

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT : Physique
N° : Ph / APP/12/2023



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : Physique Appliquée

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: LAMICHE Yasmine

Intitulé

Etude et simulation des propriétés du dopant
sur les profils d'un implantation ionique pour
application en nanotechnologie

Soutenu le devant le jury composé de:

BERRI Saadi	Université de M'Sila	Président
BOUROUINA Hicham	I'E.N.S.Bousaada	Rapporteur
BOUSSENDEL Abdelmadjid	Université de M'Sila	Examineur
IBRIR miloud	Université de M'Sila	Co-Rapporteur

Année universitaire:2022/2023

Remerciements

JE tiens à exprimer ma profonde gratitude envers toutes les personnes qui m'ont accompagné tout au long de la réalisation de ce mémoire de master. Le chemin a été parsemé de défis, mais grâce à leur soutien inestimable, j'ai réussi à mener ce projet à bien. Tout d'abord, je souhaite remercier mon directeur de mémoire, **Bourouina Hicham**, pour son expertise, sa patience et ses précieux conseils. Ses orientations éclairées m'ont permis de structurer mes idées, d'affiner ma méthodologie de recherche et d'atteindre un niveau de qualité que je n'aurais jamais pu espérer sans lui. Je tiens également à remercier les membres de mon comité de mémoire pour leur examen attentif de mon travail et leurs commentaires constructifs qui ont grandement contribué à améliorer ce mémoire. Mes remerciements s'adressent également à mes enseignants et professeurs qui m'ont transmis leur savoir et leur passion pour la recherche. Votre enseignement a été une source d'inspiration tout au long de ce parcours académique. Je suis reconnaissant envers ma famille pour leur soutien constant et leur encouragement inébranlable. Votre amour et votre compréhension ont été mes piliers dans les moments les plus difficiles.

Dédicaces

Je dédie mon cet travail :À tous ceux qui embellissent ma vie, qu'ils soient ma famille, professeurs , collègues ou amis, Chacun de vous apporte une touche spéciale à mon existence. Merci d'être des étoiles brillantes dans mon univers. ,Yasmine

Tableau des matières

Tableau des matières	i
Liste des Figures	iv
Liste des Tableaux	vii
1 Technique de dopage par implantation ionique	3
1.1 Introduction	3
1.2 Technique de l'implantation ionique	3
1.2.1 Principe de l'implantation ionique	4
1.2.2 Procédés d'implantation	6
1.2.3 Effets engendrés par l'implantation ionique	8
1.3 Description de l'implanteur ionique	11
1.3.1 l'implanteur	11
1.3.2 Principe étape du procédé de l'implantation ionique	12
1.3.3 Interaction ions- matière	14
1.3.3.1 Types des interactions	16
1.3.4 Distribution des ions après implantation	18
1.4 Théories de ralentissement et de l'arrêt des ions	19
1.4.1 Cas d'un matériau amorphe	21
1.4.1.1 Pouvoir d'arrêt nucléaire	22
1.4.1.2 Pouvoir d'arrêt électronique	23
1.4.2 Cas d'un matériau cristallin	23
1.5 Distribution des ions en profondeur	25
1.6 conclusion	27
2 Modélisation de dopage par l'implantation ionique	35
2.1 Introduction	35
2.2 Propriétés du matière dans l'état solide	36
2.2.1 Solides amorphes	36
2.2.2 Solides cristallins	37

2.2.2.1	Structure de type monocristalline	38
2.2.2.2	Structure de type polycristalline	38
2.3	Semi-conducteur de la colonne IV Silicium	39
2.3.1	Généralités sur le silicium et ses applications	40
2.3.2	Dopage de semi-conducteur	41
2.4	L'interaction ion-matière	43
2.4.1	Principe de l'interaction	43
2.4.2	Perte d'énergie	44
2.4.3	Pouvoir d'arrêt nucléaire	45
2.5	Distribution des ions implantés	47
2.5.1	Canalisation et son rôle	48
2.6	Effets des défauts sur les propriétés des semiconducteurs	49
2.6.1	Effets engendres sur le volume	49
2.6.2	Effets engendres sur les propriétés optiques	49
2.6.3	Effets engendres sur les propriétés électriques	50
2.7	La simulation par le code SRIM	50
2.7.1	Définitions	50
2.7.2	Principe de fonctionnement	50
2.7.3	Applications de SRIM et Types de Calculs	52
2.8	Conclusion	53

3 Simulation des paramètres liés à l'implantation ionique de l'aluminium dans le silicium dopé au nitrogène. 57

3.1	Introduction	57
3.2	Présentation de la structure	57
3.3	Paramètres de la simulation	58
3.4	Simulation et interprétation	58
3.4.1	Trajectoire des ions	58
3.5	Profils de concentration	59
3.5.1	Influence de la quantité d'azote	59
3.6	Production des lacunes	61
3.6.1	Variation de la quantité d'azote	61
3.6.2	Variation de l'énergie	62
3.7	Phénomène d'ionisation	63
3.7.1	Variation de la quantité d'azote	63
3.7.2	Variation de l'énergie	64
3.8	Production de phonons	65
3.8.1	Variation du rapport stœchiométrique	65

3.8.2	Variation de l'énergie	66
3.9	Simulation du pouvoir d'arrêt	66
3.9.1	Pouvoirs d'arrêt d'aluminium dans la structure SiN_x/SiO_2 . . .	67
3.10	Conclusion	68

Liste des Figures

1.1	Phénomènes d'interaction ions/matière lors d'une implantation et profil de concentration associé [5]	5
1.2	Schéma d'un implantateur utilisé dans l'industrie de la microélectronique [5]	7
1.3	Implanteurs destinés au traitement industriel d'outils en acier, chrome et alliages de titane [10].	7
1.4	: Exemple de réacteur d'implantation ionique par immersion plasma [11]	8
1.5	Modification de la densité de dislocation par effet longue-portée de l'implantation ionique. $n(z)$: profil de concentration des ions implantés. $\rho(z)$: distribution de la densité de dislocations. $S(0)$ et $S(t)$: positions de la surface de l'échantillon avant et après implantation. [48]	10
1.6	Schéma d'un implantateur utilisé dans l'industrie de la microélectronique [68].	12
1.7	: Phénomènes d'interaction ions/matière lors d'une implantation et profil de concentration associé [69,70,71].	13
1.8	Applications des interactions ion-matière [70]	14
1.9	Exemple de trace simulée dans l'eau par méthode Monte-Carlo. La ligne rouge représente la trajectoire de l'ion. Chaque point bleu représente une ionisation	15
1.10	Collision élastique entre deux particules dans le système de référence du laboratoire [72]	16
1.11	Illustration du parcours d'un ion incident dans la cible. Les déplacements des atomes de la matière sont également schématisés [74].	17
1.12	: Illustration des phénomènes de surface et de volume ayant lieu par interaction des ions avec la matière [75].	17
1.13	Exemple de parcours d'un ion.	18
1.14	Distribution des ions implantés dans une cible : (a) le chemin parcour (R) et le parcours moyen projeté (Rp) ; (b) la distribution à deux dimensions	19
1.15	Illustration des différents phénomènes se produisant au cours d'une implantation ionique dans un matériau solide [78].	20

1.16	Composantes nucléaire et électronique du pouvoir d'arrêt en fonction de la vitesse de l'ion incident 81. (Z_1) est le numéro atomique; (V_0) est la vitesse de Bohr.	21
1.17	Trajectoire de l'ion incident dans un canal [83].	24
1.18	Parcours de vingt ions de bore de 20 keV dans le silicium [84].	25
1.19	Distribution des ions implantés en profondeur de la cible [86]. (a) échelle linéaire; (b) échelle logarithmique.	26
2.1	Les principaux états de la matière	36
2.2	Organisation des molécules dans la matière cristalline et amorphe. . .	37
2.3	Structure des solides cristallins : (a) Silice cristalline, (b) Graphite et (c) Diamant.	38
2.4	Structure des solides : (a) monocristalline, (b) polycristalline et (c) Amorphe.	39
2.5	Un schéma représente les couches d'électrons de valence et d'électrons de conduction	39
2.6	Structure cristalline du silicium.	41
2.7	Dopage du silicium par du Phosphore (N) et du Bore (P).	42
2.8	Différentes interactions dans le matériau cible.	45
2.9	Diagramme de l'énergie cinétique totale du système ion-atome avant et après collision.	45
2.10	Évolution des pertes d'énergies électroniques (Se) et nucléaires (Sn) en fonction de la vitesse du projectile.	47
2.11	Parcours et distribution des ions implantés.	48
2.12	Distribution des ions implantés dans différents cas de canalisation . . .	49
2.13	: Interface du logiciel SRIM- 2008.	52
3.1	Représentation de la structure à implanter : SiN_x/SiO_2	57
3.2	Simulation de la trajectoire d'aluminium dans la structure SiN_x/SiO_2 , pour des proportions de l'azote de 2.5%, 5%, et 7.5%, avec une énergie de 15 keV	58
3.3	: Simulation de la trajectoire d'aluminium dans la structure $SiN_{0.025}/SiO_2$, pour différentes énergies : (a) E=5 keV, (b) E=10 keV, (c) E=15 keV . .	59
3.4	Simulation des profils de distribution d'aluminium dans la structure SiN_x/SiO_2 , pour les taux d'azote de 2.5%, 5%, et 7.5%, avec une énergie de 15 keV	60
3.5	Simulation des profils de distribution d'aluminium dans la structure $SiN_{0.1}/SiO_2$, en fonction de l'énergie d'implantation : E=5 keV, E=10 keV, E=15 keV.	61

3.6	Nombre de lacunes créées par implantation d'aluminium en fonction de la quantité d'azote dans la couche SiN_x	62
3.7	Nombre de lacunes créées par implantation d'aluminium dans la couche $SiN_{0.025}$ en fonction de l'énergie incidente des ions : E=5keV, E=10 keV, E=15 keV.	62
3.8	Perte d'énergie par le phénomène d'ionisation dans la couche SiN_x par les ions projectiles et les atomes de recul d'aluminium : Influence de la quantité d'azote	63
3.9	Perte d'énergie par le phénomène d'ionisation d'aluminium dans la couche $SiN_{0.1}$ par les ions projectiles et les atomes de recul : effet de la variation de l'énergie d'implantation : E=5 keV, E=10 keV, E=15 keV.	64
3.10	: Perte d'énergie lors de la production des phonons dans la couche SiNx par les ions projectiles et les atomes de la cible d'aluminium : influence de la quantité d'azote.	65
3.11	Perte d'énergie lors de la production des phonons dans la couche $SiN_{0.025}$ par les ions projectiles et les atomes de la cible d'aluminium : Effet de la variation de l'énergie d'implantation : E=5 keV, E=10 keV, E=15 keV.	66
3.12	Simulation des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique d'aluminium dans la cible SiN0.01/SiO2 , en fonction de l'énergie incidente des ions	68

Liste des Tableaux

2.1	Les propriétés physiques du silicium.	40
-----	---	----

Introduction générale

La technique d'implantation ionique est l'une des techniques essentielles utilisées dans plusieurs industries, mais elle est particulièrement connue dans l'industrie des semi-conducteurs. Cependant, en plus de son utilisation principale, elle trouve de plus en plus d'applications dans divers domaines tels que la métallurgie, la céramique et la biologie, grâce à sa capacité à modifier et à améliorer les propriétés de surface et des matériaux. La technique d'implantation ionique repose sur un concept simple et efficace, qui consiste à accélérer des particules d'ions vers une cible spécifique. Ces particules pénètrent alors dans les couches superficielles du matériau cible en quantités contrôlables avec précision. Ce processus permet d'apporter des modifications précises et spécifiques à la composition des matériaux, ainsi qu'à leurs propriétés physiques et chimiques. Cela contribue au développement de produits offrant des performances améliorées dans une variété d'applications. La technique d'implantation ionique est ainsi devenue un outil essentiel pour la recherche et le développement dans les domaines des sciences et des industries qui dépendent de la modification et de l'amélioration des surfaces et des structures fines des matériaux. [1-2]

Plusieurs méthodes sont utilisées pour réaliser le dopage des matériaux, notamment la diffusion, la transmutation nucléaire, la technique laser et l'implantation ionique. La technique la plus avancée est l'implantation ionique, sur laquelle nous allons nous pencher. Cette technique, également appelée implantation ionique, sera soumise à une simulation à l'aide du logiciel TRIM (Transport et Portée des Ions dans la Matière) [3]. Lorsqu'une surface solide est bombardée par des ions primaires, cela engendre une séquence d'interactions au cours desquelles les ions primaires transfèrent tout ou partie de leur énergie. L'ion incident peut parcourir une certaine distance à l'intérieur du solide, dissipant son énergie avant d'être finalement stoppé ou éjecté du matériau. Cette étude vise à examiner deux types d'interactions, à savoir le pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire, en utilisant le logiciel TRIM (Transport et Portée des Ions dans la Matière) développé par le scientifique allemand James Ziegler [4]. L'implantation ionique est devenue un outil essentiel dans l'industrie de la fabrication des dispositifs à semi-conducteurs, offrant ainsi un moyen de modifier les propriétés de surface d'une grande variété de matériaux. L'implantation d'éléments tels que l'aluminium, le bore et le phosphore est considérée parmi les méthodes les plus couramment utilisées pour le dopage du silicium. Dans le cadre de cette recherche, nous proposons d'étudier le comportement des ions implantés dans le silicium. Notre réalisation se composera de deux parties principales. La première partie sera réalisée à travers une simulation visant à anticiper les différents phénomènes qui se produisent lors des interactions des ions avec la matière (Si). Quant à la deuxième partie, elle sera dédiée à une expérience qui

nous permettra de comprendre le comportement réel des ions dans le silicium. Afin de mener à bien notre travail, nous structurons cette thèse comme suit : Au chapitre premier, nous présentons des informations générales sur la méthode d'implantation ionique, en commençant par le principe et les processus, en passant par les effets, et en arrivant à la description de l'appareil utilisé et à la distribution des ions après l'implantation. Dans le deuxième chapitre, nous abordons les informations physiques sur le silicium et les semi-conducteurs en général. Nous expliquons comment le silicium est dopé en utilisant des ions, en fournissant des détails sur les types de dopage N et P, le principe de l'interaction des ions avec la matière, le modèle de distribution des ions, et nous mentionnons également le programme de simulation SRIM / TRIM. Dans le troisième chapitre, nous utilisons le programme TRIM pour simuler les réactions des ions avec la matière. Nous traitons de la capacité d'arrêt nucléaire et électronique, des effets des lacunes créées par l'interaction des ions, des trajectoires des ions à l'intérieur de la matière, des effets phononiques et de la perte d'énergie des ions. Enfin, dans le chapitre de conclusion, nous résumons les points essentiels et proposons des suggestions pour les futures recherches.

Chapitre 1

Technique de dopage par implantation ionique

1.1 Introduction

Il existe différentes techniques pour améliorer les propriétés physiques, chimiques ou mécaniques des matériaux solides, dont l'une d'entre elles est le dopage par l'implantation ionique. Le dopage joue un rôle essentiel dans le traitement des matériaux à des fins de fabrication de composants optiques et électroniques. Il peut être réalisé par divers procédés technologiques, mais l'implantation ionique est souvent préférée en raison de ses avantages significatifs par rapport à d'autres procédés, tels que la diffusion thermique. L'implantation ionique est principalement utilisée dans l'industrie des semi-conducteurs, mais elle est également appliquée dans d'autres domaines tels que la métallurgie, les céramiques et la biologie. Le principe de cette technique consiste à bombarder une cible avec des ions accélérés, qui pénètrent alors dans les couches superficielles avec une quantité contrôlable. Dans le premier chapitre, nous aborderons de manière générale la technique de l'implantation ionique. Nous examinerons divers paramètres tels que les avantages et les inconvénients, les principes physiques et la description d'un implant ionique. Enfin, nous étudierons la théorie du ralentissement et de l'arrêt des ions dans un matériau, ainsi que la distribution des ions en profondeur dans la cible.

1.2 Technique de l'implantation ionique

Le processus technologique appelé implantation ionique consiste à introduire des atomes chargés (appelés projectiles) dans un matériau (appelé cible). En fournissant suffisamment d'énergie aux ions, ces projectiles peuvent pénétrer au-delà de la surface de la cible. La tension appliquée aux ions varie généralement de quelques kiloélectronvolts

(implantation plasma) à quelques millions d'électronvolts (implantation haute énergie), tandis que la dose se situe généralement entre 10^{10} et 10^{16} ions/cm² [1,2]. L'implantation ionique est une technique largement utilisée dans l'industrie électronique. Elle a été introduite en 1951 par Shockley, l'un des inventeurs du transistor, pour remplacer le processus traditionnel de dopage des semi-conducteurs par diffusion à haute température [3]. Comme toute technique technologique, l'implantation ionique présente des avantages et des inconvénients. Parmi les principaux avantages, on peut citer le contrôle précis du nombre et de la profondeur de pénétration des ions, la possibilité de dépasser la limite de solubilité, l'introduction d'éléments non miscibles dans la cible, la simplicité du processus, la facilité de reproduction et de contrôle des paramètres, l'applicabilité à différents types de substrats et impuretés, la facilité de mesure de la quantité totale d'ions introduits, la réalisation à des températures plus basses que la diffusion, et l'absence de variation dimensionnelle lors de l'application sur des pièces finies. De plus, la pénétration latérale des ions dans le substrat est limitée [3]. Cependant, l'implantation ionique présente également des inconvénients tels que les dommages inévitables causés à la cible pendant le ralentissement des ions par collision avec les atomes cibles, la nécessité que les surfaces à traiter soient externes ou directement exposées au faisceau, des épaisseurs de traitement faibles ($<1\text{ }\mu\text{m}$) et le coût élevé de l'équipement nécessaire (le prix d'une nouvelle machine est généralement compris entre 3 et 6 millions de dollars) [4].

1.2.1 Principe de l'implantation ionique

L'implantation ionique, une technique inventée par William Shockley à la fin des années 1940, consiste à insérer des ions dans un matériau cible pour en modifier les propriétés. À l'origine utilisée pour le dopage des semi-conducteurs, cette méthode a été détournée dans les années 1970 pour améliorer les caractéristiques des métaux et des polymères. La principale valeur de cette technique réside dans sa capacité à contourner les lois de la thermodynamique et à créer de nouvelles phases métastables qui seraient autrement impossibles à obtenir par des procédés conventionnels de traitement de surface. Ces nouvelles phases induisent des modifications des propriétés du matériau implanté, comme l'amélioration de la résistance à la corrosion, la réduction du coefficient de frottement, l'augmentation de la dureté et de la résistance à l'usure. En raison de son potentiel d'obtenir un large éventail de nouvelles propriétés, cette technologie a d'abord été adoptée par l'industrie nucléaire et l'aéronautique, et est actuellement utilisée dans de nombreux autres secteurs tels que le biomédical, l'outillage et l'automobile. Le procédé d'implantation ionique se déroule en plusieurs étapes. Tout d'abord, l'élément à implanter est ionisé en introduisant un gaz contenant cet élément dans une chambre

d'ionisation, généralement grâce à l'émission d'électrons par un filament, ce qui crée un plasma. Le plasma peut être magnétiquement confiné dans certains cas. Ensuite, les ions sont extraits de la source et accélérés vers le matériau cible à l'aide d'un champ électrique. Certains implantateurs utilisent également un séparateur de masse pour sélectionner un seul type d'ion à planter. Les ions pénètrent ensuite le matériau cible et perdent progressivement leur énergie cinétique jusqu'à être immobilisés, ce qui entraîne des modifications structurelles et des changements de propriétés. Pendant le processus d'implantation, différentes interactions se produisent entre les ions implantés et le matériau cible. Au début de leur parcours, les ions ont une trajectoire presque rectiligne en raison de leur énergie cinétique élevée. Au fur et à mesure qu'ils interagissent avec les électrons du matériau, ils perdent de l'énergie (collisions inélastiques). Lorsqu'ils ralentissent considérablement, les ions commencent à interagir avec les atomes par collisions élastiques, changeant de trajectoire à chaque collision. Ces collisions peuvent provoquer un phénomène en cascade où un atome déplacé peut entrer en collision avec d'autres atomes. La profondeur d'implantation des ions dans le matériau dépend du champ électrique appliqué pendant l'accélération et suit une distribution Gaussienne centrée autour d'une distance de parcours moyen. Pendant l'implantation, un phénomène important appelé pulvérisation peut se produire. Les collisions élastiques peuvent entraîner l'éjection d'atomes de la surface du matériau cible, provoquant une érosion. La nature et l'énergie des ions implantés peuvent influencer l'importance de ce phénomène et entraîner des modifications du profil de concentration.

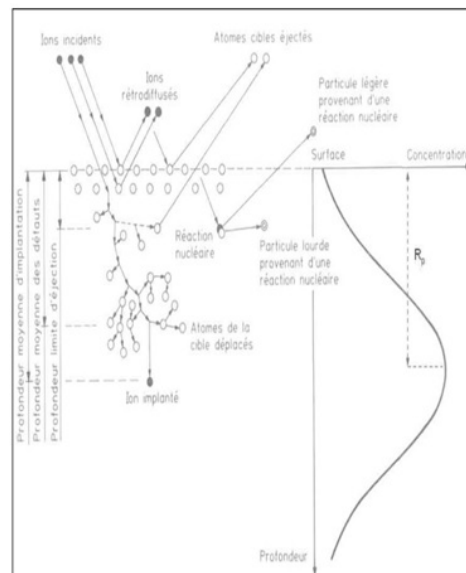


FIGURE 1.1 – Phénomènes d'interaction ions/matière lors d'une implantation et profil de concentration associé [5]

1.2.2 Procédés d'implantation

L'industrialisation de l'implantation ionique a connu une expansion rapide et étendue dans le domaine de l'industrie électronique en raison de son caractère fondamental. En effet, ce processus revêt une importance capitale pour le dopage des semi-conducteurs et la modulation de leurs propriétés. Dès 1973, Hartley et Dearnaley [6,7,8] ont établi l'intérêt de l'implantation ionique dans le traitement des métaux en démontrant que l'implantation d'azote améliore les caractéristiques tribologiques des aciers. Cependant, les dispositifs d'implantation en place à cette époque étaient relativement complexes (voir Figure 1.2), ce qui a suscité un consensus quant à la nécessité de simplifier ces systèmes pour favoriser l'industrialisation du procédé. Ainsi, des études subséquentes ont rapidement confirmé [9] que le spectromètre de masse, qui permet la sélection des ions, n'était pas requis lors du traitement des aciers. Bien que les premières solutions industrielles pour le traitement des métaux par implantation ionique aient émergé (voir Figure 1.3), cette technologie est demeurée peu utilisée, en grande partie en raison de la fragilité des sources d'ions. En effet, pour générer les ions, ces sources utilisaient un filament dont la durée de vie était limitée, et l'intensité des faisceaux ioniques obtenus demeurerait insuffisante (quelques dizaines de nA) pour réaliser des implantations efficaces sur des pièces métalliques dans des délais restreints. L'amélioration des sources d'ions est devenue ainsi une condition sine qua non pour atteindre une fiabilité et une intensité de faisceau suffisantes afin de répondre aux exigences industrielles. Une alternative a alors été mise au point : l'implantation ionique par immersion plasma (ou PIII : Plasma Immersion Ion Implantation). Contrairement aux dispositifs conventionnels d'implantation ionique, la PIII ne nécessite pas de source d'ions externe. Un réacteur de PIII (voir Figure 1.4) est principalement composé d'une chambre à vide contenant la pièce à implanter, ainsi que d'un générateur haute tension et d'un générateur radiofréquence. Un mélange gazeux est introduit dans la chambre de traitement, puis ionisé à l'aide d'une onde haute fréquence. En appliquant une haute tension entre la cathode et la pièce à implanter (reliée à l'anode), les ions du plasma s'implantent de manière homogène sur toute la surface de la pièce. Actuellement largement adoptée par de nombreuses entreprises, cette technologie se révèle particulièrement adaptée aux applications industrielles, permettant l'implantation uniforme de multiples pièces en une seule opération.

