

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DE Technologie
DEPARTEMENT Electronique

N° :



FILIÈRE : Electronique
OPTION : MICRO ELECTRONIQUE

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par :

CHOUTLA Aicha

LOUGLITI Randa

THÈME

Contribution à l'amélioration de la résolution en
profondeur de l'analyse SIMS

Soutenu devant le jury composé de :

Pr. MEZACHE Amar	Université M ^{ed} Boudiaf –M'sila	Président
Pr. OUDIRA Houcine	Université M ^{ed} Boudiaf –M'sila	Rapporteur
Dr. BOURAS Mounir	Université M ^{ed} Boudiaf –M'sila	Examineur

Année universitaire : 2021 /2022

Remerciements

*Avant tout, nous remercions Allah le tout puissant
qui nous a donné la force pour réaliser ce travail. à exprimer nos
remerciements les plus sincères
à nos encadreurs **Prof. Oudira Houcine**
pour nous suivre à travers notre travail de mémoire, pour ses conseils
précieux et la compétence
de son encadrement.*

*Nos remerciements s'adressent également à tous les membres de Jury,
qui ont accepté de nous honorer, de leur présence et de juger notre
travail.*

*Nous remercions tous ceux qui de près ou de loin nous ont
Aidés à la réalisation de ce travail. Egalement tous nos amis avec qui
nous avons divisé tant de
Moments de la vie, et qui nous a aidés à croiser Certains essais au
cours de cette période.*



Dédicaces

Je dédie ce modeste travail

A mes parents

A mes chères sœurs Rania, rahef, radia et Raouf , et toute ma famille

A tous mes amis surtout Aicha

A tous mes collègues sans exception et à toutes les promos 2022

Surtout mécro électronique.



-Loughliti Randa-

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail

A mes parents

A mes chères sœurs Nassira, Hadjira et ses enfants, Barkahoum, Rabiha, Rahma ,Abir et à Ahmed, Ali et Saad et ses fils, Oncle Massoud et ses enfants, Ma tante Fatna et ses enfants, Oncle Belkacem et ses fils, Ma tante Erbiha et ses enfants et toute ma famille A tous mes amis surtout Randa

A tous mes collègues sans exception et à toutes les promos 2022

Surtout mécro électronique.



-Choutla Aicha-

RESUME

Résumé

La spectrométrie de masse des ions secondaires (SIMS) est une importante technique pour la réalisation des profils en profondeur. Cependant les développements SIMS ne sont pas aussi prononcés et rapides que ceux des techniques de fabrication de la microélectronique. De plus, l'analyse SIMS, de par son principe, implique un élargissement et décalage des profils mesurés vers la surface. Ce travail est consacré à l'amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS au moyen d'une technique de déconvolution. La déconvolution des profils SIMS est un problème inverse mal posé. La présence de bruit dans la mesure complique les calculs, et il faut prendre certaines précautions pour obtenir une solution acceptable. L'objectif est de premièrement régulariser le problème mal posé. Ceci peut être réalisé par l'utilisation d'une technique itérative. De plus, il faut appliquer des contraintes dures pour forcer la solution obtenue à satisfaire les propriétés physiques connues auparavant sur les mesures comme la positivité. Les résultats obtenus des profils déconvolués nous ont montré une amélioration très satisfaisante de la résolution en profondeur, le décalage et l'élargissement des profils sont corrigés.

Mots-clés : SIMS, profils en profondeur, microélectronique, résolution en profondeur, déconvolution, semi-convergence.

Abstract :

Secondary ion mass spectrometry (SIMS) is an important technique for performing depth resolution. However, SIMS developments are not as pronounced and rapid as those of microelectronics manufacturing techniques. Moreover, the SIMS analysis, by its principle, implies a widening and a shift of the measured profiles towards the surface. This work is devoted to improving the depth resolution of SIMS analysis by means of a deconvolution technique. The deconvolution of SIMS profiles is a not well-posed inverse problem. The presence of noise in the measurement complicates the calculations, and certain precautions must be taken to obtain an acceptable solution. The objective is to first regularize the not well-posed problem. This can be achieved by using an iterative technique. In addition, hard constraints must be applied to force the resulting solution to satisfy previously known physical properties on the measurements such as positivity. The results obtained from the deconvoluted profiles showed us a very satisfactory improvement in the depth resolution; moreover the shift and the widening of the profiles are corrected.

