



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 :

KACI Amar

Simulation de dopage par implantation ionique du Germanium

Devant le jury d'examen composé de :

BOUKELLAL	Ali	Professeur	U. M. M. T. O.	Président
AOUCHICHE	Hocine	Professeur	U. M. M. T. O.	Examineur
HAMMOUM	Karima	Maitre de conférences A	U. M. M. T. O.	Rapporteur

Soutenu le 02/10/2021

Remerciements

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Mécanique Structures et Energétique (LMSE) de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, sous la direction de Madame HAMMOUM Karima ep. HAMADOUCHE.

Ma gratitude profonde et mes vifs remerciements à Madame HAMMOUM Karima ep. HAMADOUCHE maître de conférences A à l'U.M.M.T.O. de m'avoir accueilli au sein de son équipe de recherche et d'avoir accepté de diriger ce travail. Sa compétence scientifique, ses conseils précieux et sa disponibilité ont permis de mener ce sujet de recherche dans un contexte motivant, favorable et très enrichissant. Je la remercie vivement pour la confiance et la considération qu'elle m'a toujours octroyées.

J'exprime aussi mes vifs remerciements aux membres du jury, Messieurs BOUKELLAL Ali et AOUCHICHE Hocine, professeurs à l'UMMTO pour l'intérêt qu'ils ont porté à notre recherche en acceptant d'examiner mon travail et de l'enrichir par leurs remarques.

Mes remerciements vont aussi à Monsieur MAKHLOUF Said, professeur à l'U.M.M.T.O et directeur du laboratoire LMSE pour m'avoir accueilli au sein de son laboratoire.

Je tiens aussi à remercier M. BOUKRIKA Allaoua chercheur senior au centre de recherche nucléaire d'Alger, pour m'avoir donné l'opportunité de visiter l'implanteur d'ions et d'avoir mis à ma disposition une documentation riche, qu'il trouve ici l'expression de ma profonde reconnaissance.

J'adresse mes plus sincères remerciements à mes parents, qui par leurs prières et leurs encouragements, j'ai pu surmonté tous les obstacles. De plus je remercie Mes sœurs Kahina et Célia et mes frères Hakim, Kocaila et Samy pour leurs soutiens.

Je voudrais exprimer ma reconnaissance envers les amis et camarades de promotion qui m'ont apporté leur support moral et intellectuel.

Enfin, je souhaite adresser mes remerciements au staff du département de physique de la faculté des sciences, ainsi que tous ceux qui m'ont soutenu de près ou de loin.

Résumé

Dans ce présent travail, nous étudions l'implantation des ions d'Azote, du phosphore et d'Arsenic dans une cible de Germanium par le logiciel SRIM (Stopping and Range of Ions In Matter).

Notre objectif consiste à étudier les différents phénomènes liés à l'implantation ionique ainsi qu'à l'interaction ion-matière. Pour cela, nous avons déterminé les profils de distribution des ions implantés, le pouvoir d'arrêt, et évalué les dommages créés à l'intérieur de la cible. Nous nous intéressons aussi à l'effet de l'énergie et la nature des ions incidents.

Mots clés : implantation ionique, Germanium, Azote, Phosphore, Arsenic, interactions, logiciel SRIM.

Abstract

In the present work, we study the implantation of Nitrogen, Phosphorus and Arsenic ions in a Germanium target by the SRIM (Stopping and Range of Ions In Matter) software.

The aim is to study the various phenomena related to ion implantation as well as ion-matter interactions. For this, we determined the ions distribution, the stopping powers, and we evaluated the damage caused in the target. We are also interested in the effect of energy and the atomic mass of the incident ions.

Key words: Ionic implantation, Germanium, Nitrogen, Phosphorus, Arsenic, interactions, SRIM software.

Table des matières

Introduction générale	1
1 Généralités sur l'implantation ionique	2
1.1 Introduction	2
1.2 Généralités sur le dopage	2
1.2.1 Introduction sur les semi-conducteurs	2
1.2.2 Le dopage	3
1.2.3 Implantation ionique	4
1.2.3.1 Les principaux avantages de l'implantation ionique	5
1.2.3.1 Les principaux désavantages de l'implantation ionique	6
1.3 Phénomènes induits par le bombardement ionique	6
1.3.1 La pulvérisation	6
1.3.2 La création de défauts	7
1.3.3 La rétrodiffusion	7
1.3.4 Éjection de produits des réactions nucléaires	7
1.4 Dispositif expérimental	8
1.4.1 Terminal	9
1.4.2 Système de guidage du faisceau d'ions	10
1.4.3 Chambre d'implantation	10
1.4.4 Principe de fonctionnement	10
1.5 Domaine d'application de l'implantation ionique	11
1.6 Interaction ion-matière	11
1.6.1 Collision	11
1.6.1.1 Les collisions élastiques	11
1.6.1.2 Les collisions inélastiques	14
1.6.2 Perte d'énergie	15
1.6.2.1 Le pouvoir d'arrêt nucléaire	15
1.6.2.2 Le pouvoir d'arrêt électronique	16
1.7 Conclusion	17

2 Simulation de l'implantation ionique dans le Germanium	18
2.1 Introduction	18
2.2 Description du logiciel SRIM	18
2.3 La cible de Germanium	21
2.4 Distribution des ions dans la cible de Ge	21
2.5 Simulation des pouvoirs d'arrêt des ions dans la cible de Germanium	27
2.6 Effets relatifs à l'implantation ionique	29
2.6.1 Phénomène d'ionisation	30
2.6.2 Création de phonons	32
2.6.3 Génération de défauts	33
2.7 Conclusion	36
Conclusion générale	37
Bibliographie	38

Introduction générale

La réalisation des composants électroniques est en expansion continue, avec les exigences des nouvelles technologies en matière de miniaturisation, de performance et de fiabilité. Parmi les procédés de fabrication de ces composants, l'introduction d'impuretés dans le substrat semi conducteur. D'ailleurs, plusieurs techniques ont été développées pour effectuer ce dopage, entre autres l'implantation ionique.

Cette technique est appliquée dans plusieurs domaines tels que la métallurgie, le biomédical et les céramiques [1]... son principe consiste à bombarder un substrat avec des ions accélérés de l'élément désiré avec suffisamment d'énergie pour pénétrer à l'intérieur d'un matériau cible avec une quantité contrôlable.

Dans le cadre de ce travail, on se propose d'étudier le comportement des ions d'Azote, du Phosphore, d'Arsenic implantés dans une cible de Germanium. Notre objectif est de simuler les différents phénomènes qui se produisent lors d'une interaction ion-atome avec le logiciel SRIM (Stopping and Range of Ions In Matter) [2].

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

Dans le premier chapitre, composé de deux parties, nous donnons des généralités sur le dopage et quelques rappels généraux sur l'interaction ion-matière afin d'introduire les notions de pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire, qui permettent de caractériser le ralentissement d'un ion projectile dans un matériau donné. Dans une autre partie, nous avons décrit l'implanteur d'ions et les domaines d'application.

Le deuxième chapitre comprend également deux parties. Dans un premier temps, nous donnons une brève présentation du logiciel utilisée SRIM 2013 (Stopping and Range of Ions in Matter) et son principe de fonctionnement, après quoi nous décrivons succinctement la cible de germanium et ses diverses utilisations. Dans la deuxième partie, nous présentons les résultats de simulation obtenus avec des énergies de 10, 100 et 180 keV, notamment l'évolution du pouvoir d'arrêt, le profil de distribution des ions implantés et les dommages créés à l'intérieur de la cible par les ions projectiles.

Enfin, nous terminons par une conclusion générale.

Chapitre 1

Généralités sur l'implantation ionique

1.1 Introduction

Dans ce premier chapitre, nous présentons des généralités sur le phénomène de l'implantation ionique et de l'interaction ion-matière. Nous rappelons donc quelques notions sur le dopage dans les semi-conducteurs, après quoi nous décrivons la technique de l'implantation ionique, son principe et l'appareillage expérimental ainsi que ses avantages et inconvénients, et domaines d'applications. Nous abordons aussi la théorie des pertes d'énergie lors de l'interaction ion-matière.

1.2 Généralités sur le dopage

1.2.1 Introduction sur les semi-conducteurs

Les matériaux solides peuvent être classés en trois catégories que sont les isolants, les semi-conducteurs et les conducteurs. On considère comme isolants les matériaux de résistivité $\rho > 10^6 \Omega.m$ (diamant $\rho = 10^{12} \Omega.m$), comme semi-conducteurs les matériaux tel que (Germanium $\rho = 0.5 \Omega.m$) et comme conducteurs les matériaux tel que (Aluminium $\rho = 2.8.10^{-8} \Omega.m$).

Un semi-conducteur est un solide cristallin dont les propriétés de conduction électrique sont déterminées par deux bandes d'énergie : la bande de valence et la bande de conduction. Dans un semi-conducteur intrinsèque (pur ou non dopé), y a donc autant d'électrons que de trous, en effet tous les électrons présents dans la bande de conduction proviennent de la bande de valence. Pour modifier cet équilibre entre les électrons et les trous afin d'augmenter la conduction électrique, les semi-conducteurs sont traités par un procédé chimique appelé : dopage.

1.2.2 Le dopage

Le dopage est l'introduction contrôlée d'atomes étrangers judicieusement choisis à l'intérieur d'un matériau semi-conducteur. Ces atomes peuvent se placer en position substitutionnelle (à la place d'un atome du réseau) ou interstitielle (entre les atomes du réseau). Les dopants sont de deux natures.

a) dopage Type p

Dans le cas des éléments de la colonne IV, du groupe A du tableau périodique, comme par exemple le Germanium, le dopage de type p est l'introduction dans le réseau d'une impureté trivalente de la colonne (III) du tableau périodique. Ces dopants tels que le Bore B, l'Aluminium Al, le Gallium Ga et l'Indium In, ont trois électrons de valence dans leurs couches externes.

Par exemple, si un atome de Bore est ajouté à l'atome de Germanium, trois des électrons de valence se fixent avec les atomes de Ge, pour former trois liaisons covalentes. Mais, un électron de plus dans le Germanium reste sans former de liaison. Comme il ne reste aucun électron dans le bore pour former une liaison covalente, l'espace est traité comme un trou. Ceci est illustré dans la figure suivante.

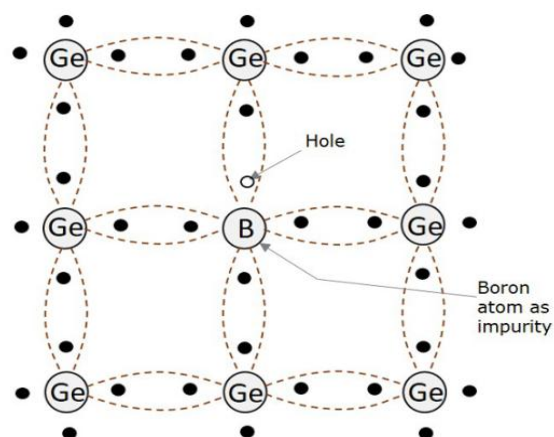


Figure 1.1 : dopage de type P [3]

b) dopage Type n

On obtient un semi-conducteur de type n en dopant le cristal de Ge avec des impuretés pentavalents appartenant à la colonne (V) du tableau périodique tels que : le Phosphore ou l'Arsenic.

L'Arsenic (33^e), par exemple, est un atome donneur avec 5 électrons de valence, 4 parmi eux sont mis en commun avec les atomes du Ge voisins pour réaliser des liaisons de covalence, le 5^{eme} électron se retrouve libre dans la bande de conduction. L'atome d'Arsenic qui a fourni un électron libre est appelé atome donneur. Ceci est illustré dans la figure suivante.

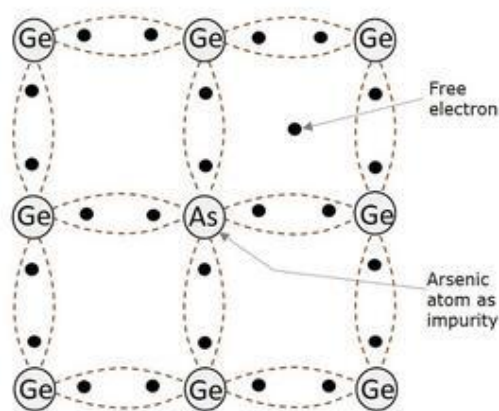


Figure 1.2 : dopage de type N [3].

1.2.3 Implantation ionique

L'implantation ionique est une technique utilisée dans la technologie des semi-conducteurs et plus récemment sur les métaux et les alliages, afin d'améliorer leur propriétés physiques et chimiques superficielles. Cette méthode consiste à bombarder une cible par des particules ionisées, à des énergies variant de quelques keV aux MeV. Les particules incidentes pénètrent à l'intérieur de la cible en effectuant une série de chocs avec les atomes de la cible jusqu'à dissipation de leur énergies et s'arrêtent en profondeur.

L'arrêt des ions présente une distribution de type Gaussienne. Cette distribution est caractérisée par deux paramètres qui sont le parcours moyen projeté (R_p) et l'écart quadratique moyen (ΔR_p).

