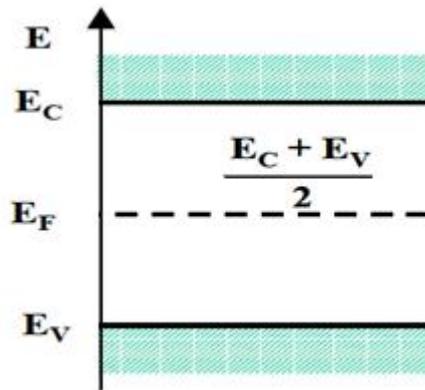


Figure II.7: Position du niveau de fermi intrinsèque.

Dns un semi-conducteur de type N : $n = N_D$

$$N_D = N_c \exp \left(-\frac{E_c - E_F}{KT} \right) \quad (II.16)$$

Le niveau de Fermi se décale donc progressivement du milieu de la bande interdite vers la bande de conduction lorsque le dopage de type N augmente :

$$E_F = E_i + KTLn \frac{N_D}{N_i} \quad (II.17)$$

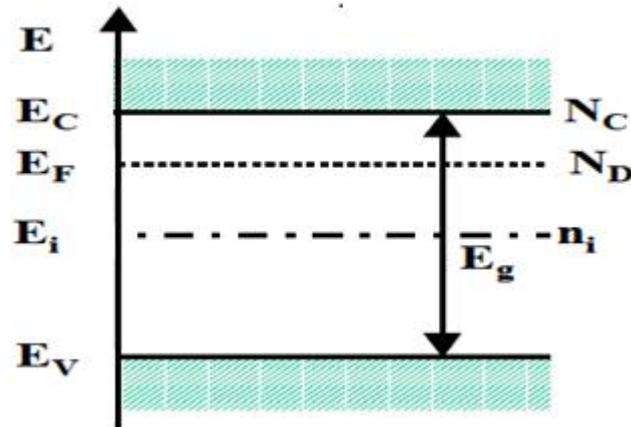


Figure II.8: Position du niveau de Fermi d'un semi-conducteur extrinsèque de type N.

Dans le cas où le matériau est de type p, la concentration de dopant accepteur $N_A = p$.

$$N_A = N_V \exp\left(\frac{E_F - E_V}{KT}\right) \quad (\text{II.18})$$

D'où l'on déduit aisément :

$$E_F = E_V + KTLn \frac{N_V}{N_A} \quad (\text{II.19})$$

Dans le cas d'un semi-conducteur dopé de type p, le niveau de Fermi se trouvera d'autant plus près du sommet de la bande de valence, que le matériau sera plus dopé.

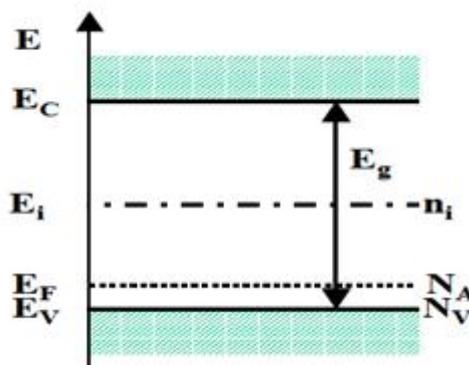


Figure II.9: Position du niveau de Fermi des dopants dans un semi-conducteur de type P.

II.3.6. Gap d'énergie :

Pour un cristal semi-conducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie E et un vecteur d'onde \vec{K} . Dans l'espace réciproque, si ce maximum et ce minimum correspondent $\overline{\Delta K} = \vec{0}$: on dit que le semi-conducteur est à gap direct.

Si au contraire, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de \vec{K} différents $\overline{\Delta K} \neq \vec{0}$: on dit que le semi-conducteur est à gap indirect; c'est le cas du silicium et du germanium. [27]

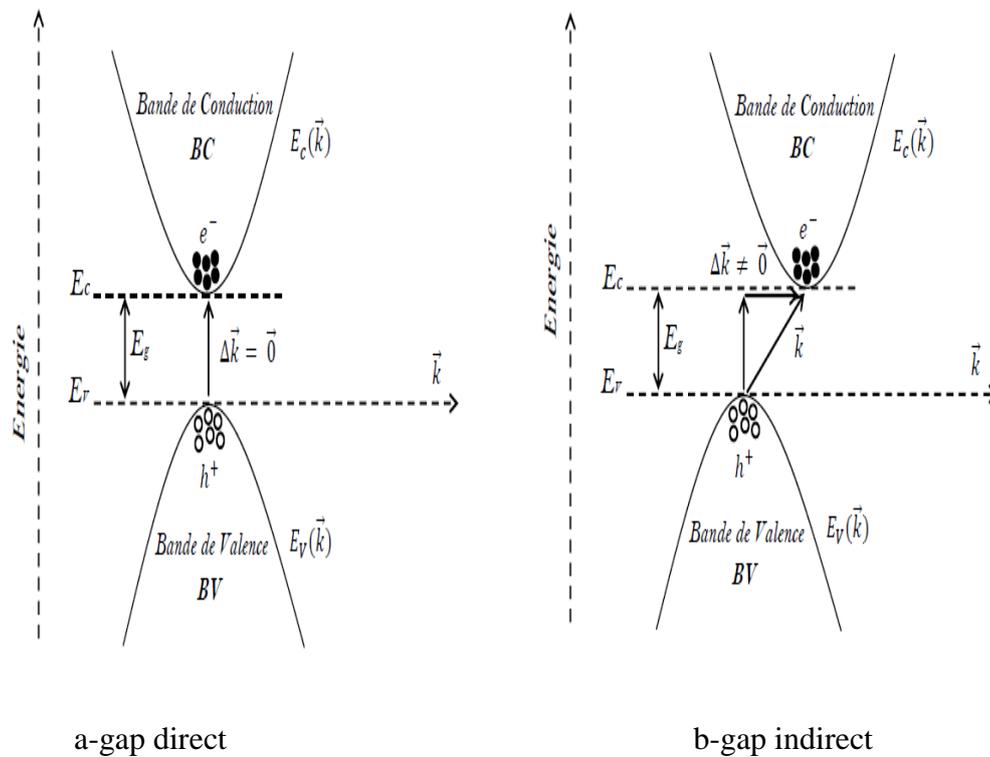


Figure II.10: Gap d'énergie. [26]

II.3.7. La jonction PN :

La juxtaposition de deux semi-conducteurs d'un même monocristal, l'un de type p (anode) et l'autre de type n (cathode) crée une jonction PN

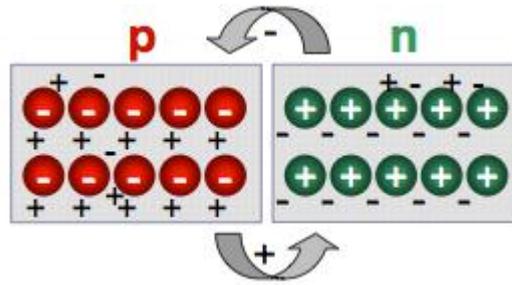


Figure II.11: Jonction PN.

Les électrons de la région de type-n vont diffuser vers la région de type-p. La région de type-n devient positive à cause du manque d'électrons et la région du type-p devient négative à cause de l'excès d'électrons.

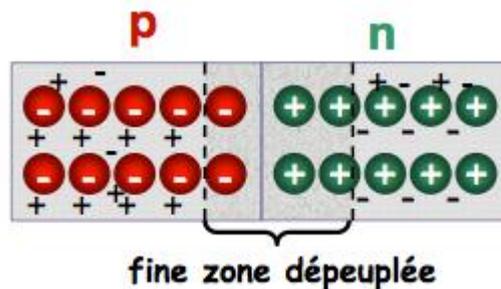


Figure II.12: Zone de déplétion dans une jonction PN.

La couche de déplétion constitue une région isolante et la jonction ressemble à un condensateur chargé.

La jonction PN est un dispositif simple utilisé sous plusieurs formes dans l'électronique moderne : diode pour le redressement, cellule solaire, photodiodes ... ou au sein d'autres dispositifs plus complexes comme le transistor MOS et le bipolaire.

III. STRUCTURE ET APPLICATIONS DU SILICIUM :

Découvert en 1823 par le chimiste suédois Jöns Jakob Berzelius. Le nom du silicium dérive du latin *silix*, ce qui signifie cailloux ou silex.

Le silicium est l'élément chimique de symbole Si et de numéro atomique 14. C'est un élément de la famille des cristallogènes. Le silicium est l'élément le plus abondant sur la terre après l'oxygène (27,6%). Il n'existe pas à l'état libre mais sous forme de composés : sous forme de dioxyde, la silice (dans le sable, le quartz, la cristobalite, etc....) ou de silicates.

Nombre atomique	14
Groupe	14
Période	3
Densité g/cm^3	2.3212
Densité atomique at/cm^3	4.977E+22
Rayon atomique $/pm$	117.6
Nombre d'oxydation	-4 +2 +4
Electronégativité	1.9
Masse atomique	28,0855 u \pm 0,0003 u

Tableau II.1: Quelques propriétés du silicium.

Le silicium cristallise dans la structure diamant. Le réseau est cubique à faces centrées (F) et La coordinence du silicium est 4 chaque atome est entouré par 4 voisins aux sommets d'un tétraèdre régulier. les coordonnées des atomes du motif sont Si (0, 0,0) et Si (1/2,1/2,1/2) et les trois atomes les plus proches à l'atome de l'origine :

- l'atome de coordonnées (1/2, 1/2, 0) qui se trouve au centre du plan (xoy).
- l'atome de coordonnées (0, 1/2, 1/2) qui se trouve au centre du plan (yoz).
- l'atome de coordonnées (1/2, 0, 1/2) qui se trouve au centre du plan (xoz).

Le groupe ponctuel **du silicium** est celui du cfc : ***m3m***

Groupe ponctuel + translation = groupe d'espace

Le groupe d'espace du silicium est : Fd3m.

III.1. Différents types du silicium :

Le silicium est le matériau semi-conducteur le plus utilisé pour la fabrication de dispositifs microélectroniques ainsi que des cellules photovoltaïques.

III.1.1. Le silicium monocristallin :

La structure cristallographique du silicium monocristallin est une structure cubique diamant dans laquelle deux réseaux cubiques à faces centrées s'interpénètrent. Chaque atome d'un des réseaux est entouré par 4 proches voisins équidistants de l'autre réseau formant un tétraèdre. Les liaisons entre les atomes sont de type covalent avec une distance interatomique de 2.35 Å et un paramètre de maille $a=5.43$ Å. La bande interdite (gap), séparant la bande de valence de la bande de conduction est égale a $E_g=1.12$ eV à température ambiante. Il correspond à un gap indirect. Il est élaboré à

partir du procédé Czochralski ou par la purification par fusion de zone. Ces procédés sont réalisés à très haute température, en phase liquide. A la fin du procédé, le produit se présente sous forme de lingots de silicium pur monocristallin. Ces lingots sont ensuite découpés en plaquettes (wafer) de 300 μm d'épaisseur. Cette épaisseur est nécessaire pour assurer une stabilité mécanique. L'étape de découpage entraîne une perte importante de matériau, jusqu'à 50 %. En plus de la méthode d'élaboration, ces pertes rendent le matériau très coûteux [28].

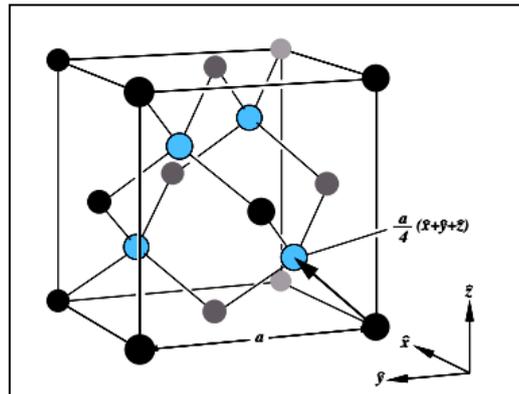


Figure II.13: Structure du silicium (diamant).

III.1.2. Le silicium poly-cristallin :

La structure du silicium poly-cristallin se situe entre celle du silicium monocristallin et celle du silicium amorphe. Elle est constituée de multiples petits cristaux de tailles et de formes différentes, dont la taille varie de quelques centaines de nanomètres à quelques millimètres, séparées entre eux par des joints de grains.

Le silicium poly-cristallin est fabriqué à partir des résidus provenant de la fabrication du silicium monocristallin. Le procédé de cristallisation consiste en la refonte de ces résidus suivie d'une resolidification unidirectionnelle sous forme de structure colonnaire poly-cristalline à gros grains, dont la taille est comprise entre 1 mm et 10 cm. Il se présente aussi sous forme de lingot qui nécessite une étape de découpe en fines plaquettes. Malgré sa pureté moindre par rapport au silicium monocristallin, ce matériau est le plus utilisé dans l'industrie photovoltaïque grâce à son coût avantageux et son efficacité [28].

