

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMERRI DE TIZI-OUZOU

FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



LABORATOIRE DE MECANIQUE STRUCTURES ET ENERGETIQUE

## MÉMOIRE DE MASTER

Filière : Physique

Spécialité : Nanophysique

Présenté par :

**Leila SI MOHAMMED**

Thème

*Simulation d'interaction du faisceau d'ions énergétiques  
avec le fer massif par le logiciel SRIM.*

Devant le jury d'examen composé de :

ZIANE	Abdelhamid	Professeur	U. M. M. T. O.	Président
AOUCHICHE	Hocine	Professeur	U. M. M. T. O.	Examineur
HAMMOUM	Karima	Maître de Conférences A	U. M. M. T. O.	Rapporteur

Soutenu publiquement le : 12/07/2018

## Remerciements

*En présentant ce travail, il m'est agréable d'exprimer, en premier lieu mes remerciements à Madame HAMMOUM Karima ep. HAMADOUCHE maître de conférences A à l'U. M. M. T. O. , qui a bien voulu en assurer la direction, de m'avoir accueilli au sein de son équipe de recherche, pour la confiance qu'elle m'a témoignée au cours de ces quelques mois, ainsi que pour son efficacité et sa disponibilité dans les moments les plus critiques. Je lui exprime ma vive et respectueuse gratitude.*

*Je tiens à exprimer toute ma gratitude aux membres de jury, les professeurs , Messieurs ZIANE Abdelhamid et AOUCHICHE Hocine, professeurs à l'U.M.M.T.O, d'avoir accepté d'examiner, juger ce travail et d'honorer, par leur présence, la soutenance de ce mémoire de master.*

*Ce stage de master a été effectué au laboratoire de mécanique, structure et énergétique de l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, à cet effet je me dois de remercier Monsieur MAKHLOUF Said, professeur à l'U.M.M.T.O, pour m'avoir accueilli au sein de son laboratoire. Mes remerciements vont aussi à ses membres pour avoir fait de sorte que le travail au sein du laboratoire soit le plus agréable possible.*

*C'est avec beaucoup de plaisir que j'associe à mes remerciements Madame MOKRANI Saida maître de conférences B, Monsieur HAMIDI Mahdi maître de conférences A et Madame KERMOUN Fatma maître assistante A pour leur disponibilités et serviabilités précieuses dont ils ont fait preuve.*

*Je tiens à remercier vivement ma famille, surtout mon père et ma mère pour leurs présence dans les moments difficiles et pour leur encouragement, ainsi que mon frère Samir et ma sœur Souhila .*

*Enfin, Mes remerciements vont à mes camarades de promotion, mes collègues, mon inspecteur de matière Monsieur DJEDID Kamel, le directeur du CEM ADNANE AZAZGA Monsieur MOHELBI Mohamed et mes amis Sabrina, Leila , Farida , Karim , Merzouk, chacun ayant contribué à sa façon à l'accomplissement de ce travail .*

## Résumé

Le présent travail consiste en la simulation de l'interaction d'un faisceau d'ions  $Kr^+$  avec une cible de fer solide par le logiciel SRIM (Stopping and Range of Ions In Matter). Notre objectif est de calculer différents paramètres liés à la pulvérisation et l'implantation d'ions dans une cible, tels que la distribution spatiale des ions implantés, les distributions des pertes d'énergies électronique et nucléaire en fonction de la profondeur de pénétration et le rendement de pulvérisation, ainsi que les dommages créés à l'intérieur de la cible.

**Mots clés :** Logiciel SRIM 2013, fer, pulvérisation ionique, interactions .

## Abstract

The present work consists in simulation the interaction of a  $Kr^+$  ion beam with a solid iron target by the SRIM (Stopping and Range of Ions In Matter) software. The aim is to determinate different parameters related to sputtering and implantation of ions in the targets, such as the distribution of ions, electron and nuclear energy loss distributions as a function of the penetration depth and sputtering yield as well as the damage caused in the target.

**Keys words :** SRIM 2013 software , iron, ionic sputtering, interactions.

# Table des matières

<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>1 Généralités sur la pulvérisation ionique</b>	<b>3</b>
1.1 Principe de l'interaction ion-matière . . . . .	3
1.2 Interactions des particules avec la matière . . . . .	4
1.2.1 Définition d'une collision . . . . .	4
1.2.2 Collisions élastiques . . . . .	4
1.2.3 Pouvoir d'arrêt . . . . .	7
1.2.4 Collisions inélastiques . . . . .	8
1.3 Pulvérisation ionique . . . . .	8
1.3.1 Définition de la pulvérisation . . . . .	8
1.3.2 Les régimes de collisions . . . . .	8
1.3.3 Le rendement de pulvérisation . . . . .	9
1.4 Conclusion . . . . .	10
<b>2 Le logiciel SRIM</b>	<b>11</b>
2.1 Description du logiciel SRIM . . . . .	11
2.2 Conclusion . . . . .	15
<b>3 Simulations par le logiciel SRIM</b>	<b>16</b>
3.1 Introduction . . . . .	16
3.2 Simulation de la pulvérisation . . . . .	16
3.3 Simulation des pouvoirs d'arrêt dans la cible . . . . .	19
3.4 Distribution des ions en profondeur de la cible de Fe . . . . .	20
3.5 L'évolution de la perte d'énergie du projectile . . . . .	21
3.6 Conclusion . . . . .	25
<b>Conclusion générale</b>	<b>26</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>28</b>

# Introduction générale

L'étude des interactions des ions avec la matière (les processus fondamentaux de l'interaction, la relaxation de l'énergie déposée dans les matériaux et les modifications induites dans ces matériaux) fait encore l'objet de recherches très intenses. Des techniques expérimentales utilisant le bombardement ionique ainsi que des logiciels de simulation ont été conçus et développés pour étudier et comprendre la physique de base des processus se produisant lors de l'interaction des ions avec la surface cible. Ces techniques ont des applications potentielles dans l'étude de l'évolution de la rugosité de surface, le dépôt de couches minces par la technique de pulvérisation cathodique [1] ou alors l'étude des émissions optiques des produits de pulvérisation des métaux...

Dans ce travail, nous nous intéressons à certains phénomènes se produisant lors de l'impact d'un ion avec une cible solide tel que l'évaluation de la perte d'énergie des ions dans la matière, la distribution de ces ions après qu'ils soient arrêtés par la cible, l'éjection de la matière et les dommages créés lors de la pénétration des ions projectiles à l'intérieur de la cible [2]. Pour simuler ces phénomènes, nous avons utilisé le logiciel SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) qui est basé sur des données expérimentales précises. Les simulations sont réalisées par la méthode de Monte Carlo dans les limites des cascades binaires dans une cible amorphe [3]. Le présent travail est consacré à l'étude de l'échantillon fer massif soumis à un bombardement par des ions énergétiques de gaz rares. Dans notre cas, nous avons choisi des ions  $Kr^+$  de 5 keV, des conditions similaires à celles utilisées par Hammoum [4] lors de l'étude expérimentale de la luminescence du fer soumis au bombardement ionique.

Dans le premier chapitre, nous rappelons les principes de l'interaction ion-matière. Nous nous intéressons aux paramètres qui gouvernent cette collision, notamment les notions du pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire, qui permettent de caractériser le ralentissement d'un projectile dans un matériau donné [5]. Nous donnons aussi une synthèse sur le phénomène de pulvérisation afin de mieux comprendre les mécanismes impliqués dans l'interaction ion-matière .

Le deuxième chapitre est consacré à la description du logiciel SRIM 2013, utilisé dans ce présent travail. Nous allons expliquer son fonctionnement simple, le choix des paramètres du bombardement, comme l'énergie d'impact, l'angle d'incidence, le nombre d'ions incidents et nous donnons l'interface des résultats ainsi que sa structure .

Enfin dans le dernier chapitre, nous présentons les résultats obtenus avec le logiciel SRIM 2013, à savoir la variation du rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie d'impact et de l'angle d'incidence, l'évolution des pouvoirs d'arrêt avec l'énergie et les dommages créés par le faisceau d'ions incidents, ainsi que leurs interprétations.

Nous terminerons par une conclusion générale, où les points importants sont mis en valeur.

# Chapitre 1

## Généralités sur la pulvérisation ionique

### 1.1 Principe de l'interaction ion-matière

L'interaction ion-matière décrit les effets du bombardement d'une surface solide par des ions énergétiques, les ions incidents peuvent interagir de plusieurs manières avec les atomes de la matière ciblée. On rencontre deux principaux types d'interaction qui sont l'excitation électronique et les chocs nucléaires.

L'excitation électronique résulte des collisions inélastiques entre le projectile et les électrons de la cible, ce qui induit à l'excitation et l'ionisation des atomes. Les chocs nucléaires sont des collisions élastiques entre le projectile et les noyaux de la cible transmettant d'une manière directe de l'énergie au noyau, ce qui conduit au déplacement des atomes.

