



MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMARI DE TIZI-OUZOU
FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



LABORATOIRE DE MECANIQUE STRUCTURES ET ENERGETIQUE

MÉMOIRE DE MASTER

Filière : Physique
Spécialité : Nanophysique

Présenté par :

Lydia ZAIDI

Simulation de l'implantation ionique sur du Silicium

Devant le jury d'examen composé de :

ZIANE	Abdelhamid	Professeur	U. M. M. T. O.	Président
MEGCHICHE	El Hocine	Professeur	U. M. M. T. O.	Examineur
HAMMOUM	Karima	Maitre de conférences A	U. M. M. T. O.	Rapporteur

Soutenu le 03/09/2020

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.

Je tiens à adresser tout d'abord, mes sincères 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 dirigé ce travail. Je lui exprime ma vive gratitude et ma profonde reconnaissance pour son aide, ses précieux conseils et son excellent suivi. Je salue également, son amabilité, sa patience et sa souplesse d'esprit.

Je tiens à remercier chaleureusement les membres de jury, les professeurs, Messieurs ZIANE Abdelhamid et MEGCHICHE El Hocine, professeurs à l'U.M.M.T.O, d'avoir accepté d'examiner et de juger ce travail, et d'honorer par leur présence, la soutenance de ce mémoire de master.

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. Mes remerciements vont aussi à Madame MOKRANI Saida maître de conférences B et membre de LMSE pour sa disponibilité et son soutien.

Je remercie bien évidemment ma famille : mes chers parents, mes sœurs Rima et Sihem et mon petit frère Nasr-Eddine qui ont toujours été à mes côtés. Un merci particulier pour mon grand frère Fawzi qui m'a aidé et encouragé tout au long de la réalisation de ce mémoire.

Je voudrais aussi remercier mes camarades de promotion pour leur sincère amitié.

Résumé

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

Nous nous sommes intéressés aux différents phénomènes qui peuvent avoir lieu lors de l'interaction ion-matière. De ce fait, nous avons déterminé les profils de distribution des ions implantés et des atomes de recul, ainsi que plusieurs paramètres physiques liés à l'implantation ionique. De plus, nous avons évalué les dommages causés par le faisceau d'ions énergétiques à l'intérieur de la cible. Notre objectif est aussi de mettre en évidence l'effet de l'énergie d'incidence et de la masse atomique des dopants.

Mots clés : implantation ionique, silicium, arsenic, phosphore, bore, interactions, logiciel SRIM.

Abstract

In the present work, we studied the implantation of arsenic, phosphorus and boron ions in silicon by the SRIM (Stopping and Range of Ions In Matter) software.

Our investigation consists in predicting the different phenomena that can take place during ion-matter interactions. So, we determined the distribution profiles of the implanted ions, the recoils atoms and several physical parameters related to the ion implantation. Moreover, we evaluated the damage caused by energetic ions beam in a solid target. Our objective is also to highlight the effect of the energy and the atomic mass of the incident ions.

Key words: Ion implantation, silicon, phosphorus, boron, interactions, SRIM software

Table des matières

Introduction générale	1
1 Généralité sur l'interaction ion-matière	2
1.1 Introduction	2
1.2 Interaction ion-matière	2
1.2.1 Collision	2
1.2.1.1 Les collisions élastiques	2
1.2.1.2 Les collisions inélastiques	6
1.2.2 Perte d'énergie	6
1.2.2.1 Le pouvoir d'arrêt nucléaire	7
1.2.2.2 Le pouvoir d'arrêt électronique	8
1.3 Phénomènes induits par le bombardement ionique	9
1.4 L'implantation ionique	10
1.4.1 Principe et caractéristiques du dopage par implantation ionique	10
1.4.2 Description de l'implanteur ionique	12
1.4.3 Domaine d'application de l'implantation ionique	13
1.5 Conclusion	13
2 Simulation de l'implantation ionique dans le Silicium	14
2.1 Introduction	14
2.2 Présentation du logiciel de simulation numérique SRIM	14
2.3 Principe de fonctionnement du logiciel	15
2.4 Simulation des pouvoirs d'arrêt des ions dans la cible du silicium	17
2.5 Simulation de la distribution des ions dans la cible Si	19
2.6 L'évolution de la perte d'énergie du projectile	24
2.6.1 L'énergie transférée aux atomes de recul	24
2.6.2 Production de phonons	25
2.6.3 Phénomène d'ionisation	26
2.7 Effets relatifs à l'implantation ionique	27
2.7.1 Génération de défauts	27
2.7.2 La pulvérisation	29

2.8 Conclusion	30
Conclusion général	31
Bibliographie	33

Introduction générale

La technologie moderne et ses applications dans divers domaines exigent l'utilisation de nouveaux matériaux. Leurs propriétés doivent satisfaire les ambitions technologiques et la réalisation de projets scientifiques très avancés.

L'implantation ionique est l'une des meilleures méthodes pour améliorer le comportement des matériaux. Elle est principalement utilisée en microélectronique pour le dopage des semi-conducteurs et la modification de la conductivité électrique [1], en mécanique, pour le traitement de surface afin d'avoir une bonne tenue à la corrosion, l'usure et la fatigue [2]. Cette technique a aussi fait ses preuves dans d'autres domaines tels que le biomédical (prothèses orthopédiques, implants dentaires...) [3] [4] et dans le domaine de l'automobile [5].

L'implantation ionique consiste à introduire les atomes ionisés, avec suffisamment d'énergie, pour pénétrer dans l'échantillon cible. Le silicium est un semi-conducteur largement utilisé dans divers domaines technologiques et les éléments les plus utilisés pour son dopage sont le phosphore, le bore, l'arsenic, l'azote, l'indium et l'antimoine.

Dans le cadre de ce présent travail, on se propose d'étudier théoriquement le comportement des ions d'arsenic, du phosphore et du bore implantés dans le silicium. Cette étude théorique a pour objet de prévoir les profils atomiques de dopage, les différents phénomènes ayant lieu lors des interactions ion-matière. Nous intéressons aussi à l'effet de l'énergie d'incidence et la nature des impuretés sur les différents paramètres qui gouvernent ces interactions.

Ce présent mémoire est structuré en deux chapitres :

Dans le premier chapitre, nous présentons des généralités sur les interactions des ions avec la matière solide. Des rappels généraux sur les collisions binaires permettant d'introduire les notions de pouvoir d'arrêt nucléaire et pouvoir d'arrêt électronique. En outre, nous décrivons les principaux phénomènes qui accompagnent le bombardement ionique, nous nous sommes intéressés particulièrement à l'implantation ionique, son principe, son appareillage et ses domaines d'application.

Le deuxième chapitre est composé de deux parties, une partie est consacrée à la description du logiciel SRIM-2013 (Stopping and Range of Ions in Matter) et son principe de fonctionnement. Dans une autre partie, nous exposons les différents résultats obtenus pour des énergies d'implantation de 10 keV et 100 keV, à savoir la distribution des ions à l'intérieur de la cible, l'évolution des pouvoirs d'arrêt et de la perte d'énergie des ions projectiles ainsi que les dommages créés par ces ions.

Enfin, nous terminons par une conclusion générale où nous avons soulevé les points essentiels.

Chapitre 1

Généralité sur l'interaction ion-matière

1.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons brièvement les mécanismes de bases de l'interaction entre un ion et le solide bombardé puis entre les atomes au sein du solide. Nous rappelons donc quelques notions sur les collisions, le transfert d'énergie, nous présentons ainsi les processus de perte d'énergie, d'une part par excitations électroniques qui sont prépondérantes dans le domaine de fortes énergies, et d'autre part par chocs nucléaires à faibles énergies. Une partie du chapitre est également consacrée à la description de quelques phénomènes pouvant se produire lors de l'impact d'un ion avec une cible solide, tel que le phénomène de pulvérisation et l'implantation des ions projectiles dans la matrice.

1.2 Interaction ion-matière

1.2.1 Collision

On dit qu'il y a collision quand deux ou plusieurs objets se rapprochent et subissent une interaction mutuelle sans qu'il y ait obligatoirement un impact. Il existe deux types de collision : collisions élastiques et collisions inélastiques.

1.2.1.1 Les collisions élastiques

La collision élastique est le principal mécanisme de transfert de mouvement au sein de la matière. Une collision dite élastique correspond au choc entre deux corps où l'énergie cinétique et la quantité de mouvement restent conservées. Les collisions ion-atome à faible énergie cinétique (keV) sont souvent traitées comme des collisions élastiques.

Bilan énergétique d'une collision élastique

On analyse deux états représentés dans la figure 1.1, avant et après la collision, entre deux particules pour lesquelles il ne s'exerce aucune force et leur énergie se trouve uniquement sous la forme d'énergie cinétique. La particule (1) représente le projectile ($v_1 \neq 0$), quant à la particule (2) est initialement au repos ($v_2 = 0$), correspond à l'atome du matériau cible.

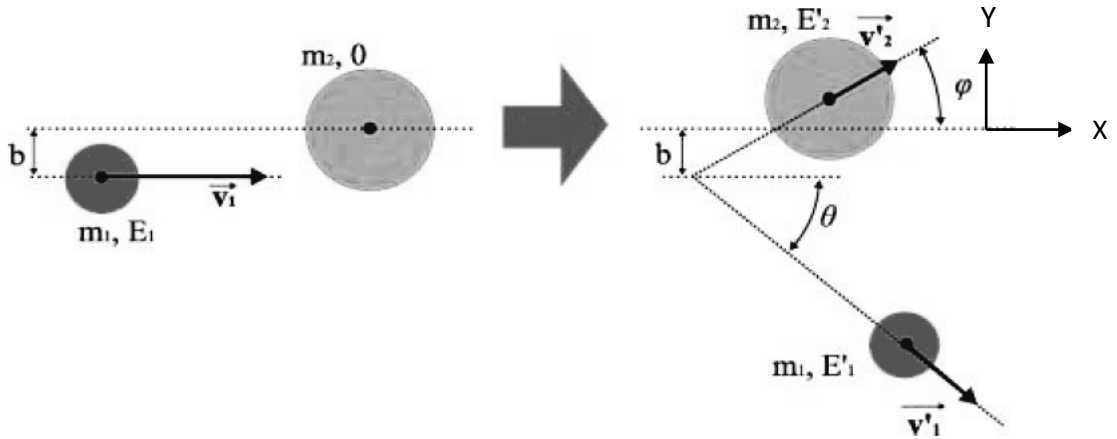


Figure 1.1 – Schéma d'une collision élastique entre deux particules [6]

Sur le schéma de la figure 1.1, 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 b .

Avec :

b : Le paramètre d'impact, il représente la distance minimale verticale entre les centres des noyaux des deux atomes mis en collision (projectile et cible).

Nous pouvons déduire, à partir des équations de conservation, le facteur cinématique k qui représente la quantité d'énergie conservée E_1' par la particule incidente après le choc par rapport à son énergie initiale E_1 .