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

Quant au ΔR_p , il caractérise la répartition statistique des ions en profondeur autour de R_p . Un autre paramètre physique est la déviation latérale souvent exprimée par ΔR_\perp (Figure 1.3). Il caractérise la dispersion latérale des ions, c'est un paramètre très important surtout dans le cas de l'utilisation des masques pour la conception (architecture) des composants.

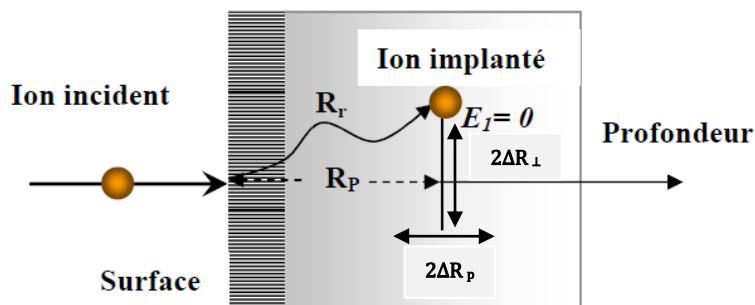


Figure 1.3 : Distribution des ions implantés en profondeur de la cible [4].

1.2.3.1 Les principaux avantages de cette technique

- Amélioration des propriétés de surface sans affecter les propriétés volumiques des matériaux.
- L'implantation ionique est un traitement à basse température.
- L'implantation ionique permet d'implanter n'importe quelle espèce dans n'importe quel matériau.
- Aucun risque de décollement (ce n'est pas un dépôt).
- La distribution en profondeur des ions est facilement contrôlée par l'énergie des faisceaux d'ions.
- Pas de modification dimensionnelle des pièces traitées du fait des faibles épaisseurs mises en jeu et du procédé permettant de limiter l'élévation de température.
- La possibilité de ne traiter qu'une partie du matériau (en cachant l'autre par un masque).
- C'est une méthode qui permet le contrôle très précis du profil de concentration du dopant dans la cible par simple réglage du courant et énergie des ions.

1.2.3.2 Les principaux désavantages de l'implantation ionique

- Les dommages provoqués dans la cible par le bombardement ionique.
- Les surfaces à traiter doivent être externes ou en vue directe du faisceau.
- La faible épaisseur du matériau traitée par cette technique : quelques centaines à quelques milliers d'angströms en surface.

1.3 Phénomènes induits par le bombardement ionique

Lors de l'implantation ionique dans un solide, des phénomènes physiques très différents peuvent avoir lieu par interaction de la particule chargée incidente avec les électrons et les noyaux des atomes cibles. La probabilité d'apparition de chacun de ces phénomènes dépend des caractéristiques de la particule incidente telles que la masse (m), la charge (z), l'énergie (E) et l'angle d'incidence (θ_i). D'après la figure 1.4, ces phénomènes sont les suivants.

1.3.1 La pulvérisation

Lorsqu'on bombarde de la matière avec des ions projectiles, les particules incidentes pénètrent à l'intérieur de la cible en effectuant différentes interactions avec la matière. En fait lors de ces interactions, les ions projectiles peuvent provoquer le phénomène de collisions en cascade en faisant déplacer des atomes quand l'énergie transférée est suffisante. Ces atomes déplacés peuvent être aussi éjectés quand ils se trouvent à proximité de la surface et que l'énergie transférée est supérieure à l'énergie de liaison de surface, c'est le phénomène de pulvérisation. Selon l'énergie d'incidence, la pulvérisation peut être induite par le pouvoir d'arrêt nucléaire (pulvérisation nucléaire) et par le pouvoir d'arrêt électronique (pulvérisation électronique).

On distingue trois régimes de pulvérisation nucléaire.

a) Régime de simple collision

Ce régime, caractérisé par le faible nombre d'atome pulvérisés, a lieu pour des basses énergies ($<1\text{keV}$) et/ou pour des ions légers, comme par exemple H et He.

b) Régime de cascade linéaire

Les collisions entre la particule incidente et les atomes de la cible produisent des atomes de recul énergétiques qui peuvent à leur tour produire une autre génération d'atomes de recul. Ce régime a lieu pour des énergies cinétiques de quelques dizaines de keV à quelques centaines de keV.

c) Régime de cascade non linéaire (Régime des pointes)

Le régime des pointes se manifeste généralement dans le cas des ions lourds d'énergies plus élevées (de l'ordre du MeV).

La pulvérisation d'un matériau est principalement caractérisée par le rendement de pulvérisation. Il correspond au rapport entre le nombre de particules émises et le nombre de projectiles [5] [6] [7]

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

1.3.2 La création de défauts

De nombreux défauts, ainsi que l'endommagement de la cible apparaissent, suite aux chocs successifs de l'ion incident avec les atomes du matériau cible et des cascades de collisions.

1.3.3 La rétrodiffusion

Elle a lieu si la masse de la particule incidente est trop faible par rapport à la masse de l'atome cible. La particule incidente peut alors rebondir sur les noyaux du solide et être rétrodiffusée.

1.3.4 Éjection de produits des réactions nucléaires : Électron, photon, particule légère et/ou lourd.

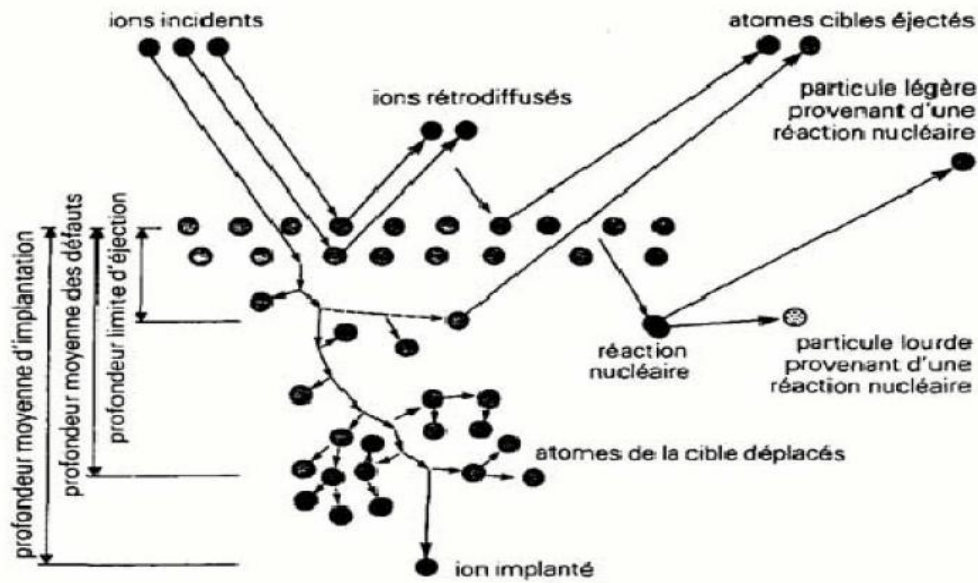


Figure 1.4 : Illustration des différents phénomènes se produisant au cours d'une implantation ionique dans un matériau solide [8].

1.4 Dispositif expérimental

L'implanteur ionique constitue l'élément de base de la technique d'implantation ionique. Il est considéré comme un accélérateur de particules. Son objectif est de délivrer un faisceau ionique mono-énergétique. Les principales caractéristiques de l'implanteur NV 3206 sont [9] :

- **Eléments disponibles :** B, P, As, Sb, Ar, Kr et N.
- **Faisceau :** Energie : 20 à 200 keV, Courant max : 1 mA.
- **Dose :** 10^9 à 10^{18} ions/cm².
- **Type de source d'ions :** Freeman (ionisation à impact électronique).
- **Système du vide secondaire :**
 - Source : Pompe à diffusion d'huile.
 - Beam line : Pompe cryogénique.
 - End station : Pompe cryogénique.

Cet implanteur est constitué essentiellement de trois parties : le terminal, le système de guidage du faisceau d'ions et la chambre d'implantation, voir figure 1.5 [9] :

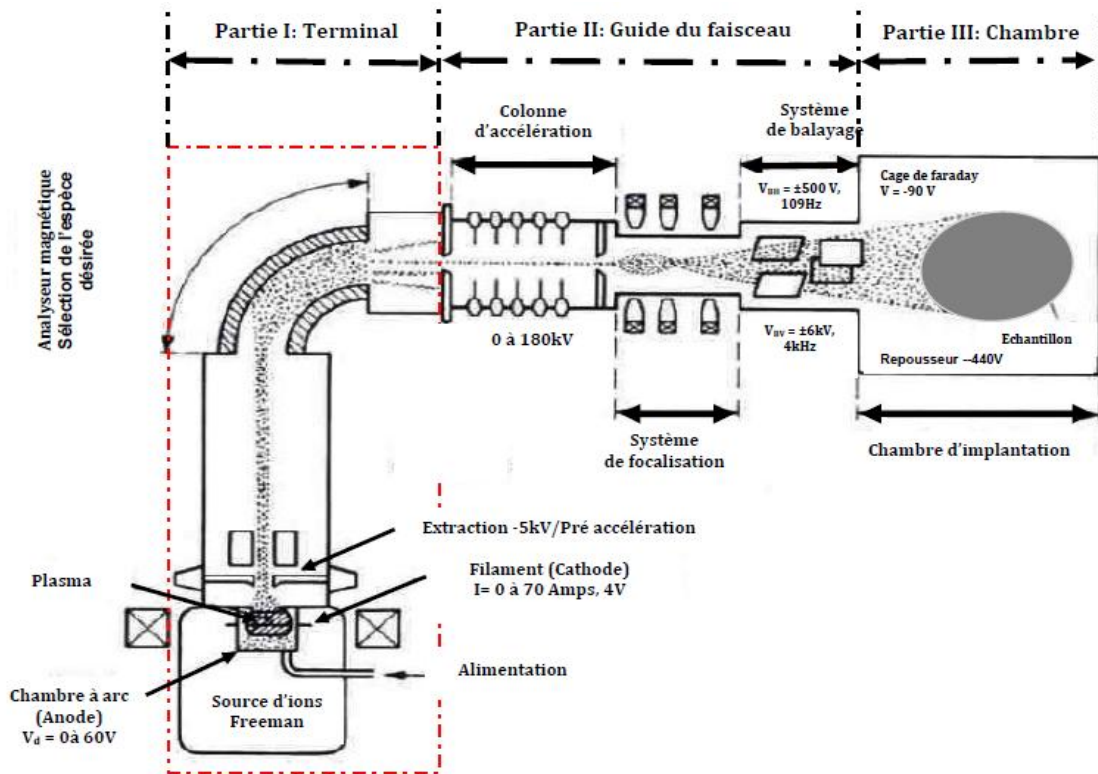


Figure 1.5 : Schéma de l'implanteur ionique NV 3206.

1.4.1 Terminal : il se compose de plusieurs éléments :

- **La source d'ions** : le terminal est disposée d'une source d'ions de type Freeman c'est-à-dire ionisation par impact électronique destinée à générer un plasma de l'espèce à implanter.
- **Panneau de gaz 'gaz box'** : Le panneau de gaz est le système qui nous permet d'introduire le gaz de l'espèce à ioniser dans la source.
- **Electrode d'extraction et le repousseur d'électrons** : Cette électrode est portée à une tension négative fixe de -5kV qui nous permet d'extraire les ions positifs du faisceau et de repousser les électrons sortant de la chambre d'arc.
- **L'analyseur magnétique** : Le rôle principal de cette pièce est de sélectionner l'espèce ionique désirée. Ceci est assurée par le choix du champ magnétique adéquat et donc du courant adéquat.

1.4.2 Système de guidage du faisceau d'ions

Il est constitué de trois pièces maitresses qui sont la colonne d'accélération, le système de focalisation et le système de balayage.

- **Colonne d'accélération** : Son rôle est d'accélérer les ions de l'espèce désirée. Ceci est obtenu par une série d'électrodes portées à un potentiel croissant.
- **Système de focalisation et de balayage** : La focalisation du faisceau d'ions est obtenue, dans notre cas, par un jeu de 3 lentilles électrostatiques dans l'objectif de réduire les dimensions du faisceau à un spot de quelques millimètres et d'assurer un balayage uniforme de la surface de la cible traitée.

1.4.3 Chambre d'implantation

L'implanteur NV3206 est équipé d'une chambre d'implantation dédiée pour effectuer des implantations pour des travaux de recherche et développement nommée '**chambre RD**'. Elle est constituée de trois éléments qui sont :

- Le porte échantillon.
- La cage de faraday.
- Le repousseur d'électron.

1.4.4 Principe de fonctionnement

L'implanteur dispose d'une source d'ions de type Freeman dans laquelle les éléments à ioniser sont introduits sous forme de gaz. Les molécules de gaz de l'espèce à implanter, arrivent à la source et pénètrent à l'intérieur de la chambre à Arc où elles vont subir des collisions avec les électrons émis par le filament de Tungstène puis accélérés vers les parois de la chambre à Arc par une différence de potentiel appliquée entre la cathode et l'anode. Ces électrons vont ioniser le gaz, un plasma est donc formé. Afin d'améliorer le confinement du plasma entre le filament et l'anode un champ magnétique est appliqué.