Les interactions entre un ion et le solide bombardé puis entre les atomes au sein du solide se composent de mécanismes relativement simples. Néanmoins, leurs additions et le plus souvent un grand nombre d'évènements successifs forment un système complexe. Généralement, on distingue quatre phénomènes concernant les modifications du solide bombardé [6]( voir figure 1.1)

1. La pulvérisation de particules de la surface (atomes, ions, etc.),
2. L'implantation d'ions primaires,
3. Des modifications dans la structure de la matière,
4. Des effets physico-chimiques tels que la rupture et la création de défauts (lacunes)



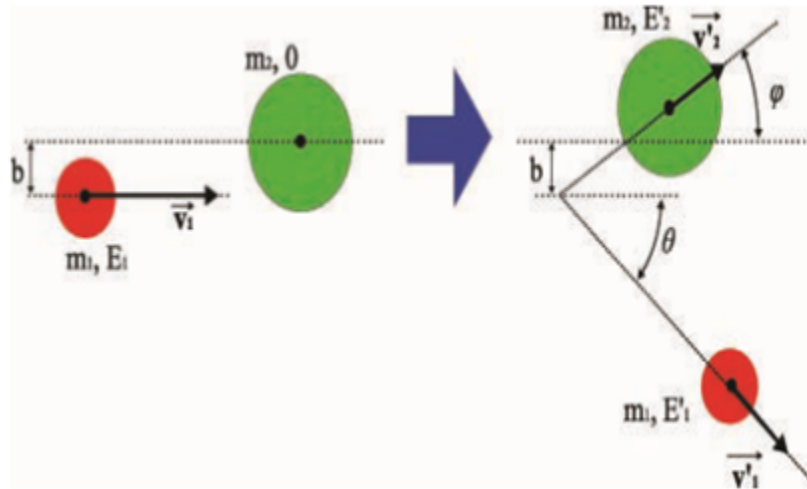


FIGURE 1.2 – Schéma d'une collision élastique entre deux particules [8]

Le transfert d'énergie est généralement désigné comme le facteur cinématique  $K$  qui est le rapport entre l'énergie cinétique après la collision  $E'_1$  et son énergie initiale  $E_1$ .

La conservation de l'énergie peut se formuler par :

$E_1 = E'_1 + E'_2$  soit :

$$\frac{1}{2}m_1v_1^2 = \frac{1}{2}m_1v_1'^2 + \frac{1}{2}m_2v_2'^2 \quad (1.1)$$

La conservation de la quantité de mouvement donne :

$$\vec{P} = \vec{P}'_1 + \vec{P}'_2$$

$\vec{P}$  et  $\vec{P}'$  représente la quantité de mouvement avant et après le choc respectivement.

soit :  $m_1\vec{v}_1 = m_1\vec{v}_1' + m_2\vec{v}_2'$

La décomposition selon l'axe du mouvement et un axe perpendiculaire donne :

$$m_1v_1 = m_1v_1' \cos \theta + m_2v_2' \cos \varphi \quad (1.2)$$

$$m_1v_1' \sin \theta = m_2v_2' \sin \varphi \quad (1.3)$$

A partir des équations (1.2) et (1.3) on peut exprimer l'énergie  $E'_2$  de deux manières différentes :

$$E'_2 = \frac{(m_2v_2')^2}{2m_2} = \frac{(m_2v_2' \sin \theta)^2 + (m_2v_2' \cos \theta)^2}{2m_2} \quad (1.4)$$

$$E'_2 = \frac{m_2v_2'^2}{2} = \frac{m_1v_1^2}{2} - \frac{m_1v_1'^2}{2} = \frac{(m_1v_1' \sin \theta)^2 + (m_1v_1 - m_1v_1' \cos \theta)^2}{2m_2} \quad (1.5)$$

$$E'_2 = \frac{m_2v_2'^2}{2} = \frac{m_1v_1^2}{2} - \frac{m_1v_1'^2}{2} = \frac{(m_1v_1' \sin \theta)^2 + (m_1v_1 - m_1v_1' \cos \theta)^2}{2m_2} \quad (1.6)$$

En simplifiant par  $m_1$ , en multipliant par  $m_2$  et en divisant par  $v_1$  :

$$\frac{v_1'^2}{v_1^2}(m_2 + m_1) - 2m_1 \frac{v_1'}{v_1} \cos \theta - m_2 + m_1 = 0 \quad (1.7)$$

D'où les solutions :

$$\frac{v_1'}{v_1} = \frac{m_1 \cos \theta \pm \sqrt{(m_1 \cos \theta)^2 - (m_1 + m_2)(m_1 - m_2)}}{m_1 + m_2} \quad (1.8)$$

On garde la solution positive, les vitesses étant prises en valeurs absolues :

$$\frac{v_1'}{v_1} = \frac{m_1 \cos \theta + \sqrt{m_2^2 - m_1^2(\sin \theta)^2}}{m_1 + m_2} \quad (1.9)$$

On peut écrire :

$$E_1' = k.E_1$$

avec :

$$k = \left[ \frac{m_1 \cos \theta + \sqrt{m_2^2 - m_1^2(\sin \theta)^2}}{m_1 + m_2} \right]^2 \quad (1.10)$$

Avec  $k$  est le facteur cinématique ou de rétrodiffusion, il représente la quantité d'énergie conservée  $E_1'$  par la particule incidente après le choc par rapport à son énergie initiale  $E_1$ , il dépend de la masse des deux particules [9].

De la même manière on calcul l'énergie transmise à la particule de masse  $m_2$ , en exprimant  $E_1'$  de deux manières :

$$E_1' = \frac{(m_1 v_1')^2}{2m_1} = \frac{(m_1 v_1' \sin \theta)^2 + (m_1 v_1' \cos \theta)^2}{2m_1} \quad (1.11)$$

$$E_1' = \frac{m_1 v_1'}{2} = \frac{m_1 v_1'^2}{2} - \frac{m_2 v_2'^2}{2} = \frac{(m_2 v_2' \sin \varphi)^2 + (m_1 v_1 - m_2 v_2'^2 \cos \varphi)^2}{2m_1} \quad (1.12)$$

On réduit les termes en  $v_1'^2$  et simplifiant ensuite par  $m_2$  et  $v_2'$  :

$$v_2' = \frac{2m_1}{m_1 + m_2} v_1 \cos \varphi \quad (1.13)$$

On peut également écrire l'énergie transmise comme suit :

$$T = E_2' = \frac{m_2 v_2'^2}{2} = \frac{1}{2} m_2 \left[ \frac{2m_1}{m_1 + m_2} v_1 \cos \varphi \right]^2 \quad (1.14)$$

$$T = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E_1 \cos^2 \varphi \quad (1.15)$$

$T_{max} = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E_1$  est l'énergie maximale qu'on peut transmettre dans le cas d'une collision frontale ( $\varphi = 0$ ) ça correspond a un paramètre d'impact  $b=0$ .

On peut réécrire l'équation (1.15) comme suit avec  $\mu = \frac{m_2}{m_1}$  :

$$T = \frac{4\mu \cos^2 \varphi}{(\mu + 1)^2} E_1 \quad (1.16)$$

- Dans le cas  $\mu > 1$  : le projectile est plus léger par rapport à la cible, il peut être diffusé .
- Si  $\mu = 1$  : la particule cible peut prendre la totalité de l'énergie initiale du projectile car le transfert d'énergie est de  $T = \cos^2 \varphi E_1$ .
- Si  $\mu < 1$  : le projectile est plus lourd que la cible, ils seront tout les deux diffusés vers l'avant.
- Si  $\mu \ll 1$  : l'énergie du projectile est beaucoup plus importante par rapport à celle transmise à la cible ce qui n'influence pas sur sa trajectoire.

### 1.2.3 Pouvoir d'arrêt

Une particule chargée pénétrant dans un matériau avec une énergie  $E$ , va perdre cette énergie par différents types d'interactions avec le milieu cible pour s'arrêter finalement à une certaine profondeur ou diffusés à la surface, on appelle cette perte d'énergie de la particule par unité de distance parcourue pouvoir d'arrêt du matériau cible, le pouvoir d'arrêt total  $S(E)$  est donné par l'équation :

$$S(E) = -\frac{dE}{dX} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left( \frac{\Delta E}{\Delta X} \right) \quad (1.17)$$

$\Delta E$  est la perte d'énergie moyenne du projectile traversant une tranche de matériau d'épaisseur  $\Delta X$ . Le pouvoir d'arrêt s'exprime généralement en eV / $\text{\AA}$ .

On distingue deux types de perte d'énergie, nucléaire et électronique, on peut les définir comme suit :

- Perte d'énergie nucléaire : c'est un processus qui est dû aux collisions élastiques des ions pénétrant à faible vitesse, avec les noyaux des atomes du matériau cible.
- Perte d'énergie électronique : c'est un processus inélastique de transfert d'énergie. Les ions incidents pénètrent dans le matériau à grande vitesse en transférant leurs énergies aux électrons des atomes du matériau, soit par excitation ou ionisation de ces atomes.

On peut considérer que la perte d'énergie totale globalise les pertes dues aux interactions avec les noyaux atomiques des atomes de la cible et ses électrons qui sont le pouvoir d'arrêt nucléaire et pouvoir d'arrêt électronique respectivement :

$$\frac{dE}{dX} = \left( \frac{dE}{dX} \right)_n + \left( \frac{dE}{dX} \right)_e \quad (1.18)$$

### 1.2.4 Collisions inélastiques

Dans le cas des collisions inélastiques, l'énergie cinétique totale des particules n'est pas conservée, ce qui signifie qu'une partie de l'énergie cinétique du projectile et de la cible est transmise à leur environnement (électrons). On distingue trois processus essentiels lors de la collision inélastique : la capture, l'excitation et l'ionisation .