III.1.3. Le silicium amorphe :

Le silicium amorphe ayant une structure désordonnée, non cristallisée et vitreuse. Il peut être déposé en couche mince à basse température sur un grand nombre de substrat.

Le silicium amorphe est obtenu soit par voie physique par pulvérisation ou par évaporation d'une cible ou par voie chimique (CVD) à partir de précurseurs gazeux. Nous précisons, la différence de structure entre les deux types de dépôt qui réside sur la présence d'atomes d'hydrogène dans le cas du silicium CVD, passivant les nombreux défauts de la phase amorphe tels que les liaisons pendantes. Il a été montré, il y a 30 ans de cela, que le silicium amorphe hydrogène présente des propriétés optiques plus intéressantes que le silicium monocristallin. En effet, le silicium amorphe hydrogène absorbe la lumière visible 50 fois plus que le silicium monocristallin ce qui favorise la réduction de son épaisseur à quelques microns pour les applications solaires [28].

III.2. Applications :

III.2.1. En automobile et aéronautique :

La principale utilisation du silicium en tant que corps simple est comme élément d'alliage avec l'aluminium. Les alliages Aluminium-Silicium sont utilisés pour l'élaboration de pièces moulées, en particulier pour l'automobile (par exemple jantes en alliage) et l'aéronautique (par exemple éléments de moteurs électriques embarqués). Les alliages Aluminium-Silicium représentent à peu près 55 % de la consommation mondiale de silicium [29].

III.2.2. Photovoltaïque :

Le silicium est aussi l'élément principal utilisé pour la fabrication de cellules solaires photovoltaïques. Celles-ci sont alors montées en panneaux solaires pour la génération d'électricité.

III.2.3. Composantes électroniques :

Les propriétés de semi-conducteur du silicium ont permis la création de la deuxième génération de transistors, puis les circuits intégrés (les « puces »). C'est aujourd'hui encore l'un des éléments essentiels pour l'électronique, notamment grâce à la capacité technologique actuelle permettant d'obtenir du silicium pur à 99 % [29].

III.2.4. Synthèses des silicones :

La synthèse des silicones représente également une utilisation importante du silicium (environ 40% de la consommation). Ces polymères $[(CH_3)_2SiO]$ sont utilisés dans des mastics pour joint, des graisses résistantes à l'eau ou conductrices de la chaleur, les poudres lessiviellles ou les shampoings conditionneurs, etc [29].

CONCLUSION :

Dans ce chapitre consacré aux généralités sur les semi-conducteurs, nous avons donné les principales propriétés structurales et électriques des semi-conducteurs. Nous avons énuméré les applications du silicium car il est le matériau semi-conducteur le plus utilisé pour la fabrication de dispositifs microélectroniques ainsi que des cellules photovoltaïques.

*CHAPITRE III:
RÉSULTATS DES
SIMULATIONS*

INTRODUCTION :

Dans ce chapitre nous allons présenter les résultats des simulations de notre étude qui est la détermination des pouvoirs d'arrêt, les variations des moments des distributions des différents ions, les pertes d'énergie et le taux d'érosion sous bombardement ionique dans une cible de Silicium.

A cet effet, nous avons utilisé un outil de calcul de type Monte-Carlo en libre accès : le logiciel **SRIM**.

Après présentation du logiciel de calcul, différentes simulations (**SRIM, version 2008**) sont effectuées afin de déterminer l'influence des différents paramètres d'implantation de cette étude.

I. PRÉSENTATION DU LOGICIEL SRIM :

Plusieurs logiciels de simulation numérique sont utilisés pour calculer les phénomènes cinétiques associés aux pertes d'énergie des ions. **SRIM** (The **S**topping and **R**ange of **I**ons in **M**atter) est un ensemble de programmes qui permettent de calculer l'arrêt et l'étendue de pénétration des ions dans la matière (jusqu'à **2 GeV/amu** (=atomic mass unity)). Ce programme utilise les théories de la mécanique quantique pour décrire la collision ion-atome (en supposant qu'un atome en mouvement est un ion, et que tous les atomes de la cible sont des atomes).

Dans ce programme, développé par **Ziegler** et **Biersack**, le matériau est supposé isotrope. Les calculs sont effectués selon une simulation de type **Monte-Carlo**, consistant à suivre individuellement un grand nombre d'ions au hasard des collisions. Un ion incident a une trajectoire rectiligne avec des pertes d'énergies électroniques, puis change de direction sous l'influence des collisions nucléaires. Lorsque l'énergie de l'ion est inférieure à son énergie de déplacement E_d , il s'arrête et il y a dissipation d'énergie sous forme de phonons.

Ce programme permet de calculer différents paramètres liés à l'implantation d'ions dans une cible, entre autres:

- **La distribution spatiale des ions implantés** (profondeur moyenne, dispersion, distribution latérale).
- **Les distributions des pertes d'énergies électronique et nucléaire en fonction de la profondeur** (ce sont les distributions moyennes pour un ion, elles sont exprimées en $eV/\text{Å}$).
- **La distribution des lacunes (atomes déplacés)** calculée à partir du modèle de Kinchin-Pease modifié.

Cependant, il existe certaines limitations à ce programme dont il faut tenir compte :

- la cible ne garde aucun "effet mémoire" d'une particule sur l'autre : ainsi, la distribution de défauts et le déplacement des atomes de recul ne tiennent pas compte des précédents défauts calculés, ce qui ne permet pas de déterminer un taux de diffusion d'une couche à l'autre.
- Le calcul ne tient pas compte d'éventuels effets chimiques qui peuvent devenir importants lorsque l'énergie de l'ion incident est de l'ordre de l'électron volt en fin de parcours.
- La simulation ne tient pas compte non plus des effets liés à l'élévation de température due à l'irradiation [30].

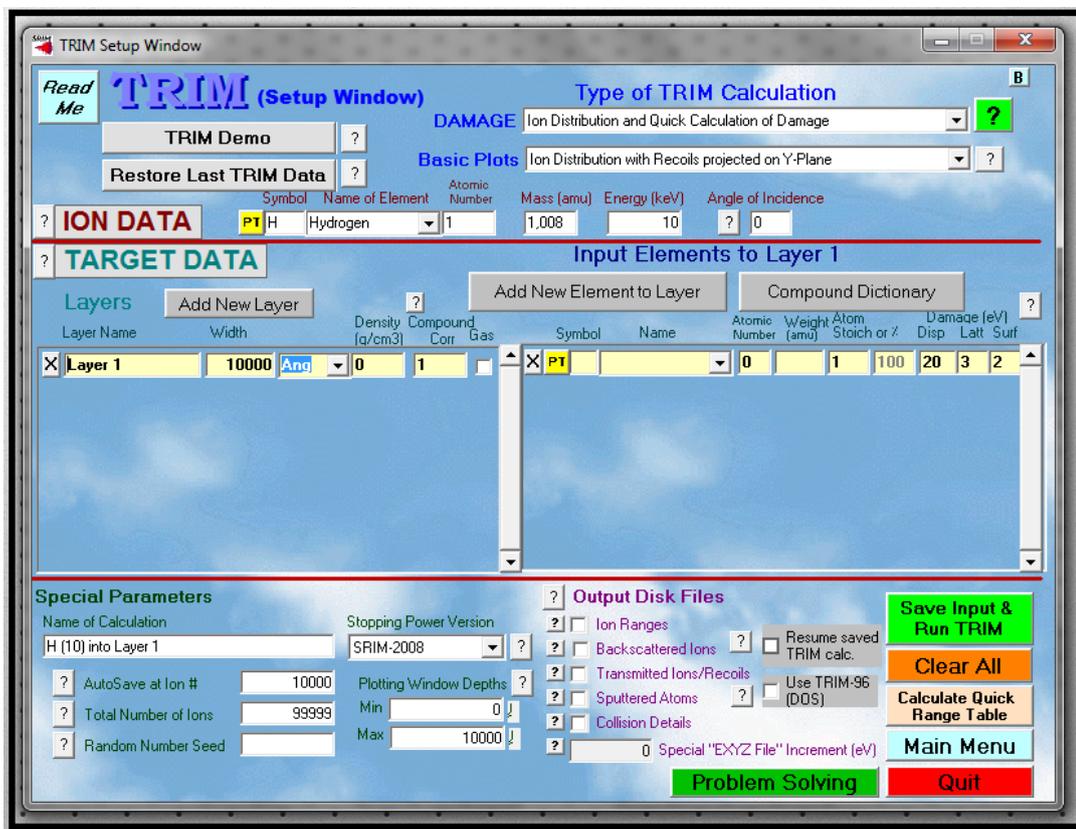


Figure III. 1: Présentation de l'interface du logiciel SRIM.

II. DÉTERMINATION DES POUVOIRS D'ARRÊT ET DES MOMENTS DES DISTRIBUTIONS DES IONS IMPLANTÉS :

Dans cette partie nous allons présenter les résultats de simulation des différents pouvoirs d'arrêt (électronique et nucléaire) des systèmes étudiés ainsi que les différents moments des distributions générées par le logiciel SRIM.

Les tables générées par SRIM pour les systèmes (B, O, Si, Ge et Xe) dans une cible de silicium, avec une énergie comprise entre [5 et 200 keV] sont données dans l'annexe.

II.1. Effets de l'énergie et de la masse de l'ion incident :

Pour étudier l'effet de l'énergie et de la masse sur les pouvoirs d'arrêt et les moments de distribution nous avons choisi les ions Bore, Oxygène, Silicium, Germanium et Xénon dans la cible de silicium.

II.1.1. Effets de l'énergie de l'ion incident :

Pour étudier l'effet de l'énergie sur les pouvoirs d'arrêt et les moments des distributions des ions (B, O, Si, Ge et Xe) sur la cible de silicium, nous avons fait varier l'énergie de ces ions de [50 à 200 keV].

L'énergie de l'ion B (keV)	Pouvoir d'arrêt électronique (eV/Å)	Pouvoir d'arrêt nucléaire (eV/Å)	Parcours projeté R_p (Å)	Déviations longitudinale ΔR_p (Å)	Déviations latérale σ_p (Å)
50	2.292E+1	4.375	1746	642	557
100	2.900E+1	2.965	3180	886	837
150	3.328E+1	2.298	4519	1050	1047
200	3.785E+1	1.898	5749	1169	1215

Tableau III.1: Regroupe les résultats du système B dans Si.

L'énergie de l'ion O (keV)	Pouvoir d'arrêt électronique (eV/Å)	Pouvoir d'arrêt nucléaire (eV/Å)	Parcours projeté R_p (Å)	Déviations longitudinale ΔR_p (Å)	Déviations latérale σ_p (Å)
50	2.308 E+1	1.152 E+1	1208	491	387
100	3.013 E+1	0.835 E+1	2324	759	645
150	3.514 E+1	0.668E+1	3398	956	858
200	3.978 E+1	0.563E+1	4417	1109	1039

Tableau III.2: Regroupe les résultats du système O dans Si.

L'énergie de l'ion Si (keV)	Pouvoir d'arrêt électronique (eV/Å)	Pouvoir d'arrêt nucléaire (eV/Å)	Parcours projeté R_p (Å)	Déviati on longitudinale ΔR_p (Å)	Déviati on latérale σ_p (Å)
50	2.384 E+1	3.438 E+1	713	287	208
100	3.563 E+1	2.783 E+1	1375	476	363
150	4.076 E+1	2.356 E+1	2036	632	500
200	4.398 E+1	2.058 E+1	2709	773	629

Tableau III.3: Regroupe les résultats du système Si dans Si.

L'énergie de l'ion Ge (keV)	Pouvoir d'arrêt électronique (eV/Å)	Pouvoir d'arrêt nucléaire (eV/Å)	Parcours projeté R_p (Å)	Déviati on longitudinale ΔR_p (Å)	Déviati on latérale σ_p (Å)
50	1.223 E+1	1.182 E+2	399	129	99
100	1.730 E+1	1.172 E+2	716	215	164
150	2.112 E+1	1.121 E+2	1038	297	226
200	2.421 E+1	1.065 E+2	1369	377	287

Tableau III.4: Regroupe les résultats du système Ge dans Si.

L'énergie de l'ion Xe (keV)	Pouvoir d'arrêt électronique (eV/Å)	Pouvoir d'arrêt nucléaire (eV/Å)	Parcours projeté R_p (Å)	Déviati on longitudinale ΔR_p (Å)	Déviati on latérale σ_p (Å)
50	2.056E+1	1.876 E+2	315	83	67
100	2.908 E+1	2.069 E+2	512	125	103
150	3.561 E+1	2.126 E+2	697	163	134
200	4.112 E+1	2.134 E+2	877	198	164

Tableau III.5: Regroupe les résultats du système Xe dans Si.