La conservation de l'énergie peut se formuler par :

$$E_1 = E_1' + E_2'$$

Soit :

$$\frac{1}{2} m_1 v_1^2 = \frac{1}{2} m_1 v_1'^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2'^2 \quad (1.1)$$

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 :

$$m_1 v_1 = m_1 v_1' \cos \theta + m_2 v_2' \cos \varphi \quad (1.2a)$$

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

En utilisant les équations (1.1) et (1.2), l'énergie E'_2 peut être exprimée avec deux manières :

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

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

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 :

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

La solution de cette équation nous donne les expressions de la vitesse finale de la particule incidente :

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

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 ainsi 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 :

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

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

En réduisant les termes en v_1^2 et en simplifiant ensuite par m_2 et v_2' , on déduit l'expression de la vitesse finale de la particule 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 :

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

L'énergie maximale transmise est obtenue dans le cas d'une collision frontale ($b=0$ et $\varphi=0$) :

$$T_{max} = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E_1 \quad (1.14)$$

L'équation (1.13) peut se réécrire comme suit :

$$T = \frac{4\mu \cos^2 \varphi}{(1 + \mu)^2} E_1 \quad (1.15)$$

Avec : $\mu = \frac{m_2}{m_1}$

Notons quelques cas particuliers en fonction du rapport des masses du projectile et de la cible :

- Si $\mu > 1$: le projectile est plus léger que la cible, il peut être diffusé dans la quasi-totalité de l'espace.
- Si $\mu = 1$: l'énergie transférée est : $T = \cos^2 \varphi E_1$. La particule cible peut alors prendre la totalité de l'énergie cinétique initiale du projectile pour $b = 0$.
- Si $\mu < 1$: le projectile est plus lourd que la cible, ils seront diffusés vers l'avant.
- Si $\mu \ll 1$: l'énergie transmise à la cible devient faible par rapport à l'énergie du projectile. Donc, sa trajectoire n'est pas perturbée.

1.2.1.2 Les collisions inélastiques

Contrairement au cas des collisions élastiques, l'énergie cinétique totale du système de la particule n'est pas conservée lors d'une collision inélastique. Une partie de l'énergie cinétique du projectile et de la cible est transmise à leur environnement (électrons). Par contre la quantité de mouvement reste toujours conservée.

Processus inélastiques élémentaires : Lors d'une collision inélastique, la configuration électronique ion-atome peut être modifiée. Ces modifications pour les deux partenaires dépendent des processus fondamentaux intervenant.

On distingue trois processus essentiels : la capture, l'excitation et l'ionisation.

- **La capture :** c'est le transfert d'un ou plusieurs électrons d'un état lié de la cible vers un état lié du projectile.
- **L'excitation :** c'est le transfert d'un électron de la cible d'un état lié vers un état moins lié (état excité). De même pour le projectile qui peut être aussi excité lors d'une collision. Si l'excitation concerne un électron de valence de la cible, la désexcitation se fait par transition radiative et dans le cas d'un électron de la couche interne, la désexcitation s'effectue par transition Auger, la cible sera ionisée après l'excitation.
- **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. L'ionisation dépend de la nature de l'atome.

1.2.2 Perte d'énergie

Lorsqu'une particule chargée pénètre un matériau, elle perd progressivement son énergie par différents mécanismes d'interaction. Cette perte d'énergie par unité de distance parcourue qui s'exprime généralement en (eV/ Å) [7] est définie par :

$$P_E = -\frac{dE}{dx} = -\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta E}{\Delta x} \right) \quad (1.16)$$

Ce concept peut être défini en considérant l'interaction de la particule avec un constituant élémentaire de la cible comme par exemple ses atomes. On définit dans ce cas le pouvoir d'arrêt (section efficace d'arrêt) [8]:

$$S(E) = \frac{1}{N} P_E \quad (1.17)$$

Avec : N la concentration atomique de la cible.

La perte d'énergie des ions projectiles est due aux deux processus suivants :

- Perte d'énergie par collisions nucléaires.
- Perte d'énergie par collisions avec le cortège électronique.

En fonction du domaine d'énergie utilisé et de la masse atomique de l'ion, l'un des deux processus devient dominant par rapport à l'autre. La superposition de ces deux processus donne le pouvoir d'arrêt total (S) qui a comme expression :

$$S(E) = \frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dX} \right) = (S_n + S_e) \quad (1.18)$$

Avec :

- S_n : le pouvoir d'arrêt nucléaire
- S_e : le pouvoir d'arrêt électronique

1.2.2.1 Le pouvoir d'arrêt nucléaire

Il s'agit de transmettre d'une façon élastique l'énergie cinétique des ions aux noyaux des atomes cible au cours de la collision. Ce processus de ralentissement nucléaire est prédominant pour des ions lourds et de faible vitesse.

Le pouvoir d'arrêt nucléaire est défini par la relation suivante [9]:

$$S_n(E) = \frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dX} \right)_n = \int T d\sigma \quad (1.19)$$

On définit la section efficace de diffusion :

$$\sigma = \pi b^2 \quad \text{où} : d\sigma = 2\pi b db \quad (1.20)$$

Où

N : le nombre d'atome par unité de volume du matériau cible.

T : l'énergie transférée à l'atome cible par l'ion incident (voir équation 1.13).

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

En utilisant un potentiel écranté de type Thomas-Fermi [10]

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} f \left(\frac{r}{a} \right) \quad (1.21)$$

Avec :

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

$$\alpha = \frac{0.4685}{\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{2/3}} \quad (\text{Rayon d'écrantage})$$

Biersack [11] proposa une expression plus réaliste du pouvoir d'arrêt nucléaire :

$$S_n = \frac{4\pi\alpha M_1 Z_1 Z_2 e^2}{M_1 + M_2} \frac{\ln \varepsilon}{2\varepsilon(1 - \varepsilon^{-1.49})} \quad (1.22)$$

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

1.2.2.2 Le pouvoir d'arrêt électronique

C'est un processus inélastique de transfert d'énergie aux électrons de l'atome cible lorsque les ions pénètrent à grande vitesse. Ce transfert d'énergie se fait soit par excitation ou par ionisation de ces atomes.

La perte d'énergie électronique est beaucoup plus importante que la perte d'énergie nucléaire, surtout pour le cas des ions implantés à forte énergie. Les ions décélèrent dans la matière par un phénomène de friction électronique et lorsque leur énergie devient suffisamment basse, il se produit des collisions nucléaires génératrices de défauts.

Le pouvoir d'arrêt électronique est souvent décrit par le model LSS à faible vitesse ($v < v_0 Z_1^{2/3}$) [12] :

$$S_e = 8\pi e^2 a_0 \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{3/2}} \frac{v}{v_0} \quad (1.23)$$

Avec :

v_0 : La vitesse de Bohr

a_0 : Le rayon de Bohr

v : La vitesse de l'ion.

A grandes vitesses, le ralentissement électronique décroît, son expression est donnée par Bohr [13] :

$$S_e = 2\pi(NZ_2) \frac{M_1 Z_1^2 e^4}{m_e} \ln \left(\frac{T_{max}}{T_{min}} \right) \quad (1.24)$$

NZ_2 : densité volumique d'électrons, m_e : masse de l'électron.

1.3 Phénomènes induits par le bombardement ionique

Lors de son parcours, l'ion transfère toute ou une partie de son énergie aux atomes cibles avant d'être arrêté ou éjecté du solide à une certaine distance. Ce transfert d'énergies durant le parcours de l'ion projectile et son ralentissement à l'intérieur de la cible peut donner lieu à plusieurs phénomènes, tel que c'est illustré sur la figure 1.2. La probabilité d'apparition de chacun de ces phénomènes dépend essentiellement des caractéristiques des deux partenaires concernés (ion, solide), notamment la masse (M_1), la charge (Z_1), l'énergie (E_1) et l'angle d'incidence (θ_i) de l'ion projectile, mais aussi la masse atomique (M_2), ainsi que la charge (Z_2) de la cible.

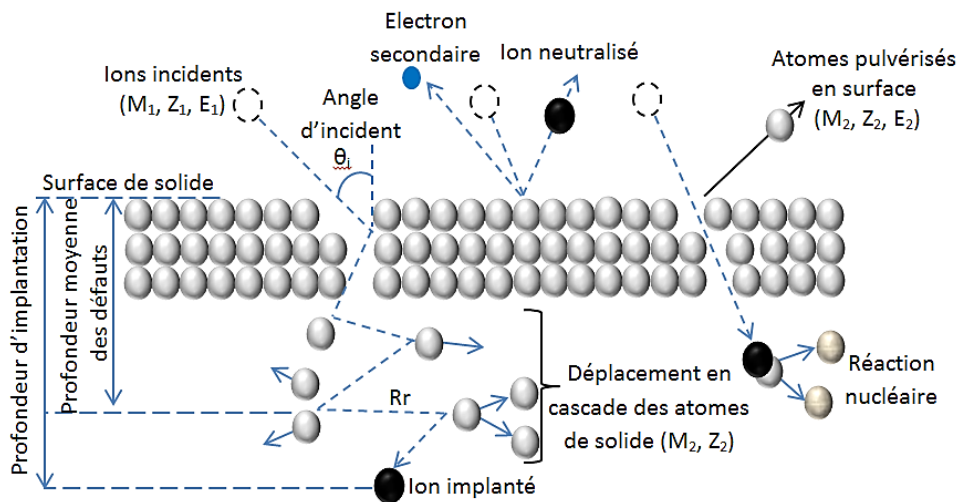


Figure 1.2 – Illustration des principaux phénomènes d'interaction ion-solide.

- **La pulvérisation de la cible :** lors d'un bombardement de la matière avec des ions, certains atomes de la cible mis en mouvement à proximité de la surface peuvent être éjectés du matériau. Cela, nécessite que l'atome mis en mouvement ait une énergie cinétique supérieure à l'énergie de liaison de la surface. En fonction de l'énergie des ions incidents, on a la pulvérisation induite par le pouvoir d'arrêt nucléaire (pulvérisation nucléaire) et par le pouvoir d'arrêt électronique (pulvérisation électronique). Si l'énergie transmise à l'atome cible est supérieure à une énergie de déplacement, elle peut quitter sa position et engendrer une série de chocs avec d'autres atomes du matériau (cascades de collisions). On distingue trois régimes de pulvérisation nucléaire :

Régimes de collisions simples : la pulvérisation est induite par une énergie faible ($<1\text{keV}$) ou des ions légers comme H et He. L'ion mettra en mouvement que peu d'atomes de la cible et lui-même sera rapidement stoppé.

Régime de cascades linéaires : l'énergie transférée est suffisante pour créer des atomes de recul assez énergétiques. Ce régime s'applique pour des bombardements d'ions de nombre atomique moyen ou élevé et dans une gamme d'énergie de quelques keV.

Régime de cascade non linéaire (de pointe) : Ce régime est assuré par des projectiles lourds ayant une énergie très importante (> 100 keV).

Le rendement de pulvérisation est le rapport entre le nombre de particules émises et le nombre de projectile [14] [15] [16] :

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

Il dépend de l'énergie d'impact, de l'angle d'incidence et la nature du projectile et la cible.

- **L'implantation d'ions primaires** : consiste à introduire des atomes ionisés projectiles avec suffisamment d'énergie pour pénétrer dans l'échantillon cible.
- **La création de défauts** : des défauts peuvent se créer dans le matériau cible si l'énergie transférée par collisions nucléaires aux atomes du matériau cibles est supérieure à l'énergie de liaison du solide.
- **La rétrodiffusion** : correspond aux événements de collision quasi frontale au cours desquelles une énergie voisine à T_{\max} est cédée à l'atome de recul, ce qui peut conduire si $M_1 < M_2$ à une réflexion du projectile à la surface de la cible [17].
- **La réaction nucléaire** : est une transformation d'un ou plusieurs noyaux atomiques. Elle se déroule lors des implantations à très hautes énergies (généralement supérieures au GeV) [18].

1.4 L'implantation ionique

1.4.1 Principe et caractéristiques du dopage par implantation ionique

L'implantation ionique est un processus technologique qui consiste à introduire des impuretés étrangères (atomes chargés) dans un matériau cible afin de modifier ses propriétés structurales, électriques ou chimiques.