- La capture : elle représente le transfert d'un état lié de la cible à un état lié du projectile d'un ou de plusieurs électrons, si cette dernière crée un site vacant (trou) dans une couche interne de la cible elle peut être ionisé.
- L'excitation : un électron de la cible peut être transféré vers un état moins lié lors d'une collision, ce qui rend la cible excitée de même pour le projectile, ce qui conduit à deux voies de désexcitation : la désexcitation radiative par émission de photons et/ou par effet Auger par émission d'électrons.
- L'ionisation : lors du transfert d'énergie du projectile à la cible, un ou plusieurs électrons peuvent être arrachés à l'atome cible ou au projectile. La probabilité d'ionisation varie en fonction de la nature de l'atome.

## 1.3 Pulvérisation ionique

### 1.3.1 Définition de la pulvérisation

Lorsqu'on bombarde de la matière avec des ions projectiles, la particule incidente pénètre à l'intérieur de la matière en perdant de l'énergie. Si l'énergie transmise à l'atome cible est supérieure à une énergie de déplacement, il peut quitter sa position et engendrer une série de chocs avec d'autres atomes du matériau (cascades de collisions). Certains atomes mis en mouvement à proximité de la surface peuvent être éjectés du matériau, Ce phénomène de pulvérisation nécessite que l'atome mis en mouvement ait une énergie cinétique supérieure à l'énergie de liaison en surface. En fonction de l'énergie des ions incidents, on distingue la pulvérisation induite par le pouvoir d'arrêt nucléaire (pulvérisation nucléaire) et par le pouvoir d'arrêt électronique (pulvérisation électronique).

### 1.3.2 Les régimes de collisions

Un transfert d'une partie de l'énergie entre la particule projectile et l'atome cible lors de la première collision (primary knock on atom, PKA) a lieu. En conséquence, cet atome issu de la première collision peut lui aussi entrer en collision avec d'autres atomes de la cible (second knock on atom, SKA). On distingue trois régimes de pulvérisation nucléaire : régimes de collisions simples, régime de cascades linéaires et de cascades non linéaires ou de pointe [10] comme c'est donné sur la figure 1.3

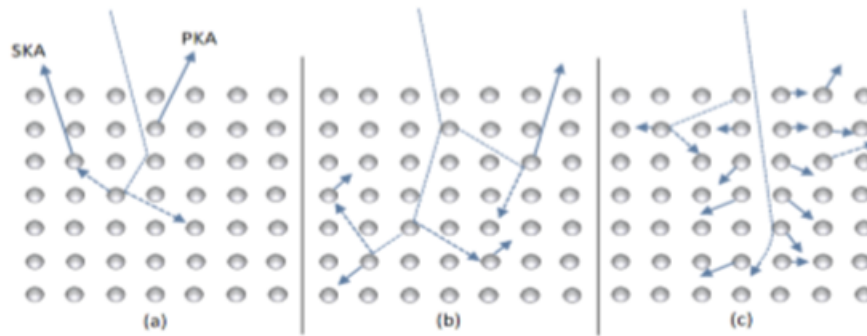


FIGURE 1.3 – (a) Régime de collisions simples, (b) régime de cascade linéaire, (c) régime de cascade non-linéaire [11]

a/ régime de simple collision : Lorsque l'énergie d'impact de l'ion est faible, il ne mettra en mouvement que peu d'atomes de la cible et sera lui-même stoppé rapidement dans la cible, elle est caractérisée par un faible nombre d'atomes qui est mis en mouvement lorsque les ions incidents ralentissent, dans ce cas on a une pulvérisation induite par des ions d'une faible énergie (  $< 1\text{keV}$  ) ou par des ions légers comme H et He , ici l'énergie transférée à un atome de recul pour qu'une cascade de collision puisse se développer complètement n'est pas suffisante .

b/ régime de cascade linéaire : Dans ce régime les collisions entre les atomes ciblés et le projectile va induire à la possibilité de créer des atomes de recul assez énergétiques pour créer des atomes de recul d'ordre supérieur. Ce régime s'applique pour des bombardements d'ions de nombre atomique moyen ou élevé et dans une gamme d'énergie de quelques keV.

c/ Régime de cascade non linéaire; régime de pointe : Ce régime est assuré par des projectiles lourds ayant une énergie très importante (  $> 100\text{keV}$  ) .

### 1.3.3 Le rendement de pulvérisation

Le rendement de pulvérisation est le rapport entre le nombre de particule émise et le nombre de projectiles [12][13][14].

$$Y = \frac{\text{nombre d'atome émis}}{\text{nombre d'ions projectiles}}$$

Y est le nombre d'atomes pulvérisé ou extrait du matériau par ion incident, il dépend des paramètres du bombardement primaire et de la cible, il est exprimé en (atome /ion). Le rendement dépend de l'énergie d'impact, de l'angle d'incidence et de la nature du projectile et de la cible [1][13][15].

## 1.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté quelques concepts de l'interaction ion- matière. Par conséquent, nous avons donné quelques équations qui modélisent les paramètres de l'interaction. Nous avons aussi décrit les processus de perte d'énergie, d'une part par excitation électronique pour les fortes énergies incidentes et d'autre part par chocs nucléaires pour les faibles énergies. Nous avons également rappelé quelques notions fondamentales de la pulvérisation ionique.

# Chapitre 2

## Le logiciel SRIM

### 2.1 Description du logiciel SRIM

Les simulations ont été effectuées avec le logiciel SRIM 2013 (Stopping and Range of Ions in Matter) qui est basé sur l'approximation des collisions binaires et sur le principe de la méthode Monté Carlo. Ce logiciel est un groupe de programmes qui s'exécutent sous Windows et qui permettent de simuler la trajectoire d'un ion ainsi que celle des atomes de recul dans un solide pour des énergies d'incidence allant de 10 eV à 2 GeV [16][17]. Il a une interface simple permettant de choisir par simple clic entre deux programmes principaux qui sont le calcul du pouvoir d'arrêt des ions (Stopping/Range Tables) et le calcul détaillé (TRIM Calculation) voir figure 2.1. Pour le premier programme, le manipulateur sera orienté vers l'interface de la figure 2.2 où il sera invité à entrer ses données : l'ion (type, gamme d'énergie) et la cible (Target) .

Pour le deuxième programme, l'ion et la cible sont choisis par simple clic sur l'icône « Add new element to layer » , « add new layer » et l'icône PT (ou table périodique) comme c'est donné sur la figure 2.3. La cible est considérée amorphe et les collisions entre les ions et les atomes cibles sont supposées de type coulombiennes écrantées.

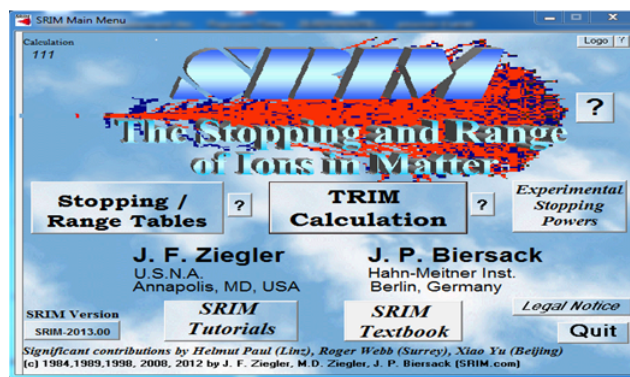


FIGURE 2.1 – interface menu du logiciel SRIM 2013



FIGURE 2.2 – Interface du programme Ion Stopping and Range Tables

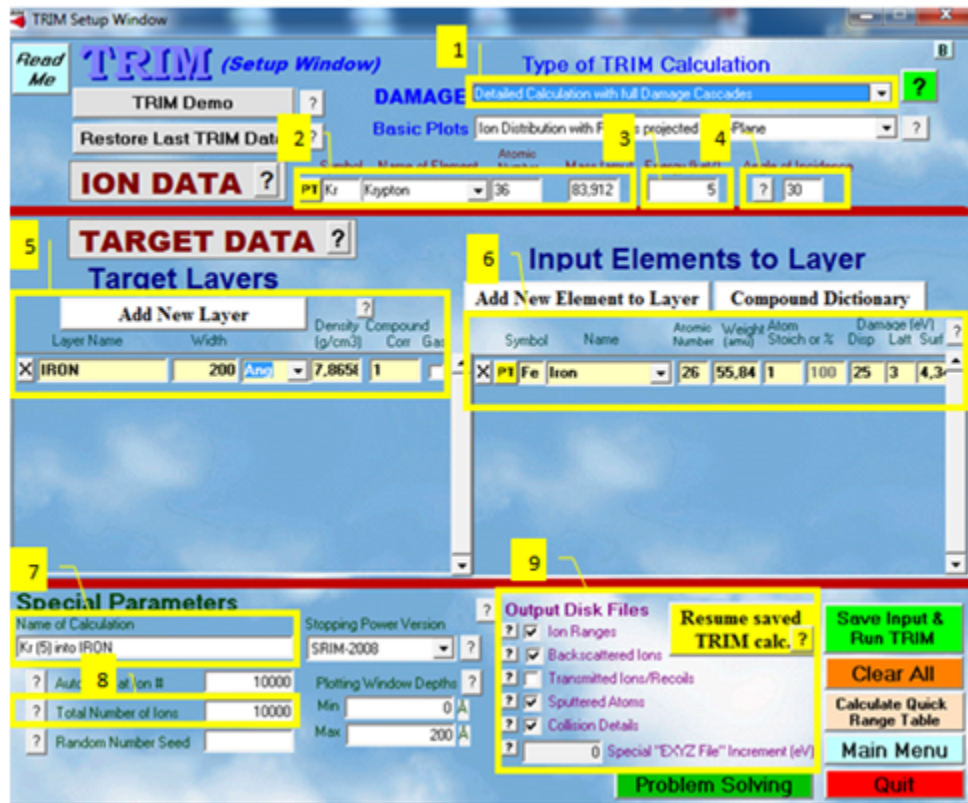


FIGURE 2.3 – Interface du programme TRIM

L'interface du programme TRIM possède plusieurs options. Les options de 1 à 9 permettent de choisir les paramètres d'entrée et de sortie regroupés dans le tableau 2.1.