La figure (III.2) regroupe les pouvoirs d'arrêt électronique des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans la cible de Si dans l'intervalle d'énergie de [50 à 200 keV].

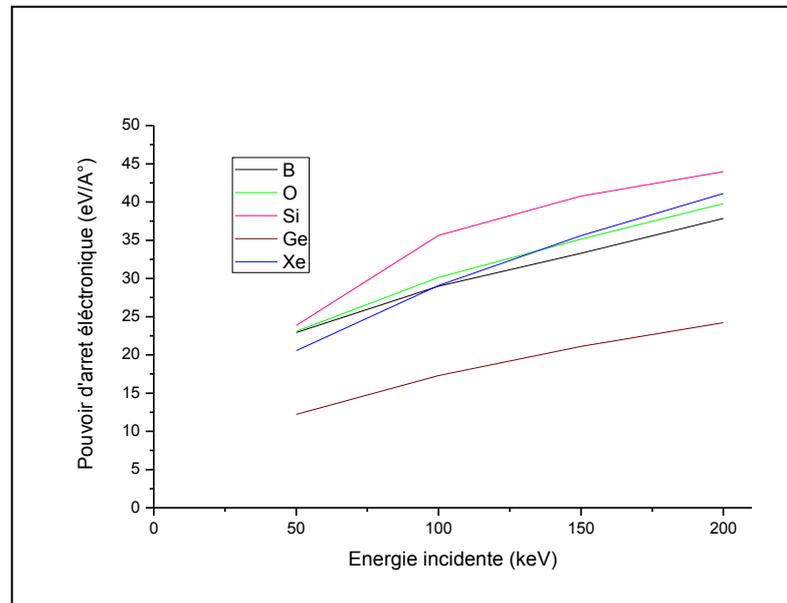


Figure III.2: L'évolution des pouvoirs d'arrêt électronique des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de l'énergie dans l'intervalle [50 à 200 keV].

Commentaire :

On constate une croissance presque linéaire du pouvoir d'arrêt électronique en fonction de l'énergie de l'ion incident, dans l'intervalle d'énergie de [50-200keV] pour les cinq systèmes.

Ceci est en accord avec l'évolution linéaire du pouvoir d'arrêt électronique réduit donné par la théorie L.S.S et exprimé en fonction des paramètres réduits (ε et ρ).

La figure (III.3) regroupe les pouvoirs d'arrêt nucléaire des ions (^{11}B , ^{16}O , ^{28}Si , ^{74}Ge et ^{132}Xe) dans la cible de S dans l'intervalle d'énergie de [50 à 200 keV].

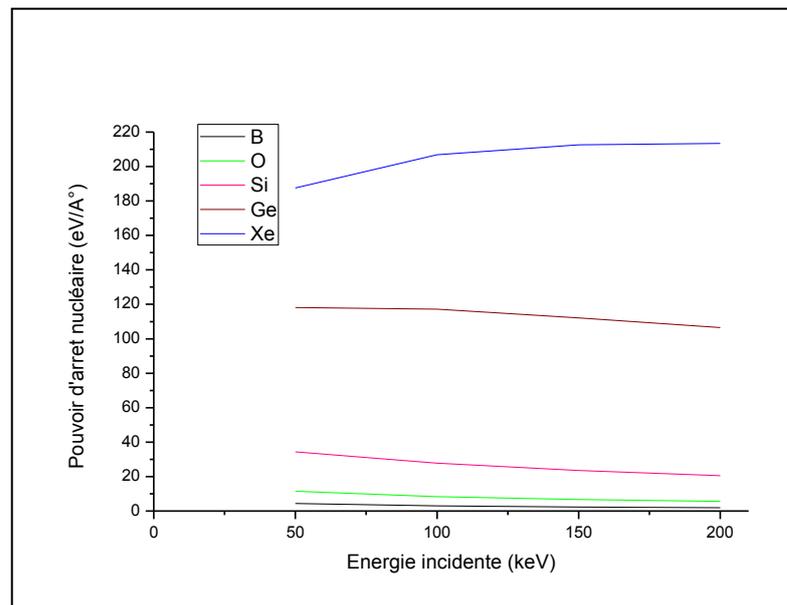


Figure III.3: L'évolution des pouvoirs d'arrêt nucléaire des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de l'énergie dans l'intervalle [50 à 200 keV].

Commentaire :

La courbe montre que le pouvoir d'arrêt nucléaire reste sensiblement constant dans l'intervalle d'énergie considéré pour un ion donné (B, O, Si, Ge ou Xe), on remarque que le pouvoir d'arrêt nucléaire augmente lorsque la masse de l'ion incident augmente.

La figure (III.4) regroupe les différents moments des distributions des des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans la cible de Si dans l'intervalle d'énergie de [50 à 200 keV].

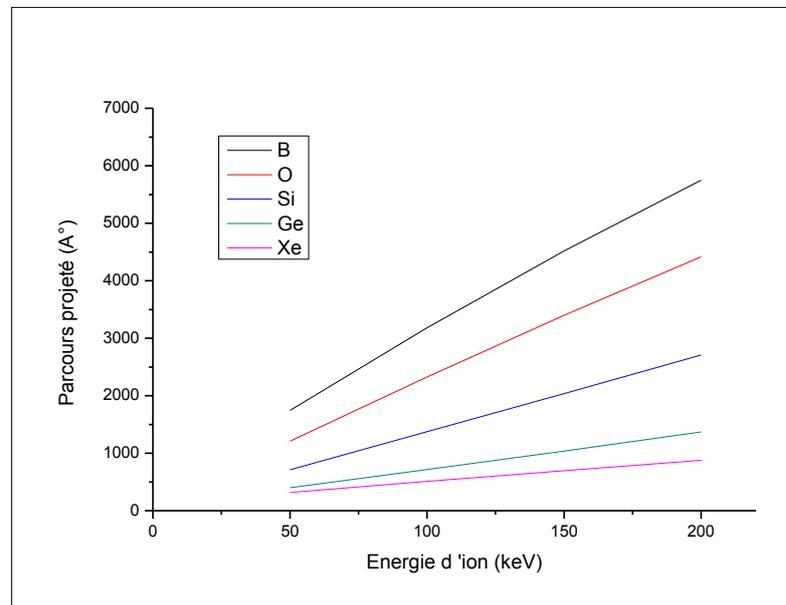


Figure III.4.a: L'évolution du parcours projeté des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de l'énergie dans l'intervalle [50 à 200 keV].

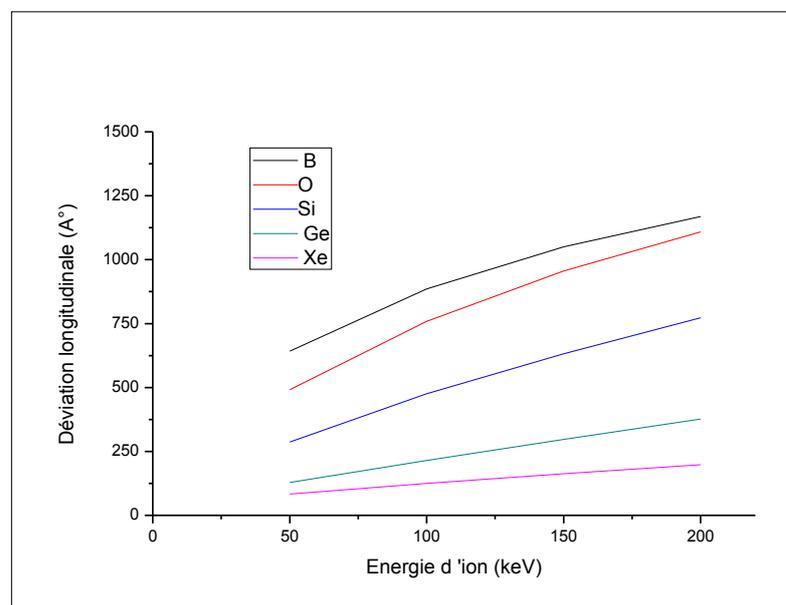


Figure III.4.b: L'évolution de la déviation longitudinale des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de l'énergie dans l'intervalle [50 à 200 keV].

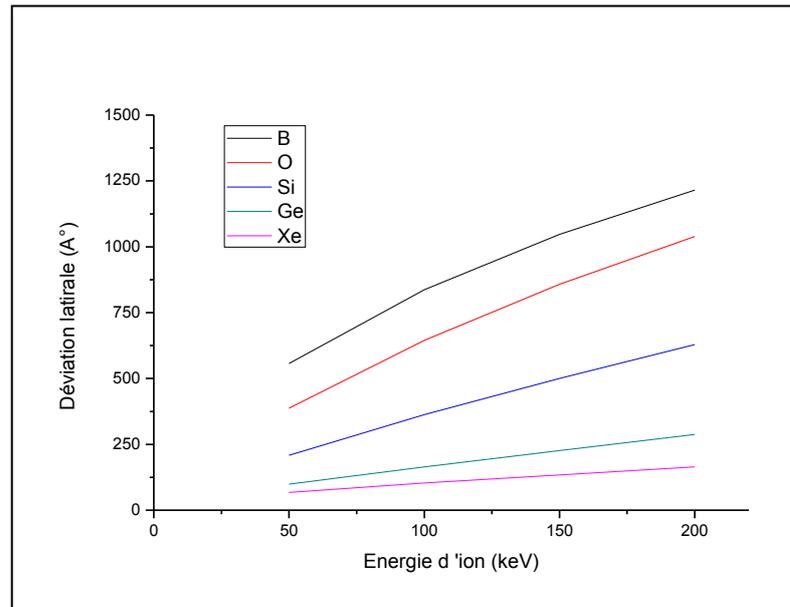


Figure III.4.c: L'évolution de la déviation latérale des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de l'énergie dans l'intervalle [50 à 200 keV].

Commentaire :

Les courbes qui donnent les variations des moments R_p , ΔR_p et σ_p des distributions des ions incidents B, O, Si, Ge et Xe dans le Silicium dans l'intervalle d'énergie [50 à 200 keV] suivent la même tendance soit une évolution pratiquement linéaire ; la variation de la masse de l'ion garde la même évolution ceci note de l'effet linéaire de l'énergie et de la masse sur les moments.

II.1.2. Effet de la masse de l'ion incident :

Pour étudier l'effet de la masse sur les pouvoirs d'arrêt et les moments des distributions sur la cible de silicium, nous avons fixé l'énergie incidente à 150 keV et nous avons fait varier le paramètre de masse de l'ion.

Les ions	Pouvoir d'arrêt électronique (eV/Å)	Pouvoir d'arrêt nucléaire (eV/Å)	Pouvoir d'arrêt global	Parcours projeté R_p (Å)	Déviaton longitudinale ΔR_p (Å)	Déviaton latérale σ_p (Å)
B	3.328E+1	2.298	35.58	4519	1050	1047
O	3.514 E+1	0.668E+1	41.82	3398	956	858
Si	4.076 E+1	2.356 E+1	64.32	2036	632	500
Ge	2.112 E+1	1.121 E+2	133.22	1038	297	226
Xe	3.561 E+1	2.126 E+2	248.21	697	163	134

Tableau III.6: Regroupe les résultats du système Bore, Oxygène, Silicium, Germanium et Xénon dans le Si à 150 keV.

La figure (III.5) regroupe les différents pouvoirs d'arrêt des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans la cible de Si à une énergie de 150 keV.