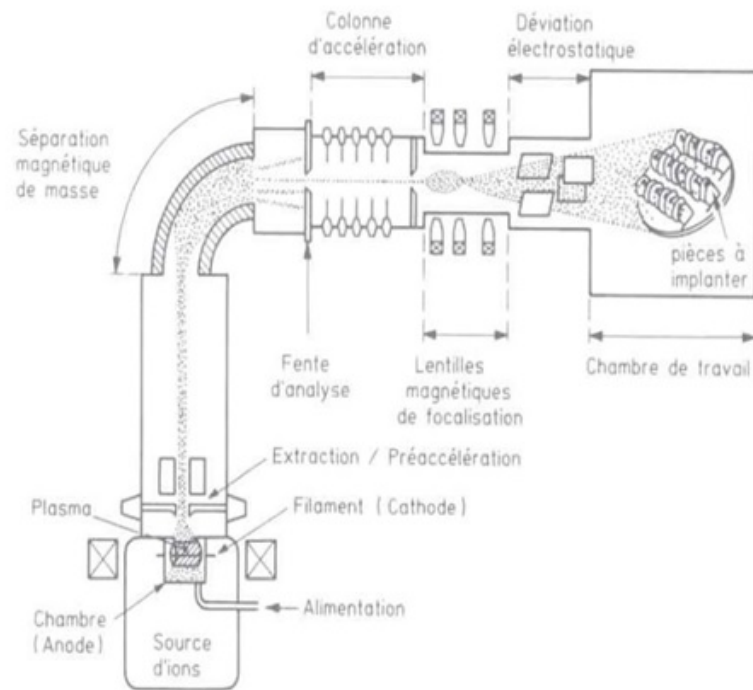


FIGURE 1.2 – Schéma d'un implantateur utilisé dans l'industrie de la microélectronique [5]

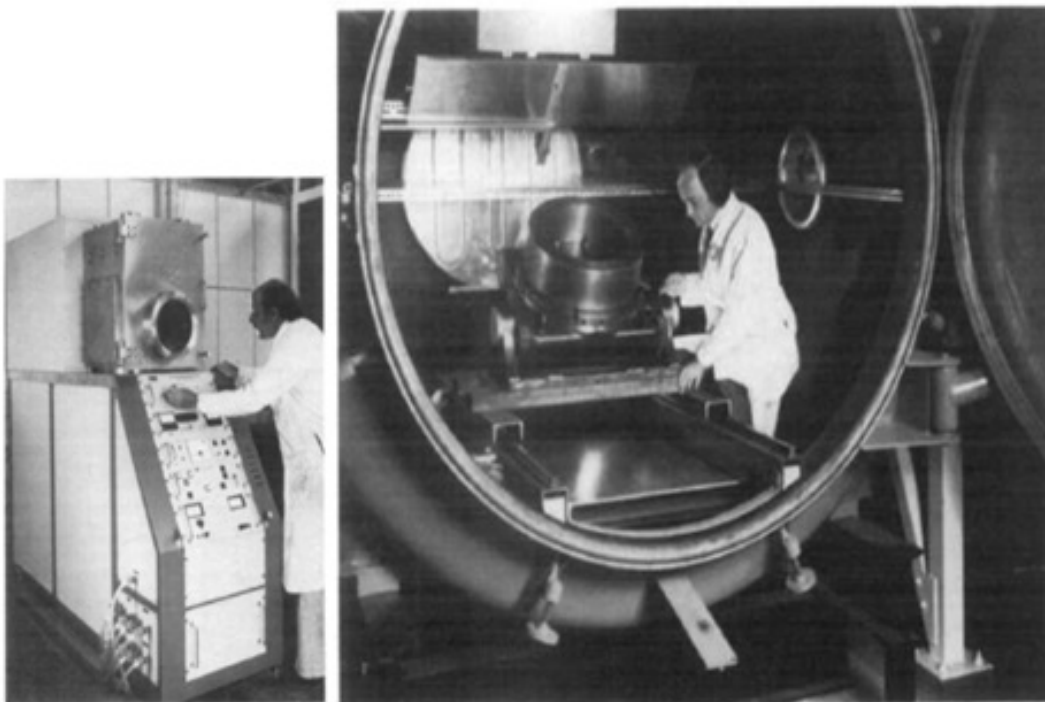


FIGURE 1.3 – Implantateurs destinés au traitement industriel d'outils en acier, chrome et alliages de titane [10].

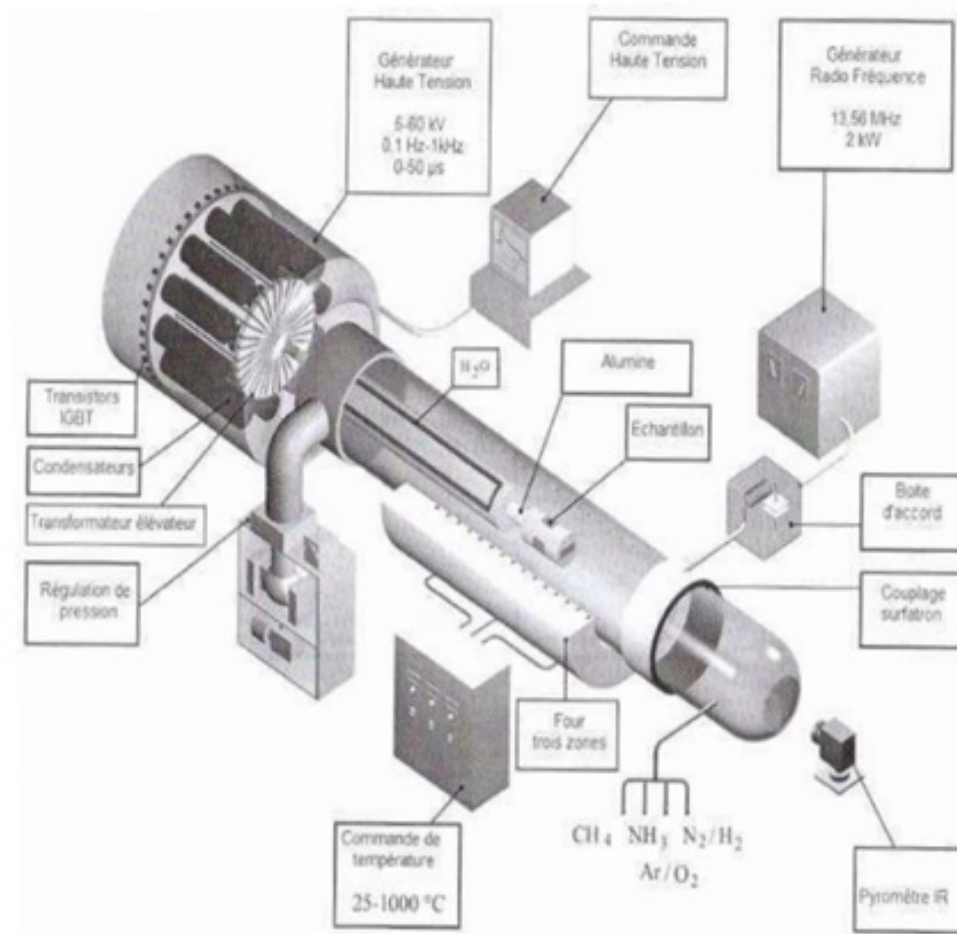


FIGURE 1.4 – : Exemple de réacteur d'implantation ionique par immersion plasma [11]

1.2.3 Effets engendrés par l'implantation ionique

En raison de la formation de nouvelles phases, de précipités ou de défauts, différentes conséquences peuvent découler de l'implantation ionique dans les métaux. Parmi les principales, on peut citer : L'amélioration des propriétés tribologiques : Cet effet est probablement l'un des plus largement étudiés depuis le milieu des années 1970 [6,7,8]. Il est établi que l'implantation ionique améliore de manière significative les propriétés tribologiques. Que ce soit pour les aciers [9,12,13,14,15], l'aluminium [16,17,18], le nickel, le chrome, le tantale ou d'autres métaux [19], l'implantation d'azote permet d'obtenir une réduction significative du frottement. Ce phénomène a été particulièrement examiné pour les alliages de titane [19,20,21,22,23], car bien que ces alliages présentent d'excellentes propriétés mécaniques, leurs propriétés tribologiques laissent à désirer. Outre l'azote, d'autres types d'ions (C+, B+, O+, Ti+, W+...) ont également montré des améliorations significatives des propriétés tribologiques pour divers matériaux [14,15,19,22,24]. Cependant, cet effet se manifeste principalement avec des charges inférieures à 1 Newton, comme démontré par Wilson [23] dans une étude comparative

des différents traitements de surface appliqués à l'alliage de titane aéronautique Ti-6Al-4V. L'amélioration de la résistance à la corrosion : Dès le début des années 1980, l'effet de l'implantation ionique sur l'amélioration de la résistance à la corrosion a été démontré, notamment par l'implantation d'azote ou de chrome dans des aciers [9]. D'autres types d'ions, tels que le phosphore ou le tantale, ont également produit des effets similaires [25]. De plus, l'implantation ionique d'azote permet de nitrurer des aciers qui ne peuvent être nitrurés par des techniques conventionnelles. C'est notamment le cas de l'acier austénitique qui, une fois implanté avec de l'azote, génère une nouvelle phase, l'austénite expansée, encore plus résistante à la corrosion [26]. L'augmentation de la résistance à la corrosion grâce à l'implantation d'azote a été principalement étudiée pour les aciers, mais aussi pour les alliages d'aluminium [27,28], de titane [29] et de zirconium [30,31]. L'amélioration des propriétés mécaniques : En 1981, Bakhru [32] a démontré qu'il était possible d'augmenter la résistance à la fatigue du cuivre en y implantant du néon. Depuis lors, de nombreux chercheurs ont étudié les effets de l'implantation ionique sur les propriétés mécaniques des métaux, principalement en utilisant des mesures de micro et nano-dureté [19,33]. Selon le type d'ion implanté dans le matériau, deux mécanismes de renforcement ont été identifiés. Le premier est directement lié à la formation de nouvelles phases. Par exemple, l'implantation d'azote dans un métal peut permettre la formation de nitrures métalliques qui renforcent le matériau [11,17,18,26,34,35,36,37,38,39,40]. De même, l'implantation de carbone peut conduire à la formation de carbures métalliques (comme les carbures de titane, par exemple : [41,42,43]). Le deuxième mécanisme de renforcement est associé à la création de défauts sous l'effet de l'énergie cinétique des ions implantés. Ce phénomène est particulièrement important pour les ions de masse élevée. En 1992, Didenko et al [44] ont mis en évidence un effet de longue portée de l'implantation ionique. En implantant du nickel et du hafnium dans du cuivre, ils ont observé une augmentation de la densité de dislocations de 15 à 40 fois, et ce, à une profondeur supérieure à la profondeur moyenne d'implantation (voir Figure 1.5). Ce phénomène survient lorsque l'énergie cinétique des ions implantés est suffisamment élevée pour créer des dislocations et les déplacer à des profondeurs plus importantes. Pendant plusieurs années, cette équipe russe a étudié ce phénomène en implantant différents types d'ions dans plusieurs métaux [33,45,46,47,48,49,50]. Sharkeev [] a établi une corrélation entre le gain en microdureté mesuré et l'augmentation de la densité de dislocation en profondeur.

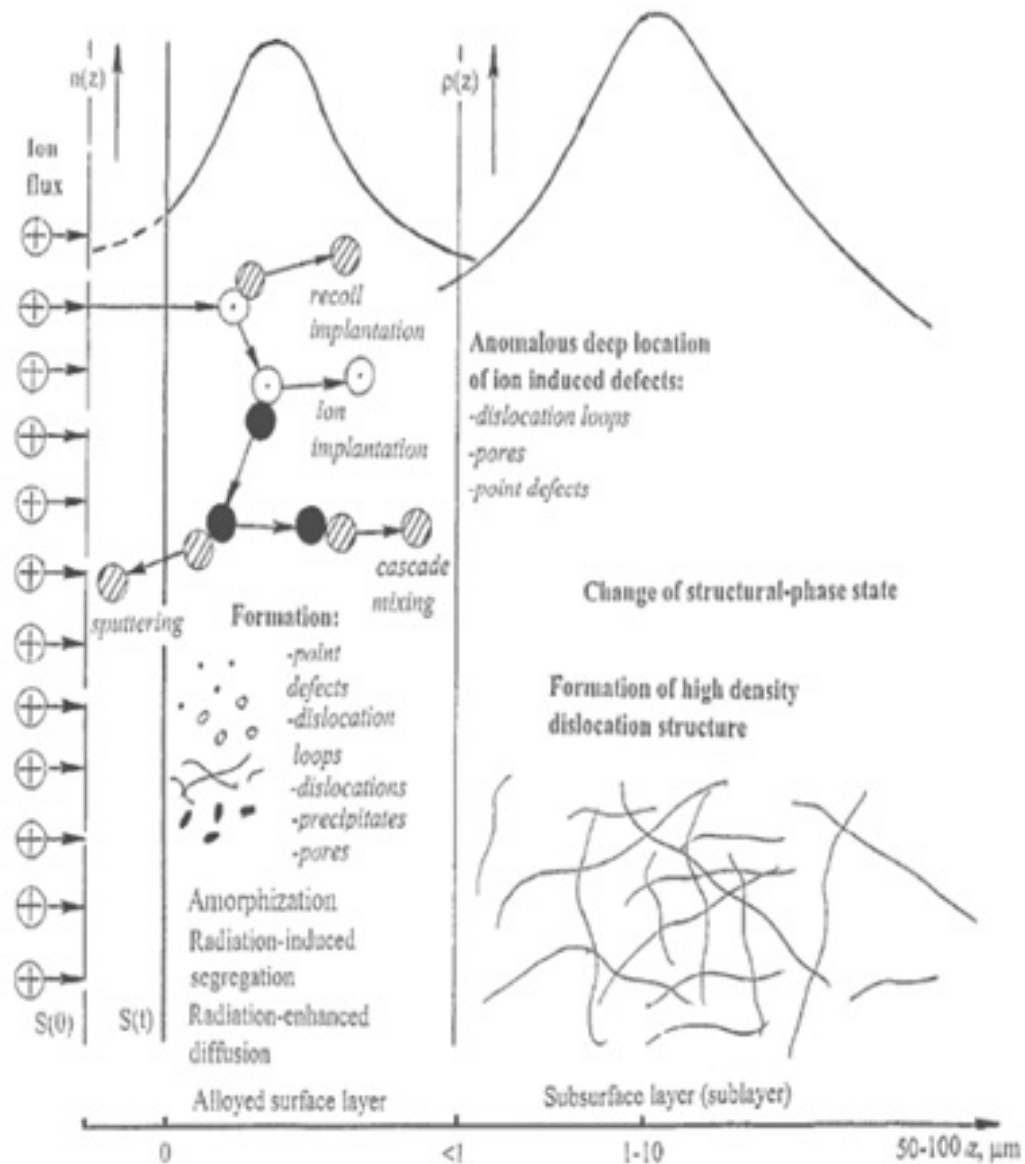


FIGURE 1.5 – Modification de la densité de dislocation par effet longue-portée de l'implantation ionique. $n(z)$: profil de concentration des ions implantés. $\rho(z)$: distribution de la densité de dislocations. $S(0)$ et $S(t)$: positions de la surface de l'échantillon avant et après implantation. [48]

- **Autres effets** : l'implantation ionique dans des métaux permet également de modifier d'autres caractéristiques, comme les propriétés d'adhésion [51,53] ou les propriétés électriques et optiques [53]. De plus, les travaux concernant les effets de l'implantation ionique ne se limitent pas aux métaux, puisque de nombreuses études concernent l'implantation dans des polymères [54,55,56] ou des céramiques [57,58]. Xu et al ont même amélioré les propriétés tribologiques du diamant en y implantant de l'azote [59]. L'implantation ionique est donc un procédé adaptable à tous types de matériaux. En raison des nouvelles propriétés qu'il est possible d'obtenir par ce procédé, certains

industriels utilisent l'implantation ionique depuis plusieurs années déjà ou envisagent de l'utiliser prochainement. C'est le cas de l'industrie de l'outillage [60,61,62,63], du biomédical [64,65] ou encore de la connectique [66].

1.3 Description de l'implanteur ionique

1.3.1 l'implanteur

Dans la pratique, un implanteur est une machine conçue pour fournir des ions (Figure 1.6). Ces ions doivent posséder une masse, une dose et une énergie spécifiques. La formation des ions se produit au sein de la source à partir de composés gazeux ou d'éléments métalliques vaporisés ou pulvérisés [67]. À ce stade, les ions sont émis à partir d'un plasma constitué d'un gaz renfermant l'espèce à implanter. Ce gaz est ionisé par des électrons émis par un filament chauffé par effet Joule. À la sortie de la chambre d'ionisation, un champ électrostatique primaire est appliqué pour extraire les ions. Cependant, la source produit toujours des quantités significatives d'ions indésirables. Pour remédier à ce problème, une opération de séparation par champ magnétique est mise en œuvre. Elle permet la sélection et l'obtention d'ions ayant la masse et l'énergie spécifiées. Après la purification et l'accélération du faisceau à l'aide d'un champ électrique intense, les ions traversent des systèmes de focalisation et de balayage pour garantir l'homogénéité de la dose au niveau de la cible. Le principe de fonctionnement d'un implanteur ionique est illustré dans la figure (1.6). L'implanteur est, en réalité, un accélérateur d'ions. Il est constitué des éléments suivants, visibles sur la figure (1.6) : Génération des ions à partir d'une source solide, liquide ou gazeuse dans un plasma excité à 25 kV. Sélection des ions par champ magnétique pour trier en fonction du rapport masse sur charge. Accélération des ions jusqu'à l'énergie d'implantation souhaitée. Mise en forme du faisceau d'ions à l'aide de lentilles électrostatiques. Dispositif de balayage en x et y pour une implantation uniforme sur les plaquettes. Les fréquences de balayage sont ajustées de manière à maintenir un glissement continu de la courbe de Lissajous associée. Déviation du faisceau pour éliminer les ions neutralisés en cours de trajet, qui ne pourraient pas être quantifiés. Chambre d'implantation.

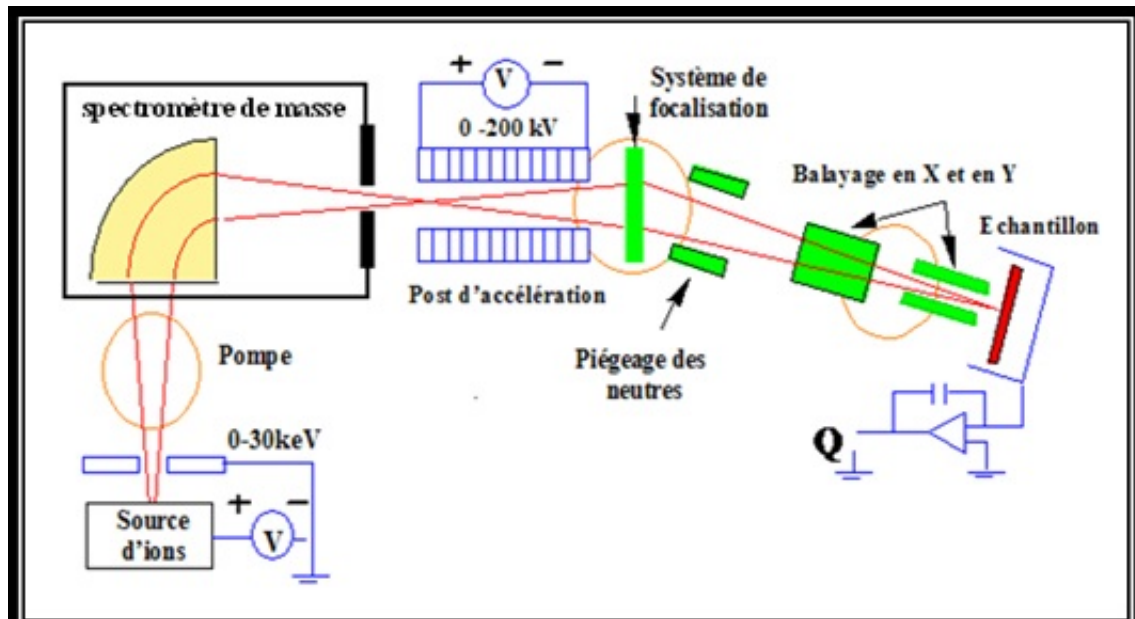


FIGURE 1.6 – Schéma d'un implanteur utilisé dans l'industrie de la microélectronique [68].

1.3.2 Principe étape du procédé de l'implantation ionique

Lors du processus d'implantation ionique, un phénomène d'importance notable peut se produire : la pulvérisation. Sous l'effet de collisions élastiques, des atomes en surface du matériau cible peuvent être éjectés dans le vide, entraînant un processus d'érosion. Selon la nature et l'énergie des ions implantés, ce phénomène peut être plus ou moins accentué, induisant ainsi des modifications dans le profil de concentration. Les étapes clés du procédé d'implantation ionique sont les suivantes [69] : Ionisation : L'élément à planter (généralement sous forme gazeuse) est introduit dans une chambre d'ionisation. La méthode la plus courante pour ioniser le gaz consiste à émettre des électrons à l'aide d'un filament. Ces électrons entrent en collision avec les atomes du gaz et les ionisent, formant ainsi un plasma, c'est-à-dire un gaz électriquement neutre composé de molécules, d'atomes, d'ions et d'électrons. Dans certains cas, le plasma obtenu peut être confiné magnétiquement à l'aide d'aimants permanents ou d'électroaimants. Extraction et accélération : Un champ électrique extrait les ions de la source et les accélère en direction du matériau cible. La plupart des implantations utilisent également un séparateur de masse pour sélectionner un seul type d'ion à planter. Implantation : Les ions pénètrent le matériau cible et perdent progressivement leur énergie cinétique jusqu'à ce qu'ils soient immobilisés. Cette implantation induit des modifications structurelles dans le matériau cible, altérant ainsi ses propriétés. Lors de l'implantation, différentes interactions entre les ions implantés et le matériau cible se produisent (Figure 1.7). Au début de leur trajet dans le matériau cible, les ions

implantés, en raison de leur énergie cinétique élevée, suivent une trajectoire quasiment rectiligne. Ils perdent progressivement de l'énergie en interagissant avec les électrons du matériau cible (appelé collisions inélastiques). Une fois que les ions implantés ont perdu la majeure partie de leur énergie et de leur vitesse, ils interagissent alors avec les atomes par des collisions élastiques. Dans ce scénario, le ralentissement des ions implantés est très prononcé, changeant leur trajectoire à chaque collision. Lorsque survient une collision entre un ion implanté et un atome du matériau cible, l'atome se déplace et peut à son tour entrer en collision avec d'autres atomes (à condition que l'ion implanté ait transféré suffisamment d'énergie à cet atome). On parle alors de phénomène de cascade. Selon le champ électrique appliqué lors de l'accélération des ions, leur profondeur d'implantation dans le matériau varie, avec une concentration en profondeur suivant une distribution gaussienne centrée autour d'une distance de parcours moyenne R_p (Projected Range). La figure (1.7) illustre schématiquement les diverses interactions lorsque des ions énergétiques incidents frappent la matière.

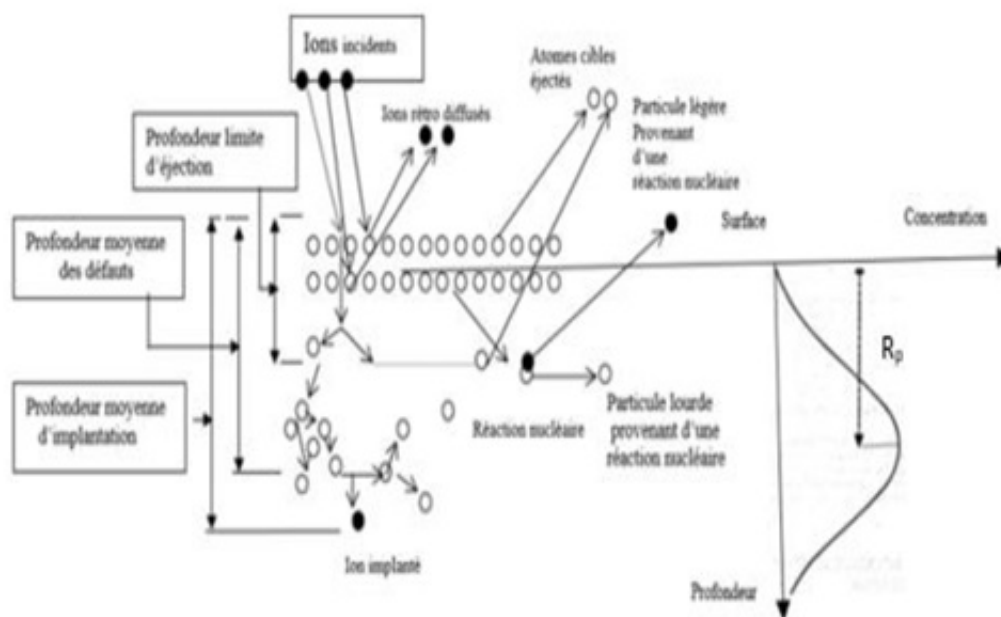


FIGURE 1.7 – : Phénomènes d'interaction ions/matière lors d'une implantation et profil de concentration associé [69,70,71].

L'implantation ionique est concernée par la gamme d'énergie d'ions incidents de quelques eV jusqu'aux MeV. En dehors de cette gamme, d'autres applications des interactions ion-matière sont possibles (figure 1.8) tel que dépôt de films, chimie des plasmas, érosion ionique, physique nucléaire.