Keywords: SIMS, depth profiles, microelectronics, depth resolution, deconvolution, semi-convergence.

ملخص :

يعتبر مقياس الطيف الكتلي الأيوني الثانوي (SIMS) تقنية مهمة الاداء التنميط العمق ومع ذلك . ومع ذلك , فان تطورات SIMS ليست واضحة وسريعة مثل تلك الخاصة بتقنيات الالكترونيات الدقيقة . بالإضافة الى ذلك , يتضمن تحليل SIMS , من حيث المبدأ , توسيع وتحويل الملامح المقاسة نحو السطح . هذا العمل مكرس لتحسين دقة العمق لتحليل SIMS عن طريق تقنية **déconvolution**. يعتبر تفكيك ملفات تعريف SIMS مشكلة عكسية غير صحيحة . يؤدي وجود ضوضاء في القياس الى تعقيد العمليات الحسابية , ويجب اتخاذ احتياطات معينة للحصول على حل مقبول . الهدف هو اولا تسوية المشكلة غير المطروحة يمكن تحقيق Ci باستخدام تقنية تكرارية . بالإضافة الى ذلك . يجب على المرء ان يطبق قيودا صارمة لإجبار الحل الذي الحصول عليه على تلبية الخصائص الفيزيائية المعروفة سابقا في المقاييس مثل الايجابية . اظهرت النتائج التي تم الحصول عليها من الملفات التعريف المتفككة تحسنا مرضيا للغاية في الدقة في العمق , والإزاحة وتوسيع الملامح

الكلمات المفتاحية : SIMS . ملامح العمق , الالكترونيات الدقيقة , دقة العمق .

Liste de notations et symboles

SIMS : Spectrométrie de Masse des Ions Secondaires.

MRI : Modèle de Hoffman (Mixing-Roughness-Information).

DRF : Fonction de résolution en profondeur (Depth Resolution Function).

RSF : Facteur de sensibilité relatif.

FWHM : Full Width at Half Maximum.

n_T : Nombre d'atomes éjectés.

Y_k : Taux de pulvérisation de l'espèce k.

Y_T : Taux de pulvérisation total.

R_p : Profondeur d'échappement (Å)

I_p : Intensité primaire (cps/s).

λ_d : La décroissance exponentielle (Å).

λ_u : La montée exponentielle (Å).

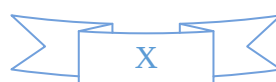
σ_g : L'écart-type (Å).

n_{opt} : Nombre D'itérations.

α : Paramètre de régularisation.

Liste des figures

Figure (I-1): Schéma de principe de l'analyse par SIMS.....	6
Figure(I-2): Schéma de l'analyseur ionique CAMECA IMS6f.....	8
Figure(I-3): Shéma montrant l'élargissement et le décalge des profils après leurs analyse par SIMS A) Delta dopage B) profil rectangulaire (créneau.)	15
Figure(II-1): principe du mixage collisionnel.....	21
Figure (II-2): Définition de la résolution en profondeur à partir d'une interface abrupte.....	22
Figure (II-3): Evaluation de la résolution en profondeur à partir du profil mesuré d'un delta- dopage.....	23
Figure (II-4): Dessin schématisant l'obtention de la DRF à partir de la convolution d'un double exponentiel avec une fonction gaussienne.....	27
Figure(II-5): Procédure de simulation sous MATLAB.....	32
Figure(II-6): DRF analytique du modèle MRI tracé pour : $W = 2.3nm$, $\sigma = 1.4nm$, $\lambda =$ $0.3nm$, $z_0 = nm$ et $z_i = 0nm$	33
Figure(II-7): simulation d'un profil gaussien de $\sigma=12nm$.A)SNR=30dB.B)SNR=40 dB.	34
Figure(II-8): Simulation d'un profil gaussien de $\sigma=22.5nm$. A)SNR=30 dB. B)SNR=40 dB.	35
Figure(II-9): Simulation d'un profil créneau de $\sigma=12nm$.A)SNR=30dB. B)SNR=40dB.	36
Figure(II-10): Simulation d'un profil créneau de $\sigma=22.5nm$.A)SNR=30 dB. B)SNR=40dB.	37