A la sortie de la chambre d'ionisation, l'extraction des ions du plasma formé est assurée par une électrode d'extraction et leur pré-accélération à une première énergie intermédiaire pour former un faisceau d'ions. Ensuite le faisceau ionique passe par un analyseur magnétique où un champ magnétique est appliqué pour sélectionner l'espèce ionique désirée.

Ensuite dans le système de guidage du faisceau d'ions, ceux sélectionnés sont accélérés avec une énergie suffisante grâce à une série d'électrodes portées à un potentiel croissant. En sortant de la colonne d'accélération, le faisceau énergétique va pénétrer au sein du système de focalisation qui consiste à utiliser un système de lentilles quadripolaires, Le rôle de cet élément est de réduire les dimensions du faisceau. Par la suite le faisceau ionique rentre dans le système de balayage en X et Y qui permet de balayer une certaine surface de la cible avec le faisceau d'ions incident pour assurer l'uniformité de la dose (nombre d'ions/cm²) d'implantation à travers cette surface. Cette dernière est placée dans une chambre d'implantation sous vide et refroidie pendant l'implantation pour évacuer l'énergie thermique apportée par le faisceau d'ions.

1.5 Domaine d'application de l'implantation ionique

- **En mécanique :** améliorer les propriétés mécaniques (frottement, usure, fatigue) ou chimique (adhésion).
- **En microélectronique :** améliorer la conductivité des semi-conducteurs qui sont à la base de la fabrication des puces électroniques et des cellules photovoltaïques.
- **En biomédical :** réalisation d'un dopage sur des capteurs de rayonnement pour imagerie médical ou radiothérapie, capteur de pression et de flux sanguin.

1.6 Interaction ion-matière

1.6.1 Collision

Une collision est le rapprochement de deux ou plusieurs objets qui subissent une interaction mutuelle sans qu'il y ait un impact dans le lieu. Il existe deux types de collisions : collision élastique et collision inélastique.

1.6.1.1 Les collisions élastiques

Dans le domaine de faible énergie cinétique (keV), le processus d'interaction entre un ion et un atome cible est considéré comme une collision élastique binaire entre deux corps m_1 et m_2 , l'énergie cinétique et la quantité de mouvement sont donc conservées. La figure 1.6 schématise cette collision.

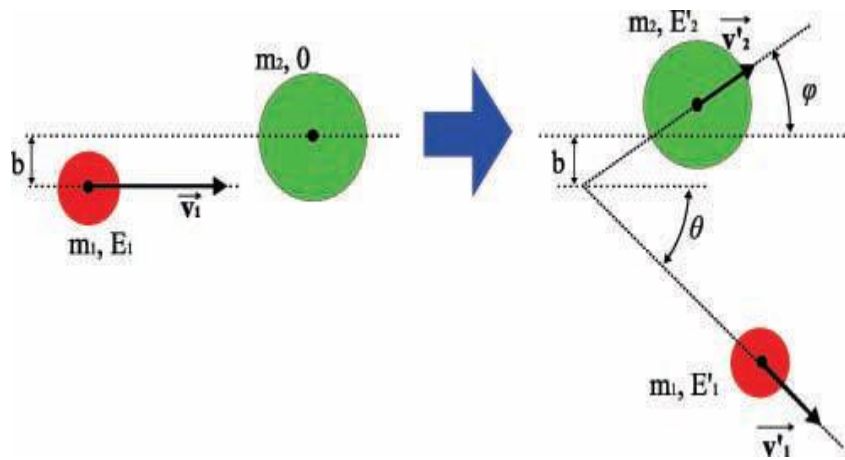


Figure 1.6 : Schéma d'une collision élastique entre deux particules [10].

Les directions (θ et φ) et les énergies (E'_1 et E'_2) des particules après la collision dépendent de leurs masses, de l'énergie cinétique E_1 de la particule incidente et du paramètre d'impact b . Nous pouvons déduire, à partir des équations de conservation, le facteur cinématique K . Celui-ci 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 mises en jeu et du paramètre d'impact b qui influe directement sur les angles de diffusion du projectile θ et de l'atome cible φ .

La conservation de l'énergie peut se formuler par :

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

Soit :

$$\frac{1}{2}m_1v_1^2 = \frac{1}{2}m_1v'^2_1 + \frac{1}{2}m_2v'^2_2 \quad (1.1)$$

La conservation de la quantité de mouvement donne :

$$\begin{aligned} \vec{P}_1 &= \vec{P}'_1 + \vec{P}'_2 \\ m_1\vec{v}_1 &= m_1\vec{v}'_1 + m_2\vec{v}'_2 \end{aligned} \quad (1.2)$$

La projection selon les axes de mouvement :

$$m_1 v_1 = m_1 v'_1 \cos \theta + m_2 v'_2 \cos \varphi \quad (1.2a)$$

$$m_1 v'_1 \sin \theta = m_2 v'_2 \sin \varphi \quad (1.2b)$$

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

$$E'_2 = \frac{(m_2 v'_2)^2}{2m_2} = \frac{(m_2 v'_2 \sin \varphi)^2 + (m_2 v'_2 \cos \varphi)^2}{2m_2} \quad (1.3)$$

$$E'_2 = \frac{m_2 v'^2_2}{2m_2} = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 - \frac{1}{2} m_1 v'^2_1 = \frac{(m_1 v'_1 \sin \theta)^2 + (m_1 v_1 - m_1 v'_1 \cos \theta)^2}{2m_2} \quad (1.4)$$

En multipliant l'équation (1.4) par $(2m_2)$ et en simplifiant par (m_1) et (v_1^2) , on obtient une équation de second degré :

$$(m_1 + m_2) \left(\frac{v'_1}{v_1} \right)^2 - 2m_1 \cos \theta \left(\frac{v'_1}{v_1} \right) + m_1 - m_2 = 0 \quad (1.5)$$

D'où les solutions :

$$\frac{v'_1}{v_1} = \frac{m_1 \cos \theta \pm \sqrt{(m_1 \cos \theta)^2 - (m_1 + m_2)(m_1 - m_2)}}{m_1 + m_2} \quad (1.6)$$

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

$$\frac{v'_1}{v_1} = \frac{m_1 \cos \theta + \sqrt{m_2^2 - m_1^2 (\sin \theta)^2}}{m_1 + m_2} \quad (1.7)$$

On peut écrire l'énergie finale de la particule 1:

$$E'_1 = k \cdot E_1$$

Avec :

$$k = \left(\frac{m_1 \cos \theta + \sqrt{m_2^2 - m_1^2 (\sin \theta)^2}}{m_1 + m_2} \right)^2 \quad (1.8)$$

K : est appelé facteur cinématique ou de rétrodiffusion.

De la même manière on calcul l'énergie transmise à la particule de masse m_1 , en exprimant E'_1 de deux manières :

$$E'_1 = \frac{(m_1 v'_1)^2}{2m_1} = \frac{(m_1 v'_1 \sin \theta)^2 + (m_1 v'_1 \cos \theta)^2}{2m_1} \quad (1.9)$$

$$E'_1 = \frac{m_1 v'^2_1}{2} = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 - \frac{1}{2} m_2 v'^2_2 = \frac{(m_2 v'_2 \sin \varphi)^2 + (m_1 v_1 - m_2 v'_2 \cos \varphi)^2}{2m_1} \quad (1.10)$$

On réduit les termes en v'^2_1 et simplifiant ensuite par m_2 et v'_2 :

$$v'_2 = \frac{2m_1}{m_1 + m_2} v_1 \cos \varphi \quad (1.11)$$

L'énergie transmise s'écrit :

$$T = E'_2 = \frac{1}{2} m_2 v'^2_2 = \frac{1}{2} m_2 \left(\frac{2m_1}{m_1 + m_2} v_1 \cos \varphi \right)^2 \quad (1.12)$$

Cette énergie peut s'écrire aussi sous la forme :

$$T = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E_1 \cos^2 \varphi \quad (1.13)$$

1.6.1.2 Les collisions inélastiques

Lors d'un choc inélastique, l'énergie cinétique totale des particules n'est pas conservée, elle est dissipée et transmise à leur environnement (électrons). Par contre La quantité de mouvement reste toujours conservée. On distingue trois processus essentiels lors de la Collision inélastique : la capture, l'excitation et l'ionisation.

- **La capture** : l'atome cible perd un électron qui est capturé par le projectile.
- **L'excitation**: le transfert d'énergie peut laisser le projectile où l'atome cible dans un état excité.
- **L'ionisation**: un électron est arraché à un atome cible ou au projectile.

1.6.2 Perte d'énergie

Lorsqu'une particule chargée d'énergie E , pénètre dans un solide, elle perd progressivement son énergie cinétique par deux phénomènes:

- Les collisions avec les atomes de la cible (transfert d'énergie par choc élastiques) conduisant à une perte d'énergie ou ralentissement nucléaire $S_n(E)$.
- Les interactions inélastiques avec les électrons (excitation et ionisation des atomes) conduisant à une perte d'énergie ou ralentissement électronique $S_e(E)$.

Dans le domaine d'énergie correspondant à l'implantation ionique, on peut considérer que ces deux ralentissements sont indépendants. La perte d'énergie totale $S_t(E)$ de la particule chargée s'exprime donc par :

$$S_t(E) = S_n(E) + S_e(E) = \frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dx} \right) \quad (1.14)$$

Avec : N la concentration atomique de la cible.

1.6.2.1 Le pouvoir d'arrêt nucléaire

Le pouvoir d'arrêt nucléaire représente les collisions élastiques qui ont lieu à faible vitesse, ou la majorité des ions incidents pénètre dans la cible et transfère de l'énergie aux autres atomes de la cible par collision élastique. Le pouvoir d'arrêt nucléaire s'écrit [11] :

$$S_n(E) = \frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dX} \right)_n = \int T d\sigma \quad (1.15)$$

N : est le nombre d'atomes de la cible par unité de volume.

T : l'énergie cinétique transférée par l'ion incident au cours d'une collision élastique.

$d\sigma$: la section efficace différentielle de collision.

On définit la section efficace de diffusion :

$$\sigma = \pi b^2 \quad \text{ou} : d\sigma = 2\pi b db \quad (1.16)$$

La section efficace de collision s'exprime en fonction du potentiel interatomique $V(R)$.

le potentiel utilisé par les simulateurs d'implantation d'ions comme le logiciel SRIM est le potentiel universel ZBL (Ziegler, Biersack et Littmark) [12] :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} f\left(\frac{r}{a}\right) \quad (1.17)$$

Z_1 et Z_2 : numéros atomiques de l'ion incident et de l'atome de la cible.

r : distance entre l'ion et la cible.

$f\left(\frac{r}{a}\right)$: Fonction d'écran (fonction de Thomas-Fermi).

a : rayon d'écran.

Avec :

$$f\left(\frac{r}{a}\right) = 0.1818 \exp\left(-3.2 \frac{r}{a}\right) + 0.5099 \exp\left(-0.9423 \frac{r}{a}\right) + 0.2802 \exp\left(-0.4028 \frac{r}{a}\right) + 0.2817 \exp\left(-2016 \frac{r}{a}\right)$$

$$a = \frac{0.4685}{\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{2/3}}$$

L'expression analytique du pouvoir d'arrêt nucléaire est donnée par [13]:

Pour $\varepsilon \leq 30$

$$S_n = \frac{\ln(1 + a\varepsilon)}{2\left(\varepsilon + b\varepsilon^c + d\varepsilon^{\frac{1}{2}}\right)} \quad (1.18)$$

Avec : $a = 1,1383$, $b = 0,01321$, $c = 0,21226$ et $d = 0,19593$

Pour $\varepsilon > 30$

$$S_n = \frac{\ln(\varepsilon)}{2\varepsilon}$$

Avec :

$$\varepsilon = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{E_0 a}{Z_1 Z_2 e^2}$$

1.6.2.2 Le pouvoir d'arrêt électronique

Les collisions électroniques sont des interactions inélastiques entre le projectile et les atomes de la cible, où des ions pénétrant à grande vitesse dans le matériau cible transfèrent leur

énergie aux électrons des atomes du matériau, en excitant ou ionisant ses atomes (Processus inélastique de transfert d'énergie)

L'expression analytique de la perte d'énergie électronique est décrite par le model LSS (Lindhard, Scharff et Schiott) à faible vitesse $\left(v < v_0 z_1^{\frac{2}{3}} \right)$ [14] :

$$S_e = 8\pi e^2 a_0 \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{3/2}} \frac{v}{v_0} \quad (1.19)$$

Avec :

v_0 : La vitesse de Bohr.

a_0 : Le rayon de Bohr.

v : La vitesse de l'ion implanté.

A $\left(v > v_0 z_1^{\frac{2}{3}} \right)$ le ralentissement électronique décroît, son expression est donnée par Bohr [15] :

$$S_e = 2\pi(NZ_2) \frac{M_1 Z_1^2 e^4}{E_1 m_e} \ln \left(\frac{T_{max}}{T_{min}} \right) \quad (1.20)$$

$N Z_2$: densité volumique d'électrons, m_e : masse de l'électron.