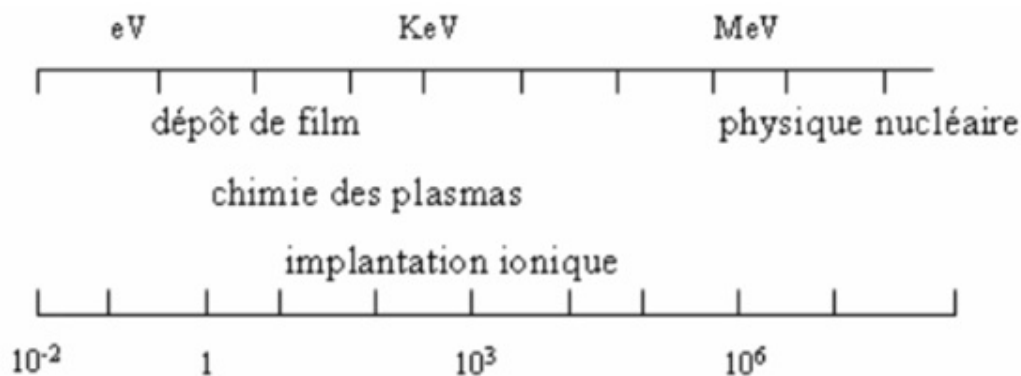


FIGURE 1.8 – Applications des interactions ion-matière [70]

L'implantation ionique est caractérisée par [70] :

La distribution des ions dans² le substrat, Les défauts créent par l'implantation dans le substrat, L'implantation ionique trouve de nombreuses applications dans divers domaines de la science des matériaux : Fabrication de guides de lumière, de mémoires à bulles, de circuits intégrés ou de pièces aux propriétés mécaniques spécifiques. Le choix de cette technique est basé sur les différents avantages qu'elle offre : L'implantation se réalise à plus basse température que la diffusion, La possibilité de contrôle de la dose d'ions introduits par le choix de l'énergie du faisceau et de la dose. L'énergie des ions permet de pouvoir contrôler la profondeur d'implantation et de déterminer l'épaisseur du substrat modifié. La possibilité de traiter tous genres de matériaux (isolants, semi-conducteurs et conducteurs). La possibilité de ne traiter qu'une partie du matériau (en cachant l'autre par un masque). La possibilité d'effectuer un traitement de surface qui n'affecte pas les propriétés et la composition du matériau en volume.

1.3.3 Interaction ions- matière

Lorsqu'un faisceau d'ions frappe un matériau, il y a toujours un transfert d'énergie à et sous la surface de ce matériau. Il s'agit ici du transfert de l'énergie cinétique de la particule aux atomes du matériau. Ce transfert correspond au ralentissement de la particule à mesure qu'elle pénètre dans la matière. En traitement de surfaces, il existe deux principaux mécanismes de perte associés à cette pénétration : L'excitation et l'ionisation des atomes du matériau. Le déplacement des atomes du matériau par collisions nucléaires. En général, on qualifie d'énergie perdue inélastique (électronique) l'ensemble des pertes d'énergie dues aux excitations et aux ionisations des atomes du matériau, car elles résultent d'une interaction inélastique avec les électrons du matériau. Dans cette situation, l'énergie perdue, la déviation des ions et le désordre introduit dans la matière sont faibles. Dans le cas du deuxième processus, les pertes d'énergie sont qualifiées d'élastiques (ou nucléaires). Ce processus devient important à mesure

que la vitesse des ions diminue et/ou que le numéro atomique de ceux-ci ou de la cible augmente. Normalement, les collisions nucléaires sont moins fréquentes que les collisions électroniques, néanmoins, ce sont elles qui sont responsables de la déviation des ions et du désordre dans le matériau cible. Avec une analogie simpliste, on peut assimiler les collisions nucléaires aux collisions entre des billes de billard, tandis que la collision électronique ressemble davantage à la résistance visqueuse de l'eau qui ralentit la chute d'un plongeur. Un ion est un atome qui a perdu des électrons. Il est caractérisé par un numéro atomique Z_p (nombre de protons dans le noyau), un nombre de masse A_p (nombre de protons + nombre de neutrons) et une charge Q_p (nombre d'électrons perdus). Lorsqu'ils sont accélérés à des énergies moyennes et élevées¹ (de 0,5 à 400 MeV/n), les ions interagissent principalement avec les électrons du matériau traversé. Les électrons impliqués dans cette interaction coulombienne peuvent être élevés vers des états d'énergie supérieure et même être éjectés de leurs atomes. On parle alors de processus d'ionisation. Les ions sont donc des rayonnements ionisants.

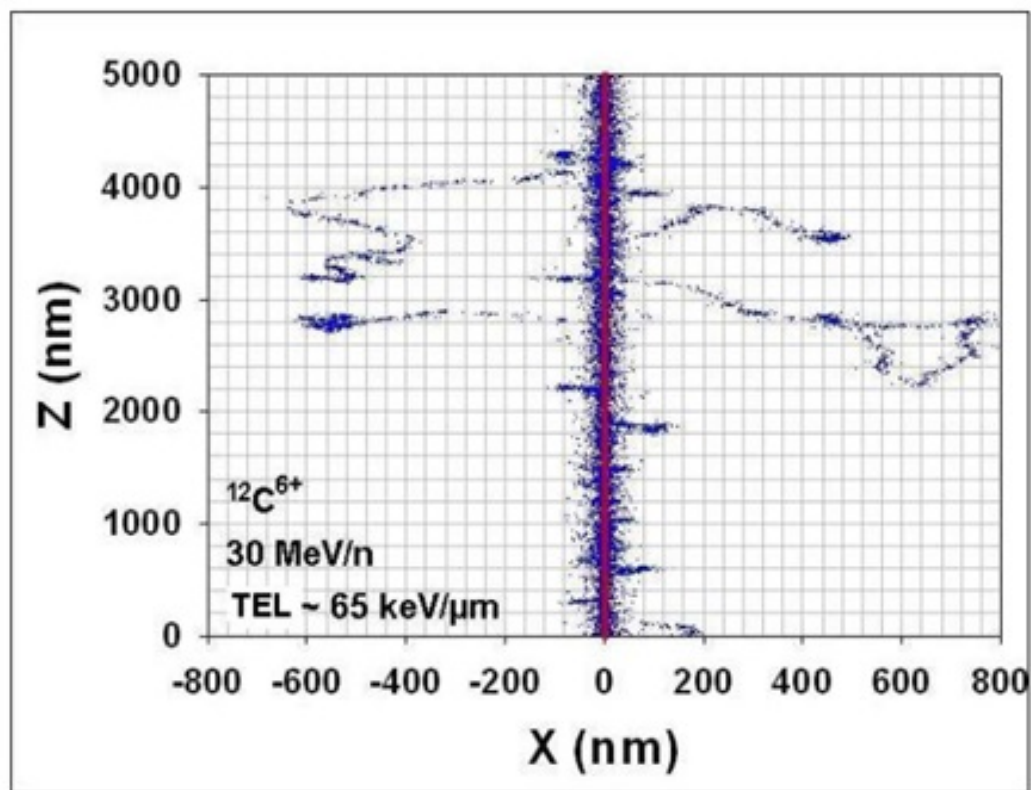


FIGURE 1.9 – Exemple de trace simulée dans l'eau par méthode Monte-Carlo. La ligne rouge représente la trajectoire de l'ion. Chaque point bleu représente une ionisation

On dit qu'il y a collision quand deux ou plusieurs objets se rapprochent et subissent une interaction mutuelle sans forcément qu'un impact ait eu lieu. Dans le cas d'une collision élastique l'énergie totale et la quantité de mouvement totale se conservent. (Figure

1.10) [72]

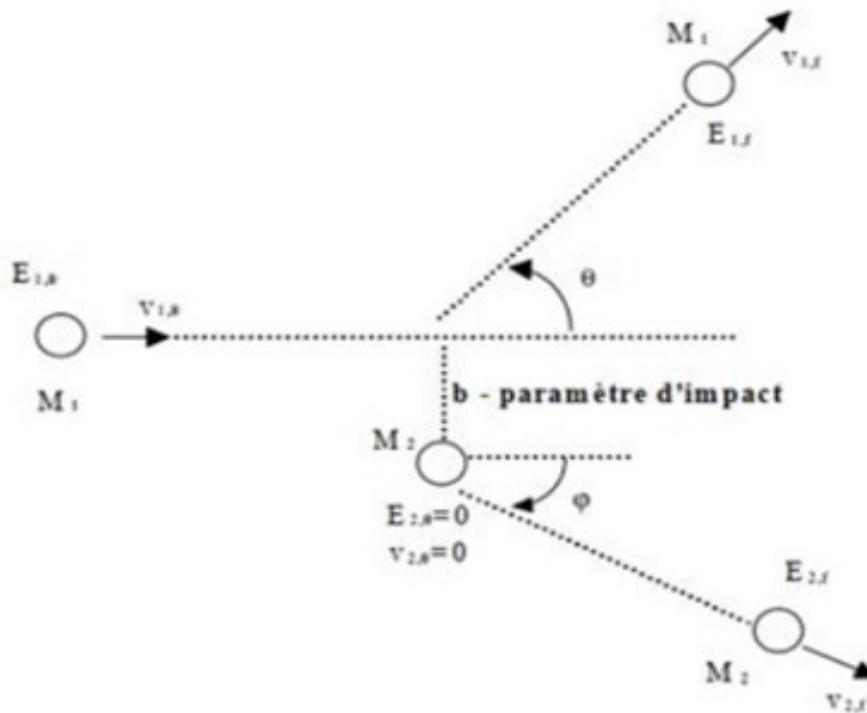


FIGURE 1.10 – Collision élastique entre deux particules dans le système de référence du laboratoire [72]

1.3.3.1 Types des interactions

Lorsqu'un ion incident pénètre dans un matériau cible (Figure 1.11), il subit un freinage dû à deux mécanismes complémentaires [73] : a) Les interactions ion-électrons de valence ; b) Les collisions nucléaires. Dans le premier cas, les ions incidents perdent leur énergie sans que leur direction de propagation soit sensiblement altérée. Dans le deuxième cas, les ions perdent leur énergie par des collisions élastiques avec les atomes du matériau cible. La direction des ions est considérablement modifiée et les atomes ayant subi une collision peuvent être déplacés de leur position d'équilibre. Ceci se produit lorsque l'énergie transférée par les collisions nucléaires aux atomes du matériau cible dépasse l'énergie de liaison du solide. Cela entraîne un endommagement significatif du réseau cristallin, avec l'apparition de défauts d'implantation tels que des sites vacants (lacunes), des sites interstitiels occupés et des paires "lacune-interstitiel". De plus, si le faisceau ionique est suffisamment intense, des atomes de surface peuvent être éjectés, conduisant au phénomène de pulvérisation où le taux d'éjection peut être proche de 1, c'est-à-dire qu'un atome est éjecté pour chaque ion incident. Par ailleurs, lors de la pulvérisation de la surface du matériau, diverses émissions telles que des atomes, des ions, des électrons et des photons peuvent se produire. La figure (1.12) illustre

l'ensemble de ces phénomènes en surface.

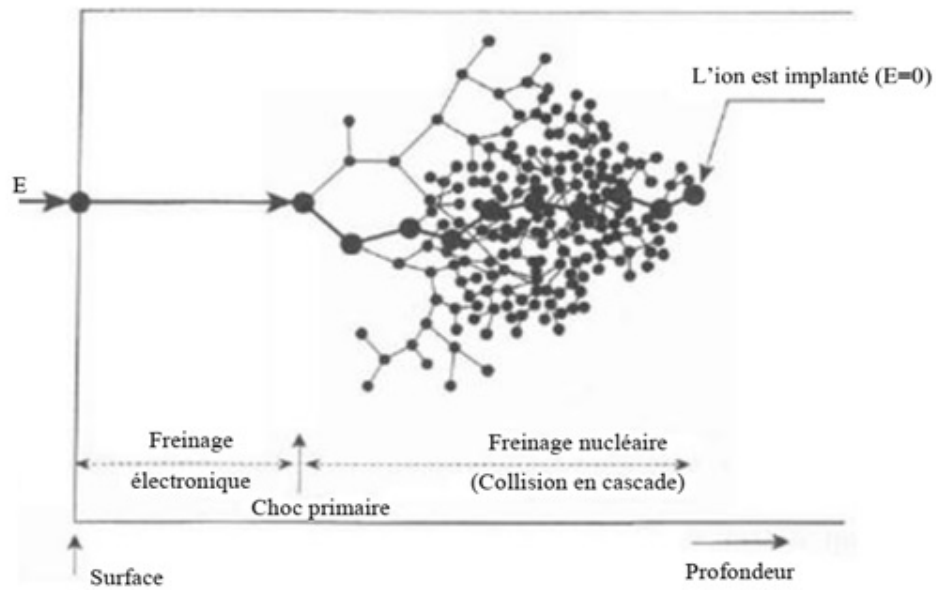


FIGURE 1.11 – Illustration du parcours d'un ion incident dans la cible. Les déplacements des atomes de la matière sont également schématisés [74].

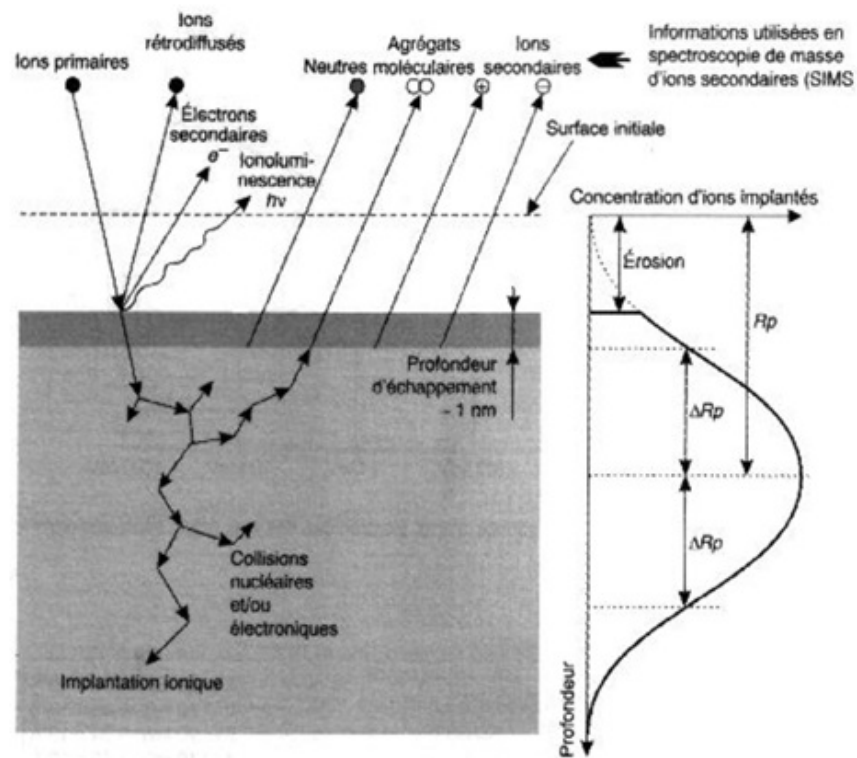


FIGURE 1.12 – : Illustration des phénomènes de surface et de volume ayant lieu par interaction des ions avec la matière [75].

1.3.4 Distribution des ions après implantation

La principale modification du matériau réside dans le changement de la composition de la zone irradiée, pouvant éventuellement conduire à la formation de solutions solides proches de la structure d'origine ou à l'apparition de nouvelles structures. La dose d'implantation, également appelée fluence, représente le nombre total d'ions implantés par unité de surface. La séquence de collisions nucléaires, qui dévie l'ion de sa trajectoire initiale, est un processus stochastique. Par conséquent, la position finale de l'ion est décrite par une distribution de probabilité de type gaussien, dont un exemple est illustré sur la figure (1.13).

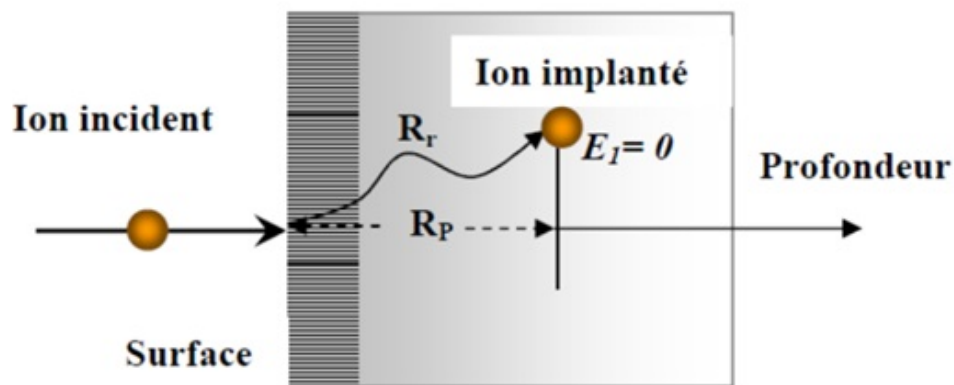


FIGURE 1.13 – Exemple de parcours d'un ion.

En dépit de la précision avec laquelle la dose peut être contrôlée, l'implantation ionique est un processus aléatoire, car chaque ion suit une trajectoire aléatoire. Les ions incidents vont perdre leur énergie par chocs successifs avec les atomes de la cible. Ceci explique d'une part, la dispersion des trajectoires et d'autre part, que l'on définisse statistiquement une profondeur moyenne de pénétration. La statistique qui convient assez bien est gaussienne. Nous définissons ainsi deux paramètres :

* **Le parcours moyen projeté R_p** : est la profondeur où les ions implantés s'arrêtent avec un maximum de concentration avec un écart type (la déviation standard) qui caractérise la répartition statistique des ions en profondeur autour de R (figure (1.21)).

* **La déviation latérale ΔR** : le parcours projeté sur le plan perpendiculaire à la direction d'incidence (perpendiculaire à la direction d'implantation), il caractérise la dispersion latérale des ions. C'est un paramètre très important sur tout dans le cas de l'utilisation des masques pour la conception (architecture) des composants figure (1.14).

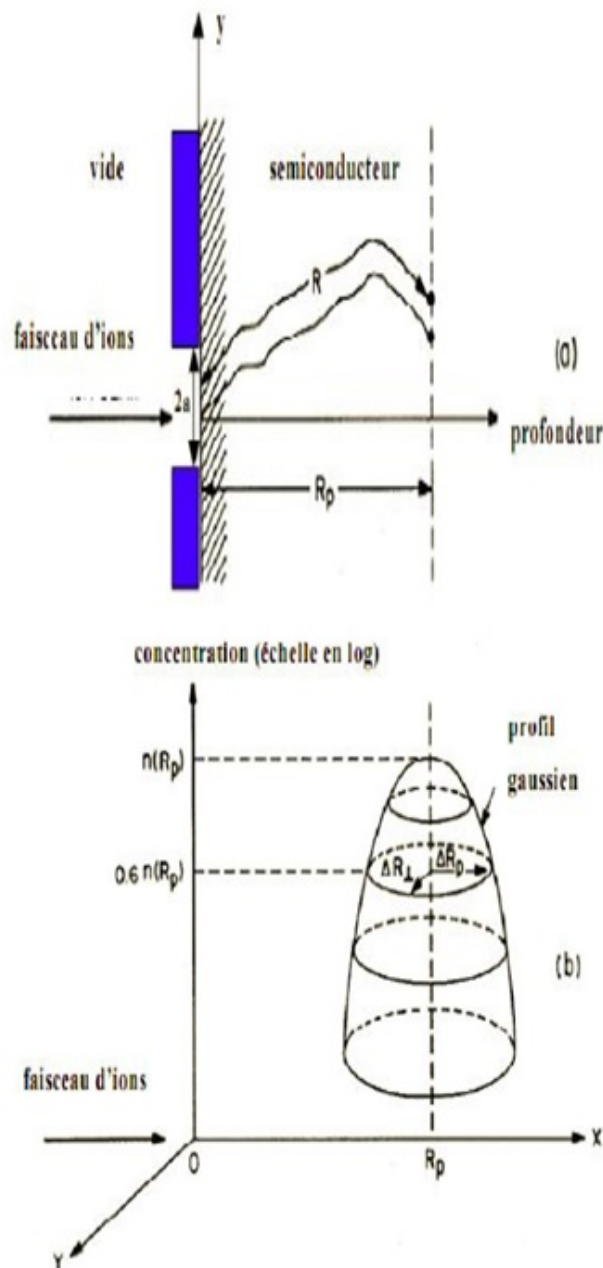


FIGURE 1.14 – Distribution des ions implantés dans une cible : (a) le chemin parcouru (R) et le parcours moyen projeté (R_p) ; (b) la distribution à deux dimensions

1.4 Théories de ralentissement et de l'arrêt des ions

Lors de l'implantation ionique dans un solide, quatre phénomènes physiques très différents peuvent se produire par interaction de la particule chargée incidente avec les électrons et les noyaux des atomes cibles. Selon la figure 2, ces phénomènes peuvent être les suivants : Des chocs élastiques qui se produisent par transfert de quantité de mouvement aux atomes cibles. Des chocs inélastiques par excitation-ionisation de

la cible. La production de photons. L'apparition de diverses réactions nucléaires. La probabilité de chaque phénomène dépend des caractéristiques de la particule incidente telles que la masse, la charge et l'énergie. Cependant, il convient de noter que les deux derniers processus se déroulent généralement à très hautes énergies d'implantation (généralement supérieures au GeV) [77]. De plus, selon la figure (1.15), il est évident que des phénomènes supplémentaires peuvent également se produire, notamment : La création de défauts dans le matériau cible, qui se produit si l'énergie transférée par collisions nucléaires aux atomes du matériau cible est supérieure à l'énergie de liaison du solide. Chaque atome peut alors déplacer d'autres atomes à son tour, par un processus en cascade, conduisant à l'endommagement de la cible. La pulvérisation de la cible en surface (c'est-à-dire que des noyaux peuvent être éjectés du matériau). La rétrodiffusion des ions incidents, qui se produit lorsque la masse de la particule incidente est trop faible par rapport à la masse de l'atome cible. La particule incidente peut alors rebondir sur les noyaux du solide jusqu'à ce qu'elle soit rétrodiffusée. L'éjection de produits de réactions nucléaires : électron, photon, particule légère et/ou lourde. Figure 1.15 : Illustration des différents phénomènes se produisant lors d'une implantation ionique dans un matériau solide [78]. Ainsi, les ions incidents pénètrent dans le matériau cible et subissent des interactions avec la matière jusqu'à ce que leur énergie soit épuisée. Dans ce qui suit, nous donnerons un aperçu des principales théories sur l'arrêt des ions dans un matériau solide. Nous commencerons par le cas d'une cible amorphe, puis nous passerons au cas de la cible monocristalline, où des difficultés supplémentaires de modélisation surviennent.

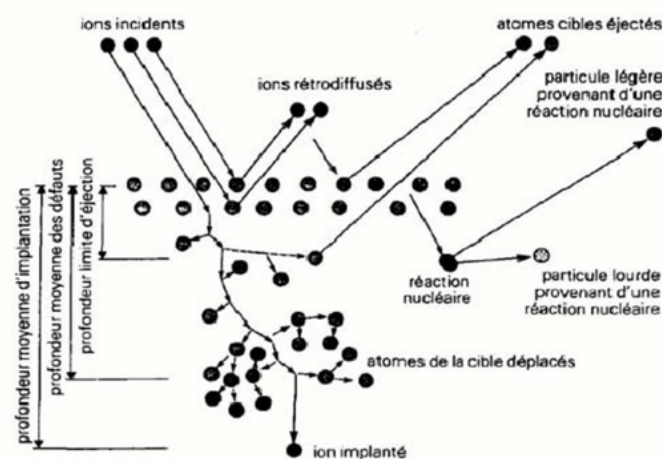


FIGURE 1.15 – Illustration des différents phénomènes se produisant au cours d'une implantation ionique dans un matériau solide [78].