Figure(II-11): Simulation d'un profil delta-dopage de $\sigma=22.5\text{nm}$ A) SNR=30dB.	
B) SNR=40 dB.....	38
Figure(III-1): Organigramme de déconvolution.....	49
Figure (III-2): Comportement de semi-convergence.....	50
Figure (III-3): Déconvolution d'un profil gaussien de $\sigma = 12 \text{ nm}$. A) SNR = 30 dB.	
B) SNR = 40 dB.....	51
Figure (III-4): Déconvolution d'un profil gaussien de $\sigma=12\text{nm}$., A) SNR = 30 dB.	
B) SNR = 40 dB.....	52
Figure(III-5): Déconvolution d'un profil gaussien de $\sigma=22.5\text{nm}$., A) SNR = 30 dB.	
B) SNR = 40 dB.....	53
Figure (III-6): Evolution de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itérations. Cas du profil gaussien.....	54
Figure (III-7): Déconvolution d'un profil créneaux de $\sigma = 12 \text{ nm}$. A) SNR = 30 dB.	
B) SNR = 40 dB.....	55
Figure (III-8): Déconvolution d'un profil créneaux de $\sigma = 12 \text{ nm}$. A) SNR = 30 dB.	
B) SNR = 40 dB.....	56
Figure (III-9): Déconvolution d'un profil créneaux de $\sigma = 22.5 \text{ nm}$. A) SNR = 30 dB.	
B) SNR = 40 dB.....	57
Figure (III-10): Evolution de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itération. Cas du profil créneau.....	58
Figure (III-11): Déconvolution d'un profil delta-dopage de $\sigma = 22.5 \text{ nm}$. A) SNR = 30 dB.	
B) SNR = 40 dB.....	59
Figure (III-12): Evolution de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itérations. Cas d'un profil delta dopage.....	60

Liste des tableaux

Tableau (III-1): Nombre optimal des iterations n_{opt} . Cas des profil gaussiens.....	51
Tableau (III-2): Nombre optimal des iterations n_{opt} . Cas des profils créneaux.....	55

SOMMAIRE

SOMMAIRE

Remerciements.....	II
Dédicaces.....	III
Résumé.....	VI
Liste de notations et symboles.....	IX
Liste des figures.....	X
Liste des tableaux.....	XII
Sommaire.....	XIV
INTRODUCTION GENERALE.....	2

Chapitre I: Généralités sur l'analyse SIMS

I.1. INTRODUCTION.....	5
I.2. SPECTROMETRIE DE MASSE D'IONS SECONDAIRES SIMS.....	5
I.2.1. Principe.....	5
I.2.2. Les possibilités et les performances de la technique.....	6
I.2.3. Description de l'analyseur ionique.....	7
I.3. CARACTERISTIQUES GENERALES.....	9
I.3.1. Une analyse élémentaire ou isotopique.....	9
I.3.2. Analyse de surface.....	9
I.3.3. Analyse en profondeur.....	10
I.3.3.1. Relation Temps-Profondeur.....	10
I.3.3.2. Relation Intensité-Concentration.....	10
I.3.4. Analyse en masse.....	10
I.3.4.1. Analyse en masse.....	11
I.3.4.2. Type moyenne résolution.....	11

I.3.4.3. Type haut résolution.....	11
I.4. DIFFERENTS TYPES D'ANALYSE	11
I.4.1. Spectrométrie de masse.....	11
I.4.2. Imagerie ionique et SIMS statique.....	11
I.4.3. Profil en profondeur et SIMS dynamique.....	11
I.4.3.1. Dynamique du signal.....	12
I.4.3.2. Sensibilité.....	12
I.4.3.3. Résolution en profondeur.....	12
I.5. DIFFERENTS PROCESSUS DE L'ANALYSE SIMS.....	12
I.5.1. Le taux de pulvérisation.....	12
I.5.2. Le taux d'ionisation.....	13
I.5.3. Le facteur de transmission.....	13
I.5.4. L'équation ionique SIMS.....	14
I.6. LE BRUIT DANS L'ANALYSE SIMS.....	14
I.7. LES LIMITES DE LA TECHNIQUE SIMS.....	15
I.8.AMELIORATION DE LA RESOLUTION EN PROFONDEUR PAR DECONVOLUTION	16
I.9. CONCLUSION.....	16