option	paramètres	
1	Entrée	Elle permet de choisir les phénomènes à étudier parmi : - l'endommagement de la cible et la distribution des ions - l'implantation ionique. - la pulvérisation - l'énergie spécifique , angle , profondeur des ions.
2		Les données d'ions incidents : ions , symbole, nombre atomique , masse atomique.
3		Energie des ions incidents en keV.
4		L'angle d'incidence des ions entre 0° et 90°.
5		La nature du matériau cible.
6		Le nom, le nombre atomique de la cible et l'énergie des liaisons des atomes .
7		Nom de la simulation : Kr – Fe ( projectile – cible ).
8		Le nombre d'ions qu'on peut introduire peut aller jusqu'à 9999999 ions et la valeur proposée par défaut est de 99999 ions .
9	Sortie	Range.txt : tableau de la répartition finale des ions et des atomes cible de recul. Backscat.txt : cinétique de tous les ions rétrodiffusés (énergie, emplacement et trajectoire). Transmit.txt : cinétique de tous les ions transmis ( énergie , localisation et trajectoire ). Sputter.txt : cinétique de tous les atomes de la cible par pulvérisation de la cible. Collision.txt : tableau de toutes les collisions atomiques ions/cibles qui conduisent à endommager la cible .

TABLE 2.1 – Paramètres d'entrée et de sortie de TRIM.

Ce programme, développé par Ziegler et Biersack [16][17] permet de calculer différents paramètres qui sont liés à l'implantation d'ions dans la cible, on peut les citer comme suit [3] :

- La distribution spatiale des ions implantés (la profondeur moyenne, la dispersion).
- Les distributions des pertes d'énergies électronique et nucléaire en fonction de la profondeur (distributions moyennes pour un ion exprimé en  $eV/\text{Å}$ )
- La distribution des lacunes qui se sont formés à partir du déplacement des atomes.
- le rendement de pulvérisation .

Le logiciel contient une interface qui fourni directement le profil de pénétration des ions incidents dans la cible et les différents paramètres physiques recherchés voir figure 2.4 .

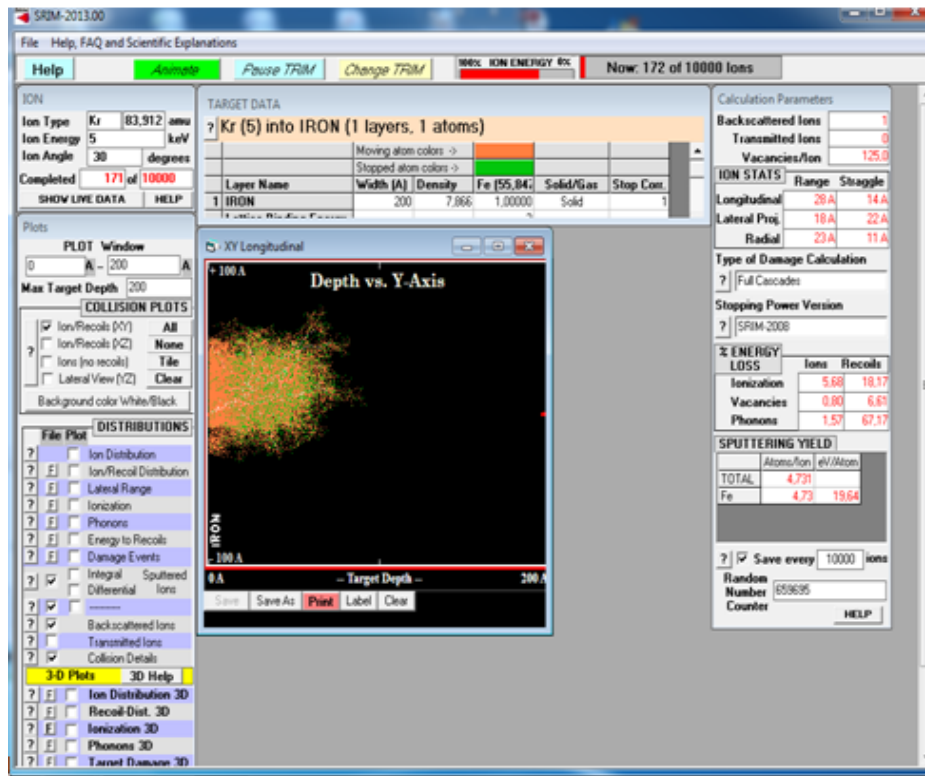
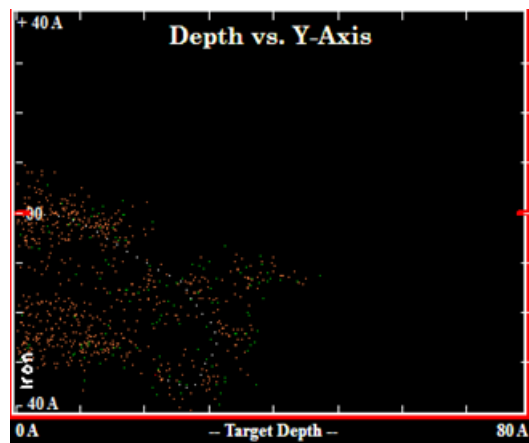


FIGURE 2.4 – Interface des résultats du programme TRIM

La trajectoire des ions est directement donnée par l'interface ainsi que les déplacements atomiques résultant. La figure 2.5 montre les cascades de collision provoquées par le passage d'un seul ion incident de 5 keV dans la cible. Les points blancs représentent l'ion projectile, les vert désignent les sites vacants créés par l'ion incident et les points oranges désignent les sites vacants créés par les cascades de collision (atomes de recul).

FIGURE 2.5 – Parcours d'un ion incident  $Kr^+$  accéléré à 5 keV

On remarque que le déplacement des atomes est limité à une région très proche de la surface et le parcours projeté maximal des ions est d'environ 50 nm. Cet ion a créé 120 sites vacants au total et 5 atomes pulvérisés d'après les résultats donnés par le programme TRIM, voir figure 2.6.

Calculation Parameters	
Backscattered Ions	0
Transmitted Ions	0
Vacancies/Ion	120,0

SPUTTERING YIELD		
	Atoms/Ion	eV/Atom
TOTAL	5,000	
Fe	5,00	27,63

FIGURE 2.6 – Quelques paramètres calculés par TRIM dans le cas du fer bombardé par un seul ion  $Kr^+$  de 5 keV.

Ce logiciel utilise la méthode de cascades de collisions, les atomes sont suivis individuellement lors de leurs déplacement jusqu'à ce que leur énergie devienne inférieure à  $E_d$ . Cette énergie c'est l'énergie minimale qu'il faut fournir à un atome cible pour le faire déplacer de son site et créer un site vacant. Si  $E_1$  est l'énergie des ions incidents après la collision et  $E_2$  est l'énergie transférée à un atome cible, 4 situations peuvent se présenter comme suit :

- Si  $E_1 > E_d$  et  $E_2 > E_d$  : l'ion incident peut faire déplacer l'atome cible le faire déplacer de son site qui va devenir à son tour une particule incidente qui va provoquer d'autres collisions constituant d'autres sites vacants.
- Si  $E_1 > E_d$  et  $E_2 < E_d$  : la cible reste dans son site car son énergie est petite ce qui veut dire qu'elle sera dissipée provoquant la vibration du réseau (création de phonons), par contre le projectile continue son mouvement.
- Si  $E_1 < E_d$  et  $E_2 > E_d$  : la cible devient une particule incidente car elle est éjectée, créant d'autres collisions. La particule incidente occupe des sites vides (substitutionnels) et son énergie est dissipée provoquant des vibrations dans le réseau (phonons).
- Si  $E_1 < E_d$  et  $E_2 < E_d$  : l'ion incident peut seulement occuper des sites interstitiels et son énergie est dissipée dans le réseau créant des phonons par contre la cible va continuer à vibrer sans quitter sa position.

## 2.2 Conclusion

Dans ce présent chapitre, nous avons décrit le logiciel SRIM 2013 (Stopping and Range of Ions in Matter) conçu sur la base de l'interaction ion-matière. Ce programme nous a permis de calculer certains paramètres physiques décrivant le phénomène de pulvérisation et de l'implantation ionique. Nous avons donné les interfaces d'entrée et de sortie du logiciel. Nous avons aussi expliqué brièvement le choix des paramètres d'entrée et le fonctionnement du logiciel.