1.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté des généralités sur le phénomène de l'implantation ionique et quelques notions sur l'interaction ion-matière. Nous avons par ailleurs expliqué le principe de la technique, décrit son appareillage et cité ses avantages et ses inconvénients. Quand au logiciel SRIM utilisé dans ce présent travail ainsi que les différents résultats obtenus, ils seront abordés dans le deuxième chapitre.

Chapitre 2

Simulation de l'implantation ionique dans le Germanium

2.1 Introduction

Dans ce présent chapitre, nous présentons les résultats de simulation effectués avec le logiciel SRIM sur une cible de Germanium implantée à l'Azote, au Phosphore et à l'Arsenic. Dans la première partie du chapitre nous donnons une brève description du programme de simulation numérique SRIM, ensuite nous présentons les différents résultats liés à l'implantation ionique à savoir le profil de distribution des dopants à l'intérieur de la cible, la perte d'énergie par unité de distance ainsi que les dégâts causés par le bombardement ionique.

2.2 Description du logiciel SRIM

SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) est un logiciel informatique qui fonctionne sous Windows et qui permet de simuler le parcours et l'arrêt des ions incidents avec la matière dans la gamme d'énergie 10 eV – 2 GeV. Ce logiciel utilise un code TRIM (Transport of Ion in the Matter) basé sur l'approximation des collisions binaires (BCA), dont les différents chocs ne sont pas corrélés entre eux et sur le principe de la méthode Monté Carlo qui permet de modéliser des phénomènes complexes par une approche de type stochastique qui est particulièrement intéressante pour traiter les distributions des particules introduites dans les semi-conducteurs par implantation ionique. Notons que la version du code TRIM utilisée dans notre travail est valable pour des cibles amorphes.

Ces programmes développés par James F.Ziegler et Jochen P.Biersack [2] [16], permettent d'accéder à plusieurs données intéressantes : la distribution suivant les trois dimensions de l'espace des ions implantés, la quantité et la nature des atomes pulvérisés, le profil de perte d'énergie des ions dans le matériau en fonction de la profondeur, le nombre de chocs générés, l'ionisation, et la production de phonons ,etc..

Ce logiciel possède une interface de démarrage qui permet au manipulateur de choisir entre deux programmes principaux qui sont : le calcul du pouvoir d'arrêt des ions (Stopping/Range Tables) et le calcul détaillé (TRIM Calculation) comme le montre la figure 2.1

➤ Pour le calcul du pouvoir d'arrêt des ions : 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 (Voir figure 2.3), l'utilisateur peut choisir les différents éléments qui composent la cible (matériau, composition, densité), de la même manière on procède pour les ions incidents (nature, énergie et angle d'incidence) par un simple clic sur l'icône "Add new élément to layer", "add new layer " ; en utilisant l'icône PT (ou tableau périodique). Le numéro atomique et la masse sont donnés par défaut. On peut choisir aussi entre plusieurs modes de calcul :

- Distribution d'ions et calcul rapide des dommages (Ion Distribution and Quick Calculation of Damage): dans ce cas seul la trajectoire de la particule incidente est simulée.
- Calcul détaillé avec cascade complète de dommage (Detailed calculation with damage cascades) : cette option est pour le suivi de tous les atomes (primaire ou secondaire), chaque atome de recul est suivi jusqu'à ce que son énergie devienne inférieure à E_d (l'énergie minimale qu'il faut transférer à un atome cible pour le déplacer de son site et créer une lacune). Tous les dommages dans la cible sont analysés.



Figure 2.1 : Interface menu du logiciel SRIM 2013.

2.2. Description du logiciel SRIM

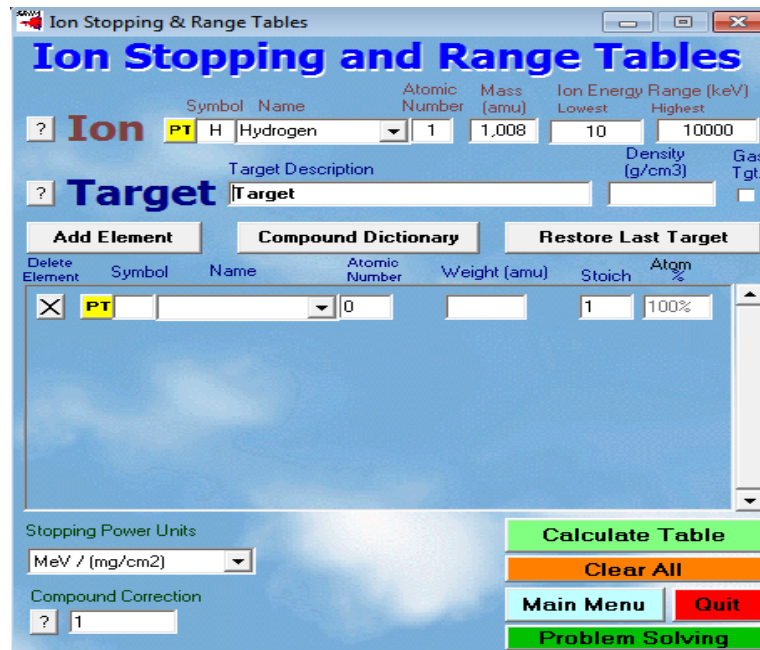


Figure 2.2 : Interface du programme Ion Stopping and Range Tables.

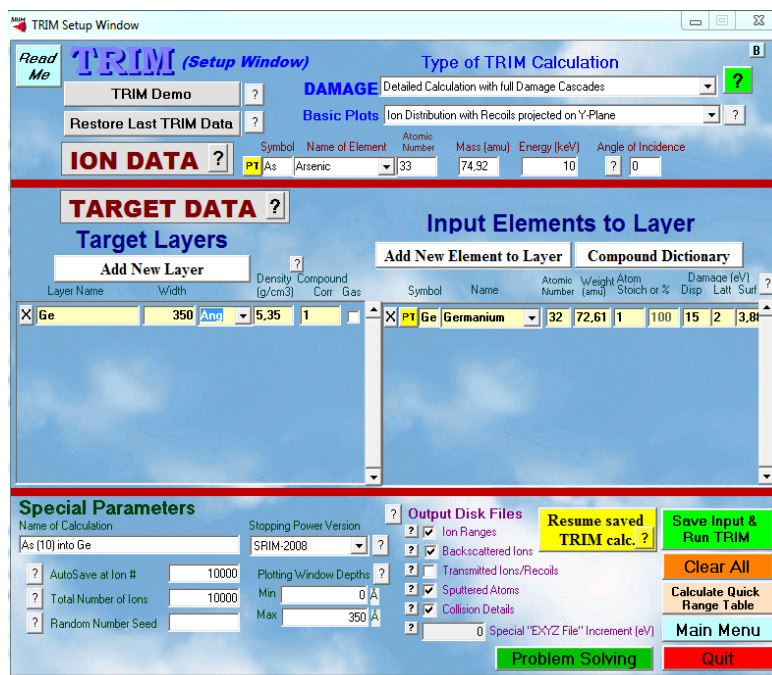


Figure 2.3 : Interface du programme TRIM.

2.3 La cible de Germanium

Le Germanium est un élément chimique ayant le symbole Ge et le numéro atomique 32 du groupe IVA du tableau périodique. Sa configuration électronique est $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^2$.

Le Germanium est un métalloïde, semi-conducteur qui cristallise dans la structure diamant. Les principales utilisations du Germanium sont diverses [17]: il est utilisé dans les systèmes optiques IR puisque les verres à Germanium ou à dioxyde de Germanium ont la propriété de transmettre des radiations IR, en électronique dans la fabrication des transistors et des circuits intégrés, ou alors dans l'industrie des cellules photovoltaïques ou encore comme catalyseur. Le substrat à base de Germanium est en pleine expansion puisqu'il offre une meilleure efficacité et une bonne conversion de l'énergie solaire. Il devient de ce fait un concurrent potentiel pour le silicium.

2.4 Distribution des ions dans la cible de Ge

Le logiciel SRIM nous a permis de simuler le parcours des ions incidents comme l'Azote (N, $Z=7$), Phosphore (P, $Z=15$) et l'Arsenic (As, $Z=33$) à l'intérieur de la cible de Germanium ainsi que la distribution des ions implantés.

Dans notre cas nous avons choisi le nombre d'ions incidents $N=10000$ pour avoir une bonne précision statistique de la probabilité de présence dans une cible de Germanium (Ge, $Z=32$), pour différentes énergies 10, 100 et 180 keV à incidence normale (un angle de 0° par rapport à la normale à la surface de la cible).

Avec le logiciel SRIM, nous avons la possibilité de suivre la pénétration des ions projectiles à l'intérieur de la cible avec une animation complète. La figure 2.4 nous montre un exemple de profil de pénétration des ions d'Azote (N) dans la cible de Germanium (Ge) selon la profondeur à deux dimensions présentée sur l'interface du logiciel SRIM. Les ions projectiles sont représentés par leur trajectoire (points blancs), les sites vacants créés par les atomes de recul sont désignés par des points oranges quant aux sites vacants créés par l'ion incident sont représentés par des points verts.

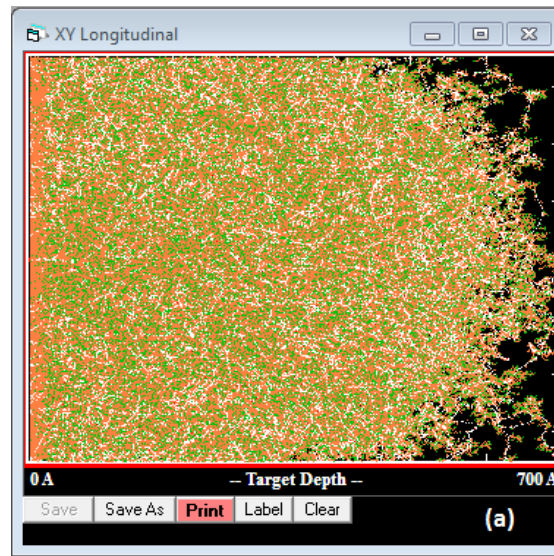


Figure 2.4 : Profil de pénétration à deux dimensions des ions d'Azote accélérés à 10 keV dans la cible (Ge), délivré par le logiciel SRIM-2013.

Les paramètres physiques qui caractérisent la cible sont fournis aussi par la même interface du logiciel, nous les avons regroupés dans le tableau suivant :

Densité massique (g.cm^{-3})	Energie de déplacement E_d (eV)	Energie de liaison de réseau E_b (eV)	Energie de liaison de surface E_s (eV)
5.350	15	2	3.88

Tableau 2.1 : Les paramètres caractérisant la cible de Germanium (Ge).

Parmi nos objectifs est de trouver l'allure de la distribution des ions implantés à l'intérieur de la cible (Ge). Le profil enregistré pour des dopants (N) à des énergies d'incidence 10, 100 et 180 keV est donné par la figure 2.5. L'allure de cette distribution est quasi-gaussienne pour ces différentes énergies, des résultats similaires ont été reportés sur le dopage de ZnO et CuInSe₂ [18][19].

D'après la figure 2.5.a, on remarque que les ions d'Azote se déplacent jusqu'à une profondeur de 900 Å pour une énergie d'incidence de 10 keV.

Son parcours projeté qui représente la profondeur moyenne ou les ions implantés s'arrêtent, et qui se calcule en additionnant la projection des parcours élémentaires réalisés après chaque choc est donné par $R_p = 241 \text{ \AA}$. L'écart type (largeur à mi-hauteur) qui représente l'élargissement du profil autour de la concentration maximale est $\Delta R_p = 131 \text{ \AA}$.

Dans le cas d'une énergie de 100 keV, les ions se déplacent jusqu'à une profondeur d'environ 3500 \AA avec une profondeur moyenne $R_p = 1693 \text{ \AA}$ et un écart type $\Delta R_p = 653 \text{ \AA}$. Quant à l'énergie de 180 keV, le déplacement des ions se fait jusqu'à une profondeur de 5000 \AA avec les paramètres $\Delta R_p = 962 \text{ \AA}$ et $R_p = 2930 \text{ \AA}$. D'après la figure 2.5.c, et pour une dose d'ions d'Azote implantés de $10^{15} \text{ ions.cm}^{-2}$, le pic de concentration est d'environ $4.5 \cdot 10^{18} \text{ ions.cm}^{-3}$, un pic obtenu à la profondeur moyenne R_p .