Chapitre II: Analyse et Simulation des profils SIMS

II.1. INTRODUCTION.....	18
II.2. RAPPEL SUR LA CONVOLUTION.....	18
II.2.1 Définition.....	18
II.3. RESOLUTION EN PROFONDEUR.....	18

II.3.1. Définition.....	18
II.3.2. Profil en profondeur.....	19
II.3.3. Les mécanismes essentiels gouvernant la résolution en profondeur.....	19
II.3.3.1. Le mixage collisionne.....	20
II.3.3.2. Développement de rugosité.....	21
II.3.4. Evaluation de la résolution en profondeur.....	21
II.3.4.1. Evaluation par front montant ou descendant.....	21
II.3.4.2. Evaluation sur un delta-dopage.....	23
II.3.5. La fonction de résolution en profondeur (la réponse impulsionnelle en SIMS)...	24
II.3.5.1. modélisation de la RDF.....	25
II.4. BRUIT SIMS.....	28
II.4.1. Différents types de bruit.....	28
II.4.1.1. Caractéristiques fréquentielles d'un bruit.....	28
II.4.1.2. Caractéristiques probabilistes d'un bruit.....	29
II.5. SIGNAUX-TYPES UTILISES POUR LES SIMULATIONS.....	30
II.5.1. Gaussienne.....	30
II.5.2. Créneau.....	30
II.5.3. Delta-Dopage.....	30
II.6. PROCEDURE DE SIMILATION.....	30
II.7. SIMULATION DES PROFILS SIMS.....	33
II.8. CONCLUSION.....	39

Chapitre III :Déconvolution des profils simulés

III.1. INTRODUCTION.....	41
III.2. GENERALITES SUR LA DECONVOLUTION.....	41

III.2.1. Définitions.....	41
III.2.2. La déconvolution : un problème inverse mal posé.....	42
III.2.3. Solution du problème de déconvolution par la méthode des moindres Carrés.....	43
III.2.4. Régularisation d'un problème mal posé.....	44
III.2.4.1. Introduction à la régularisation.....	44
III.2.4.2. Formulation générale de la régularisation.....	45
III.2.5. Contraintes dures appliquées à un signal.....	46
III.2.6. Méthode de déconvolution en SIMS sans terme de régularisation.....	46
III.2.7. Calcul des erreurs.....	48
III.2.7.1. Erreur vraie.....	48
III.2.7.2. Erreur de reconstruction.....	48
III.3. PROCEDURE DE DECONVOLUTION.....	49
III.4. DECONVOLUTION DES PROFILS SIMULES.....	50
III.4.1. semi-convergence.....	50
III.5. CONCLUSION.....	61
CONCLUSION GENERALE.....	63
REFERENCES.....	66

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

La miniaturisation des dimensions des dispositifs de la microélectronique nécessite l'appel à la technologie des couches minces et ultra minces pour leur réalisation. Mais l'efficacité de ces dispositifs est fortement liée aux techniques de caractérisation accompagnant ces réalisations. Parmi ces techniques, nous citons la spectrométrie de masse des ions secondaires (SIMS). Elle s'agit d'une importante technique pour la caractérisation des couches atomiques minces et aiguës à la profondeur nanométrique. Le proche avenir exigera une résolution en profondeur en nm ou même sous-nm, c'est-à-dire la capacité de distinguer entre des caractéristiques adjacentes dans un profil de concentration qui sont séparées par 1 nm ou moins [1,7].

Les développements de la technique d'analyse par SIMS ne sont pas aussi prononcés et rapides que ceux des techniques de fabrication de matériaux en microélectronique. Additionnant à cet effet que la mesure SIMS, de par son principe, implique un élargissement des profils mesurés même en utilisant les appareils les plus précis et dans les meilleures conditions expérimentales.

Pour progresser dans ce domaine, il est nécessaire de dépasser les résultats expérimentaux bruts en incluant les techniques numériques de traitement du signal. Tout en ayant à l'esprit que ces traitements ne doivent en aucun cas altérer l'information contenue dans le profil mesuré et que les temps de traitement doivent rester raisonnables.