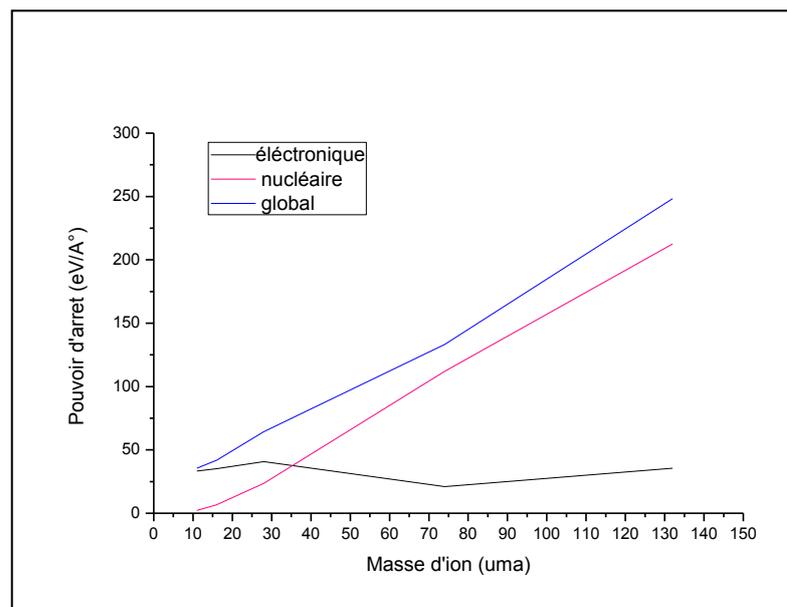


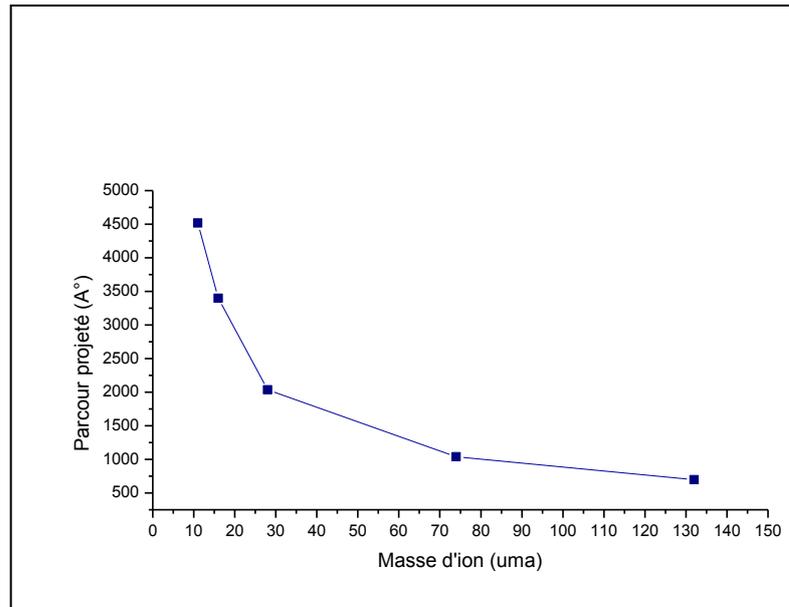
Figure III. 5: L'évolution des pouvoirs d'arrêt des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans une cible de Si en fonction de la masse de ces ions à une énergie de 150 keV.

Commentaire :

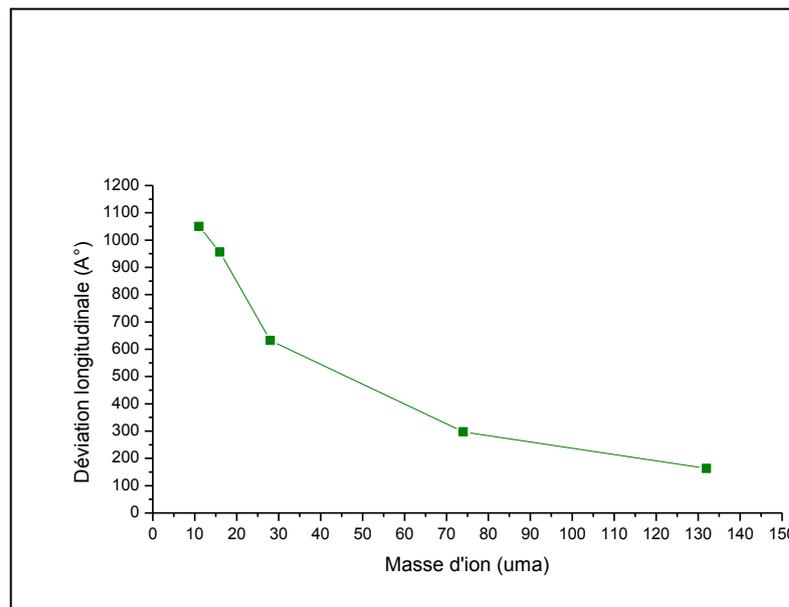
On observe que le pouvoir d'arrêt global et le pouvoir d'arrêt nucléaire augmentent en fonction de la masse de l'ion incident pour la cible du silicium à une énergie de 150 keV (cette variation est presque linéaire), les deux courbes sont presque parallèles ce qui signifie que le pouvoir d'arrêt électronique est relativement constant bien qu'il varie entre 20 eV/Å pour le Ge à 40 eV/Å pour le

Si. Mais ces valeurs restent très inférieures à celle des pouvoirs d'arrêt nucléaires pour les ions de masses atomiques supérieures à 70 uma. Les pouvoirs d'arrêt électroniques peuvent être négligés en 1^{ère} approximation pour les systèmes lourds.

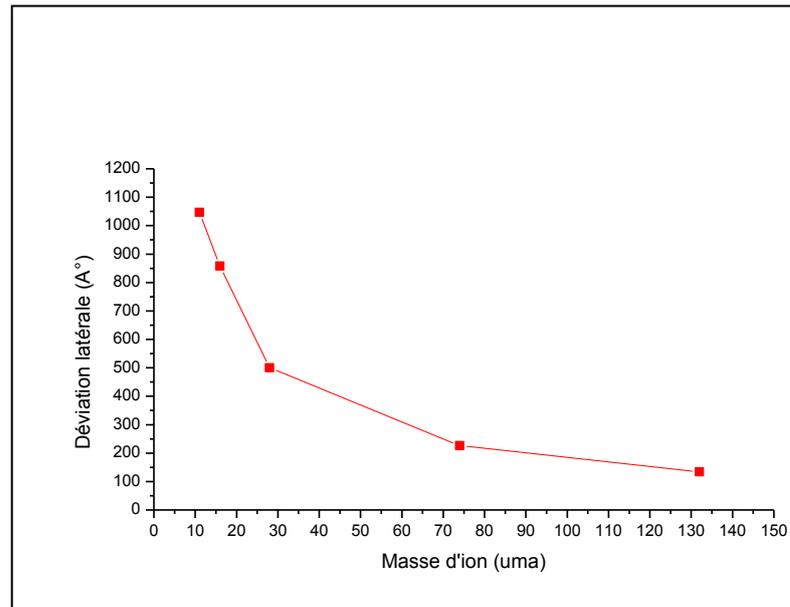
La figure (III.6) regroupe les différents moments des distributions des ions (B, O, Si, Ge, Xe) dans la cible de Si avec une énergie de 150 keV.



a)



b)



c)

Figure III.6: L'évolution des moments de distribution (a) R_p , b) ΔR_p , c) σ_p) pour des ions incidents différents à une énergie de 150 keV dans la cible de silicium.

Commentaire :

Ces courbes qui donnent les variations des moments R_p , ΔR_p et σ_p des distributions des ions incidents B, O, Si, Ge et Xe en fonction de la masse de ces ions dans une cible de Silicium à 150 keV suivent la même évolution.

Pour ces courbes on a une décroissance exponentielle ceci explique que l'ion incident subit un freinage et un ralentissement dans son parcours. La dispersion des distributions des ions implantés est d'autant plus élevée que l'ion incident est léger.

III. DÉTERMINATION DES PERTES D'ÉNERGIE DES IONS IMPLANTÉS :

Dans cette partie, nous allons présenter et discuter les différentes pertes d'énergie des ions dans les semi-conducteurs (phonons, ionisation et énergie absorbée) en fonction de divers paramètres (énergie, masse...). Donc nous avons fixé la cible qui est un semi-conducteur monoatomique du silicium cristallin ^{28}Si .

III.1. Effet de l'énergie de l'ion incident :

Ce paragraphe est consacré à l'étude de l'effet de l'énergie de l'ion incident sur les différentes distributions des pertes d'énergie électronique et nucléaires de la cible. Pour cela nous avons fixé les paramètres d'implantation comme suit : Des ions d'Oxygène ^{16}O implantés dans une cible de silicium cristallin ^{28}Si avec des énergies variant de 50 keV à 200 keV.

Distribution des parcours projetés

La figure (III.7) présente la distribution des ions oxygène ^{16}O implantés dans le Silicium avec des énergies variant de 50 keV à 200 keV.

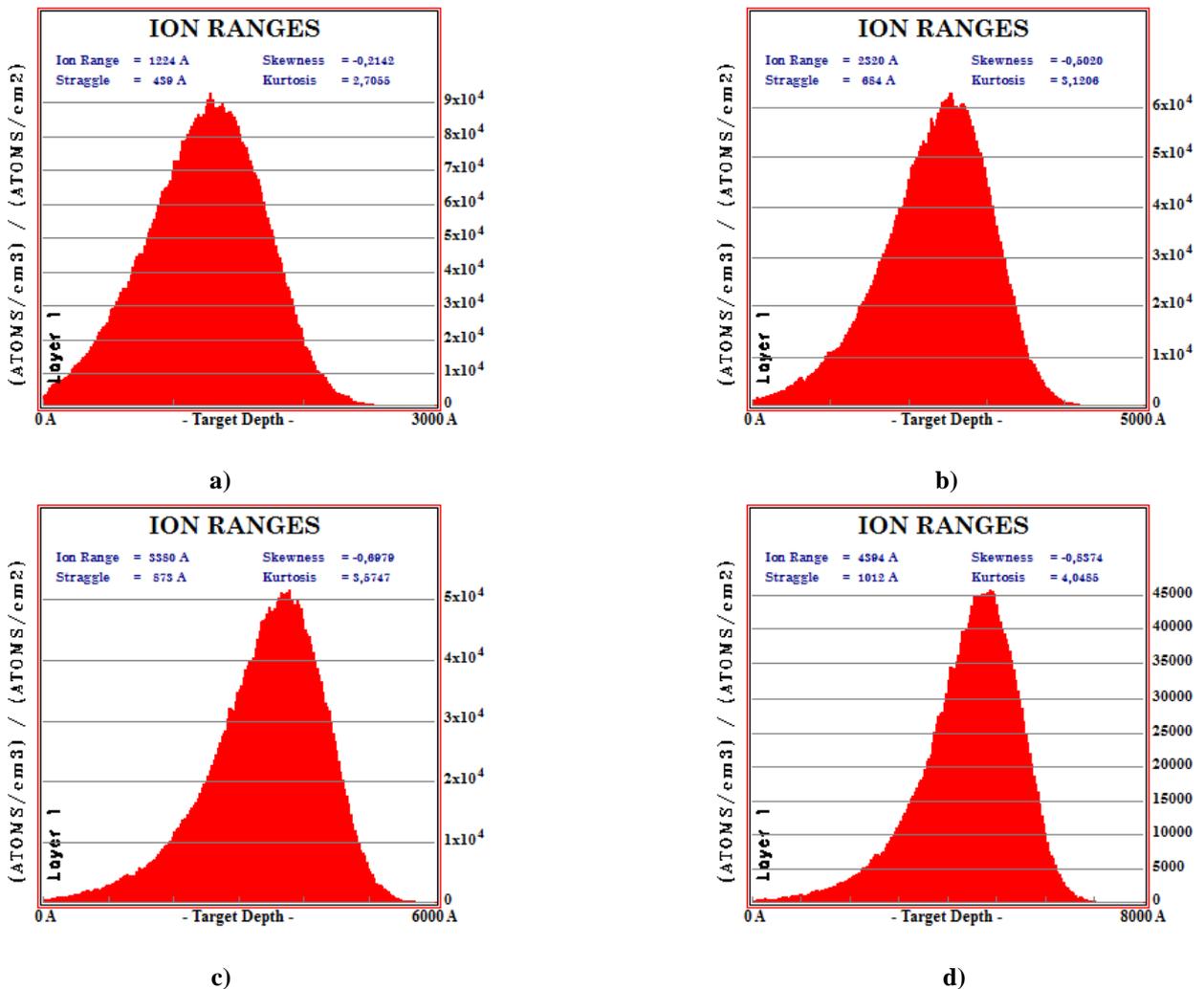


Figure III.7: Distribution des ions oxygène implantés dans le Si pour différentes énergies :

a) 50 keV , b) 100 keV , c) 150 keV , d) 200 keV

Commentaire :

Toutes les distributions d'oxygène implanté dans le silicium pour différentes énergies ont une distribution presque en cloche. Donc une gaussienne peut être considérée une bonne approximation de ces distributions.

Distribution de l'énergie d'ionisation

La figure (III.8) regroupe la distribution d'énergie d'ionisation des ions incidents et des atomes de recoils pour les systèmes précédents.