1.4.1 Cas d'un matériau amorphe

L'un des principaux facteurs qui joue un rôle significatif dans les théories concernant l'arrêt des ions dans un matériau est la déperdition d'énergie par unité de profondeur, également appelée pouvoir d'arrêt. Ce paramètre reflète la réduction de l'énergie cinétique des ions au cours de leur pénétration dans le solide. Selon la théorie LSS (Lindhard, Scharff et Schiott) [79,80], deux processus sous-tendent cette dissipation d'énergie. Selon le domaine d'énergie et la masse atomique de l'ion, l'un des deux processus prédomine sur l'autre. Le premier processus correspond à la collision nucléaire (S_n), impliquant l'interaction élastique directe entre les ions et les atomes du matériau. Quant au second processus, il s'agit de la collision électronique (S_e), décrivant l'interaction inélastique entre les ions et le cortège électronique des atomes cibles. La combinaison de ces deux processus aboutit au pouvoir d'arrêt total (S), qui est proportionnel à la perte d'énergie de l'ion par rapport à la distance parcourue (dE/dX). Le pouvoir total $S(E)$ peut être exprimé comme suit : $S(E) = 1/N dE/dX = S_n + S_e$ (1) où : S_n : pouvoir d'arrêt nucléaire ; S_e : pouvoir d'arrêt électronique ; N : concentration atomique de la cible. La figure 1.16 illustre les variations du pouvoir d'arrêt total en fonction de la vitesse de l'ion incident. La forme générale de ces courbes est applicable à tout ion dans n'importe quel matériau [77]. On distingue quatre régions distinctes : Zone I : dominée par l'arrêt nucléaire, cette contribution nucléaire devient plus marquée à mesure que la masse de l'ion augmente. Zone II : dominée par l'arrêt électronique. Zone III : appelée Bethe-Block, où le pouvoir d'arrêt diminue avec l'augmentation de l'énergie. Zone IV : correspondant aux énergies relativistes (vitesse ionique supérieure à 107 eV/amu). Dans cette région, S_e redevient proportionnel à la vitesse incidente en raison de l'émission de photons par le matériau [77]. Cette zone n'est pas représentée sur la figure 1.16.

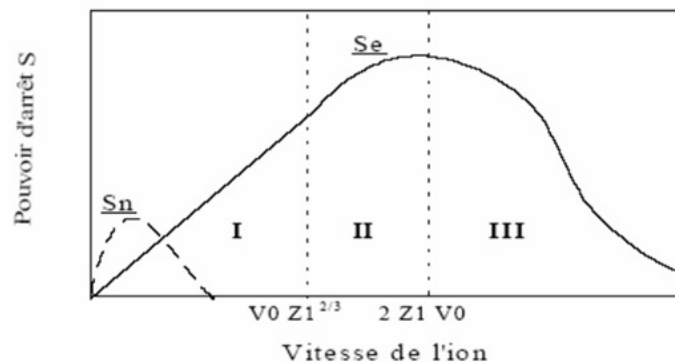


FIGURE 1.16 – Composantes nucléaire et électronique du pouvoir d'arrêt en fonction de la vitesse de l'ion incident 81. (Z_1) est le numéro atomique ; (V_0) est la vitesse de Bohr.

1.4.1.1 Pouvoir d'arrêt nucléaire

Pendant le processus de collision nucléaire, l'ion incident transmet de manière élastique (en conservant la quantité de mouvement) son énergie cinétique au noyau de l'atome cible. Les collisions nucléaires permettent ainsi de réduire la vitesse des particules incidentes en transférant leurs moments cinétiques aux atomes cibles. Elles contribuent également à la détermination de la distribution spatiale des impuretés à l'intérieur de la cible. Le processus de ralentissement nucléaire prédomine particulièrement pour les ions lourds et à basse vitesse. Si E représente l'énergie cinétique de l'ion incident et N est le nombre d'atomes par unité de volume du matériau cible, le pouvoir d'arrêt nucléaire (section efficace de ralentissement nucléaire) est défini selon la relation suivante [82] :

$$S_n(E) = \frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dX} \right) = \int T d\sigma \quad (1.1)$$

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

$d\sigma$: la section efficace différentielle (c'est-à-dire la probabilité pour le projectile de céder de l'énergie à la particule cible lors du processus de collision).

La formule de la section efficace différentielle de collision $d\sigma$ est la suivante :

$$d\sigma = 2\pi p dp \quad (1.2)$$

Où :

p : le paramètre d'impact, représentant la distance minimale entre les centres des noyaux. Dans la théorie LSS (Lindhard, Scharff et Schiott), le potentiel utilisé est de type coulombien, modéré par l'effet d'écran des électrons. Il est exprimé de la manière suivante

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \phi\left(\frac{r}{a}\right)} \quad (1.3)$$

Où : Z_1 et Z_2 sont les numéros atomiques du projectile et de la cible respectivement. Ce potentiel, appelé le potentiel de Thomas-Fermi, est en réalité le potentiel de coulomb classique multiplié par une fonction d'écran $\phi\left(\frac{r}{a}\right)$ qui tend vers 1 lorsque la distance r diminue. Le paramètre a désigne le rayon d'écran, et il est estimé par Bohr à partir du modèle atomique de Thomas-Fermi

$$a = \frac{0.8853a_0}{\sqrt[3]{Z_1 + c^{2/3}}} \quad (1.4)$$

Dans cette formule le terme a_0 désigne le rayon de Bohr, exprimé comme suit :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529 \text{Å} \quad (1.5)$$

En mécanique classique, le calcul final du potentiel $V(r)$ est utilisé pour déterminer la variation de la section efficace différentielle $d\sigma$ et de l'énergie T (c'est-à-dire l'énergie transférée à l'atome cible par l'ion incident) en fonction de l'angle de diffusion θ (c'est-à-dire l'angle entre la trajectoire de l'ion et l'axe X perpendiculaire à la surface du matériau implanté). L'énergie transférée $T(p)$ est exprimée par la relation suivante

$$T(p) = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \sin^2 \left(\frac{\theta(p)}{2} \right) \quad (1.6)$$

Finalement, le pouvoir d'arrêt nucléaire S_n d'une particule incidente est calculé en intégrant $T(p)$ et $d\sigma$ sur la distance parcourue [77].

1.4.1.2 Pouvoir d'arrêt électronique

Durant la collision électronique, chaque ion incident peut interagir de manière inélastique avec les atomes de la cible, provoquant des excitations électroniques et l'ionisation des atomes proches de la trajectoire des ions. Ces interactions inélastiques, plus complexes que les interactions élastiques, résultent de l'interaction entre les ions incidents et plusieurs électrons liés aux noyaux de la cible. Le pouvoir d'arrêt électronique, généralement situé dans la zone II pour les implantations ioniques, reste proportionnel à la vitesse de l'ion. Il est décrit par le modèle LSS sous la forme suivante :

$$S_e = \frac{8\pi e^2 a_0 Z_1^{7/6} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2} V_0} V D \quad (1.7)$$

Où :

D : densité électronique de la cible ;

V_0 : la vitesse de Bohr ;

a_0 : le rayon de Bohr ;

V : La vitesse de l'ion.

1.4.2 Cas d'un matériau cristallin

Les matériaux monocristallins possèdent une structure anisotrope où les effets directionnels peuvent jouer un rôle important lors de l'implantation ionique. En effet, l'arrangement en rangées et en plans cristallins a une influence significative sur le pouvoir d'arrêt. Lorsque l'angle d'incidence des ions (par rapport à une rangée ou à un plan de la cible) est inférieur à une valeur critique Y_c , l'ion est progressivement repoussé par une série de déviations successives corrélées vers la rangée ou le plan adjacent. Ainsi, l'ion est canalisé entre deux plans ou dirigé le long d'un axe cristallographique. Ceci

est appelé l'effet de canalisation, qui peut être axial (par rapport à une direction) ou planaire (par rapport à un plan) (Figure 1.17). Par conséquent, la trajectoire des ions en profondeur est grandement prolongée par rapport au cas de la cible amorphe. Dans la pratique, les cibles monocristallines sont généralement légèrement désorientées, par rapport à l'axe du faisceau ionique, d'un angle de 7° pour éviter la canalisation des ions. Lors d'une canalisation axiale ou planaire, le terme $(dE/dX)_n$ qui représente la perte d'énergie nucléaire devient négligeable par rapport à la perte d'énergie électronique. Les ions canalisés perdent alors presque exclusivement leur énergie par des interactions inélastiques avec les électrons. L'angle critique ψ_c de canalisation est exprimé comme suit : Pour une canalisation axiale :

$$\Psi_c = \sqrt{\frac{2Z_1Z_2e^2}{E_0d}} = 9.73\sqrt{\frac{Z_1Z_2}{E_0d}} \quad (1.8)$$

Et pour une canalisation planaire :

$$\Psi_c = \sqrt{\frac{2Z_1Z_2e^2na}{E_0}} = 9.73\sqrt{\frac{Z_1Z_2na}{E_0}} \quad (1.9)$$

Où

d : distance inter-atomique en Å ;

E_0 : énergie incidente de l'ion en keV ;

n : densité atomique surfacique dans le plan ;

a : rayon d'écran de Thomas-Fermi.

Il est à noter que l'effet de canalisation est probable dans le cas d'ions lourds et de faible énergie.

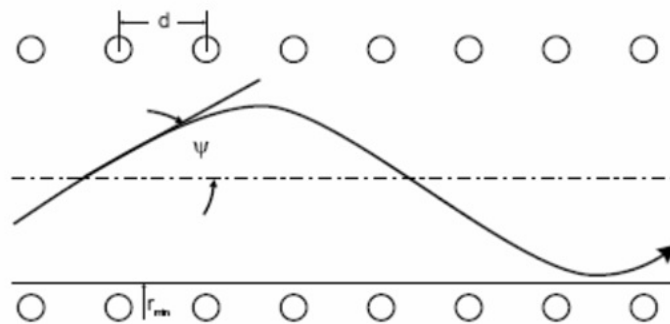


FIGURE 1.17 – Trajectoire de l'ion incident dans un canal [83].

1.5 Distribution des ions en profondeur

L'étude du profil des ions implantés dans un matériau cible revêt une importance croissante pour deux raisons essentielles : la première est que l'implantation ionique a récemment connu de nombreuses applications et continue de se développer ; la seconde est qu'il existe désormais des techniques très précises pour déterminer les profils expérimentaux, telles que la technique ERDA (Analyse de Détection de Recul Élastique) et surtout la technique SIMS (Spectrométrie de Masse des Ions Secondaires), ce qui permet de réaliser des comparaisons avec les profils théoriques. La distance totale parcourue par un ion le long de sa trajectoire est appelée parcours (noté R). Cependant, ce qui intéresse davantage l'utilisateur, c'est la distance parcourue dans la direction normale à la cible, que l'on appelle parcours projeté. Étant donné que le processus de ralentissement est principalement statistique, les paramètres pertinents sont le parcours projeté moyen (noté R_p) ainsi que la dispersion des valeurs autour de R_p , caractérisée par l'écart type longitudinal ΔR_p et transversal $\Delta R_\perp$ [84] (Figure 1-18).

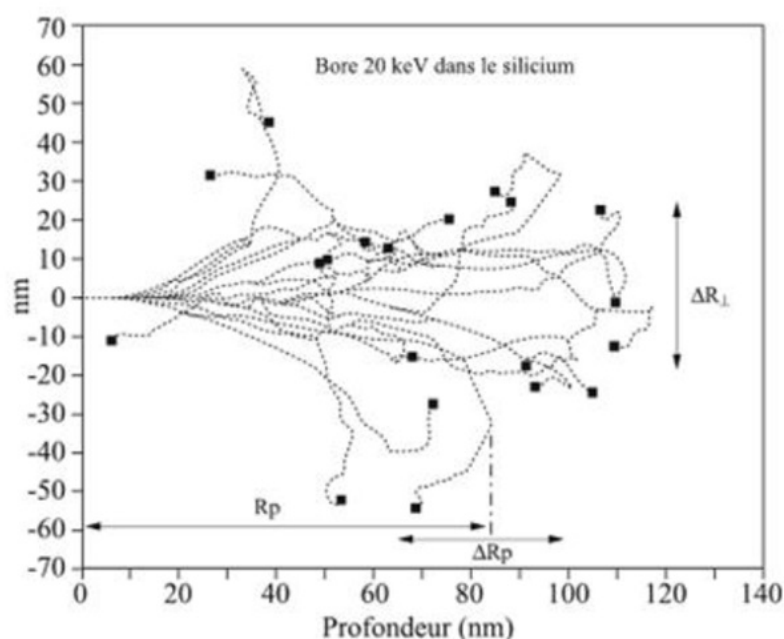


FIGURE 1.18 – Parcours de vingt ions de bore de 20 keV dans le silicium [84].

L'étude de la profondeur de distribution des ions repose souvent sur l'hypothèse d'un solide amorphe. Selon la théorie L.S.S (Lindhard, Scharff et Schiott), l'arrêt des ions suit une distribution de type gaussien [3,4,79,85]. Cette distribution est caractérisée par deux paramètres, à savoir le parcours moyen projeté (R_p) et l'écart quadratique moyen (ΔR_p). Le (R_p) est défini comme la profondeur à laquelle les ions implantés s'arrêtent avec une concentration maximale. En ce qui concerne ΔR_p , il rend compte de la répartition statistique des ions en profondeur autour de (R_p) (Figure 5). Un autre paramètre

physique incontournable est la déviation latérale, souvent exprimée par ΔR (Figure 1.19). Elle caractérise la dispersion latérale des ions, un paramètre particulièrement crucial, surtout dans le cas de l'utilisation de masques pour la conception architecturale des composants.

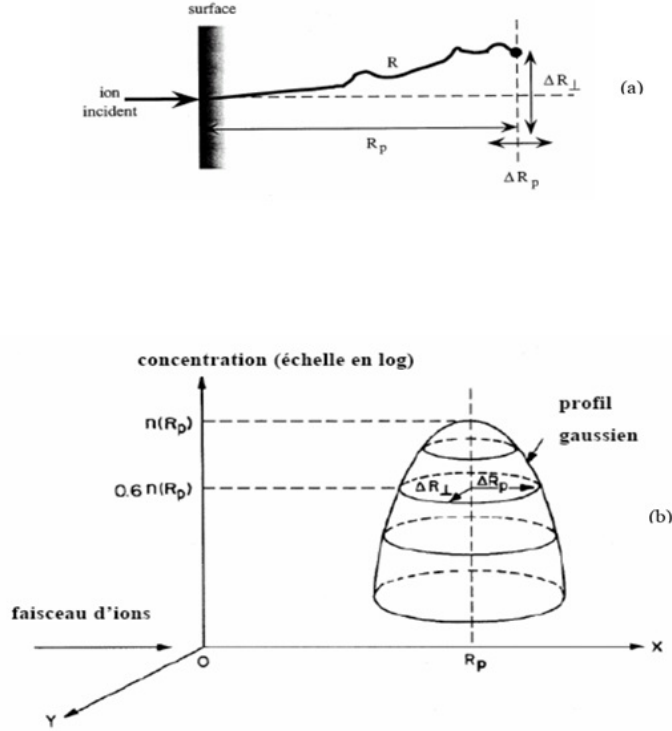


FIGURE 1.19 – Distribution des ions implantés en profondeur de la cible [86]. (a) échelle linéaire ; (b) échelle logarithmique.

La distance totale parcourue par un ion le long de sa trajectoire est déterminée à partir de l'énergie perdue, par collisions électroniques et nucléaires, comme suit :

$$R = \int_0^R dX = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)} \quad (1.10)$$

Expérimentalement nous n'avons pas accès à la distance (R) parcourue par l'ion incident. En pratique, le paramètre manipulé est la projection de ce parcours sur la direction perpendiculaire à la surface de la cible. Comme mentionné plus haut, ce paramètre, est désigné par le parcours moyen projeté (R_p) (Voir Fig. 5). Il correspond à la moyenne de tous les parcours projetés et s'exprime comme suit :

$$R_p = \frac{1}{\Phi} \int x n(x) dx \quad (1.11)$$

Où

Φ : la dose totale implantée (ions/cm²) ; n (x) : la distribution en profondeur de tous

les ions implantés.

La fonction de distribution $n(x)$ est caractérisée par les quatre premiers moments physiques qui sont :

*Le parcours moyen projeté R_p .

*La déviation standard ΔR_p .

*L'obliquité γ (ou skewness) qui mesure l'asymétrie de la distribution ou le positionnement du sommet de la courbe par rapport à R_p .

*Le kurtosis β qui mesure l'écrasement du pic (ou bien l'extension de la queue de distribution en volume). Les deux derniers paramètres sont reliés par l'expression universelle suivante :

$$\beta \approx 2.91 + 1.56\gamma^2 + 0.59\gamma^4 \quad (1.12)$$

La fonction de distribution $n(x)$ est souvent de type gaussienne ou de Pearson [10, 11]. Dans le cas d'une distribution de Gauss, $n(x)$ est exprimé par la relation suivante :

$$n(x) = n_0 \exp \left(-\frac{(x - R_p)^2}{2(\Delta R_p)^2} \right) \quad (1.13)$$

Où

$$n_0 = \frac{\Phi}{2\pi\Delta R_p} \quad (1.14)$$

Avec γ et β approximativement égaux à 0 et à 3 respectivement.

1.6 conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exposé quelques principes fondamentaux de l'implantation ionique, ainsi que la distribution des ions dans la cible. Nous avons abordé les divers aspects liés à l'interaction entre un ion et les atomes d'une cible, ainsi que les théories du ralentissement et de l'arrêt des ions dans un matériau. L'implantation ionique s'avère être une technique hautement pertinente dans les domaines électroniques et optiques.

Bibliography

- [1] S. Blanqué, "Optimisation de l'implantation ionique et du recuit thermique pour SiC", Thèse de doctorat, Univ. Montpellier II, (2004).
- [2] R. Legros, Physique des Semi-conducteurs Technologie-diodes, Tome 1, Editions Eyrolles, (1974).
- [3] A. Bensaada, Technologie des Semi-conducteurs, Office des Publications Universitaires, Alger, (1994).
- [4] <http://www.ion-beam-services.com>
- [5] **C. Chabrol**, Implantation ionique. Les Techniques de l'ingénieur, M 1219
- [6] **N.E.W. Hartley, G. Dearnaley, J.F. Turner, J. Saunders**, Proc. Conf. on Applications of ion beams to metals, Albuquerque, 1973 (Plenum Press, New York, 1974) 123.
- [7] **G. Dearnaley, N.E.W. Hartley**, Proc. 4th Conf. on scientific and industrial applications of small accelerators, Denton, 1975 (IEEE, N.Y., 1976) 20
- [8] **N. Hartley**, Ion implantation and surface modification in tribology, Wear 34 (1975) 427-438
- [9] **M. Iwaki, Y. Okabe, S. Namba, K. Yoshida**, Comparison between properties of steels implanted with separated ions and a selected ion, Nuclear Instruments and Methods 189 (1981) 155-159
- [10] **G. Dearnaley, P.D. Goode**, Techniques and equipment for non-semiconductor applications of ion implantation, Nuclear Instruments and Methods 189 (1981) 117-132
- [11] **V. Fouquet**, Etude des mécanismes d'implantation et diffusion lors de la nitruration du Titane et de Ti-6Al-4V par implantation ionique en immersion plasma. Thèse de doctorat, Université de Poitiers (2004)
- [12] **I.L. Singer**, Surface analysis, ion implantation and tribological processes affecting steels, Applied Surface Science 18 (1984) 28-62
- [13] **C. Blawert, B.L. Mordike**, Nitrogen plasma immersion ion implantation for surface treatment and wear protection of austenitic stainless steel X6CrNiTi1810, Surface and Coatings Technology 116-119 (1999) 352-360
- [14] **P. Budzynski, A.A. Youssef, B. Kamienska**, Influence of nitrogen and titanium implantation on the tribological properties of steel, Vacuum 70 (2003) 417-421

- [15] **P.J. Wilbur, B.W. Buchholtz**, Engineering tribological surfaces by ion implantation, *Surface and Coatings Technology* 79 (1996) 1-8
- [16] **R.J. Rodriguez, A. Sanz, A. Medrano, J. A. Garcia-Lorente**, Tribological properties of ion implanted aluminium alloys, *Vacuum* 52 (1999), 187-192
- [17] **A.A. Youssef, P. Budzynski, J. Filiks, Z. Surowiec**, Improvement of tribological properties of aluminium by nitrogen implantation, *Vacuum* 78 (2005) 599-603
- [18] **S. Ohira, M. Iwaki**, Characterization of the aluminium surface layer implanted with nitrogen, *Materials Science and Engineering* 90 (1987) 143-148
- [19] **T.D. Radjabov**, Modification of physico-mechanical properties of metals and metallic coatings by ion implantation, *Vacuum* 42 (1991) 163-168
- [20] **Y. Itoh, A. Itoh, H. Azuma, T. Hioki**, Improving the tribological properties of Ti-6Al-4V alloy by nitrogen-ion implantation, *Surface and Coatings Technology* 111 (1999) 172-176
- [21] **Y.Z. Liu, X. Zu, S.Qiu, X. Huang**, Improvement of tribological behaviour of a Ti-Al-Zr alloy by nitrogen ion implantation, *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms* 248 (2006) 42-46
- [22] **F. Alonso, A. Arizaga, S. Quainton, J.J. Ugarte, J.L. Viviente, J.I. Ofiate**, Mechanical properties and structure of Ti-6Al-4V alloy implanted with different light ions, *Surface and Coatings Technology* 74-75 (1995) 986-992
- [23] **A.D. Wilson, A. Leyland, A. Matthews**, A comparative study of the influence of plasma treatments, PVD coatings and ion implantation on the tribological performance of Ti-6Al-4V, *Surface and Coatings Technology* 114 (1999) 70-80
- [24] **D. Williamson**, Microstructure and tribology of carbon, nitrogen and oxygen implanted ferrous materials, *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms* 76 (1993) 262-267.
- [25] **F.A. Smidt**, Recent advances in the application of ion implantation to corrosion and wear protection, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section BBeam Interactions with Materials and Atoms* 10-11(1985) 532-538
- [26] **M. Samandi, B.A. Shedden, D.I. Smith, G.A. Collins, R. Hutchings, J. Tendys**, Microstructure, corrosion and tribological behaviour of plasma immersion ionimplanted austenitic stainless steel, *Surface and Coatings Technology* 59 (1993) 261-266
- [27] **Y. Massiani, J.P. Crousier, L. Fedrizzi, S. Gialanella, P.L. Bonora**, Electrochemical study of multiple-energy nitrogen-ion-implanted aluminium alloys.

Materials Science and Engineering A - Proceedings of the Sixth International Conference on Surface Modification of Metals 116 (1989) 53-57.

[28] **K.C. Walter, R.A. Dodd, J.R. Conrad**, Corrosion behavior of nitrogen implanted aluminum, Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms 106 (1995) 522-526

[29] **J. De Damborenea, A. Conde, C. Palacio, R. Rodriguez**, Modification of corrosion properties of titanium by N-implantation, Surface & Coatings Technology 91 (1997) 1-6.

[30] **Y.Z. Liu, X. T. Zu, S. Zhu, L. M. Wang**, Phase formation and corrosion behaviour of nitrogen implanted Zr-Sn-Nb alloy in alkaline environment, Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms 246 (2006) 345-350.