Dans ce contexte, le présent travail est consacré à l'étude et la simulation des profils en profondeur de l'analyse SIMS. La procédure de simulation est très simple. Elle consiste à convoluer le profil réel considéré par la fonction de résolution en profondeur (DRF) et additionné ensuite une composante de bruit. La simulation a été faite à haute énergie. Ceci conduit à l'utilisation des algorithmes de correction pour améliorer la résolution en profondeur de l'analyse SIMS. L'intérêt des profils simulés dans ce cas est la vérification des performances de ces algorithmes.

Le reste du mémoire est organisé comme suit :

Le premier chapitre de ce travail décrit tout d'abord les principaux organes de l'analyseur ionique, il sera consacré à la description de la technique SIMS. Nous allons présenter donc le principe de cette technique, ses caractéristiques générales, ces performances et ces limites. Nous donnerons aussi une description de l'analyseur ionique.

Pour le deuxième chapitre on expliquant les mécanismes intervenant dans la formation du profil en profondeur. Nous nous attacherons en particulier aux caractéristiques de l'analyse par ions primaires oxygène, largement utilisés en SIMS. Cela nous amènera à définir la résolution en profondeur ainsi que la réponse impulsionnelle du système d'analyse, appelée fonction de résolution en profondeur, ou depth resolution Function (DRF). En suite nous allons exposer la procédure utilisée pour la simulation des signaux SIMS. Nous allons voir ensuite l'application de cette procédure. L'étude de différents profils permettra en particulier de définir les conditions opératoires que nous utiliserons en fonction des types de profils expérimentaux possibles.

Le troisième chapitre présente les principes de la déconvolution, nous nous attacherons en particulier à son application en SIMS. Nous passerons ensuite en revue différentes méthodes de déconvolution, et nous terminerons par la présentation d'un nouvel algorithme dans le domaine de l'analyse SIMS. les performances et les limites de la technique proposée sont évaluées en détail. Ceci est rendu possible grâce à l'utilisation des profils SIMS simulés par nous-mêmes. Nous définirons ensuite des critères d'arrêt pour cette méthode.

Nous conclurons enfin par un bilan du travail effectué et les perspectives dans ce domaine.

Chapitre I

Généralités sur l'analyse SIMS

I.1. INTRODUCTION

Les développements récents des circuits intégrés à base de silicium conduisent à contrôler des jonctions très peu profondes par implantation de dopants à très faible énergie (quelques dizaines d'électrons-volts). Cependant les développements de l'instrumentation SIMS ne sont pas aussi prononcés et rapides que ceux des techniques de fabrication des matériaux de la microélectronique moderne ce qui motive l'amélioration de l'analyse et la recherche d'une information de plus en plus précise sur les structures extrêmes (deltas dopage, interfaces abruptes, très faibles concentrations...).

Ce premier chapitre sera consacré à la description de la technique SIMS. Dans ce chapitre, nous présenterons donc le principe de cette technique, ses caractéristiques générales, ces performances et ces limites. Nous donnerons aussi une description de l'analyseur ionique. Enfin, nous conclurons sur la problématique de l'application de l'analyse SIMS à la caractérisation des matériaux de la microélectronique moderne.

I.2. SPECTROMETRIE DE MASSE D'IONS SECONDAIRES SIMS

I.2.1. Principe

L'analyse SIMS est une méthode de caractérisation chimique destructive. Elle consiste à bombarder la surface d'une cible (échantillon à analyser) par un faisceau d'ions dit primaires, émis par une source. Le fonctionnement du SIMS repose sur le régime des cascades linéaires où, sous l'effet de l'impact des ions incidents, les atomes de la cible possèdent suffisamment d'énergie pour engendrer des sous cascades avec les autres atomes du matériau [8].

Une pulvérisation est ainsi induite lors du bombardement primaire et des collisions avec la surface. Si le bombardement est maintenu, l'échantillon sera alors érodé progressivement et

très

lentement.