Lors de l'implantation, ces particules chargées sont accélérées avec des énergies allant de quelques KeV aux MeV. La dose est généralement comprise entre 10^{10} et 10^{16} ions/cm² [19] [20]. Elle est essentiellement utilisée pour doper des semi-conducteurs durant la fabrication des dispositifs électroniques.

1.4. L'implantation ionique

Dans le cas du silicium, les atomes ont quatre électrons de valence. Le dopage est de type N, si l'impureté introduite est un atome pentavalent (par exemple le phosphore, l'arsenic, l'azote, l'antimoine et le bismuth). Cet atome aura quatre liaisons covalentes et un électron libre qui peut être facilement excité vers la bande de conduction. Dans le cas du dopage de type P, un atome trivalent (par exemple le bore) est incorporé dans le réseau cristallin, cet atome peut accepter un électron pour compléter la quatrième liaison en créant ainsi un excès de trou quand le dopage est suffisant (porteurs majoritaires).

Lors d'une implantation ionique, l'ion incident perd son énergie par collision avec les atomes de la cible avant de s'arrêter dans un site soit substitutionnel ou interstitiel à une certaine profondeur dite profondeur de pénétration moyenne R_p . Selon la nature et l'énergie de l'ion, celui-ci va s'implanter plus ou moins profondément dans le matériau, avec une concentration en profondeur qui suit une distribution Gaussienne centrée autour de la distance R_p et d'épaisseur $2\Delta R_p$.

Cette méthode est introduite pour remplacer le processus classique (diffusion thermique) car elle peut s'appliquer à n'importe quel substrat et pour n'importe quelle impureté, ainsi, l'implantation ionique peut être caractérisée en général par :

- La distribution des ions dans le substrat qui est facilement contrôlable.
- Les défauts créés par l'implantation dans le substrat.
- Le site occupé par l'ion après un recuit thermique est bien défini.

Comme tout processus technologique, l'implantation ionique possède aussi bien des avantages que des inconvénients.

Les principaux avantages de cette technique sont :

- L'énergie des ions permet de pouvoir contrôler la profondeur d'implantation et de déterminer l'épaisseur du substrat modifié.
- L'implantation ionique se réalise à basse température.
- Le profil peut être déterminé de façon précise et l'influence d'impuretés non désirées à la surface peut être considérablement réduite.
- La possibilité de traiter tous genres de matériaux (isolants, semi-conducteurs et conducteurs) et de ne pas traiter qu'une partie de l'échantillon en cachant l'autre partie par un masque.

Les principaux inconvénients de la technique sont les suivant :

- Endommagement de la cible durant le ralentissement des ions par la collision en cascade avec les atomes cibles.
- Les surfaces à traiter doivent être externes ou en vue directe du faisceau.
- Les épaisseurs à traiter doivent être faibles ($<1\mu\text{m}$).

1.4.2 Description de l'implanteur ionique

L'implanteur des ions 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.

Ce dispositif comprend une chambre d'ionisation où les atomes à planter sont introduits à partir d'une source liquide, solide ou gazeuse. L'ionisation se fait au moyen d'un canon à électrons. Une fois émis par le filament, les électrons entrent en collision avec les atomes de la source provoquant la génération du plasma. Le champ électrique, appliqué en sortie de la chambre d'ionisation, permet d'extraire les ions du plasma et de les accélérer à une première énergie intermédiaire. Le faisceau d'ions ainsi formé passe ensuite dans un spectromètre de masse, qui permet au moyen d'un champ magnétique de sélectionner, selon l'angle de déviation, une seule masse ionique. Les ions sélectionnés sont accélérés à l'énergie souhaitée, cette énergie étant directement liée à la profondeur d'implantation des ions dans le matériau cible. Le faisceau est ensuite focalisé par des lentilles quadripolaires et magnétiques. Un système de balayage étant également réalisé, permet d'assurer une implantation homogène (la dose) au niveau de la cible traitée. Celle-ci, placée dans une chambre sous vide, est généralement refroidie pendant l'implantation.

La figure 1.3 illustre le schéma de l'implanteur d'ions à moyen courant de marque EATON NV 3206 installé au niveau du Centre de Recherche Nucléaire d'Alger avec ses principaux éléments constitutifs [21].

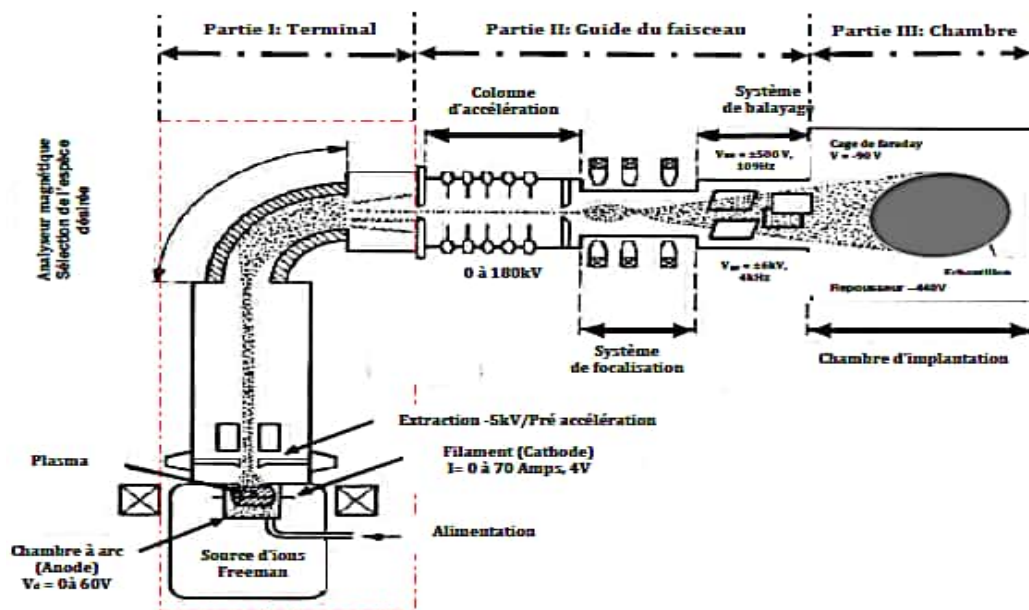


Figure 1.3 – Schéma de l'implanteur ionique NV 3206 [21].

1.4.3 Domaine d'application de l'implantation ionique

Les principaux domaines d'application de cette technique sont :

- **En microélectronique** : pour modifier la conductivité électrique des semi-conducteurs (dopage par P, As, Sb et B) et dans la fabrication des transistors.
- **En mécanique** : pour augmenter la dureté des métaux (acier, Cu, Al,...) et améliorer le facteur de résistance à la corrosion et à l'oxydation pour les surfaces métallique.
- **En biomédical** : la réduction de l'usure des prothèses articulaires (implantation d'azote) et les surfaces antibactériennes pour les cathéters (implantation du Ag). Thrombo-résistance des cathéters (implantions N, O, C et Ar).
- **Les polymères** : l'implantation est utilisée pour modifier les propriétés tribologiques (microdurété, usure abrasive, friction).

1.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté quelques notions sur les interactions des ions avec la matière solide ainsi que les différents processus de perte d'énergie. Nous avons aussi abordé brièvement les différents phénomènes induits par le bombardement ionique. Nous nous sommes spécialement intéressées à l'implantation ionique, objet de notre travail. Nous avons exposé donc son principe, décrit l'implanteur d'ions. Nous avons aussi cité quelques avantages et inconvénients et ses domaines d'application. La description du logiciel de simulation utilisé dans ce présent mémoire, ainsi que les résultats obtenus, feront l'objet du deuxième chapitre.

Chapitre 2

Simulation de l'implantation ionique dans le Silicium

2.1 Introduction

La simulation numérique est un outil permettant l'étude et la prédiction des phénomènes réels. Plusieurs logiciels de simulation numérique ont été développés pour représenter le profil de pénétration des ions projectiles à l'intérieur d'une cible et suivre les phénomènes cinétiques associés aux pertes d'énergie des ions tel que MARLOWE [22], L₂SiC [23] et le logiciel SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) [24] [25] utilisé dans le cadre de ce travail. Dans ce chapitre, nous décrivons ce programme de simulation et nous expliquons brièvement son fonctionnement. Nous exposerons aussi les résultats de simulation de l'implantation d'arsenic, du phosphore et du bore sur du silicium, obtenus par ce logiciel.

2.2 Présentation du logiciel de simulation numérique SRIM

Le logiciel SRIM est basé sur le code TRIM (Transport of Ions in Matter). C'est un ensemble de programmes qui s'exécutent sous Windows permettant de simuler l'arrêt et le parcours des ions dans la matière pour des énergies d'incidence allant de 10 eV à 2 GeV [26] [27]. Il permet de calculer différents paramètres liés à l'implantation d'ions dans une cible, parmi lesquels on peut citer [28] :

- La distribution spatiale des ions implantés (profondeur moyenne, dispersion, distribution latérale).
- Les distributions des pertes d'énergies électronique et nucléaire en fonction de la profondeur (ce sont les distributions moyennes pour un ion, elles sont exprimées en eV/Å).
- La distribution des lacunes.

2.3 Principe de fonctionnement du logiciel

Le programme TRIM utilise la méthode de cascades de collisions dans une cible amorphe [28] pour suivre les atomes individuels reculés. De plus, les atomes sont considérés comme immobiles (le matériau est à 0 K) ce qui met de côté les phénomènes de recombinaison entre, par exemple, un atome déplacé et une lacune.

Pour le calcul du pouvoir d'arrêt, le manipulateur sera orienté vers l'interface de la figure 2.1 où il sera invité à entrer ses données : l'ion (type, gamme d'énergie) et la cible (Target).

Nous pouvons également définir les paramètres initiaux de la cible (matériau, composition, densité) et des ions primaires (nature, énergie et angle d'incidence) par simple clic (voir figure 2.2). Le choix du nombre de particules incidentes permet de définir la qualité statistique de la simulation. Comme pour toute simulation, l'augmentation de cette dernière a pour conséquence l'augmentation du temps de calcul. L'utilisateur peut aussi choisir entre plusieurs modes de calcul lors des simulations TRIM comme c'est donné sur la figure 2.2 :

- Un calcul condensé (rapide) qui permet de prendre en compte l'effet global d'un pas dans la cible sur la trajectoire de la particule.
- Un calcul détaillé, où chaque collision va être simulée. Ce type de simulation est envisageable dans le cas de cible minces. Néanmoins, la nécessité de simuler le parcours d'un nombre important de particules pour obtenir des distributions implique des temps de calculs relativement long. Des simulations condensées sont alors indispensables [29].