[31] **W. Kim, K.S. Jung, B.H. Choi, H.S. Kwon, N.J. Lee, J.G. Han, M.I. Guseva, M.V. Atamanov**, Corrosion behavior of nitrogen-implanted Zircaloy, Surface and Coatings Technology 76-77 (1995) 595-599

[32] **H. Bakhru, W. Gibson, C. Burr, A.J. Kumnick, G.E. Welsch**, Modification of the fatigue behavior of copper and stainless steel by ion implantation, Nuclear Instruments and Methods 182/183 (1981) 959-964

[33] **Y.P. Sharkeev, S.A. Gashenko, O.V. Pashchenko, V.P. Krivobokov**, Evaluation of the microhardness of ion-implanted metals, Surface and Coatings Technology 91 (1997) 20-24

[34] **S. Thibault**, Modifications des propriétés physico-chimiques et de la microstructure de l'aluminium après nitruration par implantation d'ions multichargés, Thèse de doctorat, Université de Caen (2009)

[35] **M. Guemmaz**, Synthèse par implantations ionique de carbures nitrures et carbonitrures de titane sub-stoechiométriques. Composition chimique, structure cristallographique et électronique. Corrélation avec l'analyse par nanoindentation, thèse de doctorat, Université de Strasbourg (1997)

[36] **M. Guemmaz, A. Moser, J.J. Grob, R. Stuck**, Sub-surface modifications induced by nitrogen ion implantation in stainless steel (SS316L). Correlation between microstructure and nanoindentation results, Surface and Coatings Technology 100-101 (1998) 353-357

[37] **S. Lucas, J. Chevallier**, Nanohardness and transmission electron microscopy study of nitrogen-implanted aluminium, Surface and Coatings Technology, 65 (1994) 128-132

[38] **P.B. Madakson**, Surface stresses and the hardness of ion implanted aluminium, Journal of Physics, D: Applied Physics, 18 (1985) 531-540

- [39] **P. Budzynski, A.A. Youssef, Z. Surowiec, R. Paluch**, Nitrogen ion implantation for improvement of the mechanical surface properties of aluminum, Vacuum, Proceedings of the sixth International Conference on Ion Implantation and Other Applications of Ions and Electrons (ION 2006), 81 (2007) 1154-1158
- [40] **D. Höche, C. Blawert, M. Cavellier, D. Busardo, T. Gloriant**, Magnesium nitride phase formation by means of ion beam implantation technique, Applied Surface Science 257 (2011) 5626-5633
- [41] **C. Pierret**, Comportements mécaniques et tribologiques du Ti-6Al-4V traité par implantation d'ions carbone et oxygène multichargés. Développement des moyens associés, Thèse de doctorat, Université de Caen (2011)
- [42] **M. Guemmaz, A. Mosser, L. Boudoukha, J.J. Grob, D. Raiser, J.C. Sens**, Ion Beam synthesis of non-stoichiometric titanium carbide : composition structure and nanoindentation studies, Nuclear Instruments and methods in Physics Research B, 111 (1996) 263-270
- [43] **A. Garcia, J.L. Viviente, F. Alonso, A. Loinaz, J.I. Onate**, Growth of carbon layers on Ti-6Al-4V alloy by very high dose carbon implantation, Surface and Coatings Technology 97 (1997) 499-503
- [44] **A.N. Didenko, E.V. Kozlov, Y.P. Sharkeev, N.A. Popova, A.V. Paul, Y.F. Ivanov, L.N. Ignatenko, O.B. Perevalova, N.V. Girsova, A.I. Rjabchikov, R.A. Nasyrov**, Microstructure of the near-surface layers of ion-implanted polycrystalline Cu, Surface and Coatings Technology 56 (1992) 11-17
- [45] **A.N. Didenko, E.V. Kozlov, Y.P. Sharkeev, A.S. Tailashev, A.I. Rjabchikov, L. Pranjavichus, L. Augulis**, Observation of deep dislocation structures and “long-range effect” in ion-implanted α -Fe, Surface and Coatings Technology 56 (1993) 97-104
- [46] **Y.P. Sharkeev, A.N. Didenko, E.V. Kozlov**, High dislocation density structures and hardening produced by high fluency pulsed-ion-beam implantation, Surface and Coatings Technology 65 (1994) 112-120
- [47] **Y.P. Sharkeev, N.V. Girsova, A.I. Ryabchikov, E.V. Kozlov, O.B. Perevalova, I.G. Brown, X.Y. Yao**, Dislocation structure in coarse-grained copper after ion implantation, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B-Beam Interactions with Materials and Atoms 106 (1995) 532-537
- [48] **Y.P. Sharkeev, E.V. Kozlov, A.N. Didenko, S.N. Kolupaeva, N.A. Vihor**, The mechanisms of the long-range effect in metals and alloys by ion implantation, Surface and Coatings Technology 83 (1996) 15-21
- [49] **Y.P. Sharkeev, A.J. Perry, S.V. Fortuna**, A transmission electron microscope study of the long-range effect in titanium nitride after metal ion implantation, Surface and Coatings Technology 108–109 (1998) 419–424

- [50] **Y.P. Sharkeev, E.V. Kozlov**, The long-range effect in ion implanted metallic materials: dislocation structures, properties, stresses, mechanisms, *Surface and Coatings Technology* 158 –159 (2002) 219–224
- [51] **M. Barlak, W. Olesinska, J. Piekoszewski, M. Chmielewski, J. Jagielski, D. Kalinski, Z. Werner, B. Sartowska**, Ion implantation as a pre-treatment method of AlN substrate for direct bonding with copper, *Vacuum* 78 (2005) 205–209
- [52] **R. Escobar Galindo, A. van Veen, J.H. Evans, H. Schuta, J.T.M. de Hosson**, A modified blister test to study the adhesion of thin coatings based on local helium ion implantation, *Thin Solid Films* 471 (2005) 170– 176
- [53] **Y. Hayashi, T. Ishikawa, D. Shimokawa**, Modification of electrical and optical properties of metal nitride thin films by hydrogen inclusion, *Journal of Alloys and Compounds* 330–332 (2002) 348–351
- [54] **J.C. Pivin**, Contribution of ionizations and atomic displacements to the hardening of ion-irradiated polymers, *Thin Solid Films* 263 (1995) 185-193
- [55] **G.R. Rao, P.J. Blau, E.H. Lee**, Friction microprobe studies of ion implanted polymer surfaces, *Wear* 184 (1995) 213-222
- [56] **C. Allen, A. Bloyce, T. Bell**, Sliding wear behaviour of ion implanted ultra high molecular weight polyethylene against a surface modified titanium alloy Ti-6Al-4V, *Tribology International* 29 (1996) 521-534,
- [57] **A.J. Perry, R.R. Manory, R. Nowak, D. Rafaja**, Post-treatment of titanium nitride by ion implantation, *Vacuum* 49 (1998) 89-95
- [58] **Y.P. Sharkeev, S.J. Bull, A.J. Perry, M.L. Klingenberg, S.V. Fortuna, M. Michler, R.R. Manory, I.A. Shulepov**, On high dose nitrogen implantation of PVD titanium nitride, *Surface & Coatings Technology* 200 (2006) 5915–5920
- [59] **T. Xu, S. Yang, M. Chen, J. Tian, Q. Xue, J. Li, W. Guo**, Influence of nitrogen ion implantation on tribological properties of nanocrystalline diamond films, *Journal of Physics D: Applied Physics* 35 (2002) 788–793
- [60] **P. Budzynski, P. Tarkowski, P. Penkala**, Influence of nitrogen ion implantation on tribological properties of tool steel NC10, *Vacuum* 63 (2001) 731-736.
- [61] **D.M. Ruck, D. Boos, I. G. Brown**, Improvement in wear characteristics of steel tools by metal ion implantation, *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms* 80-1 (1993) 233-236.
- [62] **B. Torp, B.R. Nielsen, A. Dodd, J. Kinder, C.M. Rangel, M.F. DaSilva, B. Courage**, Improvement of rolling contact fatigue life of ion implanted M50 steel, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms* 80 (1993) 246-249.

- [63] **C.A. Straede**, Application of ion implantation in tooling industry, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms 113 (1996) 161-166.
- [64] **D. Dowson**, A comparative study of the performance of metallic and ceramic femoral head components in total replacement hip joints, Wear 190 (1995) 171-183
- [65] **F.Z. Cui, Z.S. Luo**, Biomaterials modification by ion-beam processing, Surface and Coatings Technology 112 (1999) 278–285
- [66] **C. Karwat**, The effect of nitrogen ion irradiation on the operational temperature regime of working surfaces of electrical contacts, Vacuum 63 (2001) 665-669
- [67] <http://www.ion-beam-services.com>
- [68] http://www.memoireonline.com/12/09/2961/m_Etude-des-nano-cavites-en-vuede-la-realisation-des-materiaux-alternatifs-agra3.html
- [69] M. Cavellier «Etude des effets de l'implantation ionique d'azote sur les propriétés du magnésium pur du cuivre pur et des alliages cuivreux », thèse de doctorat, université de Poitiers, France, 2012.
- [70] A. Naas « Etude de l'oxyde de silicium implanté krypton ou xénon : évolution de la constante diélectrique », thèse de doctorat, université 'Orléans, France, 2010.
- [71] Ch. Pierret « Comportements mécaniques et tribologiques du Ti-6Al-4V traité par implantation d'ions carbone et oxygène multichargés. Développement des moyens associés » thèse de doctorat, université de Caen Basse-Normandie, France, 2011.
- [72] A. Zouke, étude des phénomènes d'interaction faisceau d'électron gaz –matière dans un MEB, Thèse Doctorat , Université Lille I (2013)
- [73] S. Blanqué, Optimisation de l'Implantation Ionique et du Recuit Thermique pour SiC, Thèse de Doctorat, Université des Sciences et Techniques -Montpellier II- (2004).
- [74] P. N. Favennec, L'Implantation Ionique pour la Microélectronique et l'Optique, Collection Technique et Scientifique des Télécommunications, ENST, Ed. Masson, (1993)
- [75] site web: https://www.scei-concours.fr/tipe/TIPE_2002/sujets_2002/si_psi_2002.pdf
- [76] G J PHELPS, " *Dopant ion implantation simulations in 4H-Silicon Carbide*", IOPscience, 1139–1146, (2004).
- [77] L. Ottaviani, "Réalisation de Jonctions pn dans le Carbure de Silicium 6H par Implantation Ionique d'Aluminium", Thèse de doctorat, Lyon, (1999).
- [78] P.N. Favennec, L'Implantation Ionique pour la Microélectronique et l'Optique, Collection Technique et Scientifique des Télécommunications, ENST, Ed. Masson, Paris, (1993).

- [79] Lindhard, Scharff, Schiott, Range Concepts and Heavy Ion Ranges, Mat. Fys. Medd., 33, (1963).
- [80] M. Nastasi, J. W. Mauer, J. K. Huvonen. Ion-Solid Interaction : "Fundamentals and Application", University Press Cambridge, (1995).
- [81] G. Dearnaley, J. H. Freeman, R. S. Nelson and J. Stephen, Ion Implantation, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, (1973).
- [82] N. Bohr, Kgl. Danske Videnskab. Mat-Fys. Medd., 18(8), (1948).
- [83] J. Stark, Phys. Z, 13, (a), (1912), p.973.
- [84] A. Baudrant, Implantation ionique et traitements thermiques en technologie de silicium, LAVOISIER, p.143 (2011).
- [85] Lindhard, Scharff, Energy Dissipation by Ions in the keV Region, Phys. Rev., 124(1), (1961), p. 128.
- [86] S. Wolf, R.N. Tauber, Laser Microfabrication, edited by

Chapitre 2

Modélisation de dopage par l'implantation ionique

2.1 Introduction

Les semi-conducteurs sont des matériaux présentant une conductivité électrique intermédiaire entre les métaux (conducteurs) et les isolants. Dans ce type de matériaux le courant électrique est favorisé par deux types de porteurs : les électrons et les trous. Lorsque le semi-conducteur est très pur, il est dit intrinsèque et présente une grande résistivité, les porteurs ne sont créés que par des défauts cristallins ou par excitation thermique. Dans ce dernier cas, le nombre d'électron dans la bande de conduction est égale au nombre de trous dans la bande de valence. Le dopage de SC est nécessaire pour les applications dans les dispositifs optoélectronique, les détecteurs de gaz et notamment les cellules solaires photovoltaïques. Le dopage peut être utilisé pour obtenir des propriétés électriques désirées (type n ou type p). Donc, on peut dire que le contrôle de ces propriétés nécessite une parfaite maîtrise des profils des dopants dans la structure, et donc un contrôle aussi précis que possible des étapes de diffusion et de l'implantation. Par conséquent, dans ce deuxième chapitre, nous présenterons une compréhension globale de la méthode théorique de dopage par implantation ionique, et en même temps, nous décrirons le mécanisme par lequel les défauts du silicium sont générés. Enfin, nous aborderons l'implantation ionique et les différents types de dopage. Nous donnerons un aperçu général de l'extraction de profils de profondeur pour deux techniques de dopage de semi-conducteurs.

2.2 Propriétés du matière dans l'état solide

L'état ou la phase d'une substance décrit l'organisation de ses particules. Les principaux états de la matière sont l'état solide, l'état liquide et l'état gazeux. L'état d'une substance varie selon plusieurs facteurs, comme la température. L'image suivante montre différents états de l'eau (Fig 2.1). Sa forme est déterminée par les interactions entre ses particules constitutives : atome, molécule ou ion [1] .



FIGURE 2.1 – Les principaux états de la matière

Les particules d'une substance à l'état solide sont très liées entre elles. Cela fait en sorte qu'elles sont très rapprochées les unes des autres et qu'elles sont aussi très ordonnées. Un solide a une forme définie. Cela signifie qu'il conserve sa forme peu importe le contenant dans lequel il se trouve. De plus, un solide a un volume défini. Cela signifie qu'il n'occupe pas nécessairement tout l'espace disponible dans son contenant [1]. Les solides peuvent exister dans deux états différents : l'état désordonné est caractérisé par une structure désordonnée, c'est le cas des systèmes amorphes, comme le verre, et l'état ordonné est caractérisé par la structure ordonnée correspondant au solide cristallin [2].

2.2.1 Solides amorphes

Un composé amorphe est un composé dans lequel les atomes ne respectent aucun ordre à moyenne et grande distance, ce qui le distingue des composés cristallisés (Fig 2.2). Ainsi, connaître la structure à un endroit ne permet pas de prédire la disposition des atomes à un autre endroit. Il n'y a donc qu'un ordre local. L'absence d'ordre à longue distance implique que le solide est isotrope [3]. L'analyse aux rayons X confirme la disposition désordonnée des atomes dans un objet amorphe. Les verres, les élastomères

et les liquides sont des composés amorphes. Les solides amorphes sont souvent obtenus en refroidissant très rapidement un liquide : Les atomes sont perturbés à de longues distances dans le liquide, n'ayant pas le temps de se réorganiser lors du refroidissement

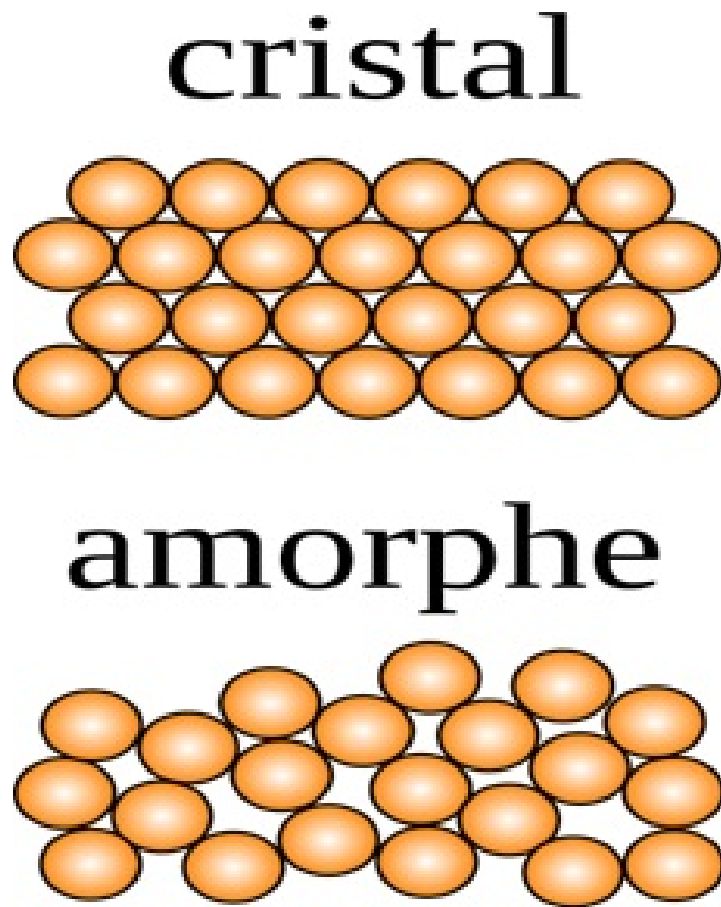


FIGURE 2.2 – Organisation des molécules dans la matière cristalline et amorphe.

2.2.2 Solides cristallins

Les solides cristallins (métaux, sels ioniques) et les céramiques sont des matériaux organisés. A l'état microscopique, les atomes, les ions ou les molécules qui les constituent sont régulièrement disposés en réseaux dans l'espace. La répétition d'une petite partie du cristal (la maille) par destranslations permet d'engendrer la totalité du cristal. Un solide cristallin est caractérisé par sa température de fusion [4]. Les matériaux cristallins se trouvent à l'état naturel. On peut aussi les synthétiser au laboratoire ; pour cela, il faut refroidir lentement un corps liquide (changement d'état) ou le faire cristalliser (évaporation). Quelques exemples de structures cristallines (Fig 2.3) :

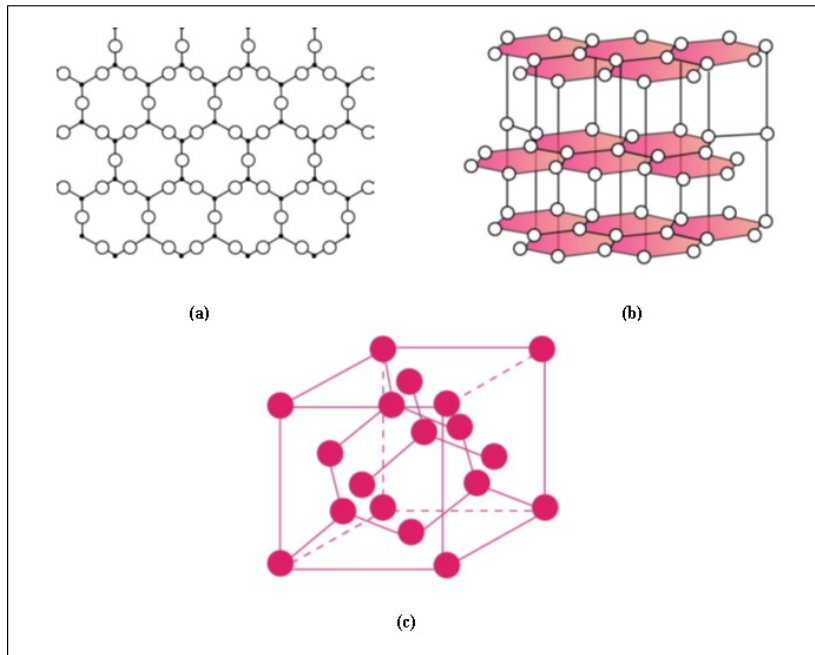


FIGURE 2.3 – Structure des solides cristallins : (a) Silice cristalline, (b) Graphite et (c) Diamant.

2.2.2.1 Structure de type monocristalline

La création de nombreux appareils commence par la production d'un matériau monocristallin de haute pureté(Fig 2.4 (a)). En particulier, la réalisation de puces microélectroniques nécessite des substrats semi-conducteurs monocristallins, par exemple en silicium, en germanium ou en arséniure de gallium. Dans le cas du Silicium, l'étirage en creuset (méthode Czochralski) est une méthode couramment utilisée pour obtenir des lingots monocristallins de haute pureté de plusieurs mètres de long et jusqu'à 300 mm de diamètre. Nous avons un rendement photovoltaïque élevé, supérieur à 15% [5].

2.2.2.2 Structure de type polycristalline

Tous les solides ne sont pas des monocristaux (par exemple, les semi- conducteurs de silicium). La plupart des solides cristallins sont composés d'un ensemble de nombreux petits cristaux ou grains de taille et d'orientation variables. Ceux-ci ont des orientations cristallographiques aléatoires. Lorsqu'un métal commence par cristalliser, le changement de phase commence par de petits cristaux qui se développent jusqu'à fusionner, formant une structure polycristalline(Fig 2.4 (b)). Dans le bloc final de matériau solide, chacun des petits cristaux (appelés "grains") est un vrai cristal avec un arrangement périodique d'atomes, mais l'ensemble du polycristal n'a pas d'arrangement périodique d'atomes, car le motif périodique est rompu à les joints de grains. Les grains et les joints de grains aident à déterminer les propriétés d'un matériau [6].

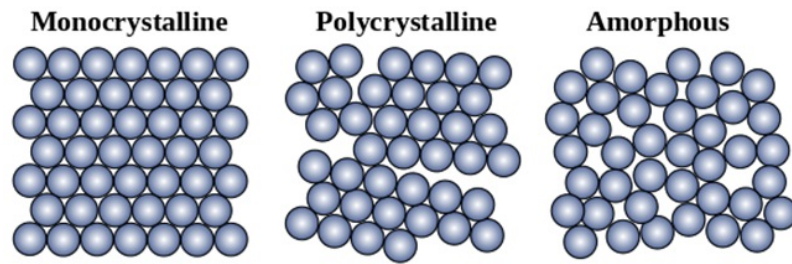


FIGURE 2.4 – Structure des solides : (a) monocristalline, (b) polycristalline et (c) Amorphe.

2.3 Semi-conducteur de la colonne IV Silicium

Un semi-conducteur, comme le silicium, est un matériau qui n'est ni conducteur ni isolant. Cela peut être l'un ou l'autre selon différentes conditions. Le caractère conducteur ou isolant provient de la structure même de l'atome : Chaque élément du tableau périodique possède un certain nombre d'électrons disposés autour du noyau. C'est cette disposition en forme de couches électroniques, différente selon les éléments, qui est responsable de la conductivité électrique [7,8]. Le diagramme suivant montre les couches électroniques de valence et de conduction(Fig 2.5) :

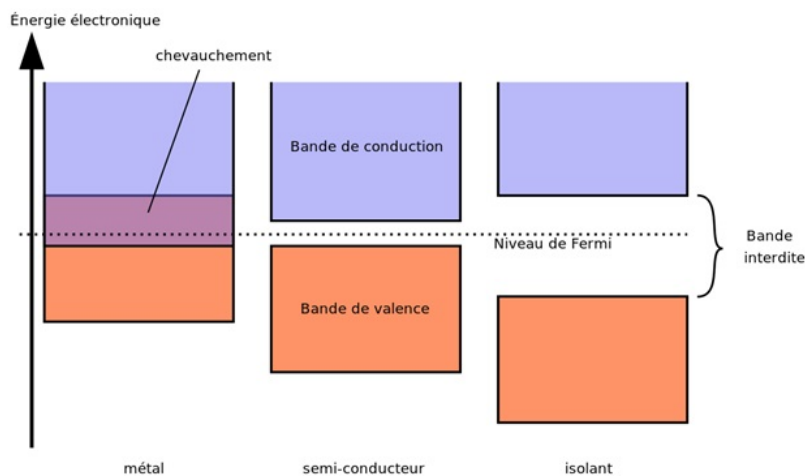


FIGURE 2.5 – Un schéma représente les couches d'électrons de valence et d'électrons de conduction

On voit que dans les métaux, certains électrons sont situés à la fois dans les bandes de valence et de conduction. Cela signifie que le métal peut conduire le courant électrique sans autre forme de traitement physico-chimique. En revanche, dans un isolant, les deux bandes sont séparées par un espace appelé « gap band » : cela signifie que les électrons ne peuvent pas être là. Dans le cas d'un isolant, les électrons externes sont tous dans la bande de valence et aucun électron n'est dans la bande de conduction : Ces matériaux ne peuvent donc pas conduire l'électricité [7]. Enfin, dans le cas

des semi-conducteurs, il existe également une bande interdite au milieu, mais cette dernière est très fine. Il suffit d'un petit quelque chose pour que les électrons de valence entrent dans la bande de conduction et fassent ainsi en sorte que le semi-conducteur... conduise l'électricité. Nous faisons cela en fournissant de l'énergie aux électrons en les excitant. Les semi-conducteurs sont donc des isolants mais peuvent devenir conducteurs très facilement en excitant des électrons de valence : nous faisons cela en chauffant le matériau, en l'éclairant ou en le soumettant à une tension spécifiée [7,8].

2.3.1 Généralités sur le silicium et ses applications

La silice, un composé du silicium très abondant dans la nature, est connue depuis l'Antiquité et a un moment été considérée comme un élément. En 1823, Berzelius parvient à isoler le silicium. Henri Sainte-Claire Deville sera le premier à obtenir du silicium cristallin en 1854. La couleur du silicium dépend de sa forme. Cristallisés sous forme cubique, les cristaux de silicium sont gris-noir avec des reflets métalliques bleutés. Le silicium amorphe se présente comme une poudre brun foncé. Il est un élément semi-conducteur : en conséquence, sa conductivité électrique est faible comparée à celle des métaux. 'Si' n'est pas soluble dans l'eau. Il est nettement moins ductile que les métaux. Le tableau suivant montre certaines des propriétés physiques du silicium [9].

TABLEAU 2.1 – Les propriétés physiques du silicium.

Symbole	Si
Numéro atomique	14
Électrons par niveau d'énergie	2, 8, 4
Masse atomique	28,0855 u
Isotopes les plus stables	28Si stable avec 14 neutrons (92,22 %) 29Si stable avec 15 neutrons (4,68%) 30Si stable avec 16 neutrons (3,09 %)
Série	métalloïdes
Groupe, période, bloc	14, 3, p
Densité	2,33
Point de fusion	1.414 °C
Point d'ébullition	3.265

De la même façon que le silicium est un élément abondant dans la nature, on le retrouve dans une myriade d'applications : verre, ciment, céramique, silicones, semi-conducteurs, huiles, etc. Il est présent dans certains aciers et dans les briques, ainsi que les émaux et les poteries en tant qu'élément réfractaire. Le silicium est aussi employé dans les panneaux photovoltaïques. Les procédés de gravure utilisés pour l'électronique permettent aussi de fabriquer du silicium avec des nanopores pour la dissociation des molécules d'eau dans les piles à combustible. Le carbure de silicium possède une dureté

très proche de celle du diamant. En conséquence, il est utilisé comme abrasif et dans les outils. La silice, quant à elle, est aussi utilisée avec le noir de carbone pour la fabrication de certains pneus. Le quartz est employé comme matériau transparent car il résiste mieux que le verre à la chaleur [10].