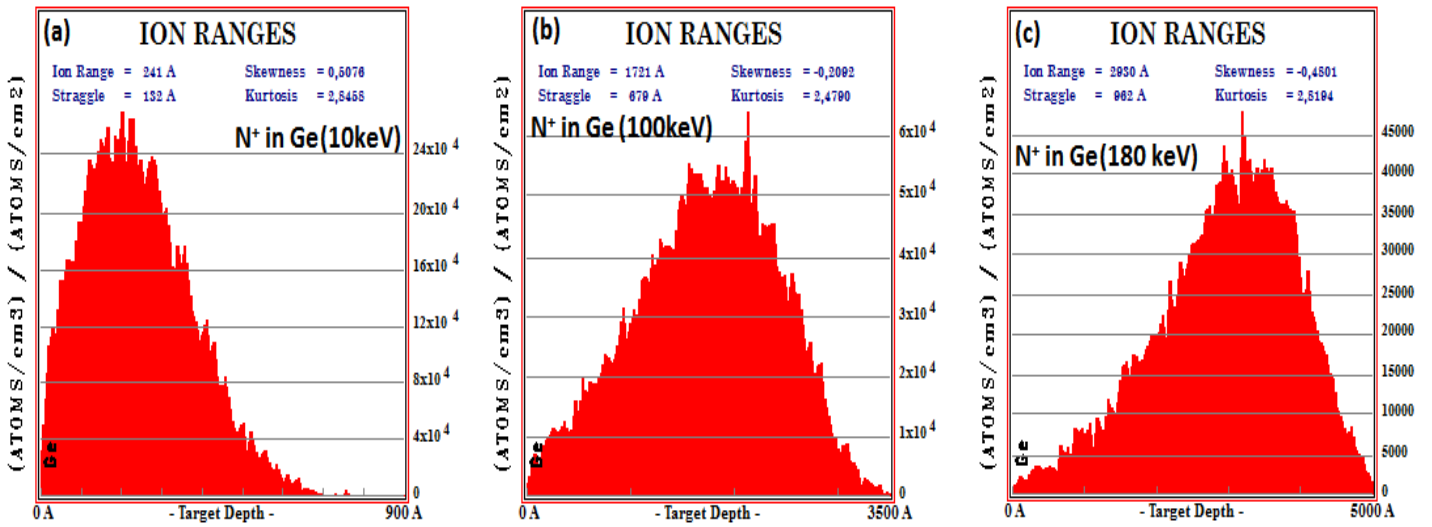


Figure 2.5 : Distribution des ions N⁺ implantés dans la cible Ge.

(a) - 10 keV (b) - 100 keV (c) - 180 keV

La figure 2.6 et la figure 2.7 représentant les profils de distribution des ions implantés pour les dopants (P⁺ et As⁺) à différentes énergies (10, 100 et 180 keV), montrent aussi des allures quasi- gaussiennes.

2.4. Distribution des ions dans la cible de Ge

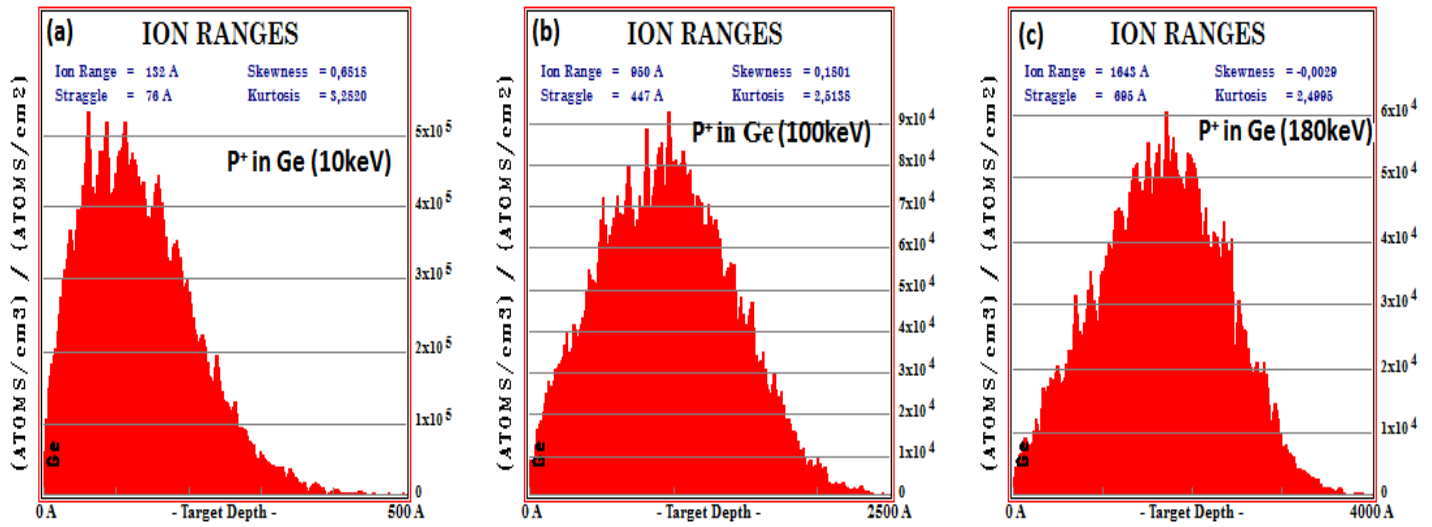


Figure 2.6 : Distribution des ions P⁺ implantés dans la cible Ge.
(a) - 10 keV (b) - 100 keV (c) - 180 keV

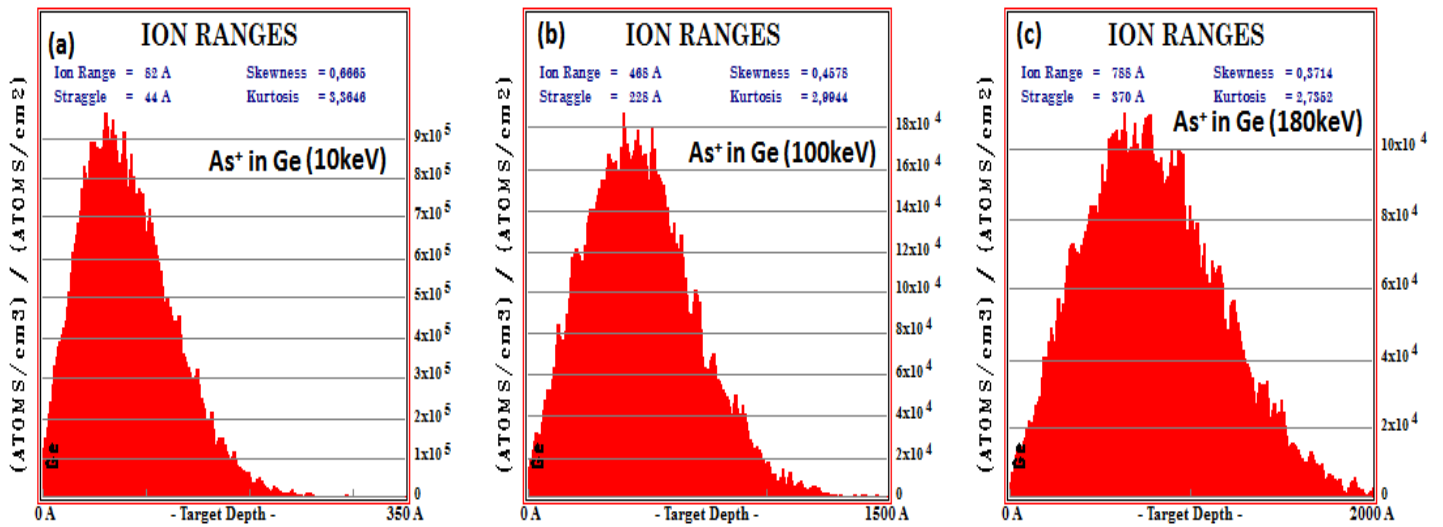


Figure 2.7 : Distribution des ions As⁺ implantés dans la cible Ge.
(a) - 10 keV (b) - 100 keV (c) - 180 keV

Le tableau 2.2 résume toutes les valeurs des paramètres de distribution des trois dopants pour des énergies d'incidence 10, 100 et 180 keV.

E (keV)	10 keV			100 keV			180 keV		
	R_p (\AA°)	ΔR_p (\AA°)	$\Delta R_p/R_p$	R_p (\AA°)	ΔR_p (\AA°)	$\Delta R_p/R_p$	R_p (\AA°)	ΔR_p (\AA°)	$\Delta R_p/R_p$
N	241	131	0.543	1693	653	0.385	2930	962	0.328
P	132	76	0.575	950	447	0.470	1643	695	0.423
As	82	44	0.536	468	228	0.487	788	370	0.469

Tableau 2.2 : Paramètres de distribution des ions d'Azote, de Phosphore et d'Arsenic implantés dans le Germanium.

Afin de comparer ces paramètres statistiques de la distribution, nous avons présenté sur la figure 2.8 l'évolution de la profondeur moyenne de pénétration en fonction de l'énergie d'incidence et de la masse atomique des dopants. On remarque bien que R_p est plus important pour les fortes énergies et pour des dopants légers, ce qui montre que les ions lourds sont beaucoup plus ralentis et freinés à l'intérieur de la cible.

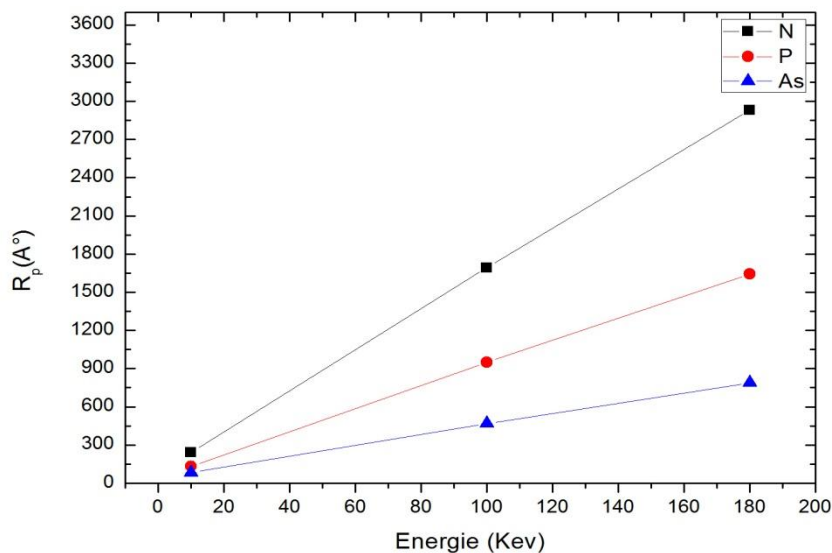


Figure 2.8 : Le parcours moyen projeté (R_p) des ions (N^+ , P^+ et As^+) en fonction de l'énergie d'incidence.

Quant à l'écart type ΔR_p (paramètre de dispersion absolue) indiquant de combien les valeurs d'une distribution s'écartent de la valeur moyenne, est représenté sur la figure 2.9.

On remarque que cette dispersion est plus forte avec l'énergie et pour les ions légers.

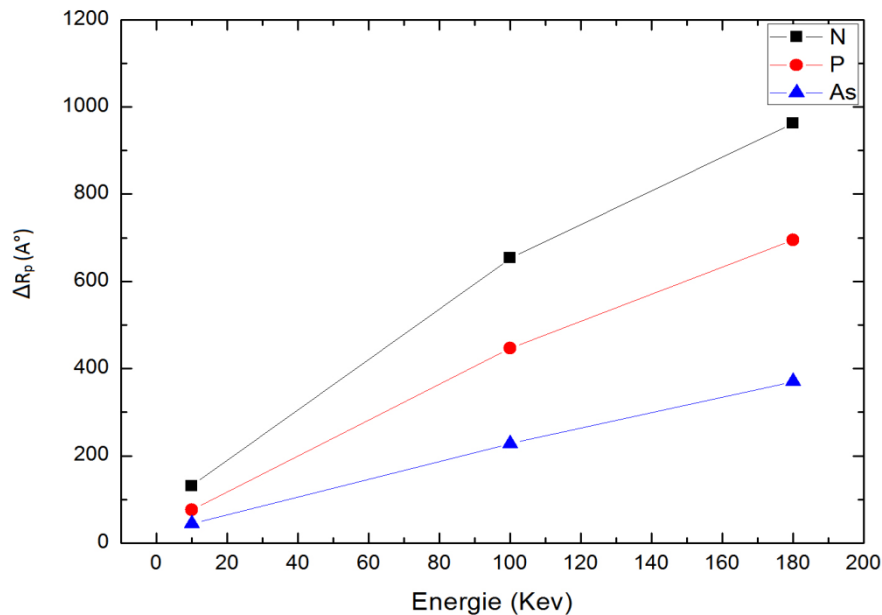


Figure 2.9 : L'écart type sur la distribution des ions (N^+ , P^+ et As^+) en fonction de l'énergie d'incidence.

Seulement la comparaison des paramètres de dispersion absolue s'avère insuffisante quand la valeur moyenne n'est pas identique (R_p), comme c'est le cas dans ce présent travail (voir figure 2.8). Par conséquent, nous avons pensé à calculer le paramètre de dispersion relatif qui est donné par le rapport : ($C_V = \Delta R_p / R_p$). Un paramètre statistique qui nous renseigne sur l'homogénéité de la distribution et permet d'évaluer l'importance relative de la dispersion, on admet que la distribution est homogène pour ($C_V < 15\%$) et relativement dispersée pour ($C_V > 15\%$) [20].