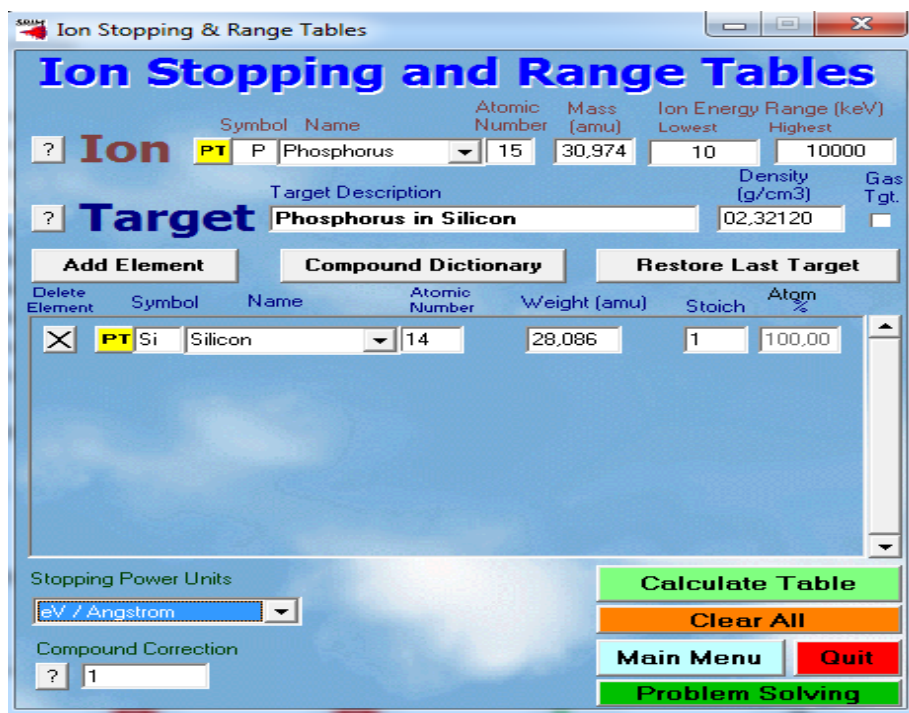


Figure 2.1– Interface du programme Ion Stopping and Range Tables.

2.3. Principe de fonctionnement du logiciel

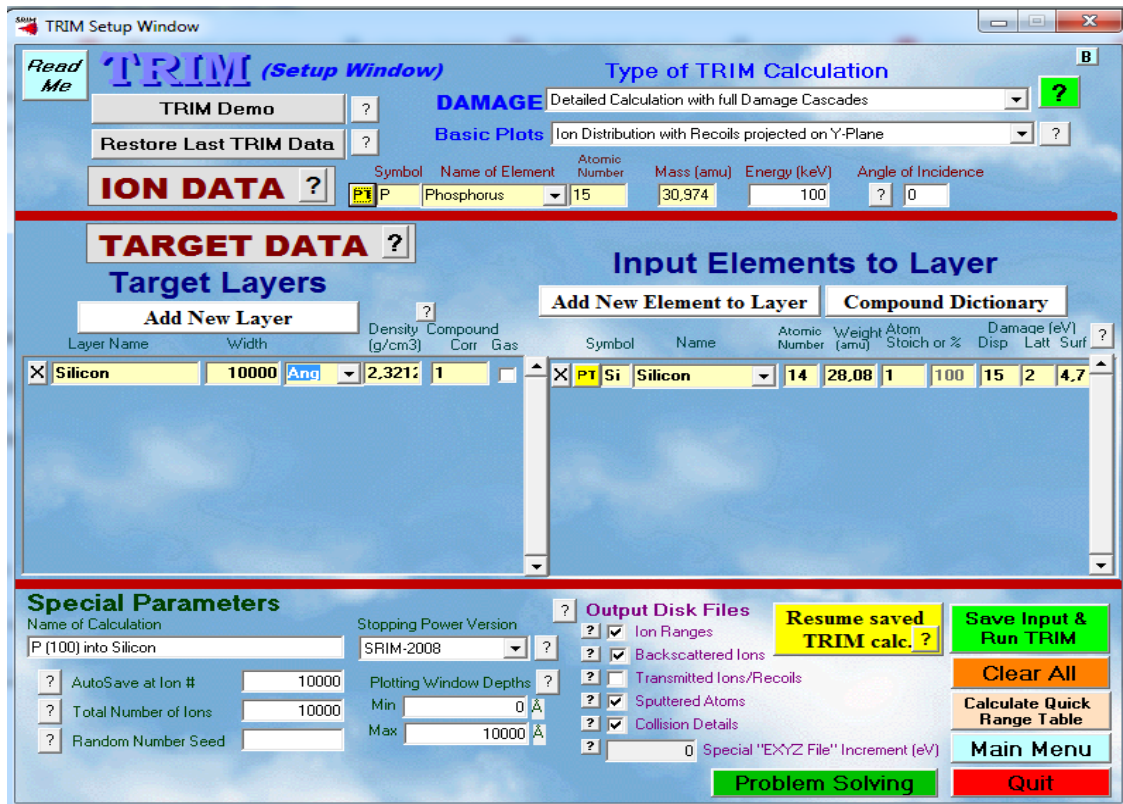


Figure 2.2 – Interface du programme TRIM.

Un ion incident a une trajectoire rectiligne avec des pertes d'énergie électroniques, puis change de direction sous l'influence des collisions nucléaires. Lorsque l'énergie de l'ion est inférieure à son énergie de déplacement E_d (l'énergie minimale qu'il faut transférer à un atome cible pour le déplacer de son site et créer une lacune), il s'arrête et il y a dissipation d'énergie sous forme de phonons.

Sachant que E_1 est l'énergie du projectile (*i.e.* l'ion) après la collision et E_2 l'énergie transférée à un atome cible, le programme TRIM peut rencontrer quatre différentes situations [30] :

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

- $E_1 < E_d$ et $E_2 < E_d$: L'atome cible continue à vibrer dans sa position d'équilibre sans quitter son site. L'ion incident peut occuper seulement des sites interstitiels et son énergie est dissipée dans le réseau pour la création de phonons.

2.4 Simulation des pouvoirs d'arrêt des ions dans la cible du silicium

Les ions incidents pénétrant une cible solide perdent leurs énergies par deux principaux processus, à savoir le ralentissement nucléaire et électronique. L'un de ces processus prend de l'importance par rapport à l'autre selon le type et le domaine d'énergie des ions accélérés.

Les figures 2.3, 2.4 et 2.5 représentent les variations des pertes d'énergie, électronique et nucléaire des ions As^+ , P^+ et B^+ respectivement en fonction de l'énergie d'incidence.

Sur la figure 2.3, on remarque que pour des énergies d'accélération inférieures à 600 keV, l'arrêt nucléaire des ions de l'arsenic (numéro atomique $Z=33$) est plus important que l'arrêt électronique, ce type d'interaction élastique peut entraîner une cascade de chocs secondaires pouvant induire des déplacements d'atomes dans le matériau cible.

Quant au pouvoir d'arrêt nucléaire des ions du phosphore ($Z=15$) dans le silicium, on remarque d'après la figure 2.4 qu'il est prédominant par rapport au pouvoir d'arrêt électronique pour des énergies inférieures à 100 keV et il passe par une valeur maximale aux alentours de 16 keV. Au point A ($E = 100$ keV), le freinage des ions du phosphore est assuré par les deux mécanismes à parts égales. Pour des énergies supérieures à 100 keV, le freinage d'origine électronique devient prépondérant par rapport à l'arrêt nucléaire. Dans cette situation, le pouvoir d'arrêt est gouverné par les interactions inélastiques. L'énergie perdue, la déviation des ions et le désordre apportés dans la matière sont faibles.

En revanche, dans le cas d'ions incidents du Bore ($Z=5$), le point de croisement du ralentissement nucléaire et électronique est localisé à $E= 8$ keV. Au delà de 8 keV, le ralentissement nucléaire est moins significatif par rapport au ralentissement électronique tel que c'est donné par la figure 2.5.

On remarque que l'évolution du pouvoir d'arrêt nucléaire est similaire pour les trois éléments (As^+ , P^+ et B^+) avec un facteur d'échelle différent. Cette contribution nucléaire prend de l'importance quand l'ion est plus lourd, donc plus sa masse atomique est élevée, moins il est sensible au ralentissement électronique. De ce fait, il cause plus de chocs nucléaires (collision en cascade) tout au long de son parcours dans le matériau et les positions initiales de sa structure sont fortement perturbées.

Concernant le pouvoir d'arrêt électronique, on remarque que d'après les trois figures, il est caractérisé par une allure proportionnelle à la racine carrée de l'énergie incidente (la vitesse de l'ion projectile), un comportement prédit par la théorie LSS (Lindhard, Scharff et Schiott) [12]. Ce type d'interaction inélastique ne produit pas directement le déplacement d'atomes. Les ions incidents perdent leur énergie sans que leur direction de propagation soit

2.4. Simulation des pouvoirs d'arrêt des ions dans la cible du silicium

sensiblement affectée. Le ralentissement électronique donc est important dans le cas des ions légers à forte énergie. Il est responsable de l'excitation des atomes pendant un temps très court.

Il est à noter que des résultats similaires au notre, ont été trouvés par Ryssel [31] dans le cas du dopage du Silicium par le Bore et l'arsenic.

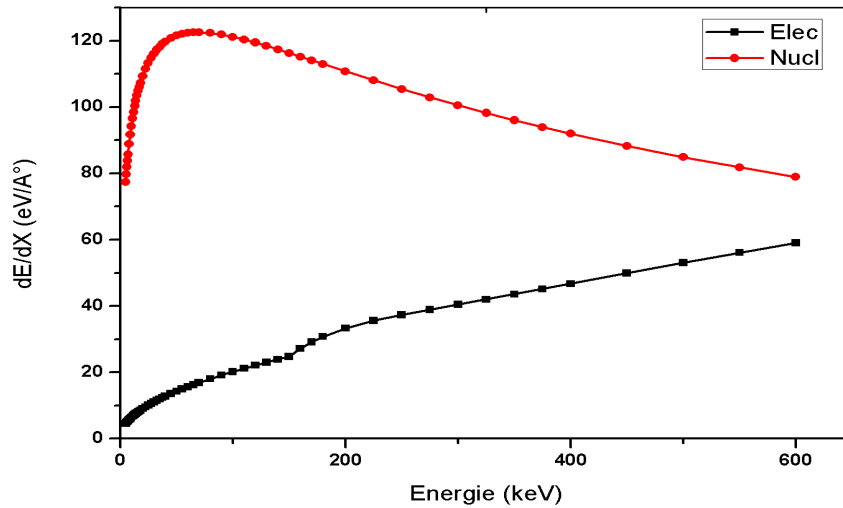


Figure 2.3 – Simulation des pouvoirs d'arrêt (nucléaire et électronique) des ions As^+ dans une cible de Si.

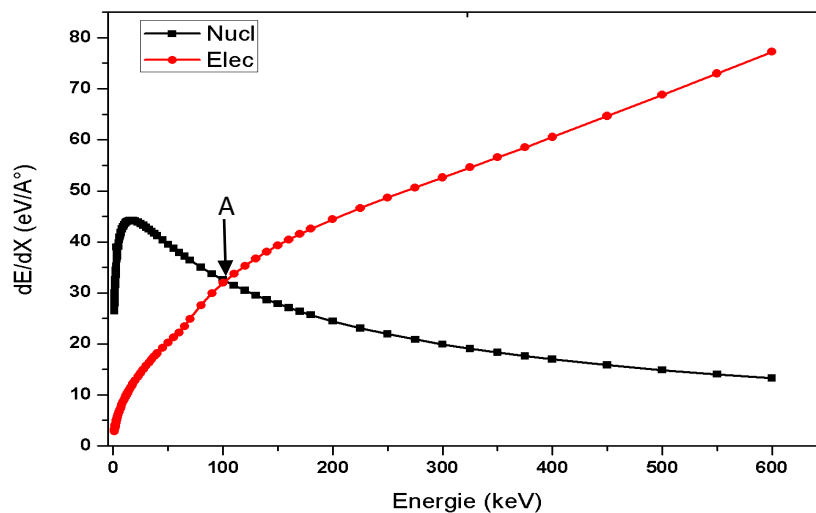


Figure 2.4 – Simulation des pouvoirs d'arrêt (nucléaire et électronique) des ions P^+ dans une cible de Si.