# Chapitre 3

## Simulations par le logiciel SRIM

### 3.1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons les résultats de simulation du bombardement d'une cible fer par des ions  $Kr^+$  par le logiciel SRIM 2013 (Stopping Range Ion in Matter). Nous nous intéressons dans le cadre de ce travail à certains paramètres physiques décrivant le phénomène de pulvérisation de la matière et de quelques dégâts créés par le faisceau ionique.

### 3.2 Simulation de la pulvérisation

Nous présentons dans cette partie l'étude de la pulvérisation du fer par des ions  $Kr^+$  pour différents angles d'incidence et différentes énergies d'impact. La figure 3.1 montre les résultats des calculs du rendement de pulvérisation en fonction de l'angle d'incidence pour une valeur d'énergie d'impact 5 keV , la simulation est faite à 10000 ions incidents et avec un angle d'incidence variable par pas de  $5^\circ$  .

On remarque une évolution exponentielle du rendement de pulvérisation du fer lorsque l'angle d'impact s'écarte de la normale à la surface jusqu'à  $70^\circ$ , puis le rendement diminue lorsque les incidences deviennent rasantes. On explique la croissance par un dépôt d'énergie d'autant plus proche de la surface de la cible que l'angle est important. L'énergie ainsi transmise va induire une série de collisions successives (cascade de collisions). Cette dernière se développe moins en profondeur lorsque l'angle d'incidence s'écarte de la normale ce qui facilite l'éjection de la matière, par contre la décroissance du rendement de pulvérisation observé pour les angles supérieurs à  $70^\circ$  peut s'expliquer par la modification des interactions de collision entre le projectile et la surface. En effet à partir de cet angle certains ions ne peuvent plus rentrer dans la cible mais vont rebondir 'rétrodiffuser' ou diffuser vers l'avant, ce qui entraîne une diminution de la quantité d'atomes mise en mouvement et donc de la matière éjectée.

Notre résultat est proche du résultat expérimental trouvé par Hammoum [4] lors de l'étude des émissions optiques des produits de pulvérisation du fer massif soumis au faisceau d'ions  $Kr^+$  d'énergie 5 keV. En effet, le signal lumineux observé croît d'une manière exponentielle avec l'angle d'incidence jusqu'à un maximum au environ de  $60^\circ$  par rapport à la normale de l'échantillon.

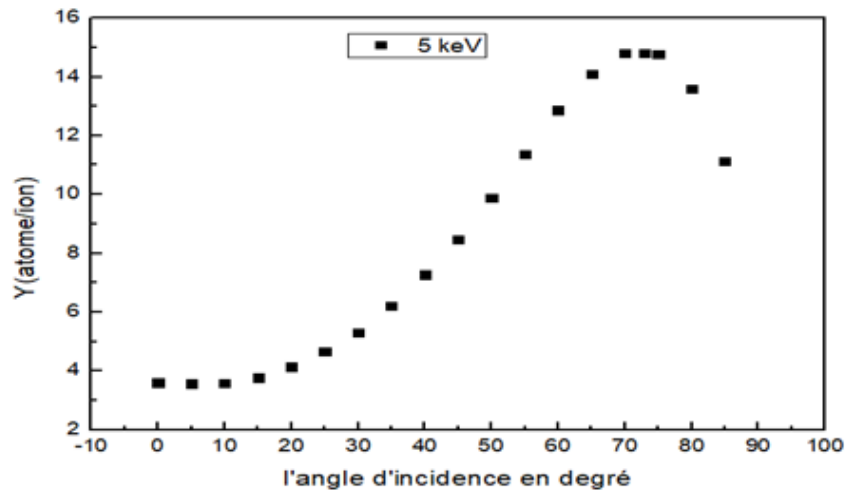


FIGURE 3.1 – Calculs numériques du rendement de pulvérisation du Fe par des ions  $Kr^+$  avec une énergie d'impact 5 keV en fonction de l'angle d'incidence par rapport à la normale à la surface de la cible.

La figure 3.2 montre les résultats des calculs du rendement de pulvérisation en fonction de l'angle d'incidence pour une valeur d'énergie d'impact 1 keV avec 10000 ions incidents.

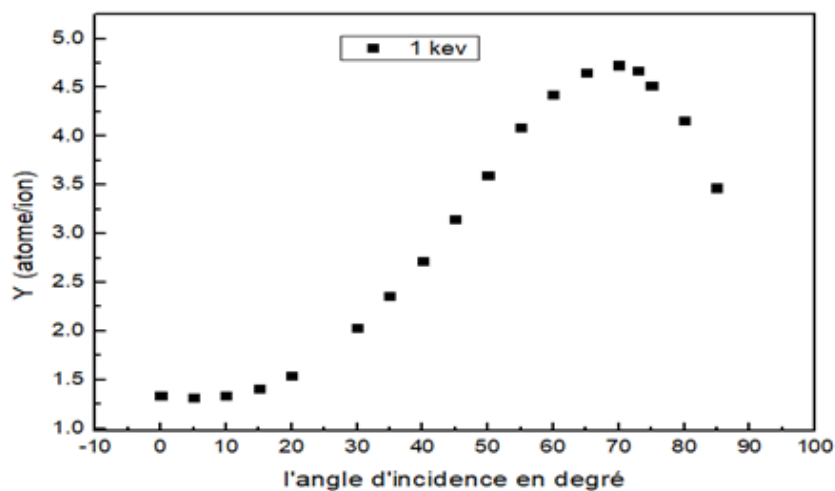


FIGURE 3.2 – Calculs numériques du rendement de pulvérisation du Fe par des ions  $Kr^+$  avec une énergie d'impact 1 keV en fonction de l'angle d'incidence par rapport à la normale à la surface de la cible.

On remarque une évolution similaire à celle observée précédemment pour une énergie d'incidence de 5 keV. Les rendements de pulvérisation diminuent d'un facteur 3 environ.

La figure 3.3 représente l'évolution du rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie incidente, on fixe quatre angles d'incidence successives  $0^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $60^\circ$  et  $70^\circ$  qui sont définis par rapport à la normale de la cible, le seuil de pulvérisation est repéré au environ de quelques dizaines d'eV, ce dernier représente l'énergie minimale du projectile pour arracher des atomes de la cible.

On remarque que le rendement de pulvérisation croît rapidement et quasi-linéairement pour des énergies d'attaques inférieures à 1 keV, un comportement déjà prédit par la théorie de Sigmund à basse énergie [18][19], ensuite il augmente lentement pour des énergies supérieures à 1 keV. A très basse énergies, très peu d'atomes sont mis en mouvement, les interactions de l'ion incident avec la cible est régi par le régime de collision simple. Par contre, pour des énergies proches du keV, l'énergie de l'ion incident est assez suffisante pour provoquer les cascades de collision, ce qui facilite l'émission de la matière. On remarque aussi que l'allure de la courbe n'est pas très affectée par l'angle d'incidence avec toutefois une légère croissance du rendement de pulvérisation pour des angles d'incidence très écartés de la normale pour le fait qu'une composante de la quantité de mouvement est parallèle à la surface et donc une bonne partie de l'énergie incidente est directement transférée aux atomes de la surface.

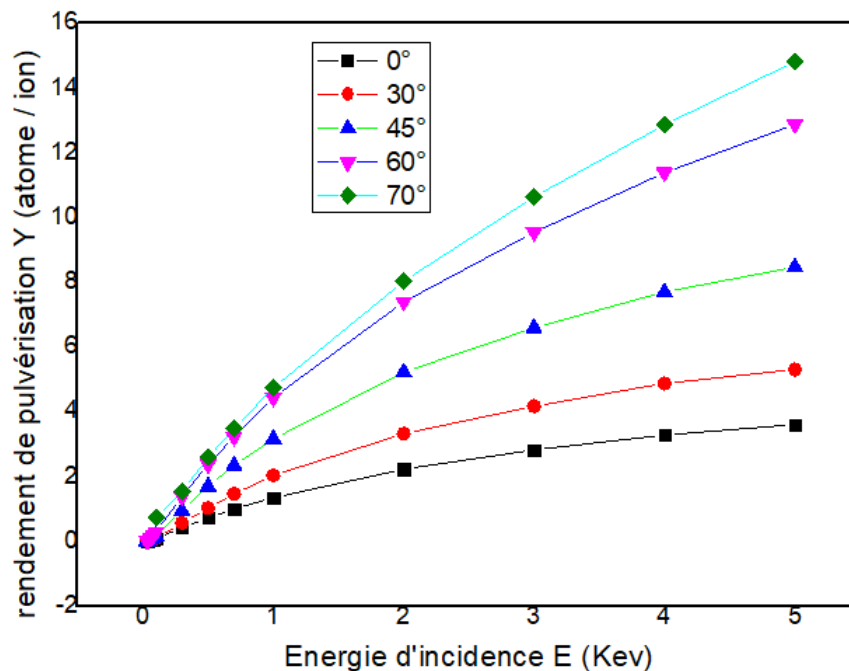


FIGURE 3.3 – Rendement de pulvérisation du Fe par des ions  $Kr^+$  en fonction de l'énergie d'impact.