La figure 2.10 illustre l'évolution de ce coefficient de variation en fonction de l'énergie et de la masse atomique des dopants. D'après la figure, on remarque bien que ce rapport diminue quand l'énergie augmente et il est aussi moins important quand la masse atomique diminue. Ce qui veut dire que la dispersion est moins importante à des énergies élevées et pour les ions légers, une propriété très intéressante pour les dopants légers.

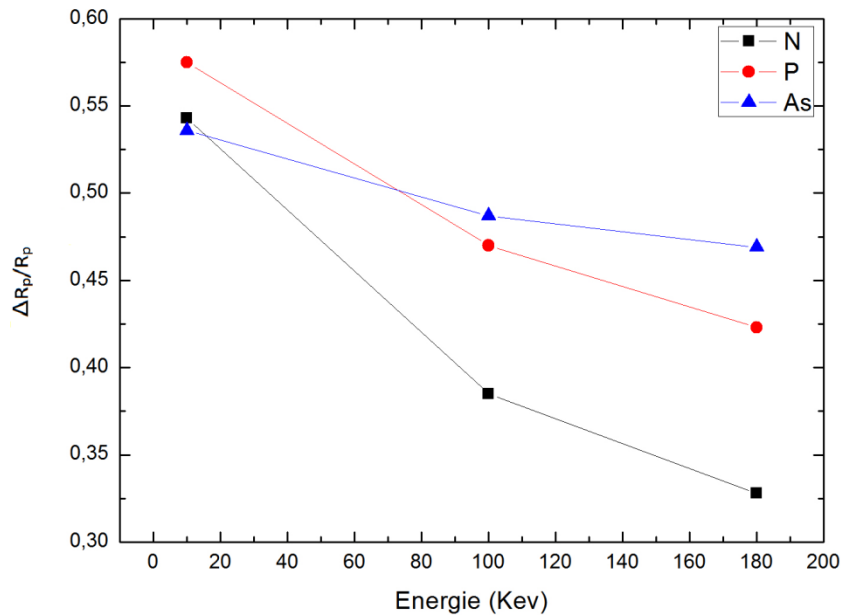


Figure 2.10 : Evolution du coefficient de variation sur la distribution des ions (N^+ , P^+ et As^+) en fonction de l'énergie

2.5 Simulation des pouvoirs d'arrêt des ions dans la cible de Germanium

Lorsqu'une particule incidente pénètre à l'intérieur de la cible, elle subit différentes interactions et perd de l'énergie par deux processus : nucléaire et électronique.

La figure 2.11 illustre l'évolution des pertes d'énergie nucléaire des ions (N^+ , P^+ , As^+) dans la cible de Ge en fonction de l'énergie d'incidence.

D'après la figure 2.11, on remarque que l'évolution du pouvoir d'arrêt nucléaire est similaire pour les éléments (N^+ , P^+ et As^+) avec un facteur d'échelle différent tel que c'est prédit par la littérature [21]. Le ralentissement nucléaire devient important quand l'ion est plus lourd, c'est-à-dire que l'énergie perdue par collisions élastiques avec les noyaux des atomes cibles est plus importante, ce qui limite le déplacement des ions lourds à une région proche de la surface. Ceci est en accord avec les résultats trouvés pour la distribution des ions implantés (voir paragraphe ci-dessus) qui montrent que les ions légers (Azote) pour le dopage N ont une portée plus importante à l'intérieur de la cible, d'autres travaux l'ont montré aussi pour le Bore dans le cas du dopage P [22], ce qui leur donne une particularité intéressante et qui fait qu'ils sont les dopants les plus privilégiés pour les semi-conducteurs [23].

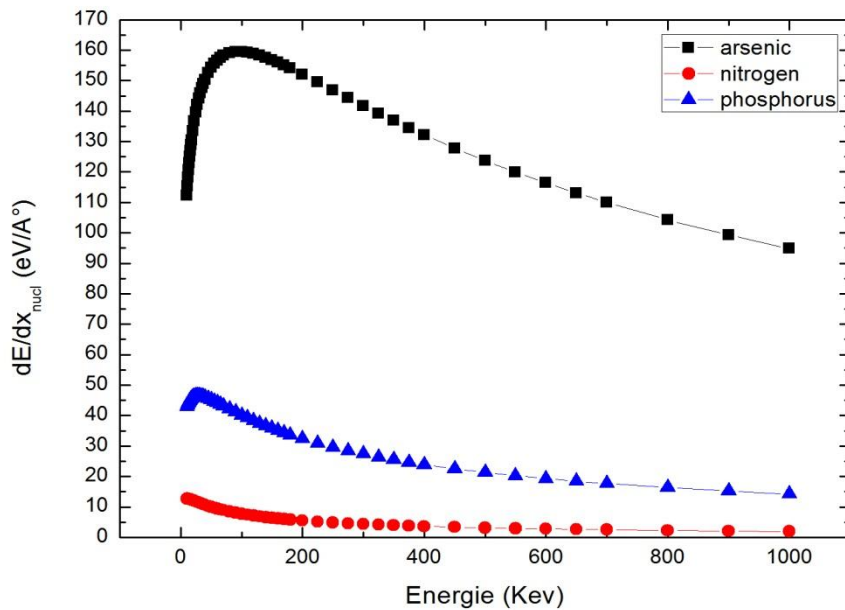


Figure 2.11 : Simulation des pouvoirs d'arrêt nucléaire des ions (N^+ , P^+ , As^+) dans une cible de Ge.

La figure 2.12 représente l'évolution des pertes d'énergie électronique des ions (N^+ , P^+ , As^+) dans la cible de Ge en fonction de l'énergie d'incidence.

D'après la figure 2.12, on remarque que le pouvoir d'arrêt électronique est caractérisé par une allure proportionnelle à la racine carrée de l'énergie incidente (la vitesse de l'ion projectile), comme le prouve la théorie LSS (Lindhard, Scharff et Schiott) [14].

Le ralentissement électronique est causé par l'interaction inélastique entre les projectiles ioniques et les électrons de la cible. Il est responsable de l'excitation et l'ionisation des atomes cibles ou l'ion incident peut transférer son énergie aux électrons de la cible soit en provoquant des sauts entre les couches électroniques (excitation) soit en éjectant des électrons si l'énergie transférée aux électrons périphériques devient supérieure à leur énergie de liaison. D'après nos observations, le ralentissement électronique prédomine dans le cas de dopants légers, quant aux ions lourds son importance apparait à forte énergie.

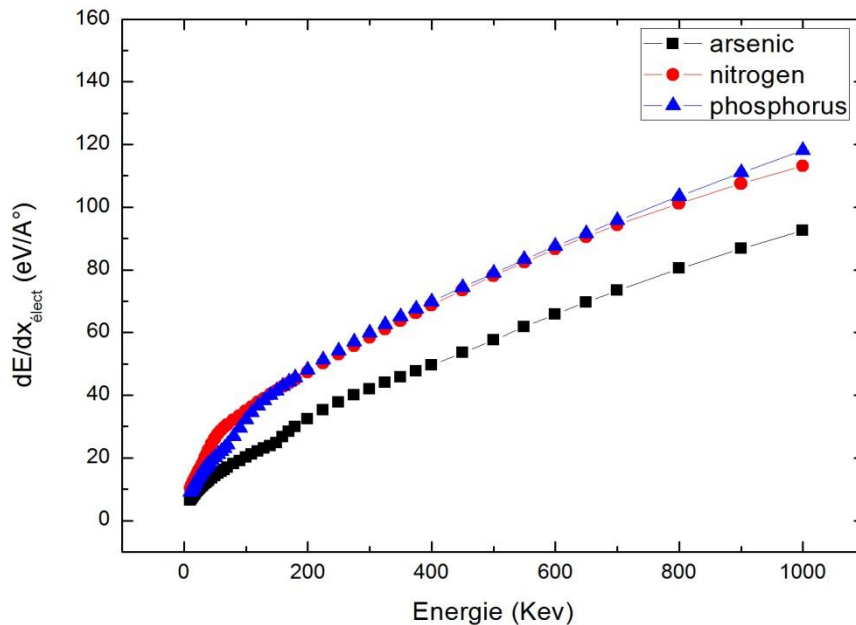


Figure 2.12 : Simulation des pouvoirs d'arrêt électronique des ions (N^+ , P^+ , As^+) dans une cible de Ge.

2.6 Effets relatifs à l'implantation ionique

Les tableaux 2.3 et 2.4 présentent la perte d'énergie en pourcentage donnée par l'interface du logiciel SRIM pour les ions projectiles (N^+ , P^+ , As^+) avec des énergies d'implantation 10, 100 keV à l'intérieur de la cible Ge.

D'après le tableau 2.3 correspondant à une énergie de 10 keV, l'énergie transférée aux cascades de recul sont respectivement : 60.23% (8.57% + 4.26% + 47.40%) pour l'Azote, 82.61% pour le Phosphore et 93.54% pour l'Arsenic. Soit une énergie par ion incident de 6.023 keV (60.23% x 10 keV = 6.023 keV) pour N^+ , 8.261 keV pour P^+ et 9.354 keV pour As^+ . On a donc seulement 39.76% de l'énergie incidente des ions d'Azote, 17.39% d'énergie d'ions de Phosphore et 6.46 % d'ions d'arsenic qui sont directement déposées dans la cible.

Le tableau 2.4 montre que pour une énergie de 100 keV, l'énergie transférée aux cascades de recul pour l'Azote, le Phosphore et l'Arsenic sont respectivement de 32.3%, 67.65%, 90.63%.

2.6. Effets relatifs à l'implantation ionique

Soit une énergie par ion incident de 32.3 keV pour l'Azote, 67.65 keV pour le Phosphore, et 90.63 keV pour l'Arsenic. L'énergie déposée directement dans la cible pour chaque ion incident sera alors de 67.71% pour l'Azote, 32.35% pour le Phosphore et 9.37% pour l'Arsenic.

	N⁺		P⁺		As⁺	
	Ions	Atomes de recul	Ions	Atomes de recul	Ions	Atomes de recul
ionisation	36.7	8.57	15.16	13.02	5.00	15.64
Sites vacants	0.60	4.26	0.53	6.15	0.43	7.12
Phonons	2.46	47.40	1.70	63.44	1.03	70.78
L'énergie totale transférée	39.76	60.23	17.39	82,61	6.46	93.54

Tableau 2.3 : Perte d'énergie en pourcentage a 10 keV.

	N⁺		P⁺		As⁺	
	Ions	Atomes de recul	Ions	Atomes de recul	Ions	Atomes de recul
ionisation	66.89	5.29	31.64	12.39	8.91	17.88
Sites vacants	0.17	2.38	0.17	5.07	0.13	6.79
Phonons	0.65	24.63	0.54	50.19	0.33	65.96
L'énergie totale transférée	67.71	32.3	32.35	67.65	9.37	90.63

Tableau 2.4 : Perte d'énergie en pourcentage à 100 keV.

2.6.1 Phénomène d'ionisation

Lors d'une collision ion-atome, une partie de l'énergie cinétique est transférée aux électrons de l'atome cible. Si cette énergie est suffisante il se produit un réarrangement ou l'atome cible peut céder un ou plusieurs électrons.

Les figures 2.14 et 2.15 illustrent les résultats de simulation du phénomène d'ionisation dans une cible de Ge implantée par des ions projectiles (N⁺, P⁺ et As⁺) pour une énergie de 10 keV et 100 keV respectivement.

D'après la figure 2.14, nous constatons qu'à 10 keV et dans le cas d'implantation de l'Azote, l'énergie transférée par les ions primaires aux électrons de l'atome cible est supérieure à l'énergie transférée par les atomes de recul. Dans le cas du Phosphore, on remarque que l'énergie transférée par les ions primaires reste toujours supérieure à celle transférée par les atomes de recul, néanmoins on s'aperçoit que la contribution de ces derniers est importante à celle observée dans le cas de l'Azote.

Par contre dans le cas de l'Arsenic, l'énergie déposée par les atomes de recul est supérieure à l'énergie transférée par les ions projectiles aux électrons de l'atome cible.

D'après nos observations, les électrons de l'atome cible absorbent plus d'énergie des ions primaires dans le cas d'ions légers, une constatation déjà faite dans le paragraphe 2.5, en effet le pouvoir d'arrêt électronique prédomine pour ce type de dopants.

D'après la figure 2.15, nous constatons que l'énergie transférée par les ions primaires s'accroît avec l'énergie d'incidence.