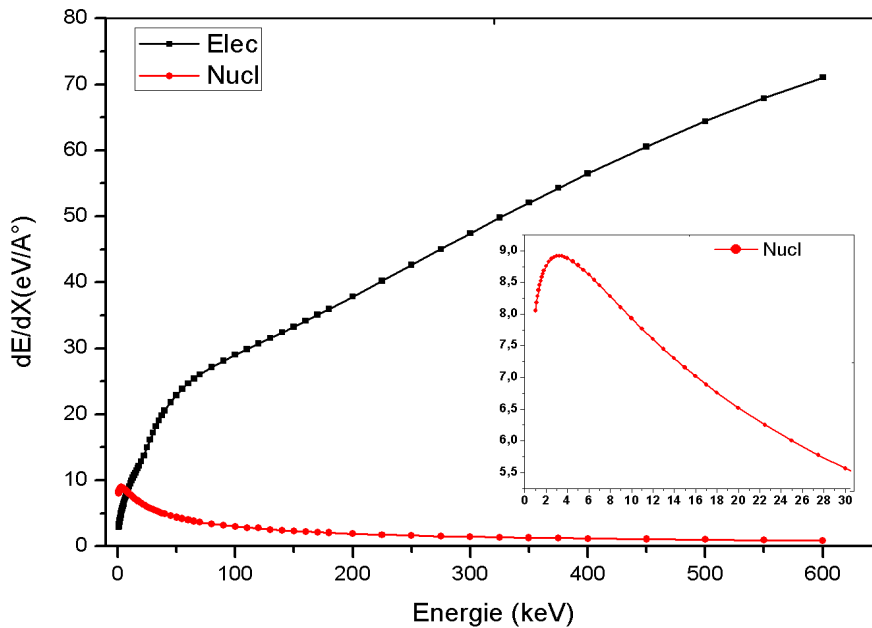


Figure 2.5 – Simulation des pouvoirs d'arrêt (nucléaire et électronique) des ions B⁺ dans une cible de Si.

2.5 Simulation de la distribution des ions dans la cible Si

Nous avons simulé avec le logiciel SRIM le parcours des ions d'arsenic, du phosphore et du bore dans la cible de silicium ainsi que leurs distributions pour des énergies d'implantation de 10 keV et 100 keV à incidence normale (0°).

La figure 2.6 représente le profil de pénétration des ions d'arsenic dans une cible de silicium. Ce profil à deux dimensions est donné directement par l'interface du logiciel, il montre la pénétration des ions d'arsenic 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.

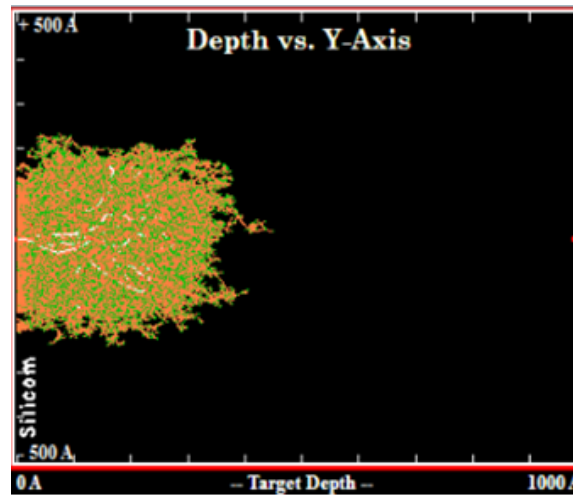


Figure 2.6 – Profil de pénétration à deux dimensions des ions d’arsenic (10 keV) délivrée par le logiciel SRIM-2013 dans la cible de Si.

Nous avons choisi un nombre d’ions incidents $N = 10000$ pour avoir une bonne précision statistique de la probabilité de présence. Les paramètres caractérisant la cible sont directement donnés par l’interface du logiciel et sont 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 (eV)
2.321	15	2	4.7

Tableau 2.1 – Les paramètres caractérisant la cible du silicium (Si).

La figure 2.7 représente les profils de la distribution des ions d’arsenic. Les paramètres extraits des ces profils sont les suivants:

- Le parcours moyen projeté R_p qui représente la profondeur moyenne d’implantation et qui se calcule en additionnant la projection des parcours élémentaires réalisés après chaque choc.
- L’écart-type ΔR_p qui représente l’élargissement du profil autour de la concentration maximale.
- Coefficient d’asymétrie γ (Skewness) qui détermine l’asymétrie de la distribution ou le positionnement du sommet de la courbe par rapport à R_p .
- Coefficient d’aplatissement β (Kurtosis) représente l’extension de la queue de distribution en volume (allongement du pic).

D’après cette figure, on peut constater que l’allure de ce profil suit une distribution quasi-gaussienne, ce qui est en bon accord avec la théorie L.S.S [32] relative à la pénétration des

2.5. Simulation de la distribution des ions dans la cible Si

ions dans un solide amorphe. Les ions d'arsenic se déplacent jusqu'à une profondeur d'environ 300 Å à 10 keV et d'environ 1600 Å à 100 keV.

Le tableau suivant résume les valeurs de ces paramètres pour les deux valeurs d'énergies d'implantation.

Energie (keV)	R_p (Å)	ΔR_p (Å)	Skewness γ	Kurtosis β
10	109	46	0.4896	3.1340
100	719	255	0.3581	2.8909

Tableau 2.2 – Les paramètres de la distribution des ions d'arsenic implantés dans le Si.

On peut noter que les valeurs du parcours moyen projeté (R_p) et de l'écart type (ΔR_p) augmentent au fur et à mesure que l'énergie d'implantation augmente.

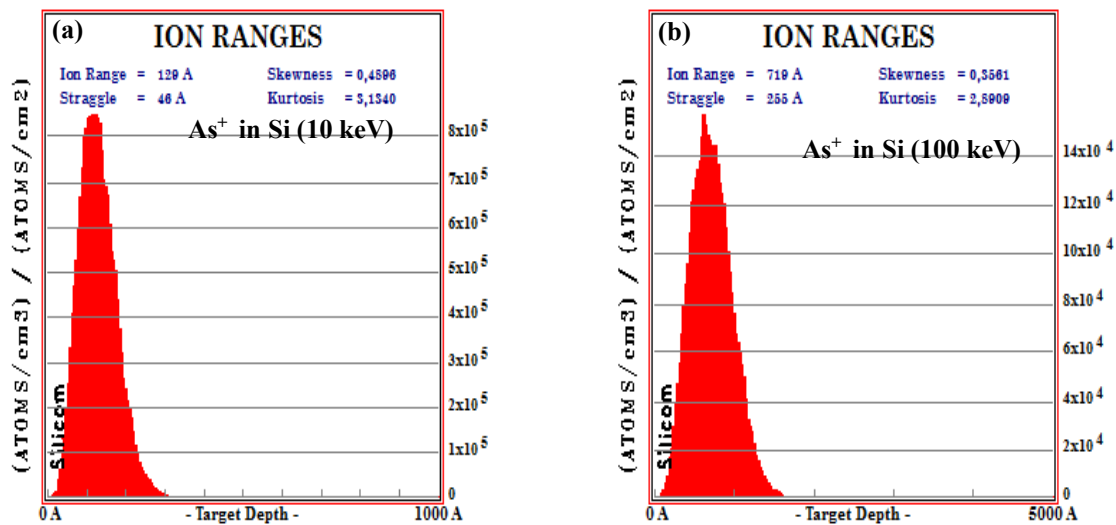


Figure 2.7 – Distribution des ions As⁺ accélérés dans la cible Si.

(a)- 10 keV (b)- 100 keV.

La figure 2.8 représente la distribution des ions P⁺ dans le Si pour des énergies d'incidence, de 10 keV et 100 keV. Cette distribution est toujours gaussienne, la position du maximum de la concentration atomique est déterminée par la valeur de R_p qui augmente avec l'énergie incidente.

La distribution des ions du phosphore est décrite par les quatre paramètres résumés dans le tableau suivant :

2.5. Simulation de la distribution des ions dans la cible Si

Energie (keV)	R_p (Å)	ΔR_p (Å)	Skewness γ	Kurtosis β
10	176	86	0.4318	2.9500
100	1363	484	-0.0983	2.6826

Tableau 2.3 – Les paramètres de la distribution des ions du phosphore implantés dans le Si.

La valeur négative du paramètre γ pour une énergie de 100 keV indique que la concentration est légèrement supérieure du côté de la surface de la cible. Quant au paramètre $\beta < 3$, indique que la cloche de la courbe est légèrement éloignée de la loi normale (Gauss) avec un pic de concentration correspondant à $8.3 \cdot 10^{18}$ ions.cm⁻³ pour une dose d'ions de phosphore implantés de 10^{14} ions.cm⁻².

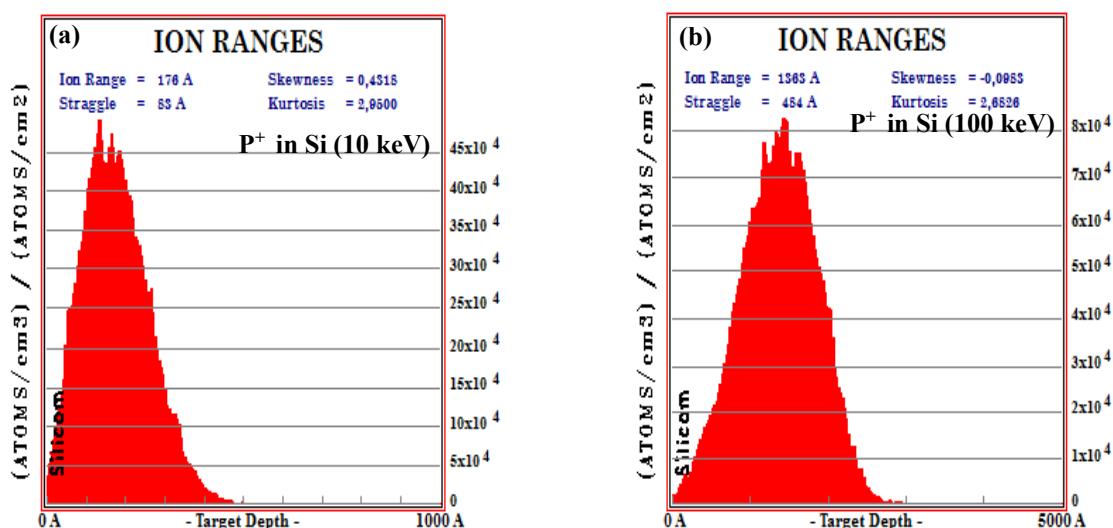


Figure 2.8 –Distribution des ions P⁺ accélérés dans la cible Si.

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

Les profils de la figure 2.9, montrent également une allure quasi-gaussienne. Pour une énergie d'implantation égale à 10 keV, Nous remarquons que les ions du bore se déplacent jusqu'à la profondeur d'environ 900 Å, son écart type est de $\Delta R_p = 189$ Å (c'est la gamme de désordre), et son parcours projeté est de 419 Å.

En augmentant l'énergie (100 keV), la profondeur de pénétration atteint environ 5000 Å. Il est à noter que les valeurs de R_p et ΔR_p obtenues sont toujours supérieures à celles trouvées pour le phosphore et l'arsenic.