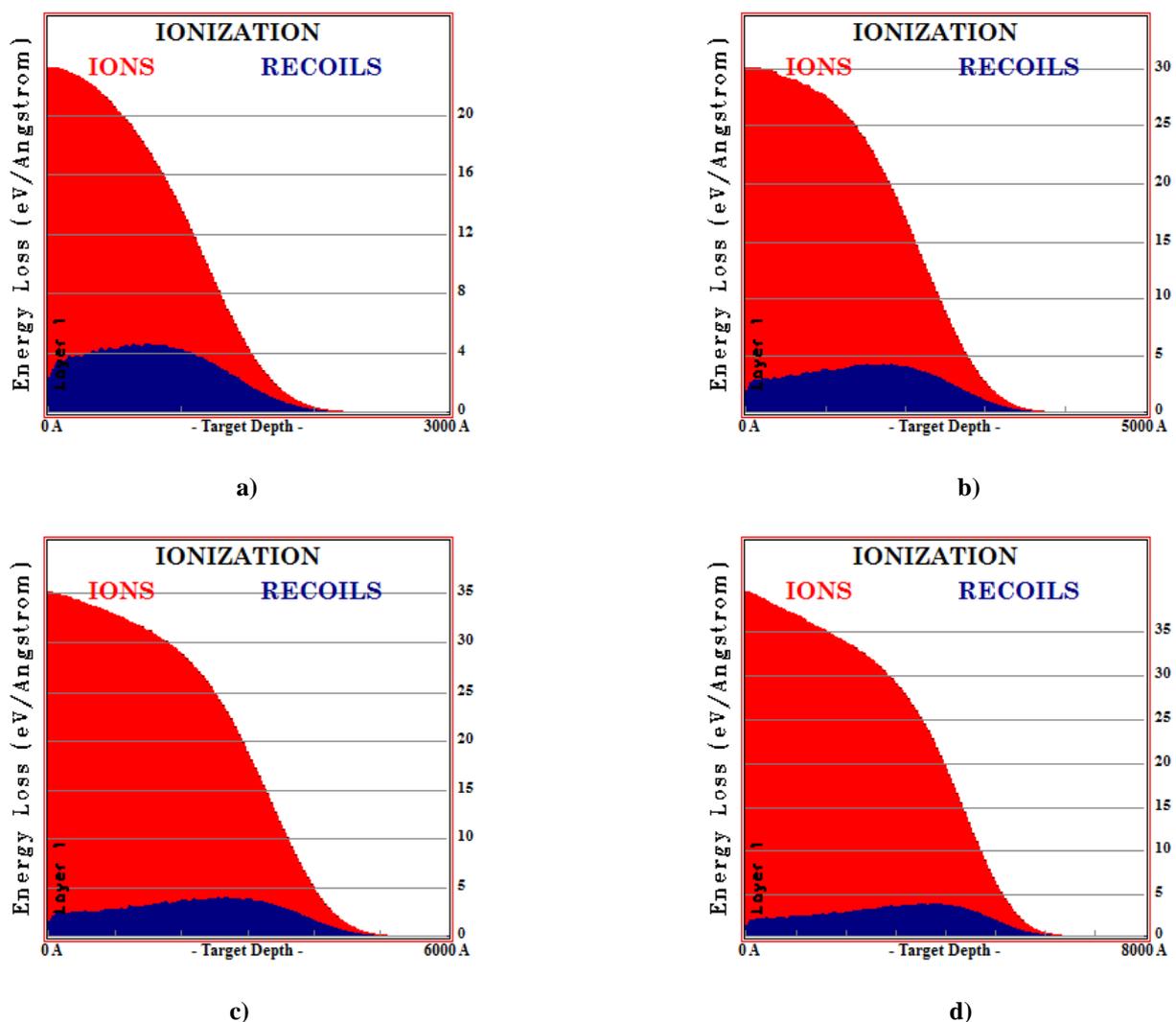


Figure III.8: La distribution de l'énergie d'ionisation des ions incidents (en rouge) et des atomes de recoils (en bleu) pour le système O→Si pour des différentes énergies d'ions incidents :

a) 50 keV , b) 100 keV , c) 150 keV , d) 200 keV

Commentaire :

L'énergie totale perdue en collisions électroniques par les ions incidents et atomes de reculs appelée énergie d'ionisation est de : 26.4 keV pour a), 45 keV pour b), 87.5 keV pour c) et 120 keV pour d). Plus l'énergie incidente est élevée plus les collisions électroniques sont importantes.

Distribution de l'énergie des atomes de recul

La figure (III.9) rassemble toutes les distributions de l'énergie absorbée par les atomes de la cible silicium sous forme nucléaire (phonons et atomes déplacés).

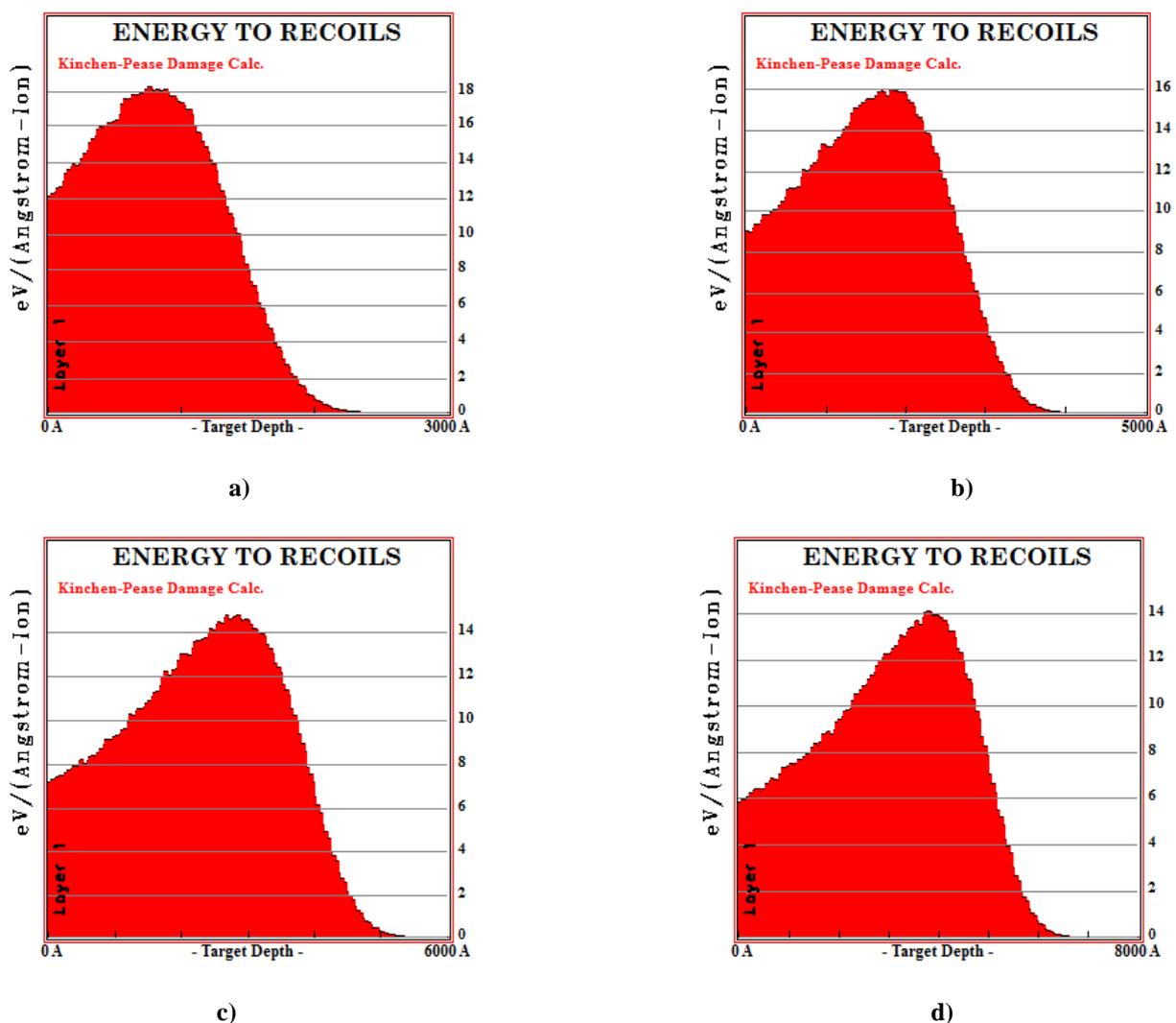


Figure III.9: La distribution de l'énergie absorbée par les atomes de Si (énergie de reculs et l'énergie des phonons) pour le système O→Si pour des différentes énergies d'ions incidents :

a) 50 keV , b) 100 keV , c) 150 keV , d) 200 keV

Commentaire :

On note que ces différentes distributions sont des distributions asymétriques. Pour modéliser ce genre de pertes d'énergie il faut prendre des distributions de moments d'ordre 3 et 4. L'énergie totale absorbée par la cible Si en collisions nucléaires est de : 25.44 keV pour a), 30.75 keV pour b), 45.65 keV pour c) et 54 keV pour d).

Distribution de l'énergie des phonons

La figure (III.10) regroupe les résultats des distributions des atomes de reculs de la partie de l'énergie nucléaire dissipée sous forme de vibration de réseau (phonons).

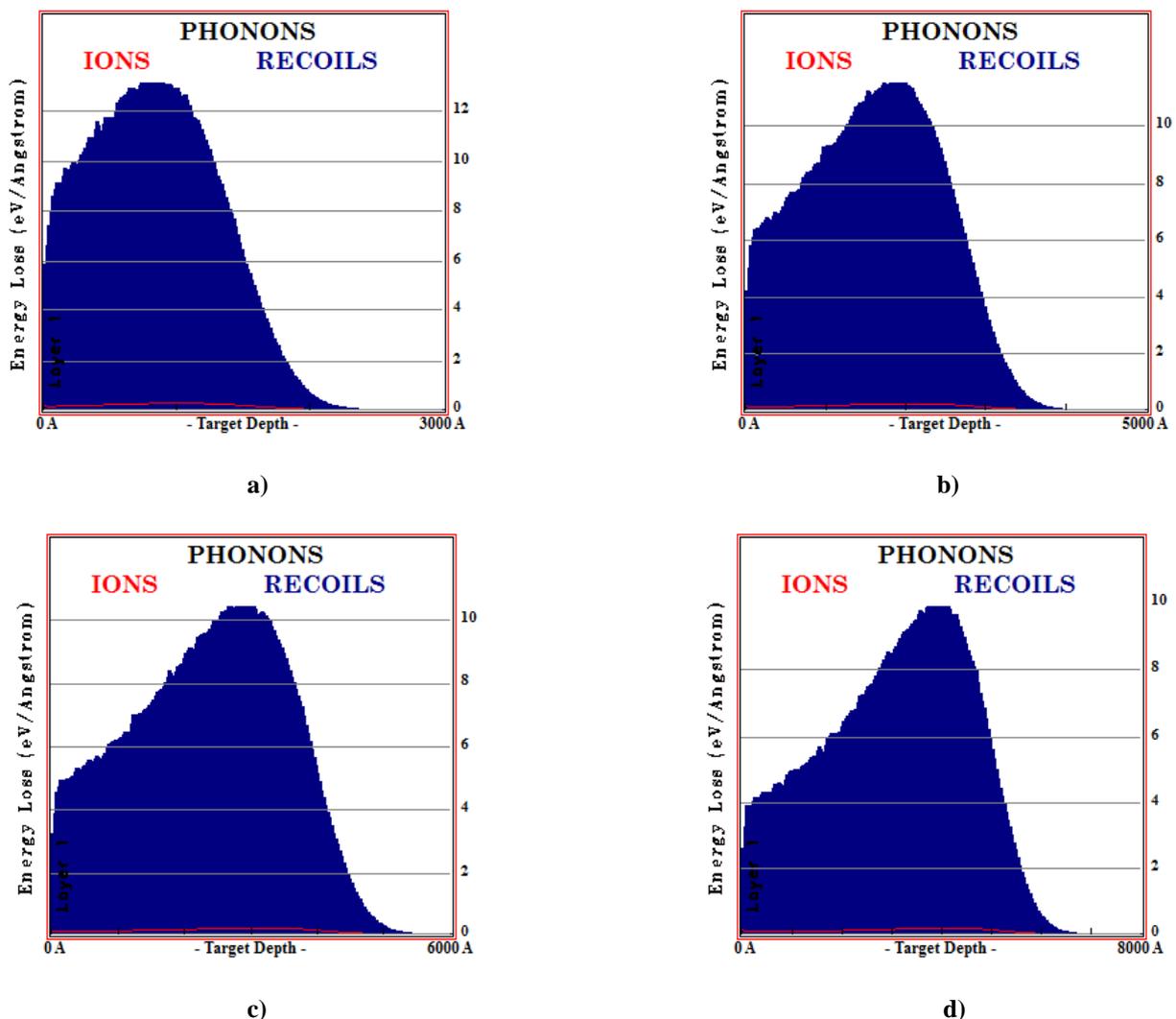


Figure III.10: La distribution de l'énergie des phonons des atomes de reculs pour le système O→Si pour des différentes énergies d'ions incidents :

a) 50 keV , b) 100 keV , c) 150 keV , d) 200 keV

Commentaire :

Lorsque l'énergie de l'ion incident augmente de 50 à 200 keV d'oxygène dans l'atome cible Silicium nous remarquons que le maximum de la distribution est décalé à droite de la médiane, et donc un épaulement de distribution étalé vers la surface (Skewness négatif).

L'asymétrie des courbes dans les simulations est une mesure de la symétrie, ou plus précisément, le manque de symétrie. Ce ci est caractérisé par une valeur positive ou négative du troisième moment de la distribution.

-Un coefficient **positif** indique une distribution décalée à gauche de la médiane, et donc une queue de distribution étalée vers la droite.