2.3.2 Dopage de semi-conducteur

On a vu qu'il existe une bande interdite dans la structure des semi-conducteurs et des isolants. Un semiconducteur possède une petite bande interdite que les électrons peuvent franchir si on leur donne l'énergie nécessaire. Plus cette bande est faible, plus l'énergie nécessaire est petite. Ceci est intéressant pour la consommation électrique de nos appareils, mais aussi d'un point de vu plus technique. Le dopage, c'est une technique qui vise à modifier l'énergie nécessaire pour rendre le semi-conducteur plus ou moins conducteur. Il consiste à injecter dans les cristaux de silicium des atomes bien choisis pour le rendre soit un peu plus conducteurs, soit un peu moins. Le silicium possède 4 électrons de valence (comme le carbone) : dans un cristal, il se lie donc de façon tétraédrique à 4 autres atomes de silicium (Fig 2.6) [7].

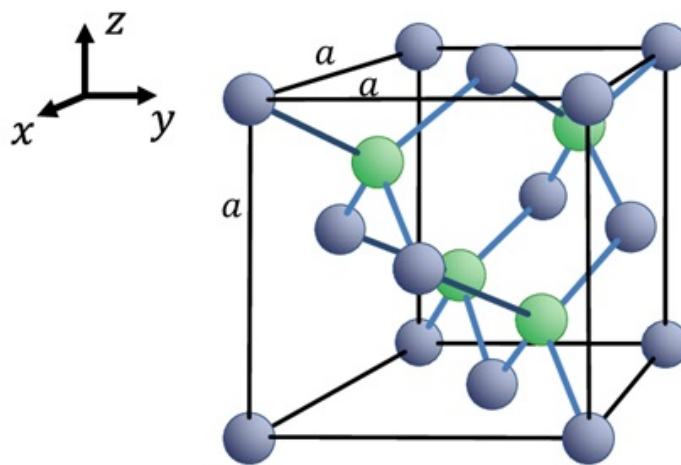


FIGURE 2.6 – Structure cristalline du silicium.

Il est possible de remplacer certains atomes de silicium par d'autres atomes, qui vont alors modifier la structure des bandes de conduction. L'atome de silicium possédant 4 électrons de valence, on peut injecter un atome avec 5 électrons de valence : l'atome sera alors dans le cristal avec 4 liaisons mais possédera un électron supplémentaire. Pour ça, on utilise souvent du phosphore (symbole PPP). Vu que ce type de modification apporte un électron en plus dans le cristal, la bande de conduction est alors globalement négative : on parle de dopage négatif, ou dopage N (Fig 2.7) (le cristal dans son ensemble reste neutre, car le phosphore contient un proton en plus aussi ; c'est juste

la bande de conduction qui est négative). Une autre solution est d'utiliser un dopage au bore (symbole BB), qui n'a que 3 électrons de valence : le bore sera là aussi bien pris dans un cristal avec 4 liaisons, mais une des liaisons manquera un électron : il sera donc comme « positif » (car il manque comme une charge négative), d'où le nom de dopage P (Fig 2.7) [7,8].

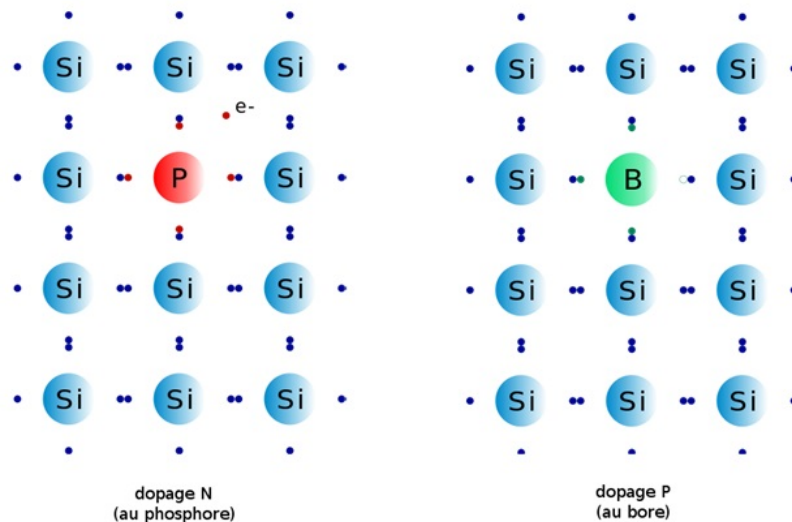


FIGURE 2.7 – Dopage du silicium par du Phosphore (N) et du Bore (P).

- ➔ Grâce au dopage N, le silicium devient un peu plus conducteur : en effet, l'introduction du phosphore a pour effet de déplacer la bande de conduction vers le bas : les électrons du silicium sont donc plus rapidement conducteurs [7,11].
- ➔ Grâce au dopage P, le silicium devient également un peu plus conducteur : le bore apporte certes « un trou d'électrons », mais ce dernier peut recevoir un électron voisin qui laisse alors un trou derrière lui. Le trou s'est alors déplacé et ceci constitue bien une sorte de déplacement de charges (« virtuellement » positive) et augmente donc la conductivité du matériau également [7,11].

Ces deux façons de doper un semi-conducteur sont donc antagonistes : l'une apporte un électron en plus au cristal semi-conducteur et l'autre en retire un. En combinant deux matériaux dopés de façon différente, on peut faire des composants électriques comme des diodes ou des transistors. Pour l'instant, reprenez que le silicium est un semi-conducteur car il ne laisse passer le courant que si on excite ses électrons de valence. Il faut pour cela une tension électrique dépassant un seuil minimal propre au matériau. On utilise le dopage N (négatif) ou P (positif) pour modifier légèrement le seuil de tension mais aussi pour modifier d'autres propriétés du semi-conducteur [12]. Le silicium est aujourd'hui massivement utilisé principalement parce qu'il est très abondant sur terre : il représente 25% de la croûte terrestre, et est simple à extraire et à utiliser [9].

2.4 L'interaction ion-matière

Les faisceaux d'ions peuvent être vus comme un outil polyvalent permettant d'aborder, aussi bien la synthèse de nouveaux matériaux, que l'analyse structurale et chimique de systèmes complexes. Nous distinguerons par la suite deux modes d'utilisation des faisceaux d'ions, l'analyse et la synthèse. Lorsque le faisceau d'ions est destiné à l'analyse, deux types d'expériences se présentent. Dans le premier cas, l'échantillon à étudier est la source de production des ions et l'analyse consiste à trier en masse les ions extraits, elle est alors destructive. Dans le second, l'analyse résulte de l'interaction d'un faisceau d'ions légers avec l'échantillon qui est alors la cible. Suivant la nature de l'analyse, différents types de détecteurs permettent de quantifier l'énergie des particules diffusées par l'échantillon (fluorescence, rétrodiffusion. . .). Lorsque l'on utilise les faisceaux d'ions en tant qu'outils de modifications contrôlées des échantillons, plusieurs paramètres (énergie, flux, dose, nature du faisceau, température de la cible) sont ajustables suivant l'objectif recherché (création de défauts, mise en ordre, synthèse de nouvelles phases ou encore modification des surfaces) [13].

2.4.1 Principe de l'interaction

Lorsqu'un ion de forte énergie pénètre dans un solide, il perd progressivement son énergie au cours d'interactions avec les atomes et les électrons du solide. On rencontre deux principaux types d'interaction qui sont l'excitation électronique et les chocs nucléaires. Le processus d'excitation électronique résulte des collisions inélastiques entre l'ion incident et les électrons de la cible, induisant l'excitation et l'ionisation des atomes. Pour exciter un électron de la cible, il faut que l'énergie incidente de l'ion soit supérieure à une énergie seuil dépendant de la largeur de la bande interdite E_g du matériau cible [13,14] :

$$E_{\text{seuil}} = \frac{M_1 E_g}{8 m_e} \quad (2.1)$$

où M_1 et m_e sont respectivement la masse du projectile et de l'électron. En-dessous de ce seuil, l'ion incident interagit avec les noyaux de la cible. Les chocs nucléaires sont les collisions élastiques entre le projectile incident et les noyaux de la cible par lesquelles le projectile peut transmettre directement de l'énergie au noyau. Ces chocs nucléaires conduisent à des déplacements atomiques. 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. Dans le cas d'une collision élastique, l'énergie totale et la quantité de mouvement totale se conservent

2.4.2 Perte d'énergie

Une particule chargée pénétrant dans un solide, va perdre progressivement son énergie par différents mécanismes d'interactions avec le milieu cible, pour s'arrêter finalement à une certaine profondeur ou rebondir à la surface (phénomène de rétrodiffusion). On appelle cette perte d'énergie de la particule par unité de distance parcourue le pouvoir d'arrêt du matériau cible [14,15] :

$$P_E = -\frac{dE}{dx} = -\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta E}{\Delta x} \quad (2.2)$$

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

- ▼ Perte d'énergie nucléaire : Il s'agit des collisions élastiques des ions pénétrant à faible vitesse avec les noyaux des atomes du matériau cible.
- ▼ Perte d'énergie électronique : Les ions pénétrant à grande vitesse dans le matériau cible transfèrent leur énergie aux électrons des atomes du matériau cible, par processus d'excitation ou d'ionisation de ces atomes. C'est donc un processus inélastique de transfert d'énergie.
- ▼ Perte par génération de photons : Ce processus a lieu à des vitesses très élevées concernant des phénomènes relativistes.
- ▼ Perte par réaction nucléaire : Il peut y avoir des réactions nucléaires entre l'ion incident et les atomes du matériau cible.

Dans le cas de l'implantation ionique, l'énergie des ions incidents se situent dans un intervalle partant de quelques dizaines de keV à quelques MeV, nous allons prendre en considération uniquement les deux premiers processus de perte d'énergie. Pour simplifier, on peut considérer ces processus comme indépendants. Macroscopiquement la perte d'énergie totale globalise le freinage électronique et nucléaire :

$$\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx} \right)_n + \left(\frac{dE}{dx} \right)_e \quad (2.3)$$

Si l'énergie transférée par collision nucléaires aux atomes du matériau cible est supérieure à l'énergie de liaison, Ces noyaux vont acquérir une énergie de déplacement qui leur permettra d'interagir avec d'autres noyaux du matériau cible, en les délocalisant à leur tour. On assiste à un processus en cascade de création de défauts, endommageant du matériau. On peut avoir une pulvérisation de la cible quand le processus a lieu en surface, les noyaux peuvent être éjectés du matériau. On précise aussi que si la

masse des ions incidents est plus faible que celle des atomes du matériau cible, les ions incidents peuvent rebondir sur les noyaux, en ayant un phénomène de rétro diffusion. La figure 2.8 schématise ces différents phénomènes d'interaction entre les ions et les atomes du substrat implanté [14,16].

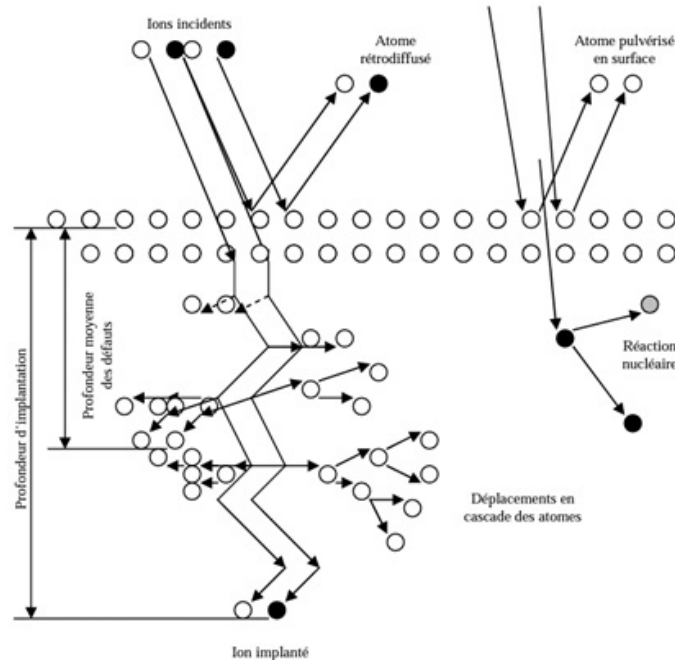


FIGURE 2.8 – Différentes interactions dans le matériau cible.

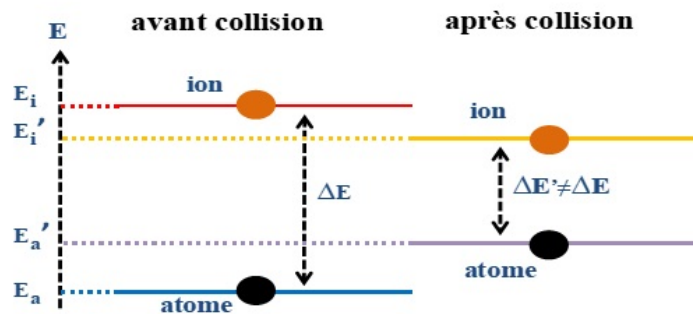


FIGURE 2.9 – Diagramme de l'énergie cinétique totale du système ion-atome avant et après collision.

2.4.3 Pouvoir d'arrêt nucléaire

Le pouvoir d'arrêt nucléaire représente des collisions élastiques qui se produisent à faible vitesse, avant que la particule ionique ne s'arrête dans l'implant. Lors de la collision élastique entre deux particules, l'énergie transmise au cœur du matériau cible est déterminée selon l'équation (2.4). La perte d'énergie de la particule incidente peut

être exprimée comme suit [18]

$$T = \frac{4M_{\text{ion}}M_{\text{atome}}}{(M_{\text{ion}} + M_{\text{atome}})} E_{\text{ion},0} \cos^2 \varphi \quad (2.4)$$

La section efficace d'arrêt obtenue dans le cas d'une collision nucléaire avec un potentiel de Coulomb [19] :

$$S_n = \frac{\pi Z_{\text{ion}}^2 Z_{\text{atome}}^2 e^4}{E_{\text{ion},0}} \frac{M_{\text{ion}}}{M_{\text{atome}}} \ln \left(\frac{T_{\text{max}}}{T_{\text{min}}} \right) \quad (2.5)$$

4.4. Pouvoir d'arrêt électronique La perte d'énergie électronique par transfert d'énergie aux électrons de l'atome cible est beaucoup plus importante que la perte d'énergie nucléaire, surtout pour les ions implantés à forte énergie. 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. La collision ion-électron est étudiée en considérant plusieurs cas en fonction, de la vitesse relative par rapport à la vitesse moyenne des électrons périphériques sur leurs orbites distinguant les collisions rapides (soudaines) des collisions lentes [20]. La section efficace d'arrêt obtenue dans le cas d'une interaction ion-électron avec un potentiel de Coulomb [19,20] :

$$S_e = \frac{\pi Z_{\text{ion}}^2 e^4}{E_{\text{ion},0}} M_{\text{ion}} M_{\text{électron}} \ln \left(\frac{T_{\text{max}}}{T_{\text{min}}} \right) \quad (2.6)$$

4.5. Pouvoir d'arrêt global En considérant les pertes d'énergies électroniques et nucléaires indépendantes et additives (à l'aide de l'équation (2.3)) la perte d'énergie totale (Fig 2.10) s'exprime comme la somme des deux processus [21] :

$$-\frac{dE}{dx} = -\left(\frac{dE}{dx}\right)_n - \left(\frac{dE}{dx}\right)_e = N [S_e(E) + S_n(E)] \quad (2.7)$$

N est la densité volumique atomique du matériau exprimée en cm^{-3} .

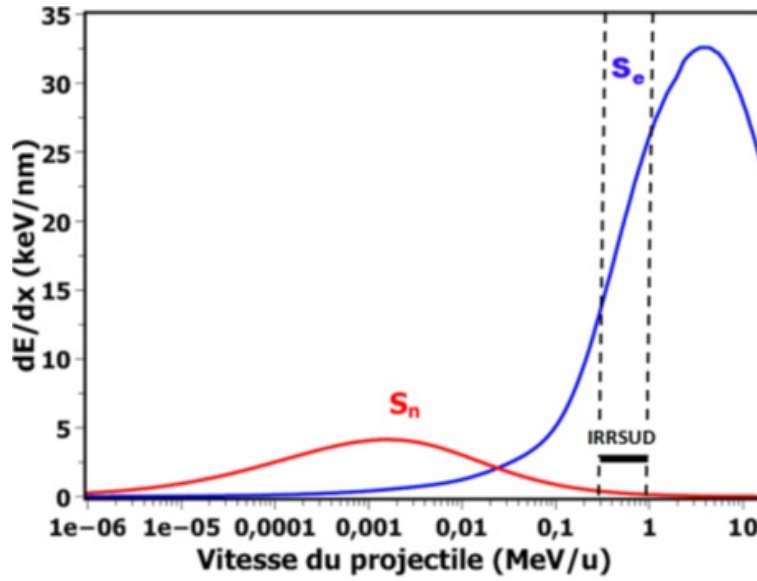


FIGURE 2.10 – Évolution des pertes d'énergies électroniques (S_e) et nucléaires (S_n) en fonction de la vitesse du projectile.

2.5 Distribution des ions implantés

La distribution de pénétration des ions dépend des facteurs suivants

- ➔ Le numéro atomique de l'ion incident.
- ➔ Le numéro atomique de la cible.
- ➔ L'énergie cinétique des ions incidents.
- ➔ La température de la cible.
- ➔ Le nombre d'ions incidents reçu par unité de surface de la cible, appelé dose.
- ➔ L'angle d'incidence du faisceau par rapport aux axes cristallographiques.

5.1. Distribution des ions implantés L'étude de la profondeur de distribution des ions est souvent basée sur l'hypothèse d'un solide amorphe. Les ions incidents vont perdre leur énergie par chocs successifs avec les atomes de la cible. Ceci explique la dispersion des trajectoires. Le parcours de l'ion incident dans le matériau cible se calcule à partir de l'énergie perdue par collisions électroniques et nucléaires [22] :

$$R = \int_0^R dx = \int_{E_{\text{ion},0}}^0 \frac{dE}{\frac{dE}{dx}} = \int_0^{E_{\text{ion},0}} \frac{dE}{-\left(\frac{dE}{dx}\right)_n - \left(\frac{dE}{dx}\right)_e} = \frac{1}{N} \int_0^{E_{\text{ion},0}} \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)} \quad (2.8)$$

Nous définissons ainsi deux paramètres (Fig 2.11) [19-23] :

- Le parcours moyen projeté R_p : C'est la profondeur où les ions implantés s'arrêtent avec un maximum de concentration avec un écart type ΔR_p (la déviation standard) qui caractérise la répartition statistique des ions en profondeur autour de R_p .
- La déviation latérale (l'écart moyen latéral) ΔR_l : est le parcours projeté sur le plan perpendiculaire à la direction d'incidence (perpendiculaire à la direction d'implantation), il caractérise la dispersion latérale des ions

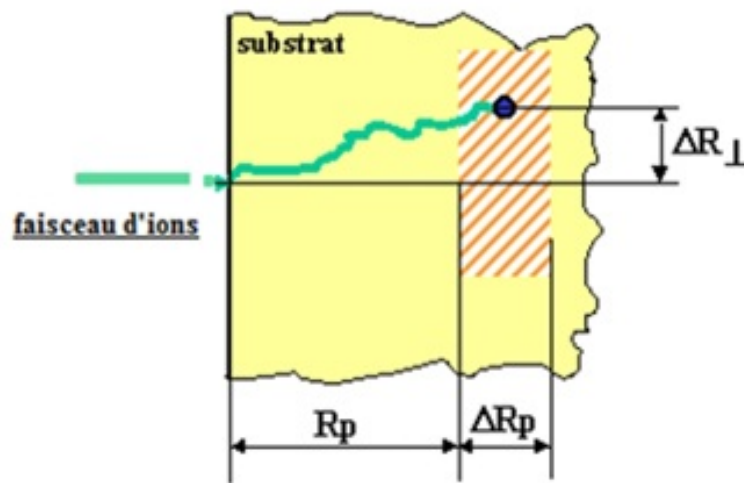


FIGURE 2.11 – Parcours et distribution des ions implantés.

2.5.1 Canalisation et son rôle

La structure cristalline des matériaux joue un rôle très important dans la distribution des ions implantés. Si la pénétration des ions se fait suivant des axes cristallographiques à faibles indices, la probabilité de collision ion-cible diminue par rapport à une pénétration selon des axes à grands indices ou dans un matériau amorphe. Cet effet est appelé canalisation. Dans la figure (2.12) représente cet effet de canalisation. On remarque un profil d'implantation atteignant R_{max} . Un deuxième pic dans le profil des impuretés peut apparaître si cet effet de canalisation deviendrait très important. La distribution des ions implantés dépend de l'orientation du faisceau d'ion par rapport à la structure cristalline du matériau cible, de la température de la cible (vibration thermique du réseau), de l'état de surface de la cible et de la dose d'implantation (amorphisation) [23].

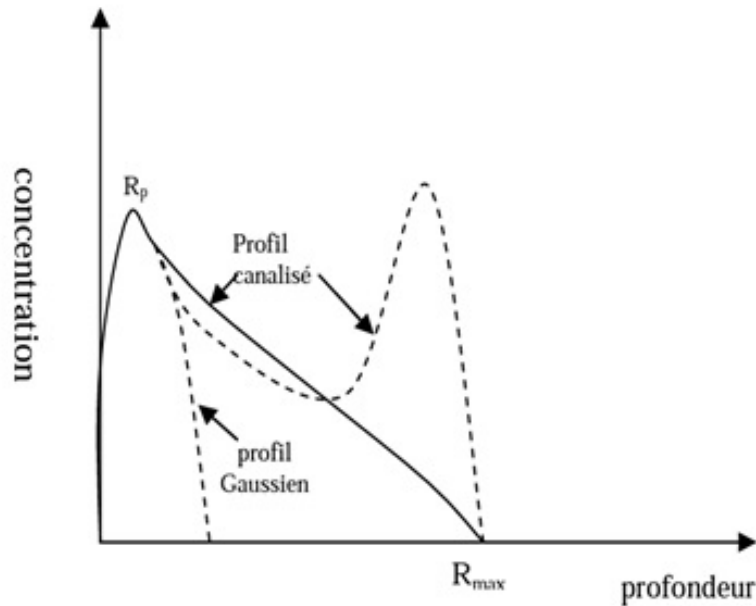


FIGURE 2.12 – Distribution des ions implantés dans différents cas de canalisation

La perte d'énergie des ions canalisés, essentiellement électronique, est plus faible, comparée à celle des particules non canalisées à cause de la densité électronique moindre dans le canal.

2.6 Effets des défauts sur les propriétés des semiconducteurs

2.6.1 Effets engendrés sur le volume

Lors de l'implantation à fortes doses, induisant la formation de couche amorphe, il se produit souvent un changement dans le volume de cette couche amorphe. Ce phénomène est principalement caractéristique des semiconducteurs monocristallins. Il se produit une augmentation du volume de la zone amorphe. La mesure de ce volume permet d'évaluer l'ampleur de cette couche amorphe [24].

2.6.2 Effets engendrés sur les propriétés optiques

Les endommagements de radiation modifient l'indice de réfraction donc la réflectivité des matériaux semiconducteurs implantés. L'indice de réfraction augmente avec la concentration des endommagements. La zone implantée peut être utilisée pour la conduction (propagation) de la lumière. Des guides optiques sont ainsi réalisés avec des matériaux tels le GaAs, le quartz [24].

2.6.3 Effets engendres sur les propriétés électriques

Les endommagements de radiation ont une grande incidence sur les propriétés électriques des semiconducteurs. Souvent, de faibles doses suffisent à réduire la durée de vie des porteurs minoritaires. La mobilité des porteurs est considérablement affectée. La concentration en porteurs après implantation est généralement faible, car les ions sont partiellement piégés au niveau des défauts et sont ainsi électriquement inactifs [24].

2.7 La simulation par le code SRIM

2.7.1 Définitions

La simulation numérique est un outil permettant l'étude et la prédiction des phénomènes réels. Elle permet de simuler, par exemple, un phénomène physique complexe en utilisant un programme informatique sur un ordinateur. La représentation d'un profil d'implantation ionique par une simple approximation gaussienne est très souvent insuffisante. On a alors recours à des programmes de simulation. Dans ce paragraphe, nous présentons le code de simulation utilisé dans cette étude. Il est basé sur la méthode de Monte Carlo que nous avons adaptée ici pour étudier la diffusion des particules par une surface solide. C'est une approche statistique qui repose sur la génération de nombres aléatoires. Il existe aujourd'hui plusieurs logiciels de simulation numérique qui sont utilisés pour calculer les phénomènes cinétiques associés aux pertes d'énergie des ions. Le plus connu d'entre eux est le code SRIM, anciennement dénommé TRIM, qui fut développé à IBM et maintenu pendant cinq décennies.