Les valeurs trouvées pour le Skewness γ et le Kurtosis β sont légèrement éloignées par rapport à celles reportées dans le cas d'une distribution gaussienne idéale et symétrique (*i.e.* $\gamma=0$ et $\beta=3$). Toutefois, le signe positif de γ pour une énergie d'incidence de 10 keV indique que le profil simulé n'est pas parfaitement symétrique et que la concentration est légèrement importante en profondeur. En revanche, ce paramètre est négatif à 100 keV, ce qui indique

2.5. Simulation de la distribution des ions dans la cible Si

que la dissymétrie est vers la gauche (*i.e.* la distribution est légèrement décalée vers la surface). Nous remarquons aussi l'apparition d'une queue de profil à 100 keV ($\beta > 3$).

Le tableau 2.4 donne les valeurs des paramètres qui caractérisent ces deux profils.

Energie (keV)	R_p (Å)	ΔR_p (Å)	Skewness γ	Kurtosis β
10	419	189	0.0516	2.3793
100	3156	751	-0.7963	3.7865

Tableau 2.4 – Les paramètres de la distribution des ions du bore implantés dans le Si.

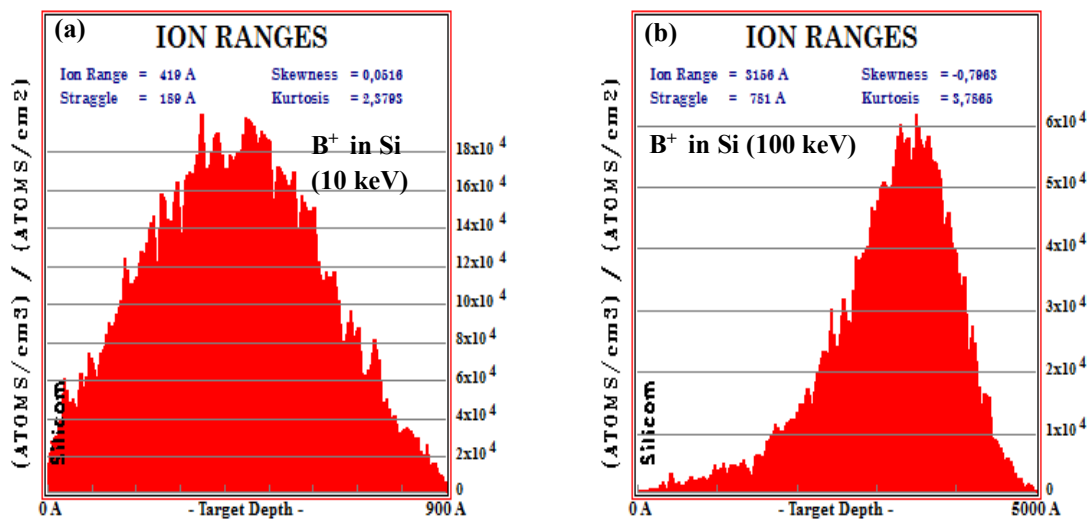


Figure 2.9 – Distribution des ions B⁺ accélérés dans le Si.

(a)- 10 keV (b)- 100 keV.

On constate à partir des trois figures précédentes que l'augmentation de l'énergie d'implantation augmente la profondeur de pénétration et de l'écart type. Quant à l'augmentation du nombre atomique Z de l'ion, la profondeur de pénétration diminue ainsi que l'élargissement des profils, ceci est en accord avec les résultats trouvés pour le pouvoir d'arrêt nucléaire. En effet, le ralentissement nucléaire est plus important dans le cas des ions lourds, 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 d'arsenic à une région proche de la surface. Des résultats similaires aux notre ont été reporté dans la littérature pour les éléments B, P et As [33].

2.6 L'évolution de la perte d'énergie du projectile

Le tableau 2.5 montre la perte d'énergie en pourcentage des ions projectiles (As^+ , P^+ et B^+) à l'intérieur de la cible (Si) avec une énergie d'implantation égale à 10 keV, elle est donnée par l'interface du logiciel SRIM- 2013.

	As^+		P^+		B^+	
	Ions	Atomes de recul	Ions	Atomes de recul	Ions	Atomes de recul
Ionisation	5.65	29.65	14.18	26.88	41.18	16.05
Sites vacants	0.53	4.89	0.5	4.38	0.56	2.83
Phonons	1.39	57.89	1.61	52.45	2.43	36.95

Tableau 2.5 – Perte d'énergie en pourcentage.

2.6.1 L'énergie transférée aux atomes de recul

Chaque fois qu'un ion subit une collision nucléaire avec les atomes de cible (Si), une partie de son énergie initiale est transférée au noyau de l'atome cible. Si la valeur de cette énergie est supérieure à l'énergie de liaison de ce dernier, celui-ci quitte son site et se déplace dans le matériau, constituant à son tour un projectile. Ainsi, chaque ion incident peut provoquer un déplacement de plusieurs atomes cibles au cours d'une trajectoire : c'est l'effet de recul.

D'après le tableau 2.5, une part significative de l'énergie des ions incidents est transférée aux cascades de recul, elle est de 92.43% pour l'arsenic, 83.71% pour le phosphore et 55.83% pour le bore. Les ions incidents As^+ déposent donc seulement 7.57% de leurs énergies directement dans la cible, quant aux ions P^+ et B^+ ils déposent 16.29% et 44.17% respectivement.

Sur la figure 2.10, nous reportons l'évolution de l'énergie absorbée par les atomes de recul en fonction de la profondeur de la cible lors de l'implantation des ions As^+ , P^+ et B^+ dans la cible (Si). D'après cette figure, comme le matériau cible est composé d'un seul élément, toute l'énergie déposée par les ions sera absorbée par les atomes de silicium.

On remarque que l'évolution des trois courbes est similaire, mais avec un ordre de grandeur différent. Elles présentent un maximum d'autant plus proche de la surface que le numéro atomique Z est plus important (ion lourd).

Le transfert d'énergie décroît aussi beaucoup plus rapidement avec la profondeur dans le cas d'arsenic et du phosphore et elle est assez constante dans le cas du bore pour une profondeur allant de 100 à 350 Å, puis elle diminue jusqu'à l'arrêt des ions.

Il est clairement remarquable que les phénomènes de collisions en cascades progressent jusqu'à épuisement de l'énergie d'impact du projectile.

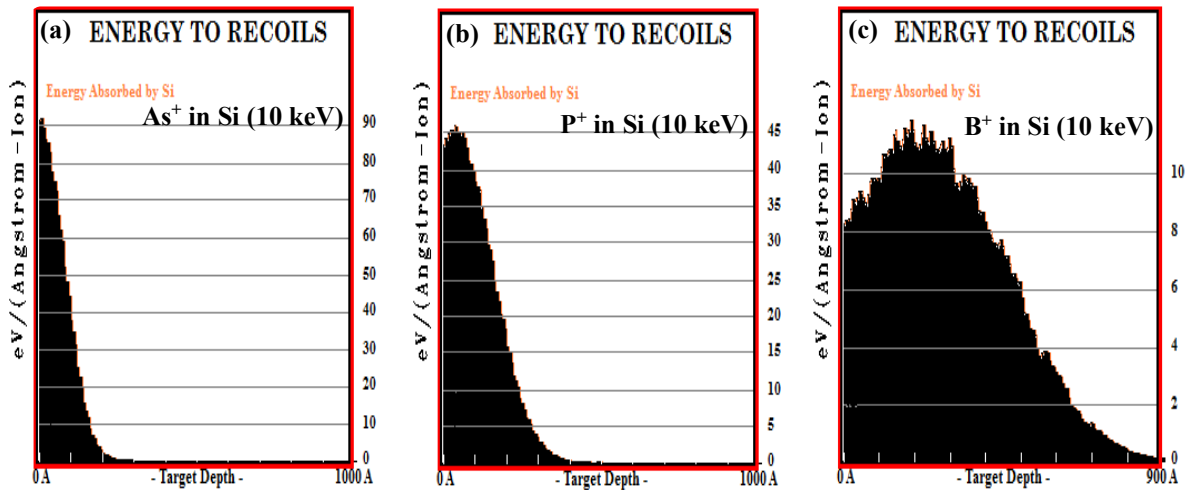


Figure 2.10 – Evolution de l'énergie transférée aux atomes de recoils en fonction de la profondeur de la cible Si (a)- As^+ in Si (b)- P^+ in Si (c)- B^+ in Si.

2.6.2 Production de phonons

La figure 2.11 montre les résultats des pertes d'énergie en $\text{eV}/\text{Å}$ en fonction de la profondeur de la cible Si. 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.

On voit bien d'après le tableau 2.5 comment l'énergie incidente de chaque ion est dissipée. La rangée appelée phonons montre que les ions perdent seulement une petite quantité de leurs énergies en phonons. Par exemple dans le cas du phosphore, l'énergie déposée par les ions primaires incidents est de 1.61%, tandis que les atomes de recul déposent 52.45% de l'énergie en phonons soit au total 54.06%, ce qui équivaut à une énergie de $54.06\% \times 10\text{keV} = 5.406\text{ keV}$ par ion incident.

Les profils de la perte d'énergie aux phonons des atomes de recul peuvent être décrits par une distribution gaussienne. Cette perte est plus importante quand l'atome est lourd. La ligne rouge qui désigne la perte d'énergie aux phonons générée par des ions est à peine visible. Les phonons sont par conséquent exclusivement créés par les atomes de recul.

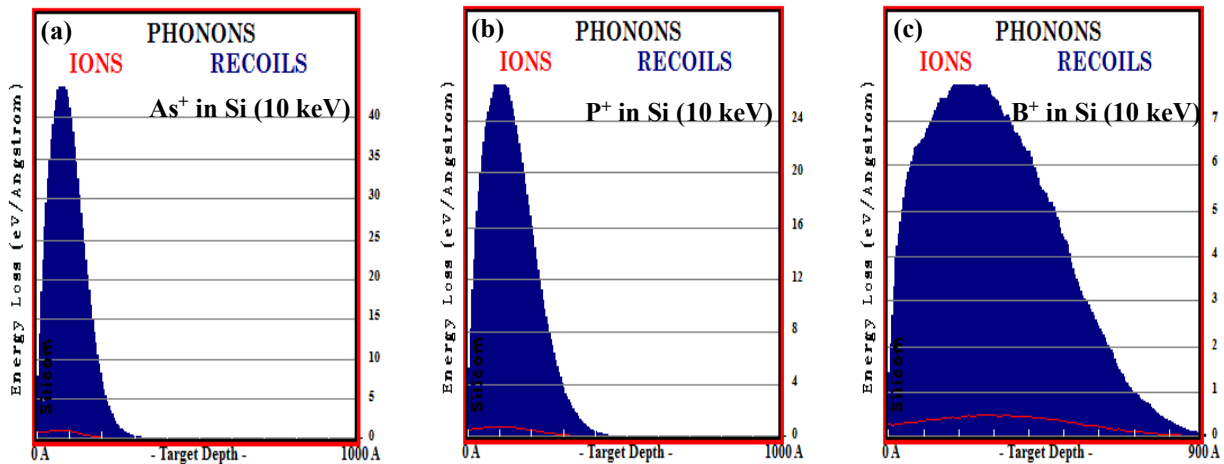


Figure 2.11 – Création de phonons (a)- As⁺ in Si (b)- P⁺ in Si (c)- B⁺ in Si.

2.6.3 Phénomène d'ionisation

Quand un atome cible est soumis à une collision, si l'énergie transférée est suffisante, il peut perdre un électron voire deux ou trois. Ce phénomène peut avoir lieu aussi bien par les ions primaires que par les atomes de recul.