### 3.3 Simulation des pouvoirs d'arrêt dans la cible

Les ions qui bombardent la cible sont freinés suite à deux types d'interactions : électronique et nucléaire. La figure 3.4 montre l'évolution du pouvoir d'arrêt électronique et du pouvoir d'arrêt nucléaire lors de l'interaction d'un faisceau d'ions  $Kr^{+}$  avec une cible Fer en fonction de l'énergie de la particule incidente. D'après les courbes données par le logiciel SRIM, nous remarquons une différence de l'évolution du pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire.

A basses énergies ( $E < 100$  keV), le ralentissement nucléaire est plus important que le ralentissement électronique, cette interaction élastique entraîne une cascade de collision et provoque le déplacement d'atomes dans la cible. Nous remarquons que la perte d'énergie nucléaire croît rapidement à très basses énergies ensuite ralenti avec l'énergie. Quand au pouvoir d'arrêt électronique, nous remarquons qu'il est en bon accord avec la théorie de LSS (Lindhard, Scharff et Schiott) [20] qui dit que ce dernier est proportionnel à la racine carrée de l'énergie incidente, voir figure 3.4.

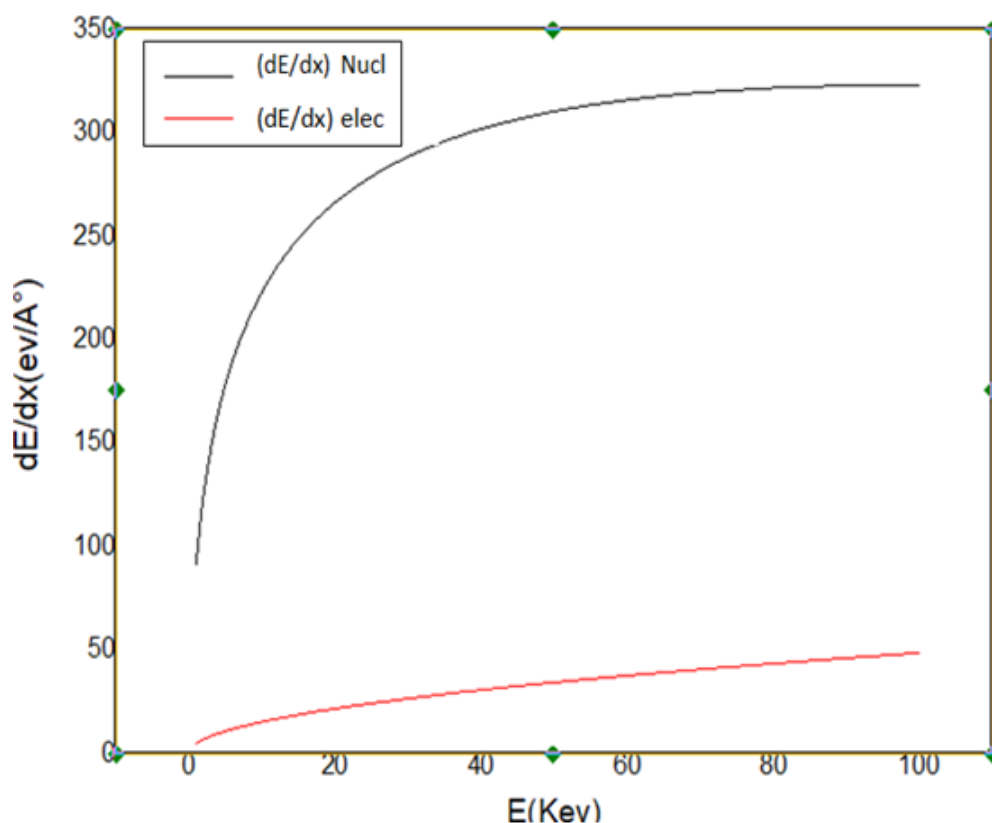


FIGURE 3.4 – Simulation des pouvoirs d'arrêt (nucléaire et électronique) des ions  $Kr^{+}$  dans une cible de Fe.

### 3.4 Distribution des ions en profondeur de la cible de Fe

La figure 3.5 représente la distribution à deux dimensions d'atomes à l'intérieur de la cible, une simulation provoquée par 10000 ions incidents de  $Kr^+$  (5 keV) calculé par le logiciel SRIM 2013 dans la cible de Fe. Ce profile est donné directement par l'interface du logiciel, il montre la pénétration des ions dans la cible avec une animation complète, ainsi que les cascades de recul et des atomes cibles qui se mélangent.

Chaque ion projectile est représenté par sa trajectoire (points blancs), les sites vacants créés par les atomes de recul sont désignés par les points oranges, les points verts sont les sites vacants créés par l'ion incident.

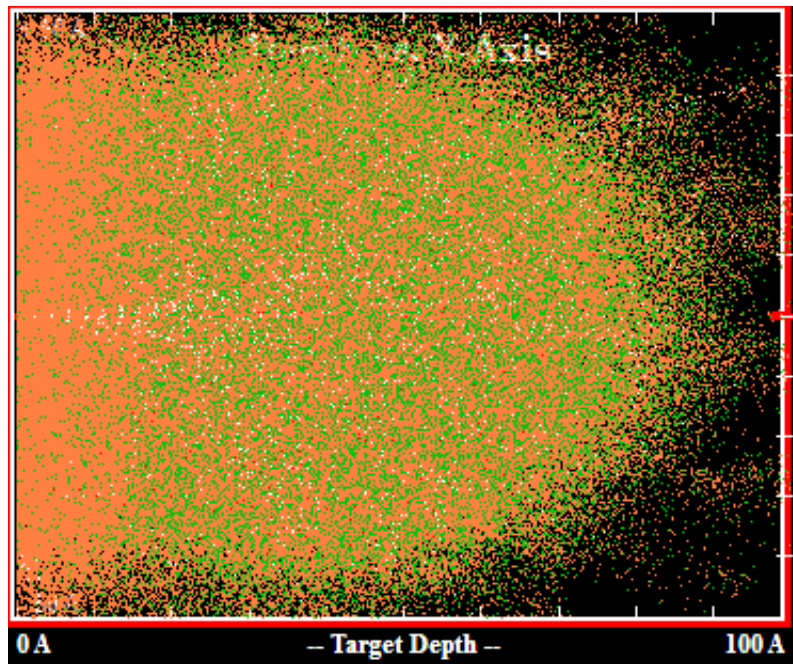


FIGURE 3.5 – la distribution de 10000 ions incidents de  $Kr^+$  (5keV) dans la cible Fe délivrée par le logiciel SRIM 2013

Les paramètres physiques donnés par la même interface sont : type de l'ion, l'énergie d'impact et l'angle d'incidence, on trouve aussi d'autres paramètres comme la densité (7,866 g/cm<sup>3</sup>) et la perte d'énergie en pourcentage (voir tableau 3.1), l'énergie de liaison de surface (4,34 eV), l'énergie de liaison de réseau (3 eV) et l'énergie de déplacement (25 eV). Dans le cas des ions  $Kr^+$  de 5 keV, la profondeur de pénétration est d'environ 100 Å, nous remarquons que le déplacement des atomes est limité à une région proche de la surface.

Lorsqu'un ion pénètre dans la matière, il perd son énergie suite aux collisions nucléaires avec les atomes cibles. Si cette énergie est supérieure à l'énergie de liaison de l'atome cible, ce dernier quitte son site pour devenir un projectile (atome de recul) à son tour qui va extraire d'autres atomes, un site vacant est ainsi créé.

Pour mieux voir la distribution de la figure 3.5, on reporte sur la figure 3.6 la distribution des atomes de recul Fe obtenue par l'interface du logiciel avec une énergie d'incidence de 5 keV. On conclue que la distribution des atomes de reculs suit une loi gaussienne avec plus de  $40 \cdot 10^7$  atomes de recul /  $cm^3$  pour une dose de 1 ion incident /  $cm^2$  crée pour une profondeur d'environ 25 Å.

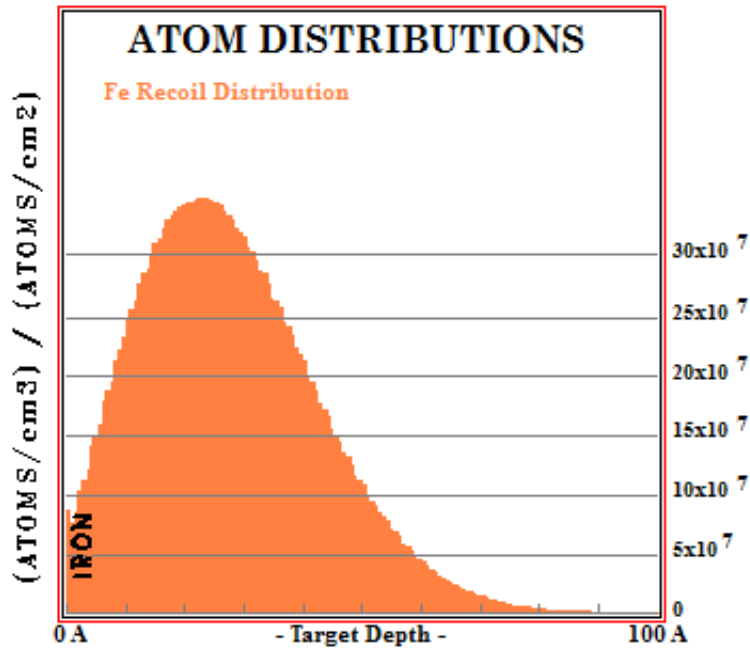


FIGURE 3.6 – Evolution de la distribution des atomes de recul en fonction de la profondeur de la cible Fe .