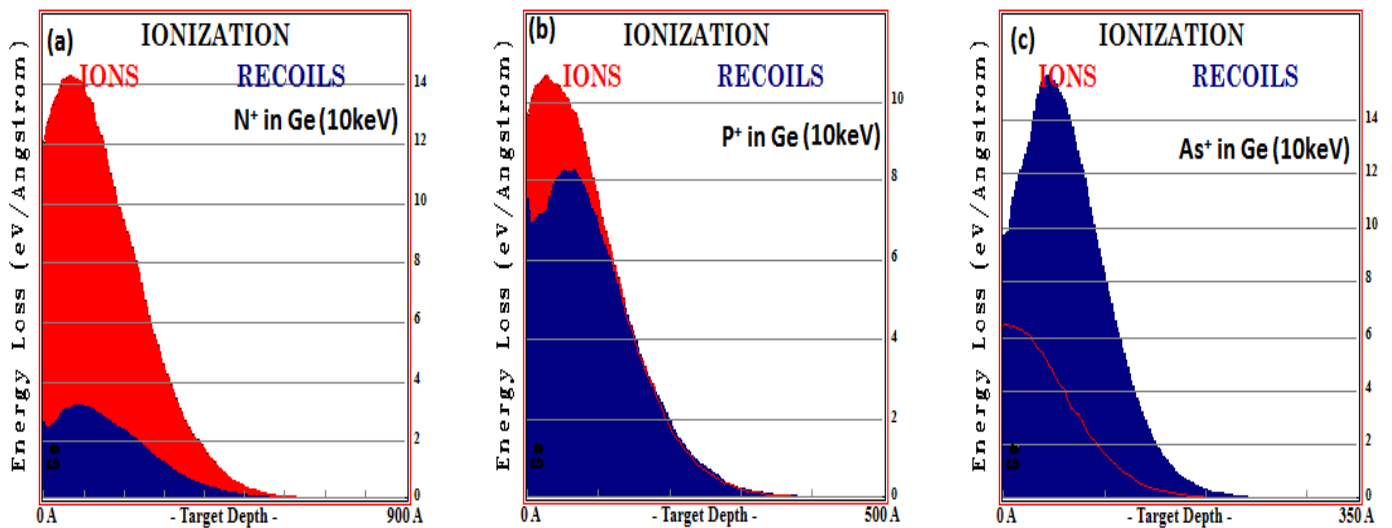


Figure 2.14 : Perte d'énergie par ionisation pour les ions projectiles N^+ , P^+ , As^+ implanté à une énergie de 10 keV.

(a) - N^+ in Ge (b) - P^+ in Ge (c) - As^+ in Ge

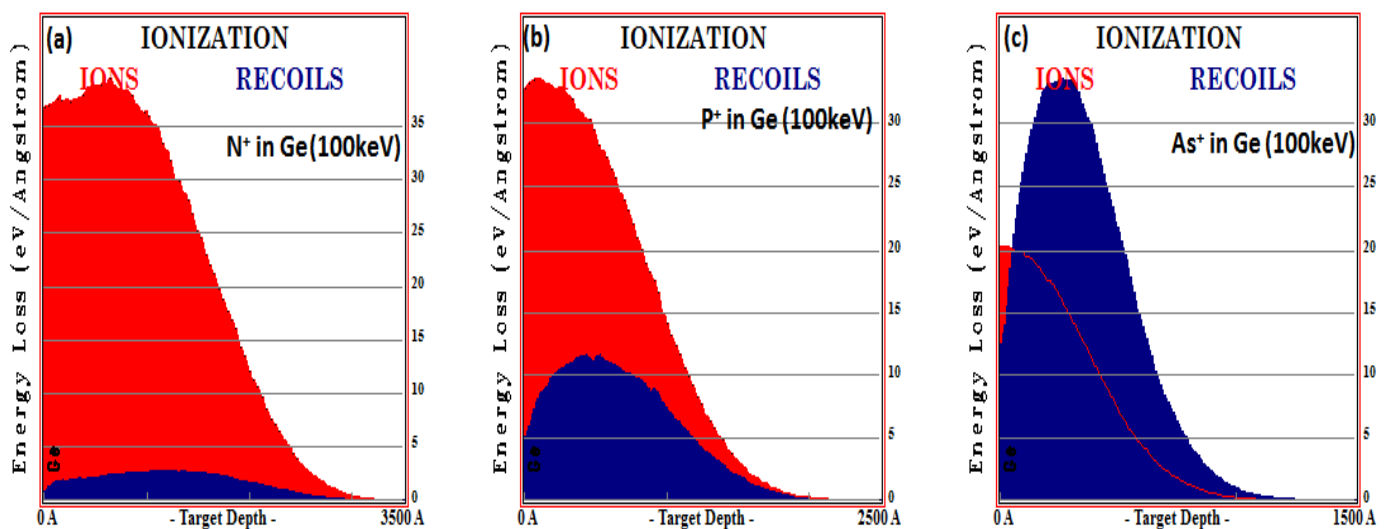


Figure 2.15 : Perte d'énergie par ionisation pour les ions projectiles N^+ , P^+ , As^+ implanté à une énergie de 100 keV.

(a) - N^+ in Ge (b) - P^+ in Ge (c) - As^+ in Ge

2.6.2 Création de phonons

Au cours d'une interaction ion-atome cible, si l'énergie transférée par les ions ou les atomes de recul à un atome cible est inférieure à l'énergie de déplacement, les atomes de la cible se mettent à vibrer et créent des phonons.

Les figures 2.16 et 2.17 donnent les résultats de simulation de l'énergie dissipée pour la formation des phonons en eV/Å° en fonction de la profondeur de la cible Ge implantée par les ions N^+ , P^+ et As^+ pour une énergie d'incidence de 10 keV et 100 keV respectivement.

D'après ces figures, on remarque que les profils de la perte d'énergie aux phonons des atomes de recul obtenus peuvent être décrits par une distribution gaussienne et que la création de phonons est exclusivement causée par les atomes de recul. Le tableau 2.3 montre que le pourcentage de l'énergie perdue en phonons par les ions primaires est très négligeables devant celle perdue par les atomes de recul, ce taux devient plus négligeables pour les ions lourds. En effet ce pourcentage est de 2.46% pour les ions primaires et de 47.40% pour les atomes de recul dans le cas du dopant N accéléré à 10 keV contre 1.03% pour les ions et 70.78% pour les atomes de recul dans le cas du dopant As pour la même énergie d'incidence.

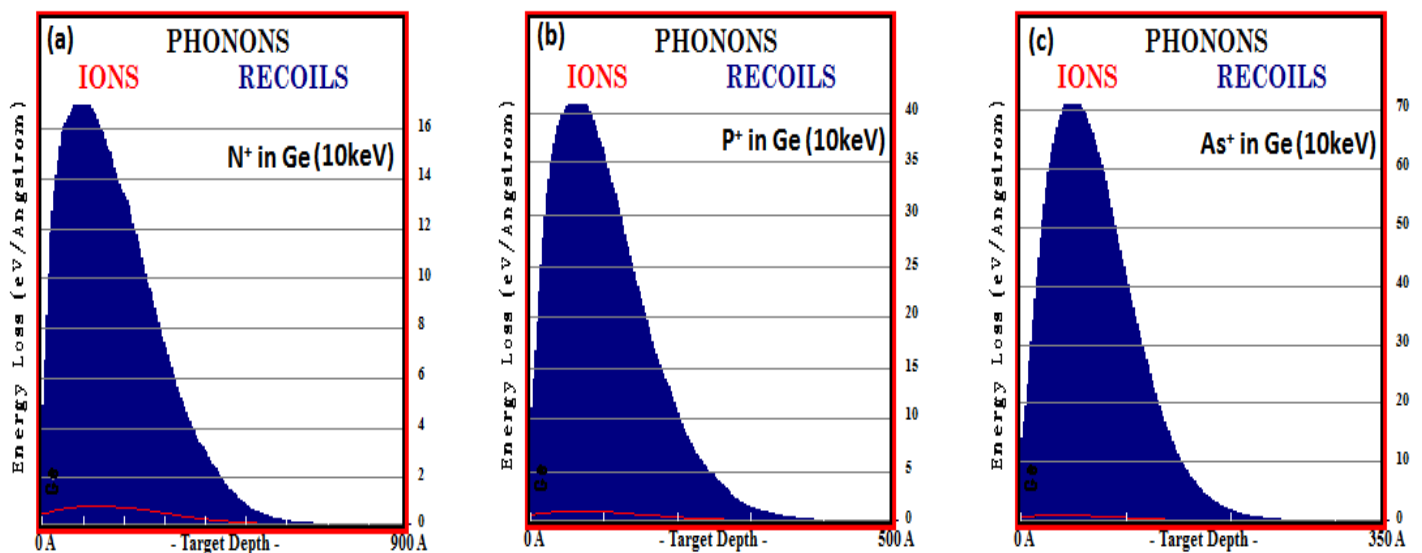


Figure 2.16 : Création de phonons par des ions (N^+ , P^+ , As^+) à une énergie de 10 keV.

(a) - N^+ in Ge (b) - P^+ in Ge (c) - As^+ in G

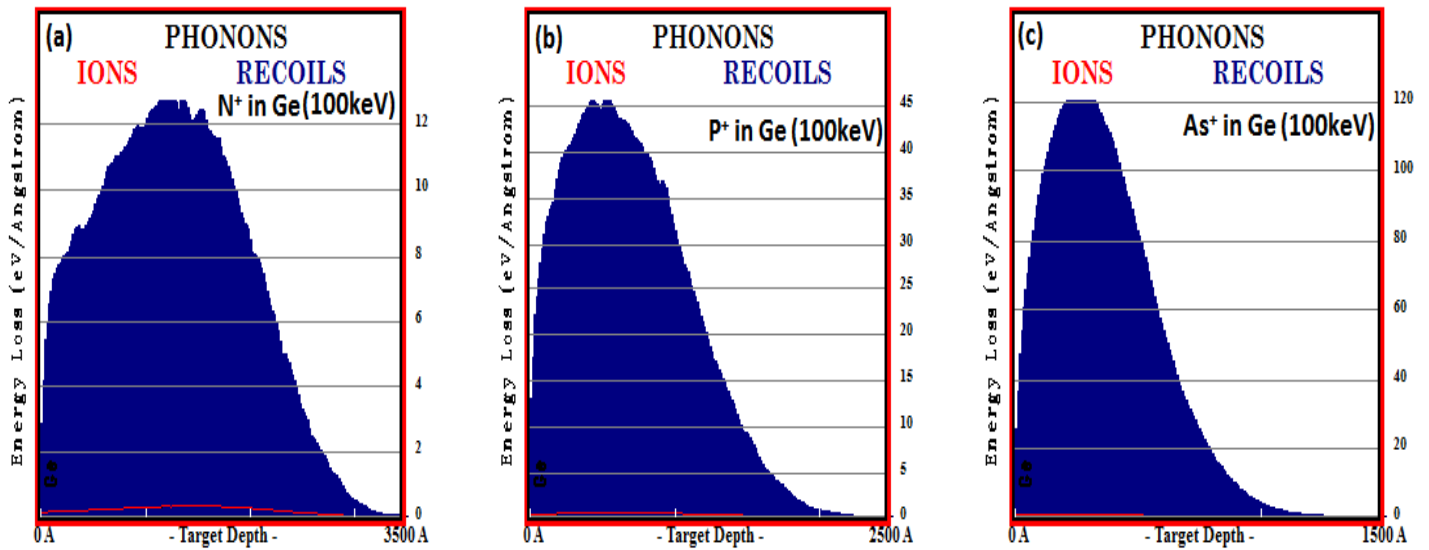


Figure 2.17 : Création de phonons par des ions (N^+ , P^+ , As^+) à une énergie de 100 keV.
 (a) - N^+ in Ge (b) - P^+ in Ge (c) - As^+ in Ge.

2.6.3 Génération de défauts

Les tableaux 2.5 et 2.6 donnent quelques statistiques des dommages créés dans la cible Ge par les ions N^+ , P^+ , As^+ pour une énergie d'incidence de 10 keV et 100 keV.

	N^+	P^+	As^+
Déplacements totaux	258/ion	353/ion	405/ion
Nombre de sites vacants	239/ion	327/ion	3.76/ion
Collisions de remplacement	19/ion	26/ion	30/ion

Tableau 2.5 : Quelques statistiques sur les dommages créés dans la cible Ge a 10 keV.

	N^+	P^+	As^+
Déplacements totaux	1378/ion	2819/ion	3729/ion
Nombre de sites vacants	1276/ion	2611/ion	3454/ion
Collisions de remplacement	102/ion	208/ion	275/ion

Tableau 2.6 : Quelques statistiques sur les dommages créés dans la cible Ge a 100 keV.

D'après le logiciel SRIM, les sites vacants représentent le nombre des interstitiels et des atomes pulvérisés, c'est-à-dire qui sont éjectés de la surface. Et parmi ces lacunes, celles qui vont être comblées par d'autres atomes lors des collisions de remplacement.

Ces défauts sont créés soit par les chocs primaires avec l'ion incident, soit par les chocs secondaires avec un atome cible en mouvement issu d'un choc primaire ou secondaire.

La figure 2.18 représente les défauts créés par les ions N^+ , P^+ , As^+ implantés à l'intérieur de la cible Ge à une énergie de 10 keV.

La courbe supérieure indique les déplacements totaux de la cible qui est le nombre d'atomes déplacés de leur site après avoir reçu suffisamment d'énergie par l'ion incident. La courbe inférieure représente les sites vacants dans la cible de Ge. Et la courbe la plus basse représente les collisions de remplacements qui sont des déplacements dans lesquels l'atome incident cède presque toute son énergie, ce qui l'empêche de continuer plus loin, et tombe et prend position dans la vacance du site laissée par l'atome cible reculant.