La figure 2.12 montre les résultats de la simulation du phénomène d'ionisation d'arsenic, du phosphore et du bore une fois introduit dans la cible de silicium. Ceci décrit l'énergie cédée aux électrons cibles.

Nous remarquons que dans le cas d'implantation du bore, l'énergie transférée par les ions primaires sous forme d'interaction avec les électrons de la cible est supérieure à l'énergie transférée par les atomes de recul. Par contre dans le cas de l'implantation d'arsenic et du phosphore, on s'aperçoit que les électrons de la cible absorbent plus d'énergie des atomes de recul. Plus l'ion est lourd, moins est la contribution des ions à l'ionisation des atomes cibles. Ceci s'explique par le fait que l'interaction nucléaire est plus probable que l'interaction électronique dans le cas d'ions primaires lourds comme s'est indiqué par la figure 2.3 représentant le pouvoir d'arrêt de l'As⁺, contrairement au cas du bore tel que c'est donné par la figure 2.5.

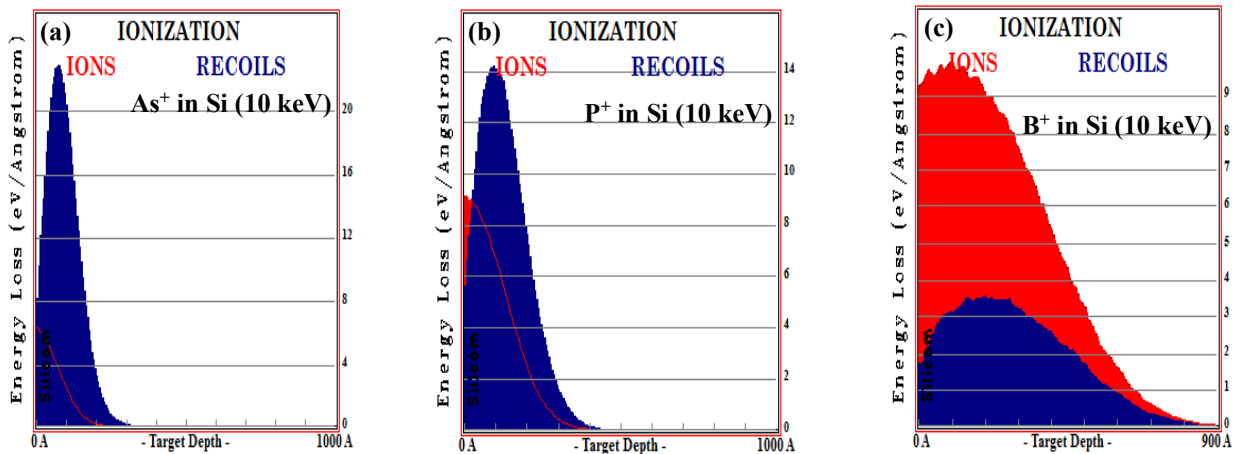


Figure 2.12 – Perte d'énergie par ionisation pour les ions projectiles As^+ , P^+ et B^+ .
 (a)- As^+ in Si (b)- P^+ in Si (c)- B^+ in Si

2.7 Effets relatifs à l'implantation ionique

Un phénomène important lié à l'implantation ionique est la création de défauts. En effet, l'ion incident peut transférer des quantités de mouvement importantes aux atomes du réseau. Si l'énergie communiquée à l'atome cible est supérieure à l'énergie seuil de déplacement, qui est de 15 eV pour le silicium, un atome va être déplacé et mis en position interstitielle, laissant un site vacant (lacune). L'atome cible peut à son tour déplacer d'autres atomes pour créer une cascade de collision. De plus, des atomes peuvent être aussi pulvérisés si l'énergie transmise par les atomes de recul est supérieure à l'énergie de liaison de surface de la cible.

2.7.1 Génération de défauts

Le tableau suivant donne quelques statistiques relatives aux structures (As^+/Si), (P^+/Si) et (B^+/Si). À savoir le nombre d'atomes déplacés, le nombre de sites vacants créés dans la cible (Si) et les collisions de remplacement créés, par ion incident à une énergie d'implantation égale à 10 keV.

	As^+	P^+	B^+
Déplacements totaux	300/ ion	269/ ion	187/ ion
Nombre de sites vacants	276/ ion	248/ ion	172/ ion
Collisions de remplacement	24/ ion	21/ ion	15/ ion

Tableau 2.6 – Quelques statistiques sur les dommages créés dans la cible Si.

2.7. Effets relatifs à l'implantation ionique

D'après ce tableau, on remarque que : Déplacements = Postes vacants + Collisions de remplacement.

La figure 2.13 montre un menu des dommages créés après introduction des ions As^+ , P^+ et B^+ dans la cible Si. Ces dommages sont les résultats des collisions en cascade produites par les ions projectiles avec les atomes cibles. Pour chaque élément, la courbe supérieure indique les déplacements totaux à l'intérieur de la cible. Il s'agit du nombre d'atomes ayant quitté leur site. La courbe inférieure suivante montre la distribution des sites vacants créés à dans la cible, qui représente d'après le logiciel SRIM, le nombre des interstitiels et des atomes pulvérisés (les atomes ayant quitté la surface). On remarque que le nombre de lacunes est inférieur aux nombres d'atomes déplacés. En effet, parmi les lacunes créés suite aux déplacements d'atomes, il y a celles qui vont être comblées par d'autres atomes suite aux collisions en cascade. 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 comme il n'en a pas assez pour continuer plus loin, il tombe dans la vacance laissée par l'atome cible en recul. Comme il s'agit du même élément, il n'y a aucun changement dans la cible. Nous pouvons voir que la somme des deux courbes inférieures est égale à la courbe supérieure des déplacements.

La distribution dans cette figure est aussi gaussienne, la forme de la distribution des sites vacants suit toujours la forme des atomes déplacés. Le nombre maximum d'atomes déplacés par unité de distance (Å) et par ion incident est supérieur à 2.0 pour l'arsenic, et supérieur à 1.2 pour le phosphore et à 0.35 pour le bore. Ce nombre est plus important pour l'arsenic, ceci est dû au fait que cet ion est plus lourd que le phosphore et le bore, donc la probabilité de collision (pouvoir d'arrêt nucléaire) est plus importante.

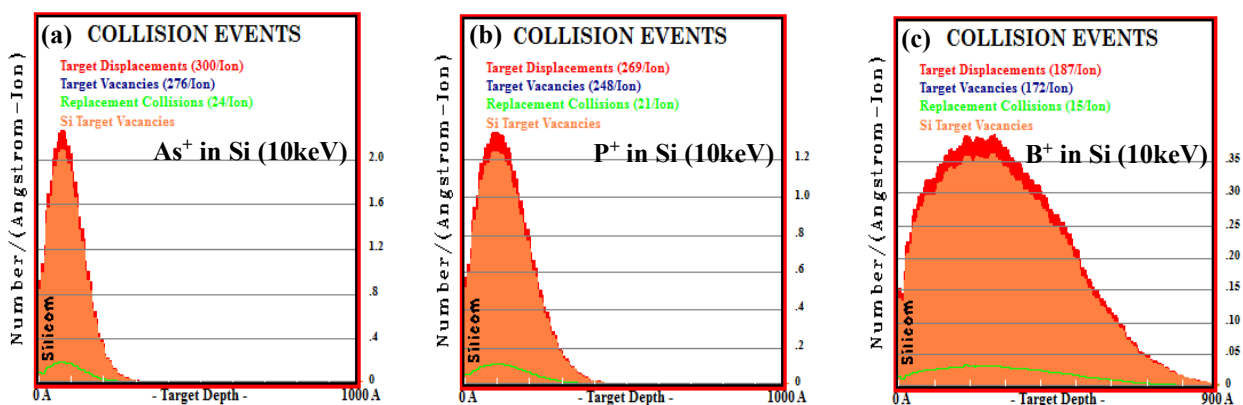


Figure 2.13 – Les dommages créés par les collisions lors d'une implantation dans la cible Si.
(a)- As^+ in Si (b)- P^+ in Si (c)- B^+ in Si

2.7. Effets relatifs à l'implantation ionique

Concernant les défauts créés par une implantation à 100 keV, la distribution est également gaussienne mais l'endommagement de la cible est assez grand par rapport au cas de 10 keV. Les résultats de simulation sont représentés sur la figure 2.14 pour les trois types d'ions (As^+ , P^+ et B^+).

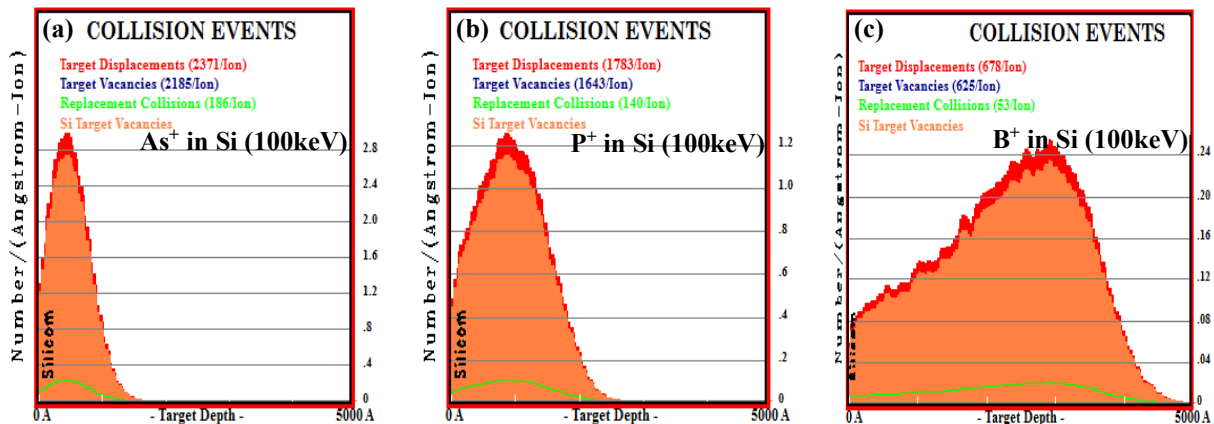


Figure 2.14 – Les dommages créés par les collisions lors d'une implantation dans la cible Si.
(a)- As^+ in Si (b)- P^+ in Si (c)- B^+ in Si

2.7.2 La pulvérisation

Comme nous l'avons mentionné au chapitre 1, un atome peut être pulvérisé lorsqu'une collision donne à un atome cible une énergie supérieure à l'énergie de liaison de surface de cette cible. La pulvérisation d'une surface est décrite par un rendement de pulvérisation, qui est défini comme le nombre moyen d'atomes cible pulvérisés par ion incident.

La figure 2.15 représente le rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie d'éjection. L'évolution des trois courbes est similaire, elles montrent l'énergie de chaque atome atteignant la surface. La barre verticale sur la figure 2.15 représente l'énergie de liaison de surface pour le silicium, cette valeur de 4.7 eV est l'énergie minimale nécessaire à l'atome pour quitter la surface. A gauche de cette barre, c'est le nombre d'atomes ayant une énergie inférieure à 4.7 eV et qui ne sont pas pulvérisés. Par contre à droite de la barre, la courbe donne le nombre d'atomes quittant la surface avec des énergies supérieures à 4.7 eV. On remarque que le nombre d'atomes pulvérisés est plus significatif dans le cas d'arsenic que dans le cas du phosphore et du bore.