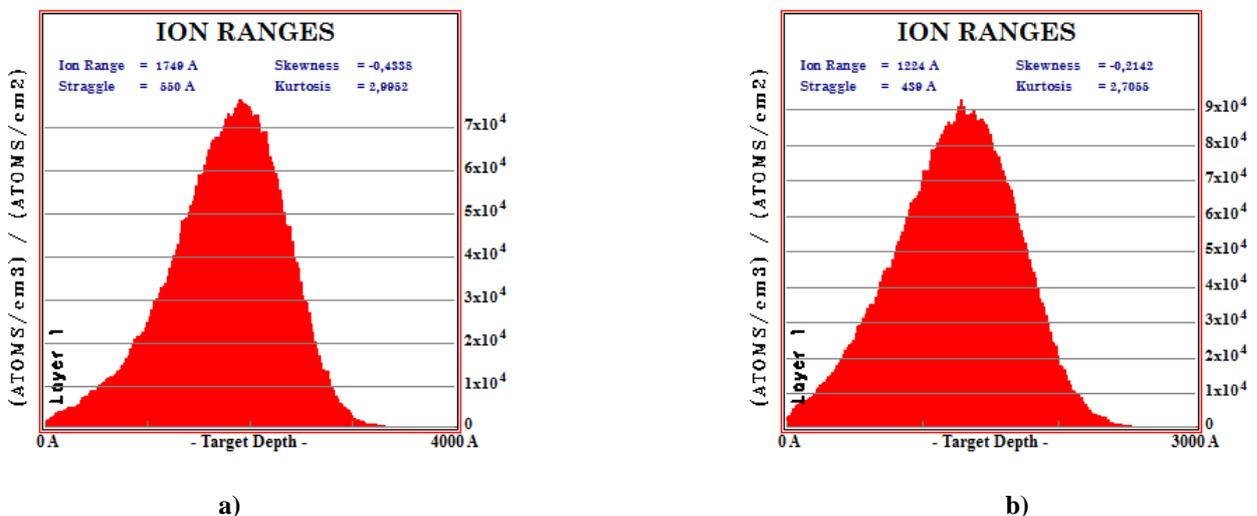
-Un coefficient **négatif** indique une distribution décalée à droite de la médiane, et donc une queue de distribution étalée vers la gauche.

III.2. Effet de la masse de l'ion incident :

Pour étudier l'effet de la masse de l'ion incident sur les pertes d'énergie, nous avons fixé la cible qui est le silicium et également l'énergie incidente à 50 keV, pour différents ions de masse atomique (uma) sont variant de Bore ^{11}B , Oxygène ^{16}O , Silicium ^{28}Si , Germanium ^{74}Ge et Xénon ^{132}Xe . L'ensemble des résultats sont regroupés dans les figures suivantes :

Distribution des parcours projetés

La figure (III.11) présente les distributions des ions implantés (^{11}B , ^{16}O , ^{28}Si , ^{74}Ge et ^{132}Xe) à 150 keV dans le Silicium.



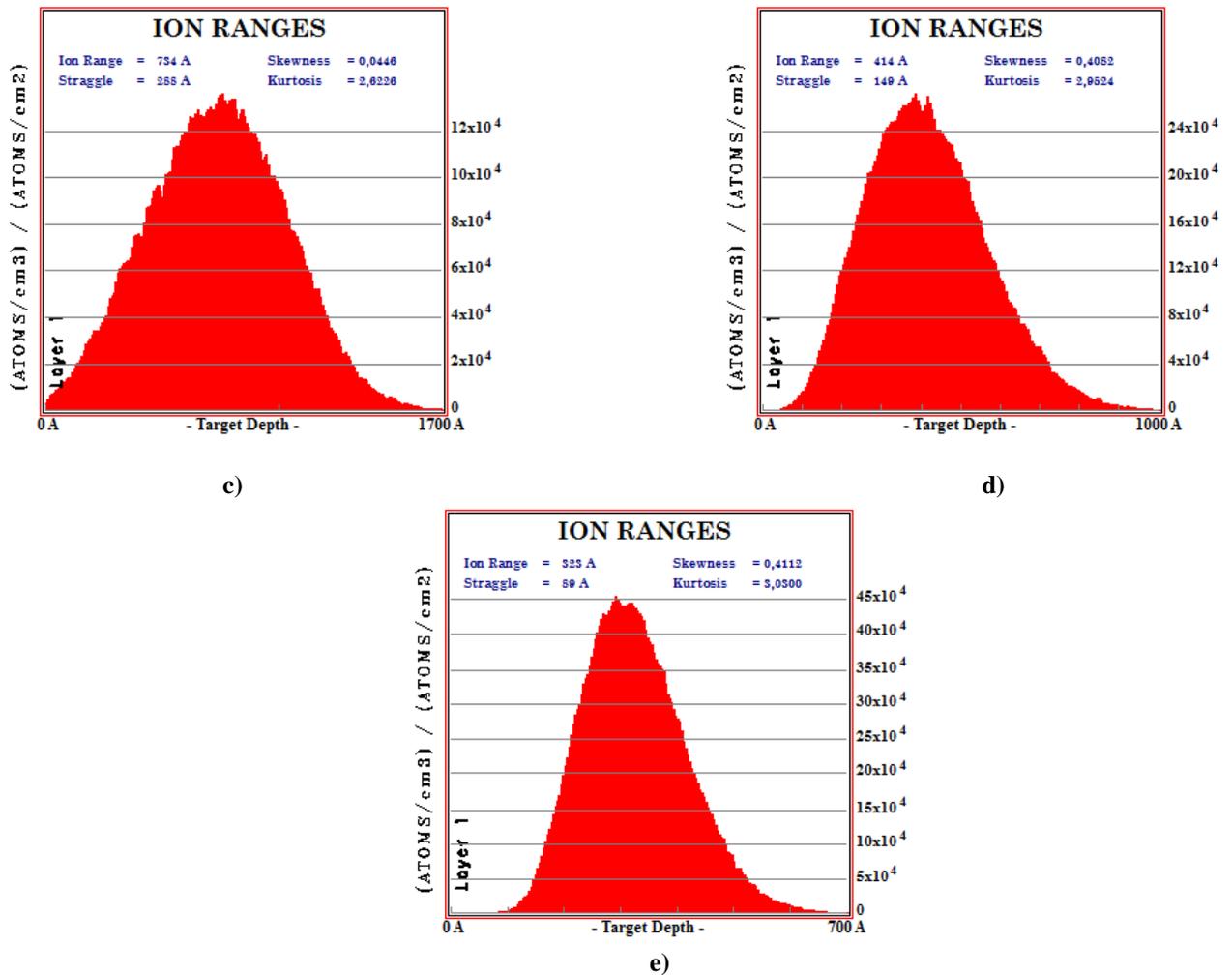


Figure III.11: Distribution des ions implantés pour différents systèmes pour une énergie incidente de 50 keV dans le Silicium

a) Bore, b) Oxygène, c) Silicium, d) Germanium, e) Xénon

Commentaire :

Pour l'Oxygène et le Silicium les distributions sont presque symétriques, une approximation par une Gaussienne est acceptable. Pour les autres distributions celle du Bore, Germanium et Xénon une approximation par deux demi Gaussiennes jointes ou bien des distributions à trois moments sont nécessaires pour tenir en compte de la dissymétrie de ces distributions.

Distribution de l'énergie d'ionisation

La figure (III.12) regroupe les résultats des simulation des pertes d'énergie d'ionisation pour des ions de ¹¹B, ¹⁶O, ²⁸Si, ⁷⁴Ge et ¹³²Xe de 50 keV dans la cible de Silicium.

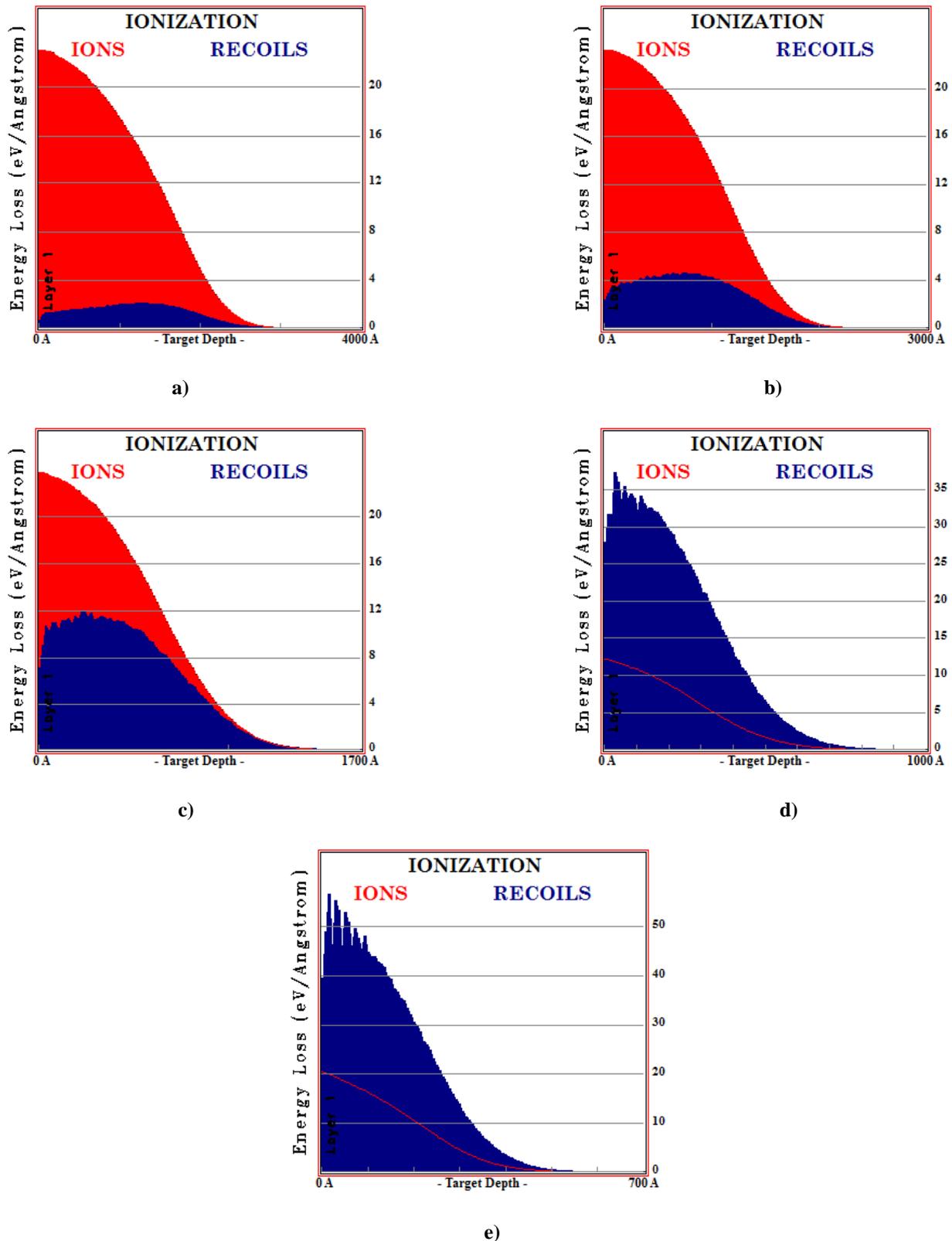


Figure III.12: La distribution de l'énergie d'ionisation des ions incidents (en rouge) et des atomes de recoils(en bleu) pour une énergie incidente de 50 keV dans le Si

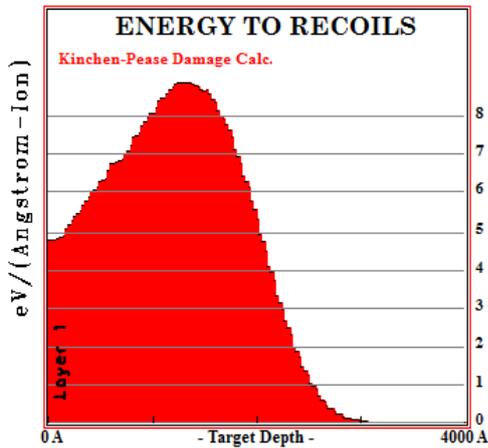
a) Bore, b) Oxygène, c) Silicium, d) Germanium, e) Xénon

Commentaire :

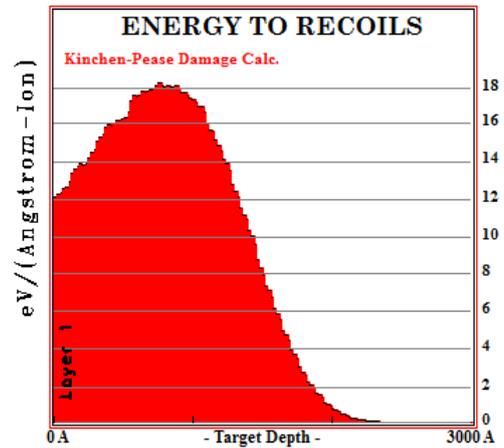
L'énergie totale d'ionisation pour les systèmes étudiées est de : 34.5 keV pour le bore, 25.2 keV pour l'oxygène, 16.2 keV pour le silicium, 3.36 keV pour le germanium et 4 keV pour xénon. Nous avons fixé une cible le silicium et l'énergie incidente à 50 keV, on note que l'ion le plus léger perd plus d'énergie sous forme électronique.