SRIM (The Stopping and Range of Ion in Matter) : l'arrêt et l'étendue de pénétration des ions dans la matière. Il est basé sur la méthode de Monte Carlo. SRIM c'est un groupe de programmes dédiés aux calculs des pertes d'énergie et du parcours des particules chargées dans la matière. Initialement créé en 1983 par J.F. Ziegler et J.P. Biersack [25], la dernière version de ce programme date de 2013. Le calcul de transport dans un matériau se base sur le programme. **TRIM (Transport of Ion in Matter)** : transport des ions dans la matière, Ce logiciel utilisé a été développé par Ziegler et al [26,27]. TRIM dont la dernière version date de 1998. TRIM accepte une définition de cible selon une géométrie en couches parallélépipédiques successives (Fig 2.13) Un dictionnaire complet de matériaux composés programmés est disponible.

2.7.2 Principe de fonctionnement

Le programme SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) est basé sur le code TRIM (Transport of Ions in Matter). Il fonctionne sous Windows et il est considéré

comme étant une évolution du TRIM qui s'exécute sous DOS. Il permet de simuler l'arrêt et le parcours des ions (10 eV – 2 GeV/amu) dans la matière [28]. Les collisions entre les ions et les atomes cibles sont supposées de type coulombiennes écrantées. C'est un programme qui utilise l'approximation des collisions binaires (BCA). Le TRIM effectue des calculs détaillés de l'énergie transférée à l'atome cible, pour chaque collision [29]. En effet, dans une interaction entre un ion et un atome cible, un atome de recul mis en mouvement devient à son tour un projectile. La même procédure est répétée pour tous les atomes de recul d'ordre supérieur impliqués dans la cascade de collision. Comme mentionné précédemment, le TRIM utilise la méthode de cascades de collisions pour suivre les atomes individuels reculés jusqu'à ce que leur énergie devienne inférieure à E_d [30]. L'énergie E_d est définie comme étant l'énergie minimale qu'il faut transférer à un atome cible pour le déplacer de son site et créer une lacune [30,31]. Le TRIM peut rencontrer quatre différentes situations. 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, les quatre situations ont lieu si :

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

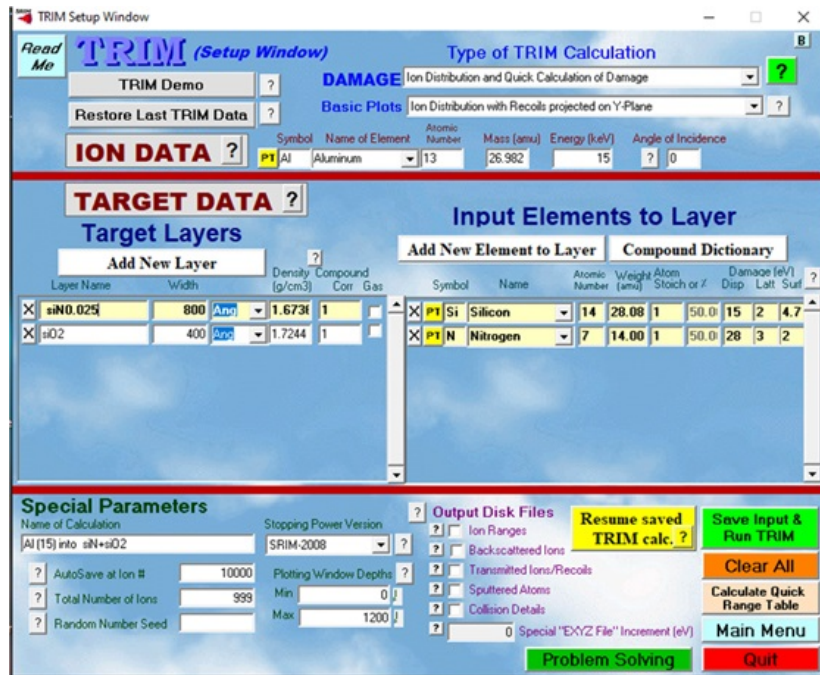


FIGURE 2.13 – : Interface du logiciel SRIM- 2008.

2.7.3 Applications de SRIM et Types de Calculs

Ce programme permet de calculer différents paramètres liés au rayonnement d'ions dans une cible, entre autres [32,33]

- ◆ La distribution spatiale des ions implantés (profondeur moyenne, diffusion, distribution latérale). Les distributions des pertes d'énergies électronique et nucléaire en fonction de la profondeur.
- ◆ La distribution des lacunes (atomes déplacés) calculée à partir du modèle de KinchinPease [34].
- ◆ La simulation ne tient pas compte non plus des effets liés à l'élévation de température due à l'irradiation.
- ◆ SRIM ne tient pas compte aux réactions nucléaires.
- ◆ SRIM n'utilise rien que les matériaux amorphes, et les composés utilisés sont des cristaux.

Le code SRIM possède une grande diversité d'applications. On s'intéressera essentiellement au calcul estimatif des dégâts causés par les ions chargés H^+ et H^{++} incidents sur des cibles consistant de couches planes de différentes épaisseurs de (NaI) et (SiC) dans

un domaine d'énergie entre 100 KeV et 1 GeV. Pour cela on considèrera [28-32] .

- ▲ Des ions incidents avec des énergies, des angles et.
- ▲ Des épaisseurs de la cible suffisantes pour complètement arrêter la particule incidente.
- ▲ Le calcul des dégâts cumulatifs occasionnés par les rayonnements incidents jusqu'à leur arrêt.

2.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté quelques notions de base sur les propriétés concernant la matière solide, et le semi-conducteur de la colonne IV (Silicium). Nous avons explicité l'interaction ion-matière et tout ce qui s'y rapporte en termes de perte d'énergie et distribution des ions implantés. En plus de son effet sur les propriétés des semi-conducteurs. Enfin, nous avons identifié le programme de simulation le plus approprié pour cette étude, appelé SRIM et expliqué son fonctionnement et ses différentes applications dans le domaine de la recherche.

Bibliography

- [1] SPRING, Walthère. Sur l'apparition dans l'état solide de certaines propriétés caractéristiques de l'état liquide ou gazeux des métaux. *Bulletins de l'Académie Royale des Sciences, des Lettres et des Beaux-Arts de Belgique*, 1894, vol. 28, no 7.
- [2] TOMAS, A., LARUELLE, P., DORMANN, J. L., *et al.* Affinement de la structure des formes ordonnée et désordonnée de l'octaoxopentaferate de lithium, LiFe_5O_8 . *Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications*, 1983, vol. 39, no 12, p. 1615-1617.
- [3] FAIVRE, G. Diffusion Dans Les Solides Amorphes. *Mass Transport in Solids*, 1983, p. 333-351.
- [4] TANDT, Maxime et GOUIRAND, Valentin. LC17: Solidecrystalline(CPGE).
- [5] HAUTCOEUR, A. Les monocristauxélaboration et mise en œuvre. Article PDF, 1982.
- [6] GUINEBRETIÈRE, René. Diffraction des rayons X sur échantillons polycristallins. Hermès, 2002.
- [7] CHOVEL, Alain et MASSON, Pascal. Physique des semi-conducteurs. *Ecole Polytechnique–université de Marseille*, 2004.
- [8] CHAZALVIEL, J.-N. L'électrochimie des semi-conducteurs: le retour du silicium. *Le Journal de Physique IV*, 1994, vol. 4, no C1, p. C1-117-C1-128.
- [9] MILLOT, Georges. Silice, silex, silicifications et croissance des cristaux. *Sciences Géologiques, bulletins et mémoires*, 1960, vol. 13, no 4, p. 129-146.
- [10] GURAV, Jyoti L., JUNG, In-Keun, PARK, Hyung-Ho, *et al.* Silica aerogel: synthesis and applications. *Journal of Nanomaterials*, 2010, vol. 2010, p. 1-11.
- [11] MOUSSAOUI, Nafissa, BOUAFIA, Mohamed, BOUARISSA, Nadir, *et al.* l'étude par simulation de l'influence du dopage sur les paramètres caractéristiques des cellules solaires à base de silicium amorphe. 2016.
- [12] LAZAR, Mihai Bogdan. Etude du Dopage par Implantation Ionique d'Aluminium dans le Carbure de Silicium pour la Réalisation de Composants de Puissance. 2002. Thèse de doctorat. Lyon, INSA.
- [13] OLIVIERO, Erwan. Faisceaux d'ions-Théorie et mise en œuvre. 2021.
- [14] M. Nastasi, J. W. Mayer, J. K. Hirvonen, *Ion-solid interactions: fundamentals anapplications*, Cambridge University Press, 1969.

[15] Lindhard J., Scharff M., "Energy dissipation by Ion in the KeV Region" Physical Review, (1961), Vol.24, n°1, pp.128-130.

[16] LAZAR, Mihai Bogdan. Etude du Dopage par Implantation Ionique d'Aluminium dans le Carbure de Silicium pour la Réalisation de Composants de Puissance. 2002. Thèse de doctorat. Lyon, INSA.

[17] A. Zouke, Etude des phénomènes d'interaction faisceau d'électron gaz –matière dans un MEB, Thèse Doctorat, Université Lille I (2013).

[18] N. Bohr, On the penetration of charged particles through matter, Kgl. Dan. Vid. selsk. Mat. Fys. Medd., 18 (8), 1948.

[19] J. Lindhard, Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles, Mat.Fys. Medd.Vid. Selsk., vol. 34, N°14, pp. 124-128, 1965.

[20] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, Approximation method in classical scattering by screened coulomb fields, Mat. Fys. Medd.Vid. Selsk., vol. 36, pp 10, 1968.

[21] J. Lindhard, M. Scharff, Energy dissipation by ions in the Bohr region, Phys. Rev., 1961, pp 124-128.

[22] H. Ryssel, I. Ruge, Ion implantation, John Wiley & Sons, 1986.

[23] Lindhard, Scharff, Schiott, Range Concepts and Heavy Ion Ranges, Mat. Fys. Medd., 33, (1963).

[24] ROUHA Mustapha . Etude de l'effet de l'implantation ionique dans le Carbure de le CuInSe_2 et autres ternaires. 2014. Thèse de doctorat. SETIF, UFAS.

[25] F.Z. Satour and A. Zegadi, Proc. 25th Europ. Photovolt. Solar Energy Conf., 5th World Conf. Photovolt. Energy Conv., Valencia (Spain), 6 – 9 Sept. (2010), pp. 3418 –3421.

[26] F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littman, 1985, "The Stopping and Range of Ions in Solids", Pergamon Press, New York, version 2013.

[27] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, and U. Littmark, "The Stopping and Range of Ions in Solids", volume I and II, 1980.

[28] <http://www.SRIM.org> .

[29] J. P. Biersack and L. G. Haggmark, Nucl. Instr and Meth., 174, (1980), p.257.

[30] S. MERABET, Simulation à l'aide d'un modèle dit de "Monté Carlo" des profils de bore implantés requis pour la réalisation des jonctions courtes utilisées dans les processus de haute densité d'intégration (PHDI), Université Mentouri de Constantine, 29/06/2009.

[31]L. Baouni « étude des défauts d'irradiation induits par implantation ionique de Sb dans Si », mémoire de master, université Mentouri Constantine, Algérie, 2009.

[32]Mr.Lachgueur Abdellah, Etude des couches minces de ZnO dopées. Simulation des dopages par TRIM (Transport of Ions in Matter), Faculté Des Sciences -Département De Physique, UNIVERSITE ABOU BEKR BELKAID & TLEMCEM, Année Universitaire 2014/2015.

[33]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.

[34]J. Lindard, M. Scharff, H.E. Schiff and K. Dan, Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 33 (1963) 1-39.

Chapitre 3

Simulation des paramètres liés à l'implantation ionique de l'aluminium dans le silicium dopé au nitrogène.

3.1 Introduction

Ce chapitre est dédié à la présentation de l'ensemble des résultats obtenus à travers la simulation en utilisant un logiciel spécifique que nous détaillerons. Dans ce cadre, nous effectuons l'implantation de l'aluminium dans une couche de silicium contenant de l'azote. Grâce à ce logiciel, nous pouvons obtenir plusieurs informations sur le comportement de l'aluminium dans le silicium en présence d'azote. En résumé, ce chapitre examine l'impact de l'énergie d'implantation et de la composition du film implanté sur le profil d'implantation de l'aluminium.

3.2 Présentation de la structure

Nous étudions les profils d'implantation de l'aluminium dans des films minces de silicium dopé à l'azote, en présence d'une autre couche de silicium dopé à l'oxygène. (figure 3.1).

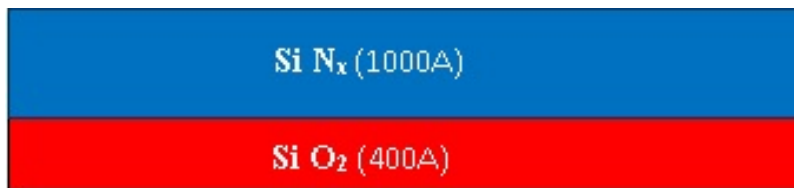


FIGURE 3.1 – Représentation de la structure à planter : SiN_x/SiO_2

3.3 Paramètres de la simulation

Le programme TRIM nous permet de créer la structure SiN_x/SiO_2 , et de choisir le dopant et l'énergie utilisés dans l'implantation. Les éléments présents dans la simulation sont alors l'aluminium et les constituants de la cible à savoir : le silicium (Si), l'azote (N), et l'oxygène (O). Pour simuler l'effet de la composition chimique de la cible, Nous utilisons des taux d'azote de 2.5%, 5%, et de 7.5%. Pour décrire l'effet du désordre du réseau cristallin du silicium causé par la présence d'azote [1]. Dans le cas de notre travail, nous avons utilisé le type de calcul "Ion Distribution and Quick Calculation of Damage"[2]. Notons que le code TRIM ne tient compte que des cibles amorphes[3].

3.4 Simulation et interprétation

3.4.1 Trajectoire des ions

Malgré les défis inhérents à la détermination des trajectoires des ions d'aluminium en mouvement lors d'une implantation ionique, l'utilisation du calcul de Monte Carlo offre la capacité de prédire avec précision les trajectoires individuelles de ces ions. En fin de compte, cela permet la répartition de tous les ions au sein de la structure cible. Les figures 3.2 fournissent une représentation visuelle des trajectoires des ions d'aluminium à l'intérieur de la structure SiN_x/SiO_2 , en fonction de la stœchiométrie x de la cible.

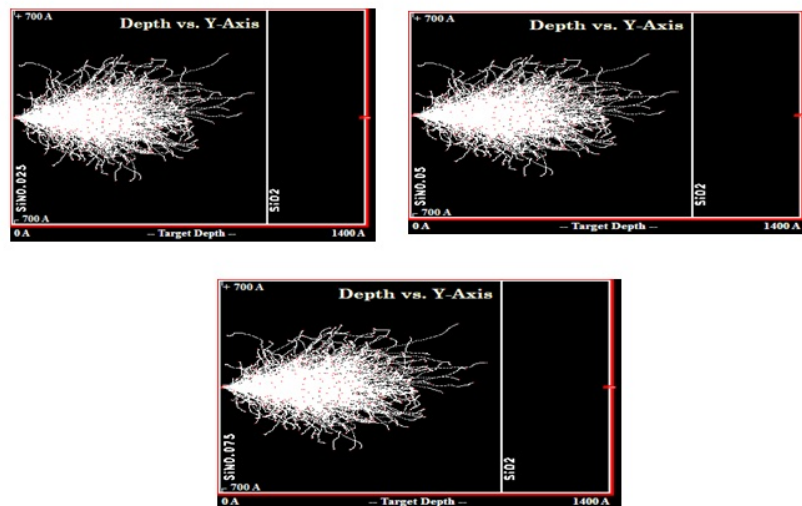


FIGURE 3.2 – Simulation de la trajectoire d'aluminium dans la structure SiN_x/SiO_2 , pour des proportions de l'azote de 2.5%, 5%, et 7.5%, avec une énergie de 15 keV

Nous constatons que les ions implantés se concentrent dans une zone proche de la surface de la première couche mince et ne parviennent pas à atteindre la deuxième

couche d'oxyde sur toute la plage de concentrations en azote des films. Il est important de noter que la forme de la zone en présence des ions d'aluminium reste stable dans les trois cas de dopage à l'azote, contrairement à la profondeur de pénétration qui semble diminuer progressivement avec l'augmentation de la concentration des impuretés d'azote dans la structure.

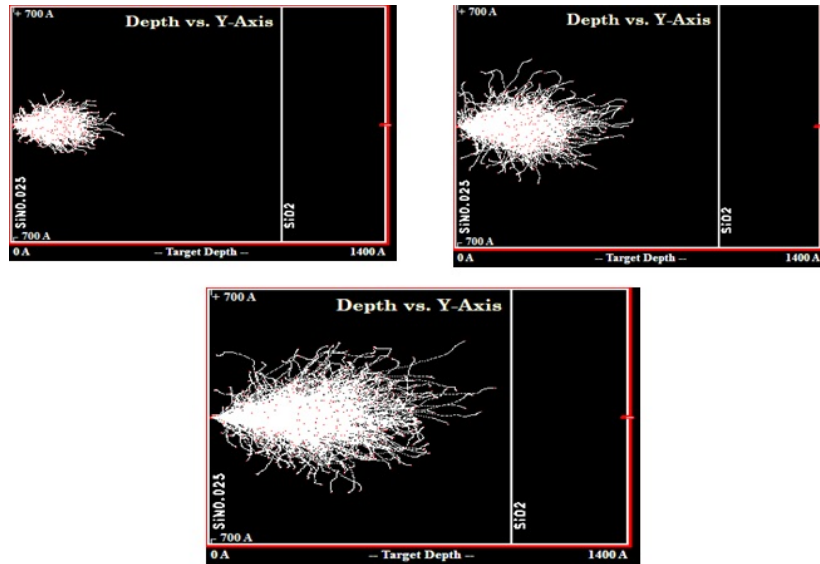


FIGURE 3.3 – : Simulation de la trajectoire d'aluminium dans la structure $SiN_{0.025}/SiO_2$, pour différentes énergies : (a) $E=5$ keV, (b) $E=10$ keV, (c) $E=15$ keV

Les résultats de la simulation montrent que l'implantation d'ions d'aluminium à un taux de 2,5 % de nitrogène conduit à une localisation des ions près de la surface, avec une augmentation de la profondeur de pénétration à mesure que l'énergie d'implantation augmente. Cependant, la simulation des trajectoires ne permet pas d'obtenir des informations précises sur la distribution en profondeur des espèces implantées, nécessitant ainsi une simulation des profils de concentration en profondeur.

3.5 Profils de concentration

3.5.1 Influence de la quantité d'azote

La simulation des concentrations d'aluminium dans la couche implantée joue un rôle crucial dans la maîtrise de la profondeur de pénétration des éléments implantés. Ce contrôle permet notamment de régler les gains en courant des transistors bipolaires et les tensions de seuil des transistors MOS (Métal Oxyde Semi-conducteur) lors de la fabrication des circuits intégrés, ainsi que de déterminer les paramètres décrivant la distribution, y compris les premiers moments physiques. Les figures 3.18 et 3.19 présentent en détail les concentrations d'aluminium simulées.

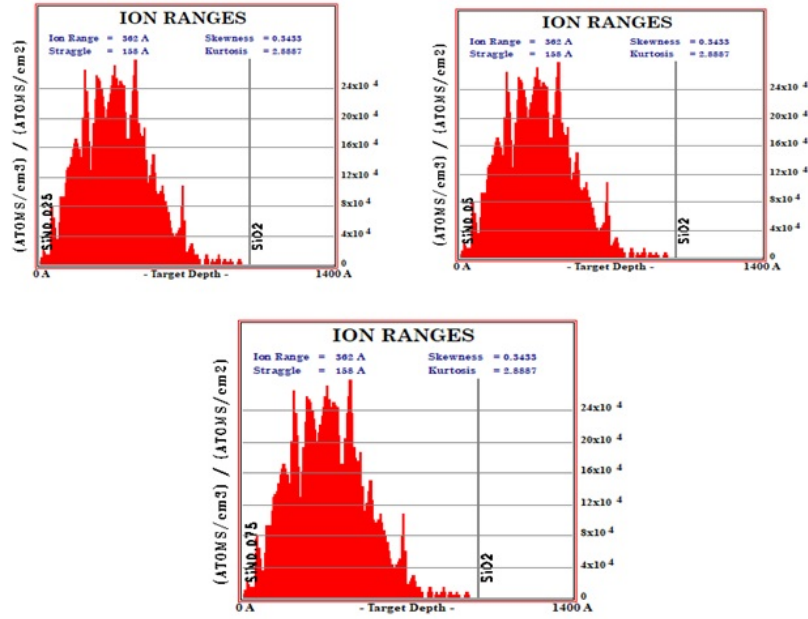


FIGURE 3.4 – Simulation des profils de distribution d'aluminium dans la structure SiN_x/SiO_2 , pour les taux d'azote de 2.5%, 5%, et 7.5%, avec une énergie de 15 keV .

On constate que le profil gaussien débute à partir d'un certain niveau de concentration, lequel dépend de la stœchiométrie en question. Cette concentration témoigne de la présence des atomes d'aluminium à la surface de la couche implantée suite à l'opération d'implantation. La concentration du dopant augmente progressivement jusqu'à atteindre la profondeur moyenne de pénétration, où elle atteint son pic maximal. À partir de ce point, on observe un déclin progressif (amortissement gaussien) de la concentration du dopant implanté.

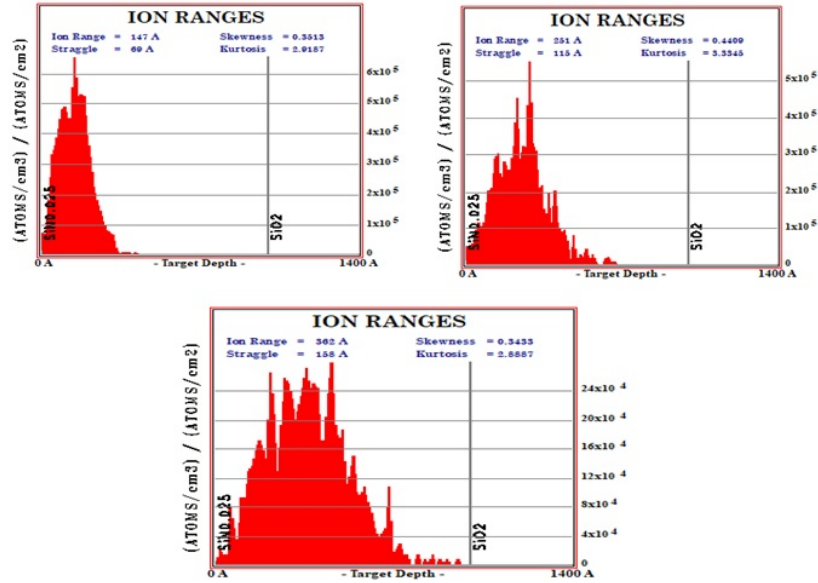


FIGURE 3.5 – Simulation des profils de distribution d'aluminium dans la structure $SiN_{0.1}/SiO_2$, en fonction de l'énergie d'implantation : $E=5$ keV, $E=10$ keV, $E=15$ keV.

Les trois profils exhibent une distribution gaussienne. Il est à noter que chacun de ces profils débute à partir d'un certain niveau de concentration, lequel diminue à mesure que l'énergie d'implantation augmente.

3.6 Production des lacunes

La formation des lacunes par l'implantation ionique peut être caractérisée par la répartition de ces lacunes dans la structure. Il est à noter que lorsque l'énergie transmise à l'atome cible (par les ions d'aluminium) dépasse le seuil minimum requis pour le déplacer, l'atome de silicium est expulsé de sa position et ne revient pas immédiatement. De plus, si l'énergie transférée à cet atome est suffisamment élevée, l'atome cible peut à son tour déplacer d'autres atomes, appelés atomes de recul. Cette notion sera expliquée plus en détail dans les documents suivants.

3.6.1 Variation de la quantité d'azote

Les distributions obtenues peuvent être assimilées à des lois gaussiennes centrées autour d'une profondeur RL correspondant à la densité maximale des lacunes. À chaque point, le nombre de lacunes générées est directement proportionnel au nombre de collisions nucléaires produites en profondeur. On remarque également que le nombre maximal de lacunes augmente en fonction du taux d'azote dans la couche.