2.8. Conclusion

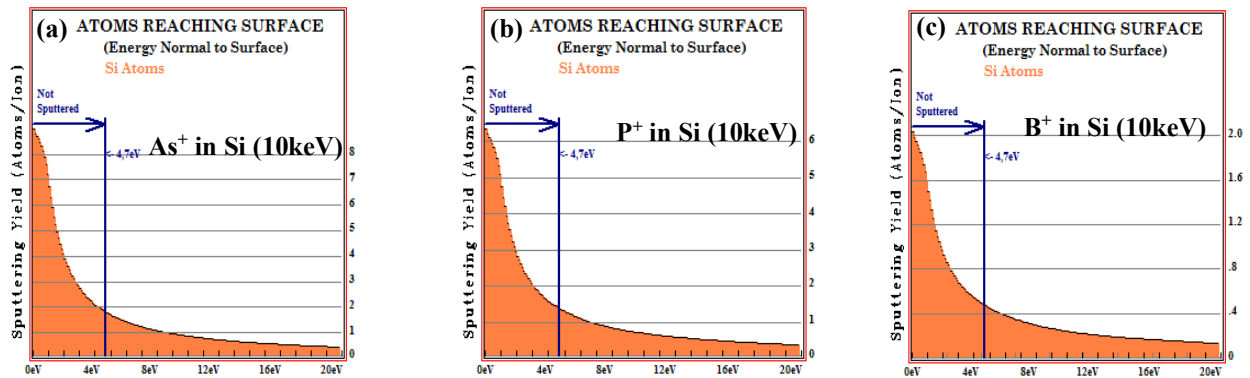


Figure 2.15 – Le rendement de pulvérisation de Si par les ions As^+ , P^+ et N^+ .

(a)- As^+ in Si (b)- P^+ in Si (c)- B^+ in Si

2.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit brièvement le logiciel SRIM-2013 (Stopping and Range of Ions in Matter) qui permet de prédire les phénomènes de collision et d'étudier le comportement des ions dans un matériau. Par ailleurs, nous avons étudié les effets de l'implantation ionique de l'arsenic (As^+), du phosphore (P^+) et du bore (B^+) dans le silicium pour des énergies d'incidence de 10 keV et 100 keV.

Les résultats des phénomènes de ralentissement (nucléaire et électronique) et les processus de perte d'énergie obtenus ainsi que les profils de la distribution des ions en fonction de la profondeur de pénétration ont été représentés pour mettre en évidence l'influence de l'énergie d'incidence et la masse atomique des ions incidents. L'étude de la création de défauts a également été prise en considération.

Conclusion générale

Le travail présenté dans le cadre de ce mémoire porte sur une étude de l'implantation des ions d'arsenic, du phosphore et du bore dans la cible du silicium. Notre principal objectif est la simulation des différents paramètres physiques décrivant le phénomène de l'implantation de ces dopants dans le silicium, Nous nous sommes particulièrement intéressés à l'effet de l'énergie des ions incidents et leurs masses atomiques sur l'évolution de ces paramètres.

La simulation a été réalisée en utilisant le logiciel SRIM-2013 (Stopping and Ranges of Ions in Matter) basé sur la méthode de Monté Carlo et sur l'approximation des collisions binaires.

Dans le premier chapitre, nous avons présenté les différents phénomènes qui peuvent avoir lieu lors de l'interaction des ions avec la matière ainsi que les processus de transfert et de perte d'énergie.

Dans le deuxième chapitre, nous avons décrit le logiciel SRIM d'une part et nous avons présenté nos résultats de simulation d'autre part. Pour une meilleure précision statistique, nous avons choisi pour la simulation 10000 ions incidents (As^+ , P^+ , B^+) et nous avons travaillé avec une énergie d'implantation de 10 keV et 100 keV selon un angle d'incidence normale (0°). Plusieurs profils liés à l'implantation ionique ont été déterminés à savoir les pouvoirs d'arrêt, distribution des ions implantés, distribution des défauts générés (lacunes, atomes déplacés)

Les résultats procurés par le logiciel SRIM nous ont permis de prévoir l'allure de ces différents profils. En effet, l'allure du pouvoir d'arrêt électronique des ions est en accord avec la littérature, qui stipule que son évolution est principalement gouvernée par les interactions inélastiques. Son allure est proportionnelle à la racine carrée de l'énergie et il est prédominant dans le cas des ions légers à forte énergie. Quant au ralentissement nucléaire, il est plus important que le ralentissement électronique dans les cas des ions lourds à basse énergie. Ce type d'interaction élastique peut entraîner une cascade de chocs secondaires pouvant induire des déplacements d'atomes dans le matériau cible.

Par ailleurs, le profil de la distribution des ions simulés suit une forme quasi-gaussienne. L'évolution des paramètres R_p , ΔR_p , γ et β décrivant la répartition des ions implantés à l'intérieur du matériau cible, montre que les paramètres R_p , et ΔR_p représentant respectivement, la profondeur de pénétration et l'écart type, croissent avec l'énergie d'incidence. Par contre, l'augmentation du nombre atomique Z , diminue la profondeur de pénétration ainsi que l'élargissement des profils. Quant au coefficient d'asymétrie γ et le coefficient d'aplatissement β , nous remarquons que dans le cas d'ions lourds la courbe est plus pointue et la dissymétrie est plus apparente.

Le logiciel SRIM nous a permis aussi d'évaluer le processus de perte d'énergie des ions projectiles à l'intérieur de la cible. Un processus qui se manifeste par la création de phonons, l'ionisation des atomes cibles et de site vacants. Celui-ci se traduit par le phénomène de collisions qui progressent jusqu'à épuisement de l'énergie incidente des ions primaires. L'évolution de l'énergie transférée aux atomes de recul en fonction de la profondeur de la cible ainsi que les défauts créés, ont la forme d'une cloche qui suit aussi la forme gaussienne. Il est à noter que les dommages créés dans la cible, tels que les sites vacants, les atomes pulvérisés ainsi que le nombre d'atomes déplacés, sont d'autant plus importants que la masse de l'ion incident est élevée.

Les résultats obtenus, ont montré que l'énergie des ions incidents et leurs masses atomiques influencent l'évolution des paramètres qui gouvernent l'implantation ionique. De plus, ils ont mis en évidence une grande corrélation entre les processus liés à ce phénomène.

Nous espérons par ce travail avoir ramené un plus à l'étude du dopage du silicium. Encore que, nous souhaitons coupler ce travail de simulation avec des techniques expérimentales telles que l'implanteur d'ions et la technique SIMS (Secondary Ion Mass Spectroscopy) pour une comparaison des profils de redistribution des ions implantés et confirmer la fiabilité du code de simulation utilisé dans ce présent travail.

Bibliographie

- [1] Pivin, J.C. *Thin Solid Films* 263 (1995) 185-193; Rao, G.R., Monar, K., Lee, E.H. et Treglio, J.R. *Surface and Coatings Technology* (1994) 64.
- [2] Lee, E.H., Rao, G.R., Lewis, M.B. et Mansur, L.K. *Nucl. Instr. and Methods* B74 (1991) 326.
- [3] F. Torregrosa, IBS (Ion Beam Services), Application de l'implantation ionique en traitement des surfaces, (2004).
- [4] P Sioshansi, EJ Tobin - *Surface and coatings Technology*, Surface treatment of biomaterials by ion beam processes, V.83, (1996) 175.
- [5] Sioshansi, P. et Smidt, F.A. « Ion implantation as a surface treatment to modify friction and Wear of materials » *Engineered Materials for Advanced Friction and Wear Applications - an International Conference*, Gaitheisburg, Md., USA, du 1 au 3 mars 1988, F.A. Smidt et P.J. Blau, Ed. ASM International (1988).
- [6] C. Verdeil, Étude de la pulvérisation et de l'émission de la matière sous bombardement Cs+, Thèse de doctorat, Vandoeuvre-les-Nancy, INPL, (2008).
- [7] M. Nastasi, J. W. Mayer, J. K. Hirvonen, *Ion-solid interactions: fundamentals and applications*, Cambridge University Press, (1969).
- [8] J. Lindhard, M. Scharff, H. E. Schiøtt, range concepts and heavy ion Ranges (notes on atomic collisions, II), *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*33, no.14 (1963).
- [9] N. Bohr, *Kgl. Danske Videnskab. Mat-Fys. Medd.*, (1948) 18.
- [10] L. H. Thomas, The calculation of atomic fields, *proc. Cambridge philos*, vol. 23, (1927) 242.
- [11] J.P. Biersack, *Zeit. Für Phys.* (1968) 211.
- [12] J. Lindhard & M. Scharff, Energy Dissipation by Ions in the keV Region *Phys. Rev.* (1961) 124
- [13] N.Bhor, *Phil. Mag.*(1915) 30.

- [14] Y. Yamamura and H. Tawara, _Energy dependence of ion-induced sputtering yields from monatomic solids at normal incidence, Atomic data and nuclear data tables, V. 62, no.2, (1996) 149.
- [15] G. McCracken, The behaviour of surfaces under ion bombardment, Reports on Progress in Physics, V.38, no.2, (1975) 241.
- [16] M. Nastasi, J. Mayer, and J. K. Hirvonen, Ion-solid interactions: fundamentals and applications, Cambridge University Press (1996).
- [17] R. Weller. In Handbook of Modern Ion-Beam Materials Analysis, eds J. R. Tesmer and M. Nastasi (Materials research Society, Pittsburgh, Pa) (1995).
- [18] L. Ottaviani, Réalisation de Jonctions pn dans le Carbure de Silicium 6H par Implantation Ionique d'Aluminium, Thèse de doctorat, Lyon, (1999).
- [19] S. Blanqué, Optimisation de l'implantation ionique et du recuit thermique pour SiC, Thèse de doctorat, Univ. Montpellier II, (2004).
- [20] R. Legros, Physique des Semi-conducteurs Technologie-diodes, Tome1, Editions Eyrolles, (1974).
- [21] 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).
- [22] M.T. Robinson, I.M. Torrens, Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation, Phys. Rev. B 9 (1974) 5008.
- [23] W. Möller, M. Posselt, TRIDYN FZR User Manual, Forschungszentrum Rossendorf, Report FZR, (2001) 317.
- [24] J.F. Ziegler, The Stopping of Energetic Light Ions in Elemental Matter, J. Appl. Phys. 85 (1999) 1249.
- [25] J.F. Ziegler, SRIM-2003, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, (2004) 1027.
- [26] J.F. Ziegler, J. Biersack, and U. Littmark, _The stopping and range of ions in matter,V.1 Pergamon Press, New York, (1985).
- [27] J. Ziegler, J. Biersack, and M. Ziegler, Srim_ the stopping and range of ions in matter, ion implantation press, (2008).

- [28] H. Faik-Etienne, étude de l'implantation ionique dans les miroirs multicouches mo/si : application aux optiques diffractives, thèse de doctorat, université Toulouse, France, (2005).
- [29] 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).
- [30] L. Baouni, étude des défauts d'irradiation induits par implantation ionique de Sb dans Si, mémoire de master, université Mentouri Constantine, Algérie, (2009).
- [31] H. Ryssel — *Adv. Elec.*(1982) 58.
- [32] Lindhard, Scharff, Schiott, Range Concepts and Heavy Ion Ranges, *Mat. Fys. Medd.*, (1963) 33.
- [33] D. Plummer, D. DEAL, B. Griffin, "Silicon VLSI technology, Fundamentals, Practice and Modeling", Prentice Hall, (2000).