Distribution de l'énergie des atomes de recul

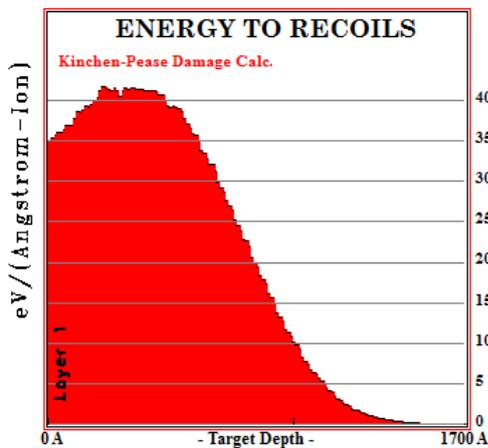
La figure (III.13) rassemble les résultats des distributions de l'énergie absorbée pour les atomes de la cible de silicium sous forme nucléaires (phonon+atomes déplacés) pour des ions de ^{11}B , ^{16}O , ^{28}Si , ^{74}Ge et ^{132}Xe de 50 keV.



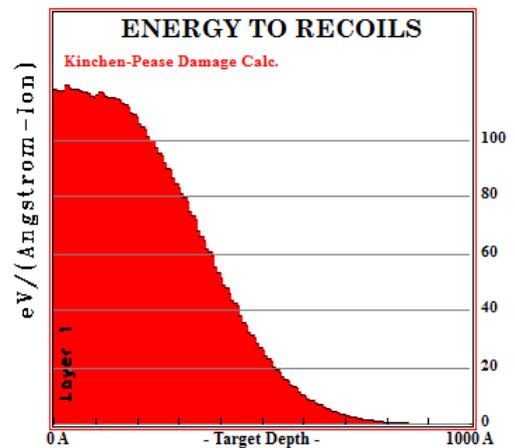
a)



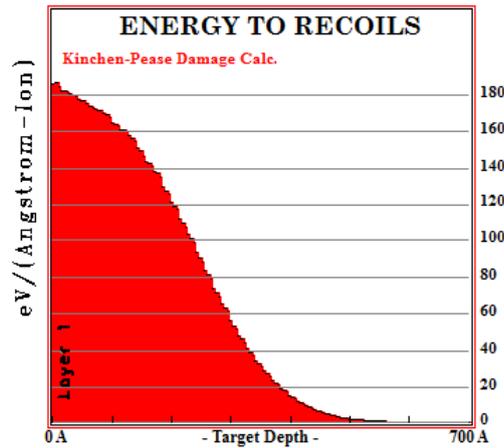
b)



c)



d)



e)

Figure III.13: La distribution de l'énergie absorbée par les atomes de Si (énergie de recoils et l'énergie des phonons) à 50 keV pour différents types d'ions incidents dans le Si

a) Bore, b) Oxygène, c) Silicium, d) Germanium, e) Xénon

Commentaire :

Pour ces différentes distributions, il est à noter une dissymétrie qui caractérise toutes ces distributions. L'énergie totale absorbée par la cible Si en collisions nucléaire est de : 16.97 keV pour le bore, 24.1 keV pour l'oxygène, 43.21 keV pour le silicium, 45 keV pour le germanium et 47 keV pour le xénon. On remarque que plus l'ion est moins énergétique plus les pertes d'énergie en collisions nucléaires sont favorisées.

Distribution de l'énergie des phonons

La figure (III.14) donne les distributions de l'énergie des phonons des atomes de recoils des B O Si, Ge et Xe dans le silicium à 50 keV.

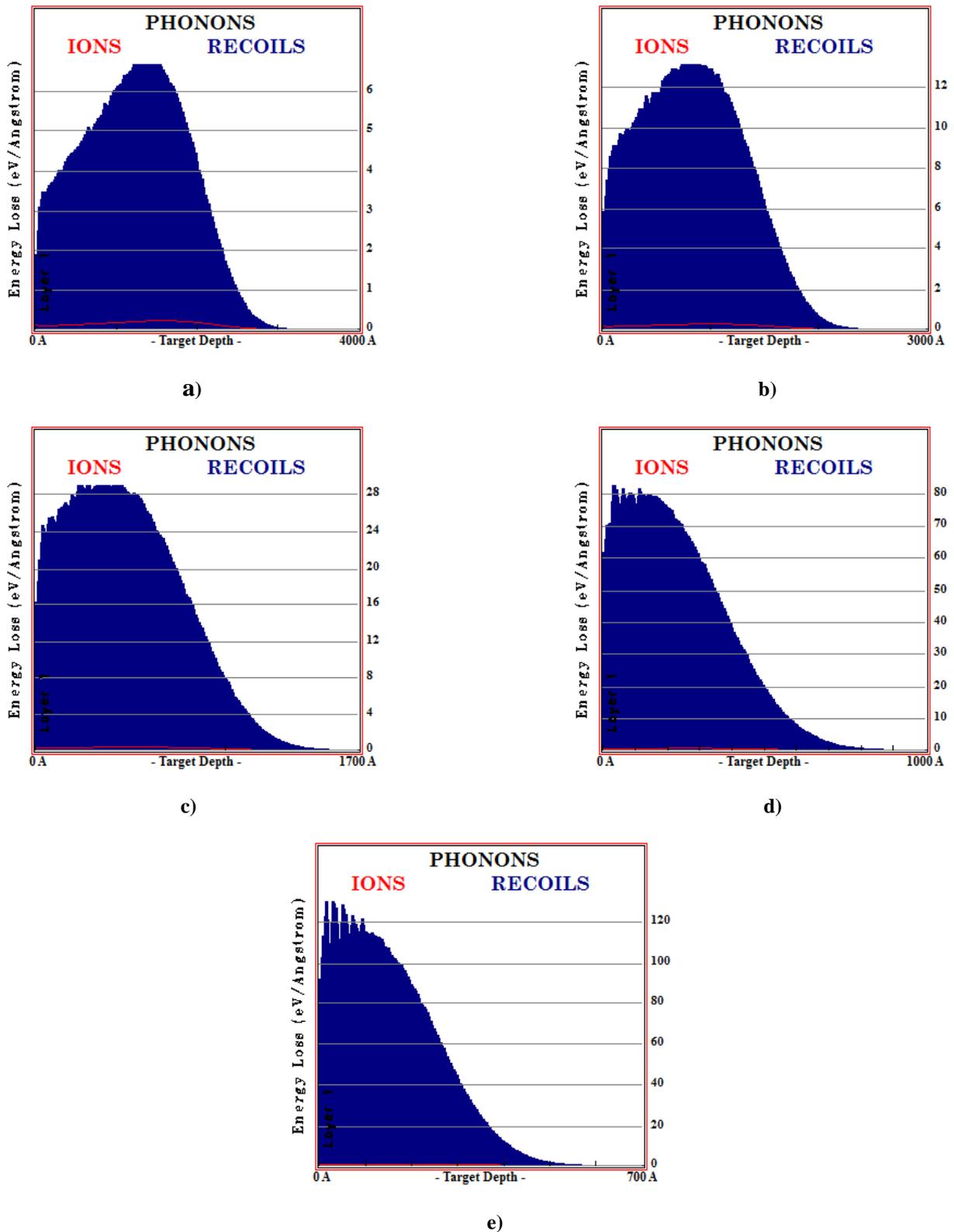


Figure III.14: La distribution de l'énergie des phonons des atomes de recoils pour différents types d'ions incidents dans le Si pour une énergie incidente de 50 keV

a) Bore, b) Oxygène, c) Silicium, d) Germanium, e) Xénon

Commentaire :

Autre remarque de ce résultat, c'est la symétrie des courbes différente d'une courbe à l'autre. Pour le Bore, l'Oxygène et le Silicium, ils ont une distribution avec un épaulement plus ou moins prononcé à gauche de la médiane.

Les simulations effectuées sur les systèmes Germanium et Xénon dans le silicium, présentent un pic de distribution aplati tous près de la surface. Ce ci renseigne que les pertes d'énergie par collisions nucléaires s'effectuent dès la surface de la cible.

IV. DÉTERMINATION DU TAUX D'ÉROSION OU SPUTTERING :

Dans cette partie nous allons présenter l'influence des différents paramètres d'implantation sur le taux d'érosion.

IV.1. Effet de l'angle d'incidence du faisceau :

Pour étudier l'influence de l'angle d'incidence du faisceau ionique sur le taux d'érosion dans une cible de silicium Si, nous avons fixé tous les autres paramètres de l'implantation. Pour cela on a choisi l'ion lourd Bismuth Bi, l'énergie de l'ion est fixée à 5 keV, la profondeur de la cible est fixée à 300Å et nous avons fait varier l'angle d'incidence θ de 0 à 89°.

θ	0°	10°	20°	30°	40°	50°
S (atome/ion)	1.26	1.29	1.71	2.48	3.70	5.68

θ	60°	70°	80°	83°	85°	89°
S (atome/ion)	8.85	14.10	18.89	18.36	16.98	10.12

Tableau III.7: Valeurs du taux d'érosion (S) en fonction de l'angle d'incidence (θ) pour le système Bi à 5 keV dans Si.

La figure (III.15) représente les variations du taux d'érosion (S) en fonction de l'angle d'incidence (θ).

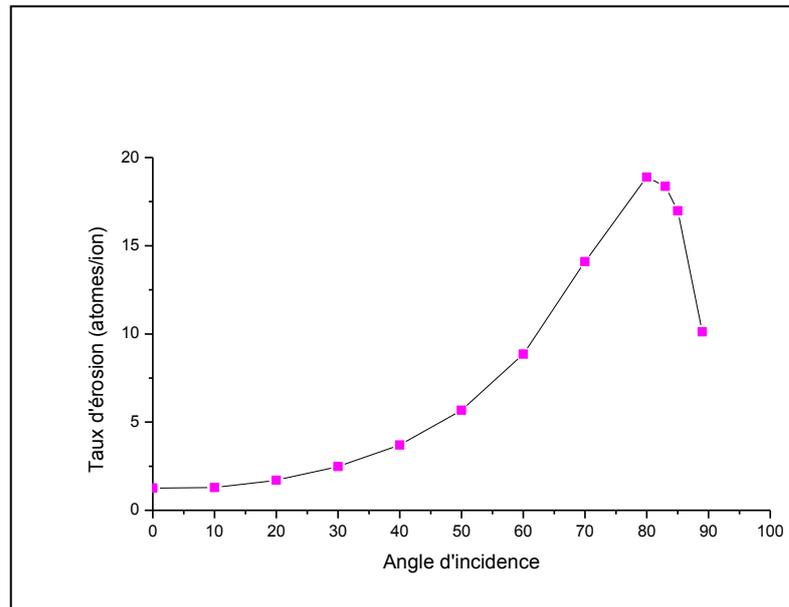


Figure III.15: Variation du taux d'érosion (S) en fonction de l'angle d'incidence (θ) pour le système Bi à 5 keV dans le Si.

Commentaire :

D'après l'allure de la courbe qui représente la variation du taux d'érosion (S) en fonction de l'angle d'incidence (θ) pour le Bi à 5 keV dans la cible de Silicium, on remarque que le taux d'érosion est fortement lié à la variation de l'angle d'incidence θ .

Le taux d'érosion croît d'une façon parabolique jusqu'à atteindre le maximum à 80°. Pour des angles $\theta < 40^\circ$, le taux d'érosion est inférieur de 4 atomes/ion mais ce dernier augmente pour atteindre la valeur maximale de 18.89 atomes/ion pour $\theta = 80^\circ$, après cette valeur on remarque une décroissance de manière très importante.

IV.2. Effet de l'énergie de l'ion incident :

Dans cette partie nous étudions l'effet de l'énergie de l'ion incident sur le taux d'érosion (S) de la cible. Pour cela nous avons fixé les paramètres d'implantation comme suit :

Des ions de Bi²⁰⁹ sous incidence θ de 80° implantés dans une cible de silicium cristallin Si²⁸ avec des énergies variant de 5 à 60 keV. Les profondeurs de la cible sont choisies telles qu'aucun ion ne puisse traverser la cible.

E (keV)	5	10	15	20	30	40	45	50	60
S (atome/ion)	18.89	28.07	34.60	39.18	47.2	52.52	54.93	56.92	59.89

Tableau III. 8: Valeurs du taux d'érosion (S) en fonction de l'énergie (E) pour le système Bi à $\theta = 80^\circ$ dans Si.