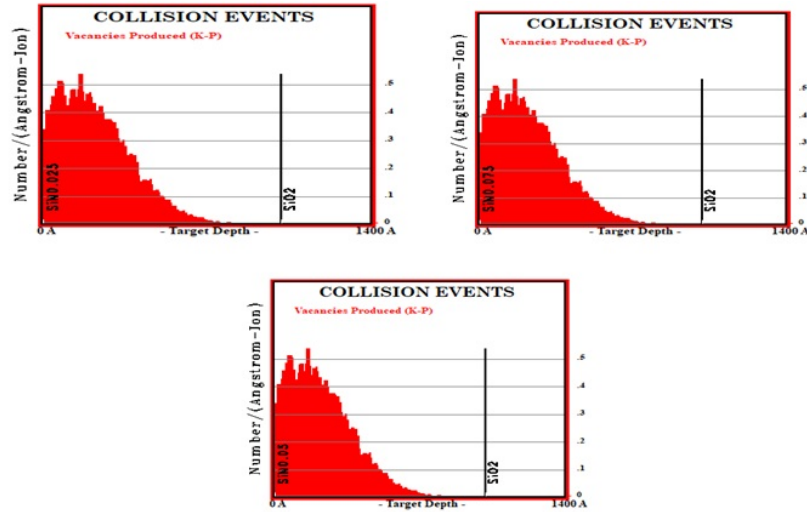


FIGURE 3.6 – Nombre de lacunes créées par implantation d'aluminium en fonction de la quantité d'azote dans la couche SiN_x .

3.6.2 Variation de l'énergie

Les courbes illustrées dans la figure 3.7 suivent une distribution gaussienne. La densité maximale de lacunes se trouve à la profondeur moyenne de cette distribution. Le nombre de lacunes générées dans ce scénario est directement proportionnel à la variation de l'énergie d'implantation. Il est également notable qu'à mesure que l'énergie augmente, l'étalement des lacunes devient plus important. De la même manière, le nombre total de lacunes augmente proportionnellement à l'augmentation de l'énergie

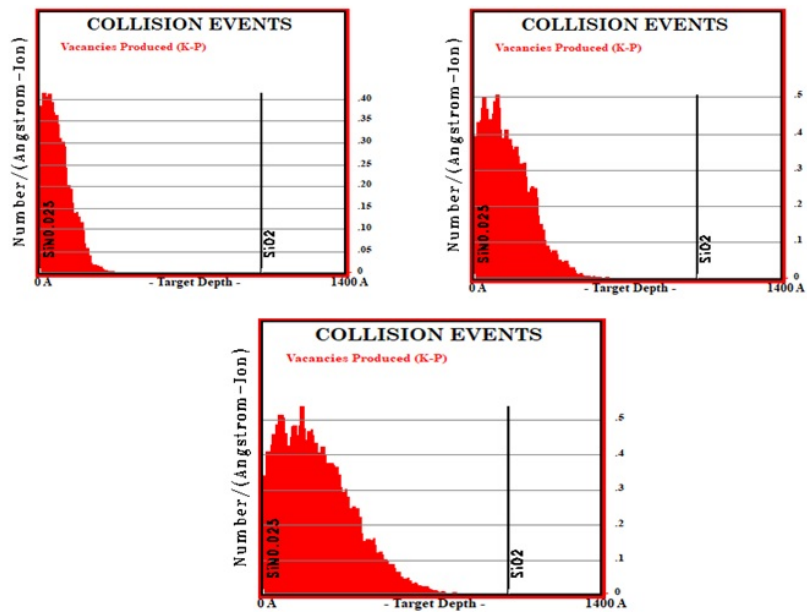


FIGURE 3.7 – Nombre de lacunes créées par implantation d'aluminium dans la couche $SiN_{0.025}$ en fonction de l'énergie incidente des ions : $E=5\text{keV}$, $E=10\text{ keV}$, $E=15\text{ keV}$.

En examinant tous ces résultats, il est clair que les lacunes sont réparties dans la première couche (SiN_x), et que la profondeur moyenne de la distribution des lacunes se situe en dessous de la profondeur de pénétration de l'aluminium, indépendamment du taux d'azote et de l'énergie d'implantation.

3.7 Phénomène d'ionisation

Ce phénomène se produit lorsque l'énergie transférée lors d'un choc inélastique est suffisante pour qu'un atome libère un électron. Si l'énergie transférée est élevée, il est même possible que plusieurs électrons soient libérés. Dans tous les cas, cela entraîne une modification de l'énergie interne de l'atome. Cette modification peut être causée aussi bien par les ions d'aluminium que par les atomes de recul, comme illustré dans les figures suivantes.

3.7.1 Variation de la quantité d'azote

La première observation de figure 3.8 permet de conclure que l'énergie perdue par l'aluminium est nettement supérieure à celle perdue par les atomes de recul sur toute la profondeur de pénétration. Au début, chaque profil atteint une valeur proche de son maximum, ce qui démontre que l'énergie perdue en surface est significative. Au-delà du pic, le profil commence à décroître progressivement, indiquant ainsi une diminution de l'effet de l'ionisation sur la perte d'énergie..

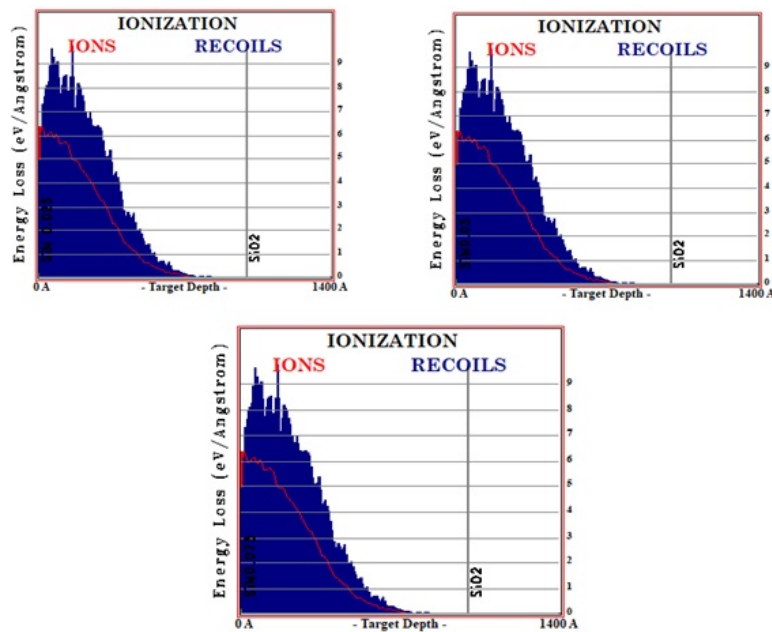


FIGURE 3.8 – Perte d'énergie par le phénomène d'ionisation dans la couche SiN_x par les ions projectiles et les atomes de recul d'aluminium : Influence de la quantité d'azote

Nous remarquons également une corrélation entre la quantité d'énergie perdue et la concentration d'azote dans la cible. En effet, à mesure que le nombre d'atomes d'azote augmente, la quantité d'énergie perdue augmente également. Cette observation met en évidence l'importante contribution des atomes d'azote au processus d'ionisation lors de l'irradiation par un faisceau d'ions.

3.7.2 Variation de l'énergie

Les profils obtenus dans ce cas (figure 3.9) présentent la même forme que ceux de la figure 3.8, avec une prédominance de l'effet des ions. L'énergie perdue est maximale à une certaine profondeur moyenne pour chaque profil, puis elle diminue progressivement au-delà de cette région. Bien que la quantité d'énergie perdue augmente avec l'énergie incidente des atomes implantés, elle reste inférieure à celle de l'implantation ionique.

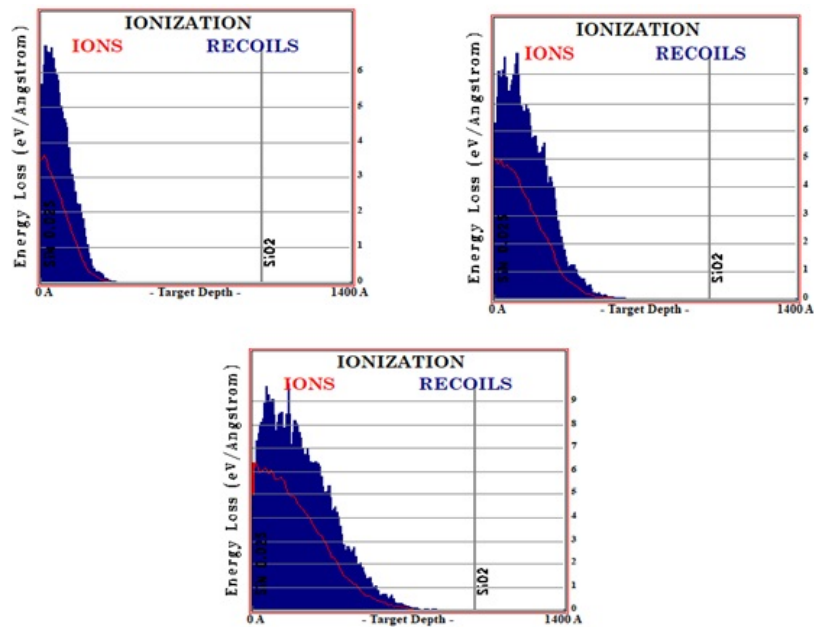


FIGURE 3.9 – Perte d'énergie par le phénomène d'ionisation d'aluminium dans la couche $SiN_{0.1}$ par les ions projectiles et les atomes de recul : effet de la variation de l'énergie d'implantation : $E=5$ keV, $E=10$ keV, $E=15$ keV.

À la lumière de toutes ces données, il est clair que l'effet d'ionisation se manifeste dans la couche SiN_x , indépendamment de la quantité d'azote et de l'énergie d'implantation, et que le pic de perte d'énergie se trouve à une profondeur inférieure à celle de la distribution de l'aluminium.

3.8 Production de phonons

La création de phonons se produit lorsque l'énergie transférée à l'atome cible est inférieure à l'énergie seuil nécessaire pour le déplacer dans la cible. La figure 3.10 illustre ce phénomène en tenant compte de la perte d'énergie en Angströms. Cet effet peut être causé à la fois par la contribution des atomes étrangers tels que l'aluminium, ainsi que par la contribution des atomes de recul. La figure prend en compte ces deux cas pour chaque simulation..

3.8.1 Variation du rapport stœchiométrique

Contrairement à l'ionisation, pour les phonons, l'énergie perdue par les ions d'aluminium est négligeable par rapport à celle obtenue par les atomes de recul. Ceci est vrai quel que soit le taux de présence d'azote dans la structure.

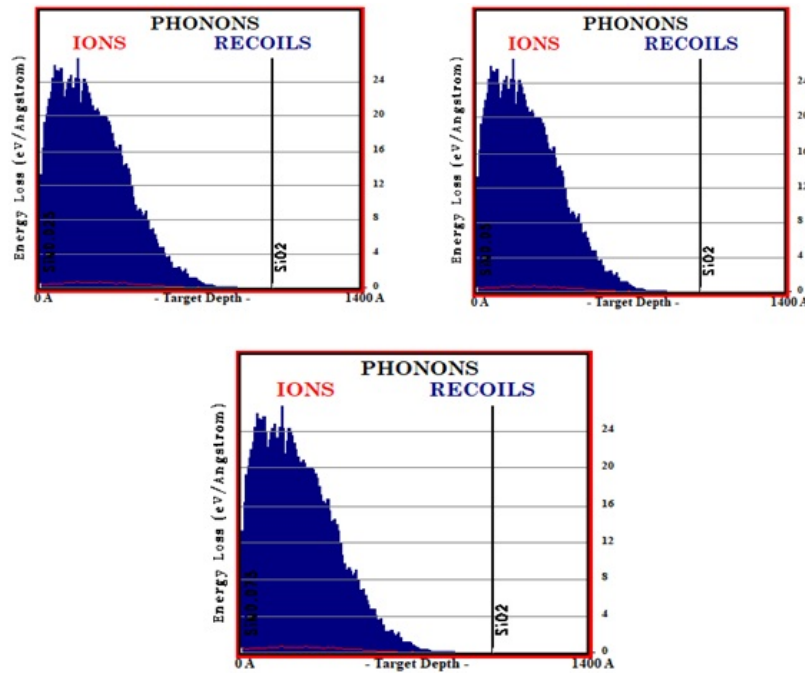


FIGURE 3.10 – : Perte d'énergie lors de la production des phonons dans la couche SiNx par les ions projectiles et les atomes de la cible d'aluminium : influence de la quantité d'azote.

Les distributions obtenues peuvent être approximées par des courbes gaussiennes centrées à une profondeur qui reflète au mieux l'effet maximal de la création des phonons sur l'implantation ionique. Dans ce modèle, une forte corrélation est observée entre la perte d'énergie et la concentration d'azote dans la cible, indépendamment de l'emplacement

3.8.2 Variation de l'énergie

En accord avec le profil représenté dans les figures 3.11, la perte d'énergie due aux ions d'aluminium est très faible par rapport à celle causée par les atomes de recul. Les distributions obtenues ont une forme approximativement gaussienne. La quantité maximale d'énergie perdue se situe à une profondeur moyenne pour chaque profil. L'énergie totale perdue dans ce cas est proportionnelle à l'énergie incidente. Cette résultat peut s'expliquer par une augmentation plus significative de l'élargissement de la distribution à mesure que l'énergie d'implantation augmente.

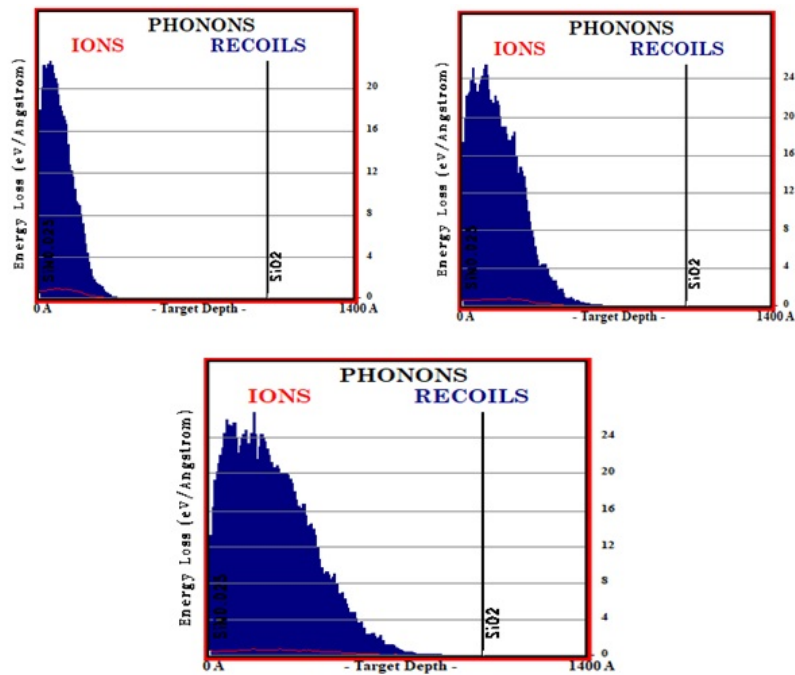


FIGURE 3.11 – Perte d'énergie lors de la production des phonons dans la couche $SiN_{0.025}$ par les ions projectiles et les atomes de la cible d'aluminium : Effet de la variation de l'énergie d'implantation : $E=5$ keV, $E=10$ keV, $E=15$ keV.

En résumé, les phonons sont toujours présents dans la première couche. Leur profondeur moyenne est inférieure à celle de la trajectoire moyenne des dopants (R_p). Le déplacement des profils lors de la variation de la quantité d'azote indique un ralentissement des ions d'aluminium en profondeur.

3.9 Simulation du pouvoir d'arrêt

Une simulation a été réalisée à l'aide du logiciel TRIM pour étudier l'effet de l'arrêt électronique et nucléaire, les taux de pulvérisation, ainsi que la quantité de défauts générés dans un matériau cible en fonction de sa profondeur [4,5] . Ce logiciel utilise la méthode de Monte-Carlo pour calculer les trajectoires des ions à l'intérieur du

matériau et fournit rapidement une estimation de la profondeur de l'implantation des ions. Cette simulation repose sur l'hypothèse de collisions binaires [6,7], où les ions n'interagissent qu'avec les atomes cibles sans prendre en compte les atomes voisins. De plus, le logiciel SRIM génère uniquement des défauts ponctuels lorsque les ions ont suffisamment d'énergie pour déplacer les atomes cibles, laissant des lacunes derrière eux. L'utilisateur doit entrer divers paramètres pour exécuter cette simulation, et le choix de ces paramètres est crucial pour se rapprocher au mieux des conditions réelles. Dans une étude particulière, un matériau cible en silicium avec une fine couche d'oxyde de silicium a été choisi. La qualité de cette couche d'oxyde dépend de la qualité du substrat en silicium, en particulier de sa surface. Des procédures de nettoyage sont mises en œuvre pour assurer une surface lisse avant l'oxydation. Le nombre d'ions utilisés dépend de l'objectif de la dopage, avec 10 000 ions utilisés dans cet exemple. Enfin, l'orientation du matériau cible par rapport au faisceau d'ions est importante, avec un angle de 0 degré couramment utilisé. Il convient de noter que le logiciel SRIM ne prend en compte que les matériaux amorphes.

3.9.1 Pouvoirs d'arrêt d'aluminium dans la structure SiN_x/SiO_2

Dans le contexte de l'implantation ionique, il est essentiel d'étudier les capacités d'arrêt de toutes les particules, indépendamment de la structure utilisée. Ces capacités d'arrêt reflètent les pertes d'énergie résultant des différentes interactions lors de l'exposition au faisceau d'irradiation. Ces interactions peuvent être nucléaires (avec les noyaux du matériau) ou électroniques (via la contribution des électrons de l'atome cible). Notre étude se limite à une plage d'énergie restreinte, comprise entre 10 et 15 keV, par rapport à la large gamme d'énergies utilisées en implantation ionique. Les pertes d'énergie sont calculées en fonction de l'unité de longueur (Å). La figure 3.12 illustre les résultats de simulations effectuées à l'aide du code TRIM, portant sur les pouvoirs d'arrêt de l'aluminium dans le silicium dopé à l'azote en fonction de l'énergie d'implantation, pour une concentration de 25 % d'azote dans le silicium.

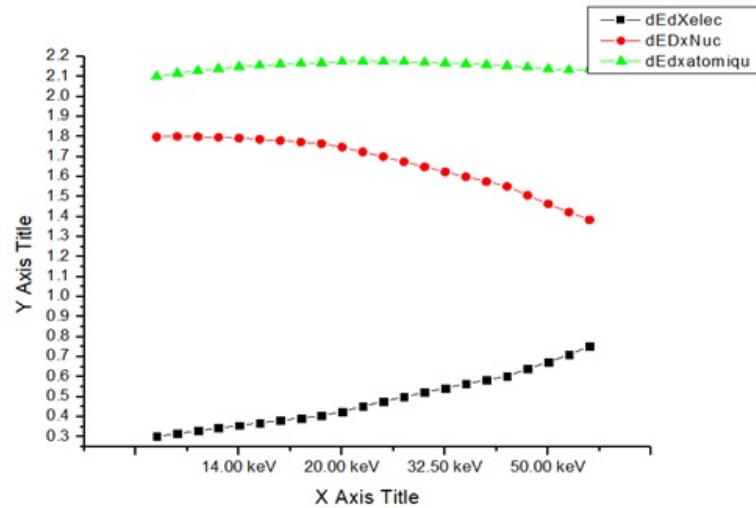


FIGURE 3.12 – Simulation des pouvoirs d’arrêt nucléaire et électronique d’aluminium dans la cible SiN_{0.01}/SiO₂ , en fonction de l’énergie incidente des ions

La figure 3.12 illustre les résultats de simulations effectuées à l’aide du code TRIM, portant sur les pouvoirs d’arrêt de l’aluminium dans le silicium dopé à l’azote en fonction de l’énergie d’implantation, pour une concentration de 25 % d’azote dans le silicium.

3.10 Conclusion

Tout au long de ce chapitre, nous avons examiné l’impact de la composition chimique de la cible et de l’énergie d’implantation sur les profils d’implantation de l’aluminium dans le silicium dopé à l’azote. Pour ce faire, nous avons simulé divers effets résultant de l’implantation ionique. Les résultats ont montré qu’il est possible d’exprimer le ralentissement de l’aluminium dû à la présence d’azote dans le silicium en utilisant le code TRIM. En effet, nous avons modélisé ce phénomène, qui est largement observé expérimentalement, en supposant un désordre plus important dans les cibles ayant une concentration plus élevée d’azote. Dans l’ensemble, les résultats de la simulation montrent qu’un choix judicieux des quantités d’azote et de l’énergie d’implantation permet d’ajuster la profondeur de pénétration de l’aluminium en fonction de l’application souhaitée.

Bibliography

- [1] A. FopahLele, Etudes des nano-cavites en vue de la réalisation des matériaux alternatifs à base de semi-conducteurs. mémoire Master , Université de Yaoundé (2009).
- [2] F. Zeigler, J.P. Beirsack, U. Littman, 1985, The Stopping and Range of Ions in Solids, Pergamon Press, New York, version 2013
- [3] P-Alain . Patard, Outils numériques pour la simulation Monte Carlo des produits dérivés complexes. Université de Lyon, France (2007)
- [5] F. Zeigler, J.P. Beirsack, U. Littman, 1985, The Stopping and Range of Ions in Solids, Pergamon Press, New York, version 2013
- [6] P-Alain . Patard, Outils numériques pour la simulation Monte Carlo des produits dérivés complexes. Université de Lyon, France (2007)
- [7] Y. Maneglia, analyse en profondeur des défauts de l'interface Si-SiO₂ par la technique du pompage de charges. thèse de doctorat, université de Grenoble France (1992)

المخلص

توجد عدة طرق لتطعيم المواد الشبه الموصلة، منها التطعيم عبر التحويل النووي، والتطعيم باستخدام تقنية الليزر، والتطعيم عن طريق قذف الأيونات. ومن بين هذه الطرق، يُعتبر التطعيم بواسطة قذف الأيونات وإدخالها في المادة هو الأكثر تطورًا واستخدامًا حاليًا.

يمكن محاكاة هذه التقنية الأخيرة باستخدام برنامج نقل ومدى الأيونات في المادة اسمه (TRIM)

الذي تم تطويره بواسطة Ziegler

في هذا السياق، تمت دراسة التطعيم النوعي باستخدام الألمنيوم كعنصر تطعيم

من نتائج المحاكاة، تمت دراسة العديد من المعاملات ذات الصلة بعملية التطعيم، وتشمل هذه المعاملات حساب تركيز العنصر المُطعم في المادة، وفقدان الطاقة للأيونات أثناء تحركها داخل المصفوفة البلورية للمادة، وطاقات الأيونات الارتجاعية، والتفاعل بين الأيونات والأيونات المبعثرة، والفونونات.

تم أيضًا دراسة تغيرات هذه المعاملات بناءً على نتائج المحاكاة، مما يساهم في فهم عملية التطعيم بشكل أفضل ويسهم في تحسينها.

RESUME

Il existe plusieurs méthodes pour le dopage des matériaux semi-conducteurs, notamment le dopage par conversion nucléaire, le dopage au laser, et le dopage par bombardement ionique. Parmi ces méthodes, le dopage par bombardement ionique suivi de l'incorporation des ions dans le matériau est actuellement la méthode la plus avancée et couramment utilisée.

Cette technique peut être simulée à l'aide du logiciel Transport and Range of Ions in Mater (TRIM) développé par Ziegler. Dans ce contexte, le dopage de type spécifique en utilisant l'aluminium comme élément dopant a été étudié.

Les résultats de la simulation ont permis d'étudier plusieurs paramètres liés au processus de dopage, notamment le calcul de la concentration de l'élément dopant dans le matériau, la perte d'énergie des ions lors de leur déplacement dans la matrice cristalline du matériau, les énergies de rétrodiffusion des ions, les interactions entre les ions et les ions dispersés, ainsi que les phonons.

De plus, des variations de ces paramètres ont été analysées en fonction des résultats de la simulation, contribuant ainsi à une meilleure compréhension du processus de dopage et à son amélioration.

ABSTRACT

There are several methods for doping semiconductor materials, including nuclear conversion doping, laser doping, and ion implantation doping. Among these methods, ion implantation followed by the incorporation of ions into the material is currently the most advanced and commonly used technique.

This technique can be simulated using the Transport and Range of Ions in Mater (TRIM) software developed by Ziegler. In this context, type-specific doping using aluminum as the dopant element was studied.

The simulation results have allowed for the investigation of various parameters related to the doping process, including the calculation of the dopant element's concentration within the material, the energy loss of ions as they move within the crystalline matrix of the material, ion backscattering energies, interactions between ions and scattered ions, as well as phonons.

Furthermore, variations in these parameters have been analyzed based on the simulation results, contributing to a better understanding of the doping process and its improvement.