On remarque que le nombre d'atomes déplacés est supérieur au nombre de lacunes créées et celui de collisions de remplacement. Sachant que les déplacements (258/ion) = postes vacants (239/ion) + collisions de remplacement (19/ion). La figure montre une distribution gaussienne pour les trois courbes, et un accroissement des dommages quand le dopant devient plus lourd. Ceci s'explique par le fait que les collisions nucléaires sont plus significatives dans le cas d'ions lourd, ce qui est d'ailleurs en accord avec les résultats trouvés dans le paragraphe 2.5. Il est à noter que ces dégâts sont plus importants quand l'énergie d'incidence augmente d'après les statistiques du tableau 2.6, des observations illustrés sur la figure 2.19 qui représente le profil de ces dommages à 100 keV.

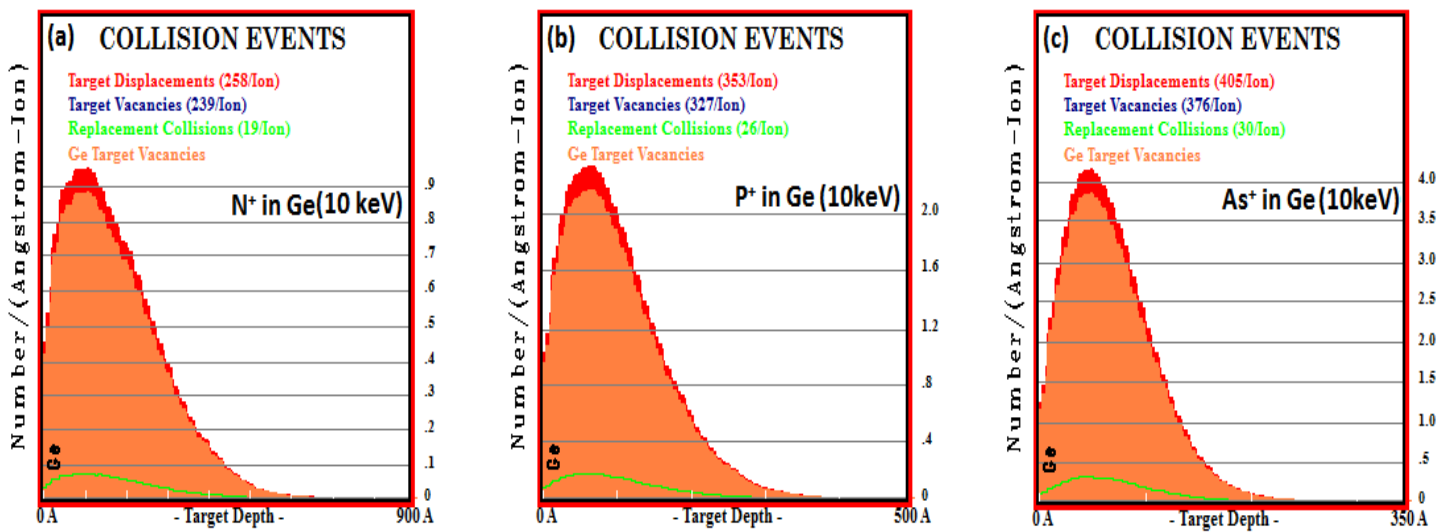


Figure 2.18 : Les dommages créés par les collisions lors d'une implantation dans la cible Ge à une énergie de 10 keV.

(a) - N⁺ in Ge (b) - P⁺ in Ge (c) - As⁺ in Ge .

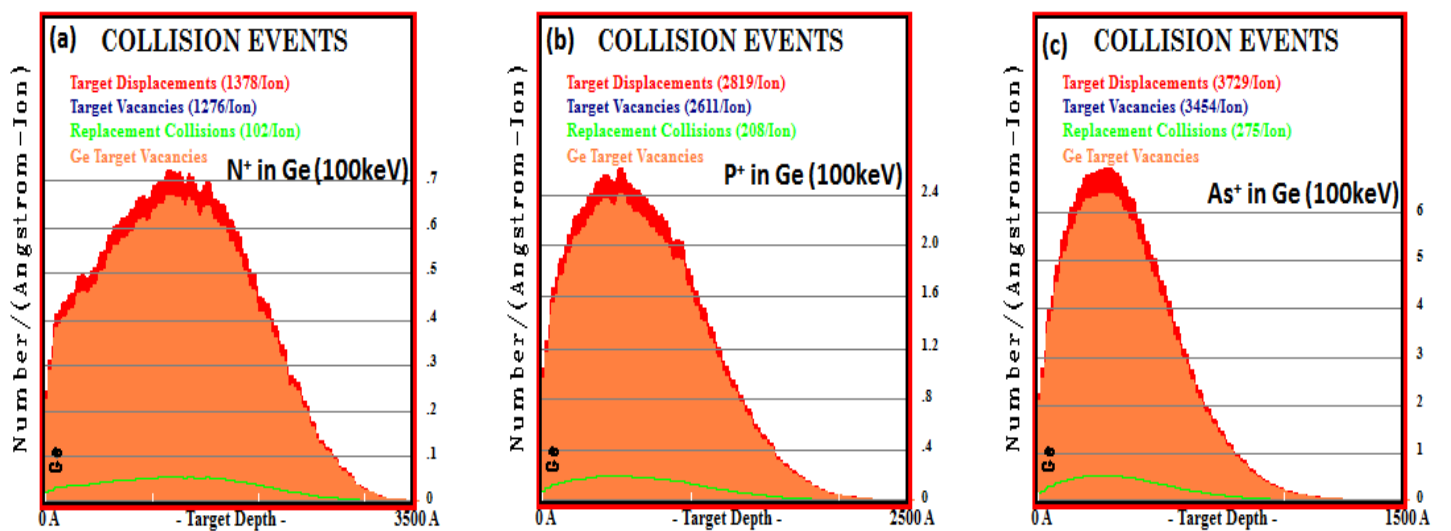


Figure 2.19 : Les dommages créés par les collisions lors d'une implantation dans la cible Ge à une énergie de 100 keV.

(a) - N⁺ in Ge (b) - P⁺ in Ge (c) - As⁺ in Ge .

2.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons donné une description succincte du logiciel SRIM, après quoi nous avons exposé les résultats de simulation de l'implantation des ions d'Azote (N^+), l'Arsenic (As^+), du Phosphore (P^+) dans le Germanium pour des énergies d'incidence de 10 keV, 100 keV et 180 keV. En effet, nous avons mis en évidence l'effet de la masse atomique des dopants ainsi que l'énergie d'incidence sur les différents paramètres liés à l'implantation ionique (la profondeur de pénétration, la dispersion des dopants...). Par ailleurs, nous avons constaté une cohérence parfaite entre les différents résultats et un bon accord avec ceux de la littérature.

Conclusion générale

Le travail présenté dans le cadre de ce mémoire porte sur l'étude de l'implantation des ions d'Azote, du Phosphore et de l'Arsenic dans la cible de Germanium. Notre objectif est la simulation de certains phénomènes liés à l'implantation ionique tels que la distribution des ions implantés, les pouvoirs d'arrêt ainsi que les dommages créés à l'intérieur de la cible.

La simulation a été réalisée en utilisant le logiciel SRIM 2013 (Stopping and Ranges of Ions in Matter) qui utilise un code TRIM basé sur l'approximation des collisions binaires (BCA) et sur le principe de la méthode Monte Carlo qui utilise une approche de type aléatoire.

D'après l'étude des différents résultats obtenu avec le logiciel, nous constatons que le profil de distribution des ions possède une forme quasi-gaussienne tel que c'est prédit par la littérature, les différents paramètres statistiques caractérisant l'implantation ionique comme le parcours projeté R_p et l'écart type ΔR_p sont plus important pour de fortes énergies et pour des dopants légers, contrairement au paramètre de dispersion relatif défini par le rapport $\Delta R_p / R_p$ qui décroît à des énergies élevées et pour des ions légers, ce qui veut dire que la distribution est moins dispersée pour cette gamme d'énergie et pour ce type de dopants. Quant au pouvoir d'arrêt, le ralentissement nucléaire est plus important quand la masse atomique des dopants augmente, une perte d'énergie causée par les collisions élastiques qui sont responsables des déplacements des atomes, ce qui favorise par conséquent le freinage des ions dans le cas des ions lourds. Des observations très cohérentes avec les résultats relatifs à la profondeur moyenne de pénétration qui diminue dans ce cas. Quant au ralentissement électronique, causé par les interactions inélastiques entre les projectiles ioniques et les électrons de la cible, d'après nos observations, son évolution prend une allure proportionnelle à la racine carrée de l'énergie incidente et prédomine dans le cas des dopants légers à forte énergie, des résultats qui sont en bon accord avec la littérature. Ce processus de perte d'énergie peut aussi se traduire par l'énergie transférée à la cible et qui se manifeste par la création de phonons, de défauts, d'atomes déplacés ou alors d'atomes pulvérisés. Notre simulation, nous a par ailleurs permis d'évaluer ces dommages créés dans la cible et a montré que ces dégâts sont plus importants dans le cas d'ions lourds. Il est à noter que d'après nos résultats, l'énergie d'accélération des dopants ainsi que leurs masses atomiques influencent considérablement les différents phénomènes qui gouvernent l'implantation ionique, ce qui explique le choix privilégié de certains ions et énergies d'accélération dans le dopage des semi conducteurs.

Bibliographie

- [1] Armand FOPAH LELE, Université de Yaoundé 1 - D.E.A en Physique option Sciences des Matériaux (2009).
- [2] J. F. Ziegler, J. Biersack, and U. Littmark, The stopping and range of ions in matter, vol. 1, 1, Pergamon Press, New York, (1985).
- [3] <https://www.hebergementwebs.com/tutoriel-de-base-sur-lelectronique/electronique-de-base-semi-conducteurs>
- [4] J.P. Rivière, Implantation ionique et les dépôts assistés par faisceau d'ions, Thèse d'état, Ed. Hermès (2001).
- [5] Y. Yamamura and H. Tawara, _Energy dependence of ion-induced sputtering yields. from monatomic solids at normal incidence, Atomic data and nuclear data tables, V62, no.2, (1996) 149.
- [6] G. McCracken, The behaviour of surfaces under ion bombardment, Reports on Progress in Physics, V.38, no.2, (1975) 241.
- [7] M. Nastasi, J. Mayer, and J. K. Hirvonen, Ion-solid interactions: fundamentals and applications, Cambridge University Press (1996).
- [8] P.N. Favennec, L'Implantation Ionique pour la Microélectronique et l'Optique, Collection Technique et Scientifique des Télécommunications, ENST, Ed. Masson, Paris, (1993).
- [9] A. Boukerika, Mise en opération de l'implanteur d'ions NV 3206 et tests d'implantation d'argon, krypton et de l'azote, Rapport technique, Centre de Recherche Nucléaire d'Alger (CRNA), (2018).
- [10] C. Verdeil, Étude de la pulvérisation et de l'émission de la matière sous bombardement Cs+, Thèse de doctorat, Vandoeuvre-les-Nancy, INPL, (2008).
- [11] N. Bohr, Kgl. Danske Videnskab. Mat-Fys. Medd., (1948) 18.
- [12] L. H. Thomas, The calculation of atomic fields, proc. Cambridge philos, vol. 23, (1927) 242.
- [13] W.D. Wilson, L. G. Hagmark and J.P. Biersack, Phys. Rev., 15. 2458 (1977).
- [14] J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiott, Range concepts and heavy ion ranges, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33 (1963) 14.
- [15] Phil. Mag. (1915) 30.

- [16] J. Ziegler, J. Biersack, and M. Ziegler, Srim the stopping and range of ions in matter, ion implantation press, 2008.
- [17] Pierre Blazy, El-Aïdjidid , Techniques de l'ingénieur, Métallurgie du germanium, 10 sept. (2010).
- [18] Lachgueur Abdellah, Etude des couches minces de ZnO dopées. Simulation des dopages par TRIM (Transport of Ions in Matter), mémoire de master, Université abou bekr belkaid, Tlemcen, (2015).
- [19] M. Rouha, Etude de l'effet de l'implantation ionique dans le CuInSe₂ et autres ternaires, thèse de doctorat, Université Ferhat Abbas, Sétif 1, Algérie, (2014).
- [20] <http://www.gymomath.ch/javmath/polycopie/OC%20stat4.pdf>
- [21] J. Lindhard, M. Scharff, Phys. Rev. (1961) 124
- [22] Echcherki Hanane, Mattei Zahra, Simulation du dopage du semi- conducteur par TRIM software, mémoire de master, Université Djilali Bounaâma de Khemis Miliana, (2019).
- [23] P. V. Pavlov, E. I. Zorin, D. I. Tetelbaum and F.Khokhlov, Nitrogen as Dopant in Silicon and Germanium, phys. Stat.sol. (a) 35, 11(1976).