### 3.5 L'évolution de la perte d'énergie du projectile

Le tableau 3.1 montre la perte d'énergie en pourcentage donnée par l'interface du logiciel SRIM 2013, il permet de diviser l'énergie des ions incidents en différents types.

	ions	Atomes de reculs
Ionisation	5.52	17.62
Sites vacants	0.79	6.59
Phonons	1.60	67.88

TABLE 3.1 – Perte d'énergie en pourcentage.

La figure 3.7 obtenue par le logiciel SRIM 2013 montre l'évolution de l'énergie absorbée par atomes de reculs en fonction de la profondeur de la cible. L'énergie transférée aux cascades

de recul d'après le tableau 3.1 est  $17.62 \% + 6.59 \% + 67.88 \% = 92 \%$  de l'énergie des ions incidents, soit 4,6 keV par ion incident. Les ions incidents déposent donc 8 % de leurs énergies directement à la cible et 92 % aux cascades de recul. Ce transfert d'énergie décroît rapidement avec la profondeur. Il est clairement remarquable que les phénomènes de collisions en cascades progressent jusqu'à épuisement de l'énergie d'impact du projectile.

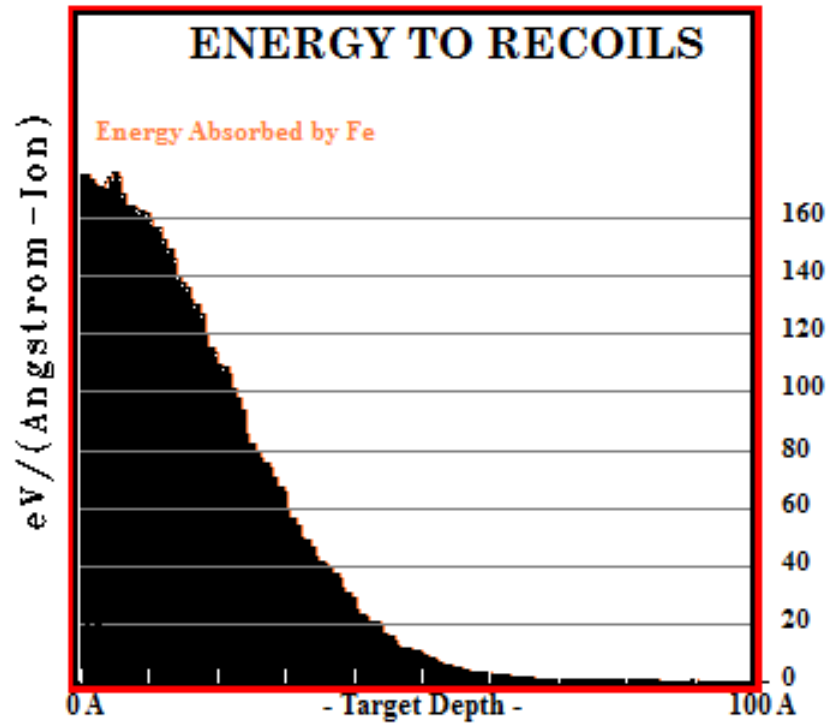


FIGURE 3.7 – Evolution de l'énergie transférée aux atomes de recoils en fonction de la profondeur de la cible Fe.

La figure 3.8 montre les résultats des pertes d'énergie en  $eV/\text{\AA}$  en fonction de la profondeur de la cible Fe. Quand un ion ou un atome de recul frappe l'atome du réseau et si l'énergie transférée est moins que l'énergie de déplacement, alors l'atome cible recule et vibre et n'aura pas assez d'énergie pour rebondir hors de son site, l'énergie est finalement donnée sous forme de phonons. La gaussienne montre la perte d'énergie aux phonons des atomes de recoils (Fe), et la ligne rouge désigne la perte d'énergie aux phonons des ions  $Kr^+$ , on peut à peine voir la perte d'énergie aux phonons des ions ( ligne rouge au bas de la parcelle) et les phonons sont produits presque exclusivement par les atomes cibles reculant .

Sur le tableau 3.1 qui donne la perte d'énergie en pourcentage on voit bien comment l'énergie incidente de chaque ion est dissipée. La rangée appelée phonons montre que les ions perdent seulement une petite quantité de leurs énergie en phonons (1.60%), tandis que les atomes de recoils déposent 67.88% de l'énergie en phonons soit au total 69,48%, ce qui équivaut à une énergie de  $69,48\% \cdot 5\text{keV} = 3,47 \text{ keV}$  de phonons par ion incident.

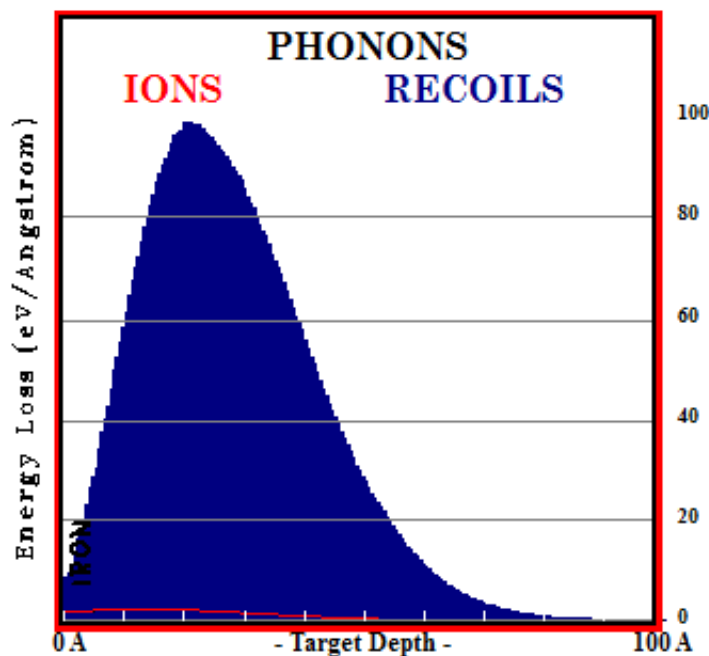


FIGURE 3.8 – Création de phonons.

La figure 3.9 décrit la perte d'énergie par ionisation en fonction de la profondeur de la cible. Il y a deux diagrammes distincts, un pour la perte d'énergie électronique des ions incidents, et un pour la perte d'énergie des atomes cibles reculant. Le tableau 3.1 qui donne la perte d'énergie en pourcentage montre que les ions incidents perdent seulement une petite quantité de leurs énergies aux électrons cibles (5.52 %), tandis que les atomes de reculs déposent 17.62 % de leurs énergies, soit au total 23,14 %. Les résultats de la simulation du phénomène d'ionisation du projectile à l'intérieur de la cible Fe montre que l'énergie transférée par les atomes de recul est supérieure à l'énergie transférée par les ions projectile  $Kr^+$ .

La figure 3.10 montre un menu des dégâts créés par les collisions, La courbe supérieure indique les déplacements totaux de la cible. C'est le nombre d'atomes éliminés de leur site à l'intérieur de la cible. La courbe inférieure suivante montre les sites vacants dans la cible Fe. Cette valeur est inférieure à la courbe des déplacements cibles, ce qui montre qu'il y a moins de sites vacants que de déplacements.

La courbe la plus basse montre les collisions de remplacement. Ce sont des déplacements dans lesquels l'atome incident abandonne presque toute son énergie, et il n'en a pas assez pour continuer plus loin, et il tombe dans la vacance laissée par l'atome cible reculant. C'est-à-dire qu'il supprime un atome cible, puis le remplace dans le réseau. On peut remarquer que la somme des deux courbes inférieures équivaut à la courbe supérieure des déplacements. Donc : Déplacements (134/ions) = Postes vacants( 126/ions) + Collisions de remplacement (9/ions) .