La figure (III.16) représente la courbe qui donne les variations du taux d'érosion (S) en fonction de l'énergie des ions incidents (E).

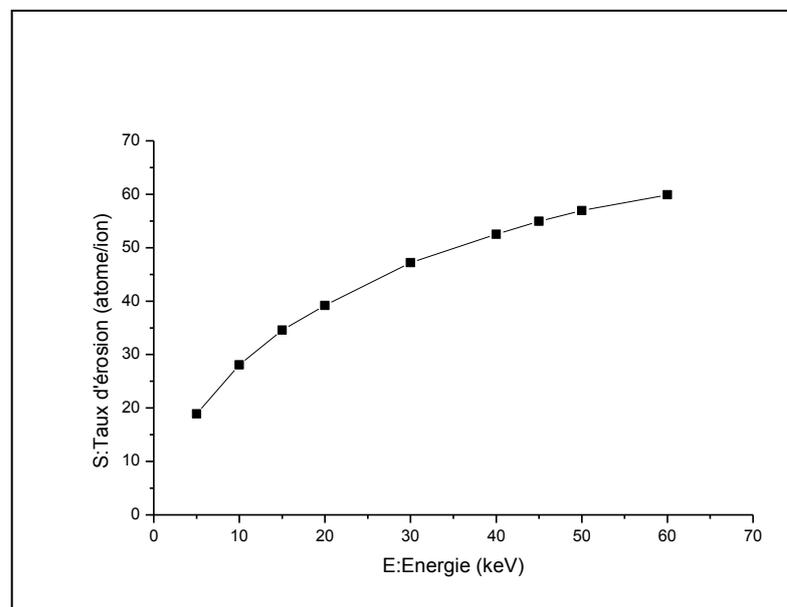


Figure III.16: Variation du taux d'érosion (S) en fonction de l'énergie incidente E pour le système Bi dans le Si à $\theta = 80^\circ$.

Commentaire :

Dans l'intervalle d'énergie étudié [5 à 60 keV] pour le Bismuth dans le silicium, on remarque qu'il y a une croissance exponentielle du taux d'érosion (S) en fonction de l'énergie des ions incidents. Cette augmentation confirme que l'énergie est un paramètre important sur le taux d'érosion de la cible.

IV.3. Effet de la masse de l'ion incident :

Pour étudier l'effet de la masse de l'ion incident sur le taux d'érosion de la cible silicium cristallin Si^{28} bombardé sous incidence θ de 80° avec des ions énergétiques de 5 keV avec différentes masses variant de 11 uma à 209 uma. Les systèmes étudiés sont (B^{11} , O^{16} , Si^{28} , Ge^{74} , Xe^{131} et Bi^{209}) et les profondeurs sont telles qu'aucun ion incident ne peut traverser la cible.

Ion incident	B^{11}	O^{16}	Si^{28}	Ge^{74}	Xe^{132}	Bi^{209}
S (atomes / ion)	4.07	6.5	8.55	13.53	16.54	18.89

Tableau III. 9: Valeurs du taux d'érosion (S) en fonction de différentes masses pour les systèmes (B^{11} , O^{16} , Si^{28} , Ge^{74} , Xe^{132} , Bi^{209}) dans Si, $E = 5$ keV, $\theta = 80^\circ$.

La figure (III.17) présente la courbe qui donne les variations du taux d'érosion (S) en fonction de la masse de l'ion incident avec une énergie (E).

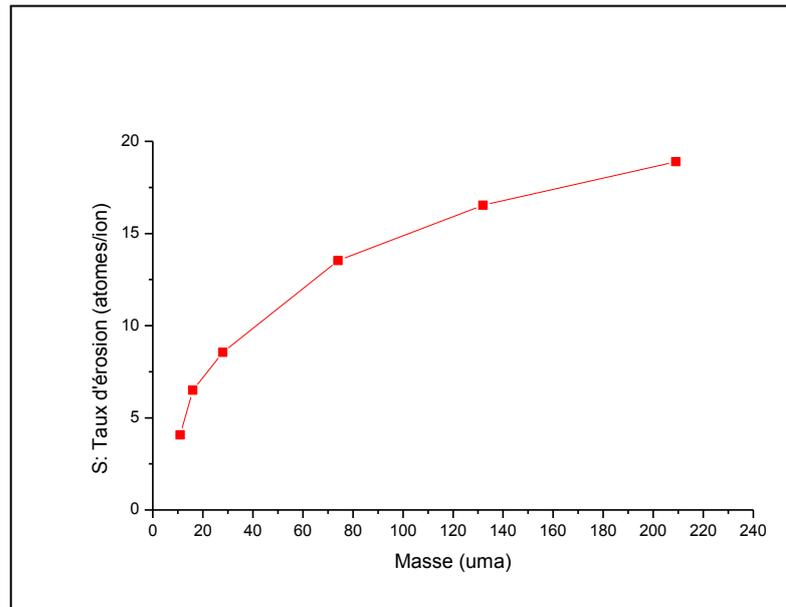


Figure III.17: Variation du taux d'érosion (S) en fonction de la masse des ions incidents pour le système Bi dans le Si à $\theta = 80^\circ$.

Commentaire :

Cette courbe montre une dépendance exponentielle du taux d'érosion (S) en fonction de la masse des ions incidents.

La courbe montre que la valeur du taux d'érosion est importante lorsque l'ion est plus lourd.

Conclusion :

A travers les simulations de calcul **SRIM** nous avons pu montrer l'importance des divers paramètres liés au bombardement ionique dans le silicium.

Les pouvoirs d'arrêt et les moments des distributions dépendent de l'énergie et de la masse de l'ion incident.

Le taux d'érosion dépend de l'angle d'incidence du faisceau ionique, de l'énergie et de la masse de l'ion incident. Ces paramètres sont à prendre en compte pour la détermination du taux d'érosion.

Les simulations faites doivent être confrontées à des données expérimentales pour les valider.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons étudié les pertes d'énergie par bombardement ionique dans le Silicium.

Un outil de calcul le logiciel SRIM utilisant la méthode Monté-Carlo a été utilisé pour déterminer tous les paramètres (pouvoir d'arrêt, les moments des distributions, perte d'énergie et le taux d'érosion).

Les distributions des pertes d'énergie de phonons, d'ionisation, l'énergie absorbée par la cible et la distribution de la probabilité de présence de chaque ion implanté dans le Si sont déterminées, en fonction de divers paramètres de l'implantation ionique pour différents ions (^{11}B , ^{16}O , ^{28}Si , ^{74}Ge et ^{132}Xe) sur un intervalle d'énergie de 50 à 200 keV.

Nous avons également fait varier ces paramètres pour des ions d'énergie de 5 keV avec un angle d'incidence variant de 0° à 89° . Le taux d'érosion enregistre sa valeur maximale pour un angle d'incidence autour de 80° par rapport à la verticale à la cible.

Cette étude a révélé la sensibilité des grandeurs étudiées à l'énergie, à la masse de l'ion incident et à l'angle d'incidence.

Des résultats expérimentaux sont nécessaires pour comparer nos résultats obtenus par SRIM et ainsi mettre en évidence la fiabilité de cet outil de calcul pour toutes les grandeurs déterminées dans le cas d'une cible de Silicium.

BIBLIOGRAPHIE

Bibliographie

- [1] : Hammoum Karima, Thèse de doctorat, " Emissions Optiques des Produits de Pulvérisation de Métaux et leurs Oxydes ", Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou « Algérie», (2011).
- [2] : H. Gnaser, B. Heinz, W. Bock et H. Oechsner " Surface modification of GaAs (110) by low-energy ion irradiation ", Physical Review B, 52(19), pp. 14086-14092 (1995).
- [3] : Smail Boudjadar, Thèse de doctorat, " Etude de la pulvérisation induite par des ions lourds multichargés ", Université Mentouri de Constantine « Algérie», (2005).
- [4] : N. Bohr " On the penetration of charged particles through matter ", Kgl. Dan. Vid. selsk. Mat. Fys. Medd, 18 (8), (1948).
- [5] : G.CARTER, W.A.GRANT " Ion Implantation of Semiconductors ", p.11, London« England», (1976).
- [6] : Mihai Bogdan Lazar, Thèse de doctorat, " Etude du dopage par implantation ionique d'Aluminium dans le carbure de Silicium pour réalisation de composants de puissance ", L'institut National Des Sciences Appliquées de Lyon, (2002).
- [7] : K.B. Wintrebon, Rad. Effects, 13.215 (1972) .
- [8] : M. B. Lazar, Thèse INSA, " Etude du Dopage par Implantation Ionique d'Aluminium dans le Carbure de Silicium pour la Réalisation de Composants de Puissance ", Lyon « France », (2002).
- [9] : Rouha Mustapha, Thèse de doctorat, " Etude de l'effet de l'implantation ionique dans le CuInSe₂ et autres Ternaires", Université Ferhat Abbas de Sétif« Algérie », (2014).
- [10] : M. Nastasi, J. W. Mauer, J. K. Huvonen. " Ion-Solid Interaction : Fundamentals and Application ", University Press Cambridge « Grande Bretagne», (1995).
- [11] : Benmenni Naanaa, Mémoire de Master, " Les dépôts d'énergies par implantation ionique dans les semi-conducteurs (Si, Ge, GaAs) ", Université Mohamed ElBachir Elibrahimi de Bordj Bou Arreridj « Algérie », (2014).
- [12] : Carine Davoisne, Thèse de doctorat, " Evolution des Silicates dans les Milieux Interstellaires, Circumstellaires et Cométaires : le Rôle de l'Irradiation et de la Température ", Université des Sciences et Technologies de Lille «France », (2006)002E.

Bibliographie

- [13] : H. H. Brongersma, M. Draxler, M. de Ridder et P. Bauer " Surface composition analysis by low-energy ion scattering ", Surface Science Reports, 62(3), pp.109 (2007).
- [14] : O.B.Firzov, Sov.Phys. JETP ,36 (9), 1076 (1959) ,(et J.Exp. Theor. Phys. (URSS), 36.1517(1959)).
- [15] : J.LINDHARD and M.SCHARFF, Phys. Rev. 124.128 (1961).
- [16] : J. Lindhard, M. Scharff " Energy Dissipation by Ions in the Bohr Region ", Phys. Rev, (1961),pp 124-128.
- [17] : J.F. Zigler, J.P. Biersack and U.Littmark " The Stopping and Range of Ions in Solids ", Pergamon Press, New York « USA », (1985).
- [18] : K.B. Winterbon, Rad. Effects, 13, 215 (1972).
- [19] : W.L Brown, Mat. Res. Soc. Proc. 51.53 (1985).
- [20] : Abbas Fouzia, Mémoire de Magister , " Synthèse de Nanocristaux du Composé Semiconducteur ZnTe dans SiO₂ par Implantation Ionique ", Université Frères Mentouri de Constantine «Algérie», (2009).
- [21] : J.F.Gibbons, W.S.Myloie " Projected Range Statistics-Semiconductor and Related Materials ", Stroudburg (PA), Dowden, Hutchinson and Ross Publisher, p.402, (1975).
- [22] : M.T. Robinson and I.M. Torrens, Phys. Rev. 9, 12,5008 (1974).
- [23] : Mathieu Caveier, " Etude des effets de l'implantation ionique d'azote sur les propriétés du magnésium pur, du cuivre et des alliages ".
- [24] : P. Sigmund, Phys. Rev. 184.383 (1969).
- [25] : Miguel Hirnandez, " Procédé laser de réalisation de jonction ultra-minces pour la microélectronique silicium, étude expérimentale, modélisation et tests de faisabilité ", (2005).
- [26] : Dr.AH.SOUICI, cours de physique des semi-conducteurs, Université de Béjaia, « Algérie », 2013.
- [27] : Malika Labidi, Thèse doctorat, " Etude des propriétés structurales, électroniques des quaternaires ", Université Badji Mokhtar, Annaba « Algérie », 2011.

Bibliographie

[28] : Zabardjade Said-Bacar, " Elaboration et caractérisations de silicium polycristallin par cristallisation en phase liquide du silicium amorphe ", Autre [cond-mat.other], Université Paris Sud -Paris XI, 2012. Français. <NNT : 2012PA112020>. <tel-00680303>

HAL Id: tel-00680303.

[29] : RAHMOUN Ilhem, Mémoire de Magister, " Réalisation et caractérisation de Silicium poreux pour des applications optoélectroniques ", Université Mohamed Boudiaf d'Oran « Algérie », 2009.

[30] : Faik-etienne Hasnaa, Thèse de doctorat , " Etude de l'Implantation Ionique dans les Miroirs Multicouches Mo/Si : Applicaton aux Optiques Diffractives ", Institut National des Sciences Appliquees de Toulouse « France », (2005).