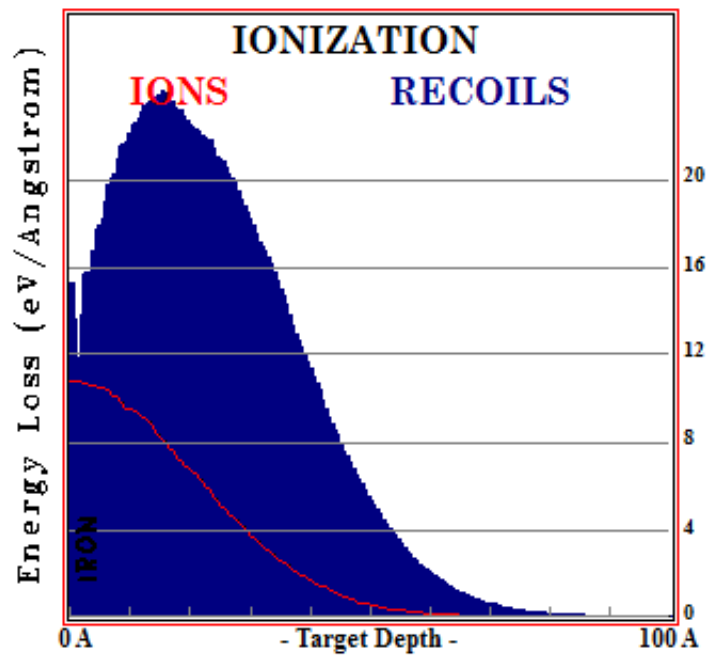
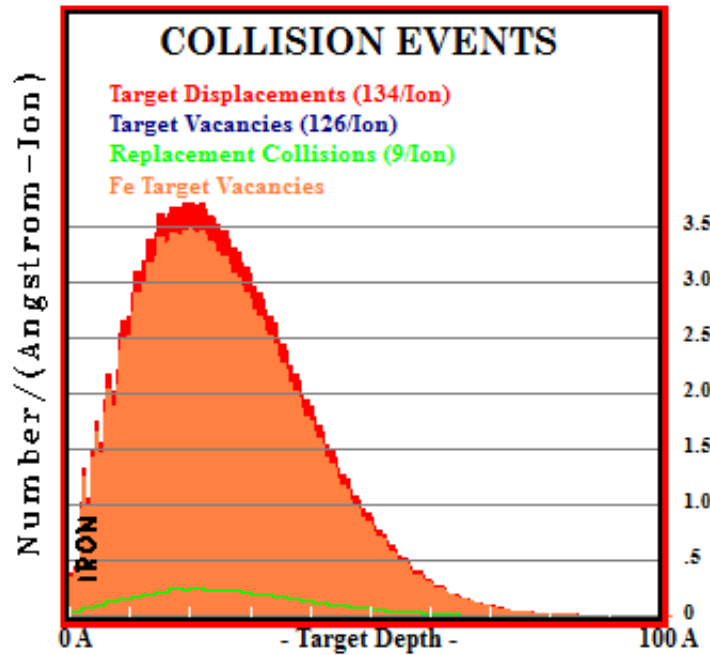
FIGURE 3.9 – Perte d'énergie par ionisation pour les ions projectiles  $Kr^+$ .

FIGURE 3.10 – Les dégâts créés par les collisions.

## 3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons introduit le logiciel SRIM 2013 qui est le plus utilisé actuellement par les spécialistes dans le domaine de l'implantation ionique et de la pulvérisation, afin de rappeler quelques notions de base de la physique des collisions. Dans ce présent travail, nous avons simulé quelques dégâts créés lors de l'impact d'un ion  $Kr^+$  de 5 keV avec une cible solide de fer, tel que le déplacement d'atomes et les sites vacants créés. Nous avons aussi évalué les pertes d'énergie électroniques et nucléaires et étudié le phénomène de pulvérisation. Ces quelques études et simulations nous ont permis de comprendre quelques phénomènes se produisant lors de l'interaction ion – matière.

# Conclusion générale

Le travail présenté dans le cadre de ce mémoire porte sur l'étude de l'interaction d'un faisceau énergétique d'ions  $Kr^+$  avec une cible de fer massif. Notre objectif consiste en la simulation de certains paramètres physiques décrivant le phénomène de pulvérisation et de l'implantation ionique. La modélisation a été réalisée en utilisant le logiciel SRIM 2013 (Stopping and Range of Ions In Matter) déjà décrit dans le chapitre 2.

Le logiciel est basé sur les méthodes de Monté Carlo, il consiste à simuler les collisions successives entre deux espèces, pour pouvoir estimer l'emplacement des ions implantés et les déplacements des atomes de la cible ainsi que les dommages créés à l'intérieur de la cible.

Dans ce présent travail, nous nous sommes intéressés au phénomène de pulvérisation. Pour la simulation, nous avons pris 10000 ions incidents  $Kr^+$  d'énergie de 5 keV et 1 keV avec un angle d'incidence variable. Nos résultats montrent une croissance exponentielle du rendement de pulvérisation avec l'angle d'incidence jusqu'à  $70^\circ$  puis diminue pour les incidences rasantes, un résultat très proche du résultat expérimental trouvé dans la littérature.

Nous avons par ailleurs évalué le rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie d'incidence. Nous avons constaté que le seuil de pulvérisation est au environ de quelques dizaines d'eV et que la croissance est rapide à très basses énergies ( $<1$  keV) tel que c'est donné dans la littérature.

Quand aux pertes d'énergies des ions projectiles à l'intérieur de la cible, l'étude procurée par le logiciel SRIM 2013, nous permet de dire qu'à basses énergies ( $<100$  keV), le ralentissement nucléaire prédomine; notons que ce type d'interaction élastique peut entraîner une cascade de collision conduisant aux déplacements d'atomes dans la cible.

Il est à noter que ce processus de perte d'énergie dû aux ions projetés et les atomes cibles se traduit par les phénomènes de collisions en cascades qui progressent jusqu'à épuisement de l'énergie incidente des ions projectiles. De plus la pénétration de l'ion à l'intérieur de la cible provoque certains dégâts qui se manifestent dans l'ionisation, création de phonons, création de sites vacants . . .

Nous souhaitons avoir contribué par ce travail à ramener un plus à l'étude de la pulvérisation du fer suite à un bombardement ionique. Pour mieux comprendre le comportement des ions à l'intérieur de la cible et mieux expliquer nos analyses, il serait encore intéressant de calculer les distributions angulaires et énergétiques des atomes pulvérisés. Par ailleurs,

nous souhaitons que ce travail de simulation, puisse être couplé, à l'avenir à des techniques expérimentales pour une analyse complète du phénomène.

# Bibliographie

- [1] F. Perry, *Diagnostic d'un plasma de pulvérisation cathodique magnétron : contribution à l'étude des possibilités de contrôle d'un procédé de dépôt d'alumine en conditions ré-actives*, Thèse de doctorat, Nancy 1, 1996.
- [2] P.-E. Lhuillier, *Etude du comportement de l'hélium et des défauts lacunaires dans le tungstène*, Thèse de doctorat, Université d'Orléans, 2010.
- [3] H. Faik-Etienne, *Étude de l'implantation ionique dans les miroirs multicouches Mo/Si : application aux optiques diffractives*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, 2005.
- [4] K. Hammoum, *Emissions optiques des produits de pulvérisation de métaux et leurs oxydes*, Thèse de doctorat, Université Mouloud Mammeri, 2012.
- [5] J. Dudognon, *Etude des modifications structurales induites par implantation ionique dans les aciers austénitiques*, Thèse de doctorat, Université d'Orléans, 2006.
- [6] A. Siad, *Etude numérique et expérimentale de la croissance de couches minces déposées par pulvérisation réactive.*, Thèse de doctorat, Ecole nationale supérieure d'arts et métiers-ENSAM, 2016.
- [7] L. Ottaviani, *Réalisation de jonctions pn dans le SiC-6H par implantation ionique d'aluminium*, Thèse de doctorat, Lyon, INSA, 1999.
- [8] C. Verdeil, *Étude de la pulvérisation et de l'émission de la matière sous bombardement Cs+*, Thèse de doctorat, Vandoeuvre-les-Nancy, INPL, 2008.
- [9] M. B. Lazar, "Etude du dopage par implantation ionique d'aluminium dans le carbure de silicium pour la réalisation de composants de puissance", 2002.
- [10] F. Haranger, *Etude de la pulvérisation du dioxyde d'uranium induite par des ions lourds multichargés de basse et très basse énergie cinétique; effet de la charge du projectile*, Thèse de doctorat, Université de Caen, 2003.

- [11] P. Sigmund, "Sputtering by ion bombardment theoretical concepts", in *Sputtering by particle bombardment I*, pp. 9–71, Springer, 1981.
- [12] Y. Yamamura and H. Tawara, "Energy dependence of ion-induced sputtering yields from monatomic solids at normal incidence", *Atomic data and nuclear data tables*, vol. 62, no. 2, pp. 149–253, 1996.
- [13] G. McCracken, "The behaviour of surfaces under ion bombardment", *Reports on Progress in Physics*, vol. 38, no. 2, p. 241, 1975.
- [14] M. Nastasi, J. Mayer, and J. K. Hirvonen, *Ion-solid interactions : fundamentals and applications*, Cambridge University Press, 1996.
- [15] M. A. Lieberman and A. J. Lichtenberg, "Principles of plasma discharges and materials processing", *MRS Bulletin*, vol. 30, pp. 899–901, 1994.
- [16] J. F. Ziegler, J. Biersack, and U. Littmark, "The stopping and range of ions in matter, vol. 1", 1, Pergamon Press, New York, 1985.
- [17] J. Ziegler, J. Biersack, and M. Ziegler, "Srim—the stopping and range of ions in matter, ion implantation press", 2008.
- [18] P. Sigmund, "Theory of sputtering. i. sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets", *Physical review*, vol. 184, no. 2, p. 383, 1969.
- [19] V. S. Smentkowski, "Trends in sputtering", *Progress in Surface Science*, vol. 64, no. 1-2, pp. 1–58, 2000.
- [20] J. Lindhard, M. Scharff, and H. E. Schiøtt, *Range concepts and heavy ion ranges*, Munksgaard Copenhagen, 1963.