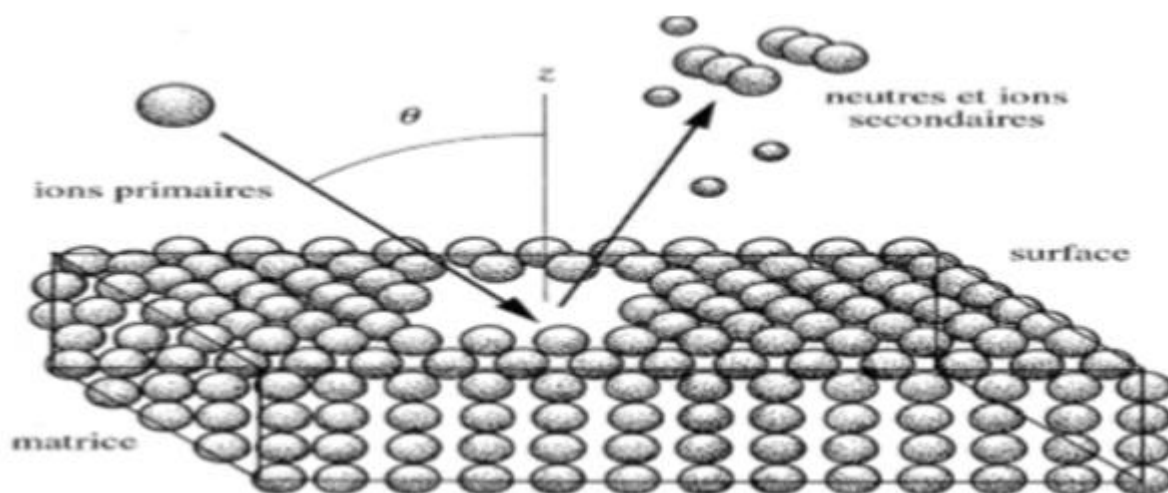


Figure (I-1) : Schéma de principe de l'analyse par SIMS.

Le bombardement continu génère alors l'émission d'espèces secondaires diverses (Figure I.1) électrons, photons, atomes et molécules neutres, ions mono et poly atomiques.

L'information recherchée pour l'analyse SIMS est contenue dans les ions secondaires qui peuvent être des ions primaires rétrodiffusés ou issus de la cible, voire une combinaison des deux; Ils sont accélérés par une tension d'extraction, triés en énergie grâce à un champ électrostatique puis triés en masse par un champ magnétique, et enfin comptés.

I.2.2. Les possibilités et les performances de la technique

L'analyse SIMS permet la détection et la mesure de n'importe quel élément de la classification périodique dans une matrice donnée. La sensibilité est de l'ordre du ppm pour la plupart des éléments, voire du ppb. C'est donc une technique d'analyse très bien adaptée aux semi-conducteurs, qui sont maintenant dopés avec des concentrations très faibles ou très fortes sur des épaisseurs toujours plus petites. C'est une analyse dite « semi-quantitative », car on a besoin d'une mesure de référence pour comparer les concentrations réelles et mesurées. La résolution est de l'ordre du μm latéralement, et du nm en profondeur. On peut ainsi aisément obtenir une image ionique d'une surface ou un profil en profondeur de la concentration d'une espèce dans une matrice. La résolution en masse de la technique est tout aussi performante, puisqu'on peut discriminer deux éléments de même masse nominale mais distantes de $\Delta M/M$ de l'ordre de 10^{-4} .

I.2.3. Description de l'analyseur ionique

Il existe plusieurs types d'analyseurs ioniques, chacune présente ses propres avantages et inconvénients. Le choix de l'un ou de l'autre de ces instruments sera fonction de l'utilisation principale qu'on désire en faire.

Le schéma de principe de l'analyseur ionique La figure (I-2) représente le schéma de principe de l'analyseur ionique CAMECA IMS4/5/6f. On peut distinguer cinq parties importantes :

- La colonne d'ions primaires : elle produit sur l'échantillon à analyser une sonde d'ions primaires. La colonne primaire peut être équipée de deux sources, produisant respectivement des ions d'éléments chimiques électronégatifs (Oxygène) ou électropositifs (Césium). Les ions primaires sont transportés de la source à l'échantillon grâce à une optique de transfert ionique.
- La colonne secondaire : elle amène les ions secondaires de l'échantillon au système de tri.
- Le secteur électrostatique trie les ions secondaires en énergie. A la sortie de ce secteur, on peut discriminer les ions monoatomiques des ions polyatomiques.
- Le secteur magnétique trie en masse les ions sortis du secteur électrostatique.
- Le système de détection des ions secondaires (une cage de Faraday pour les forts courants ioniques et un multiplicateur d'électrons pour des faibles intensités)

Le lecteur intéressé par plus des détails pourra consulter les références [9, 10,11].

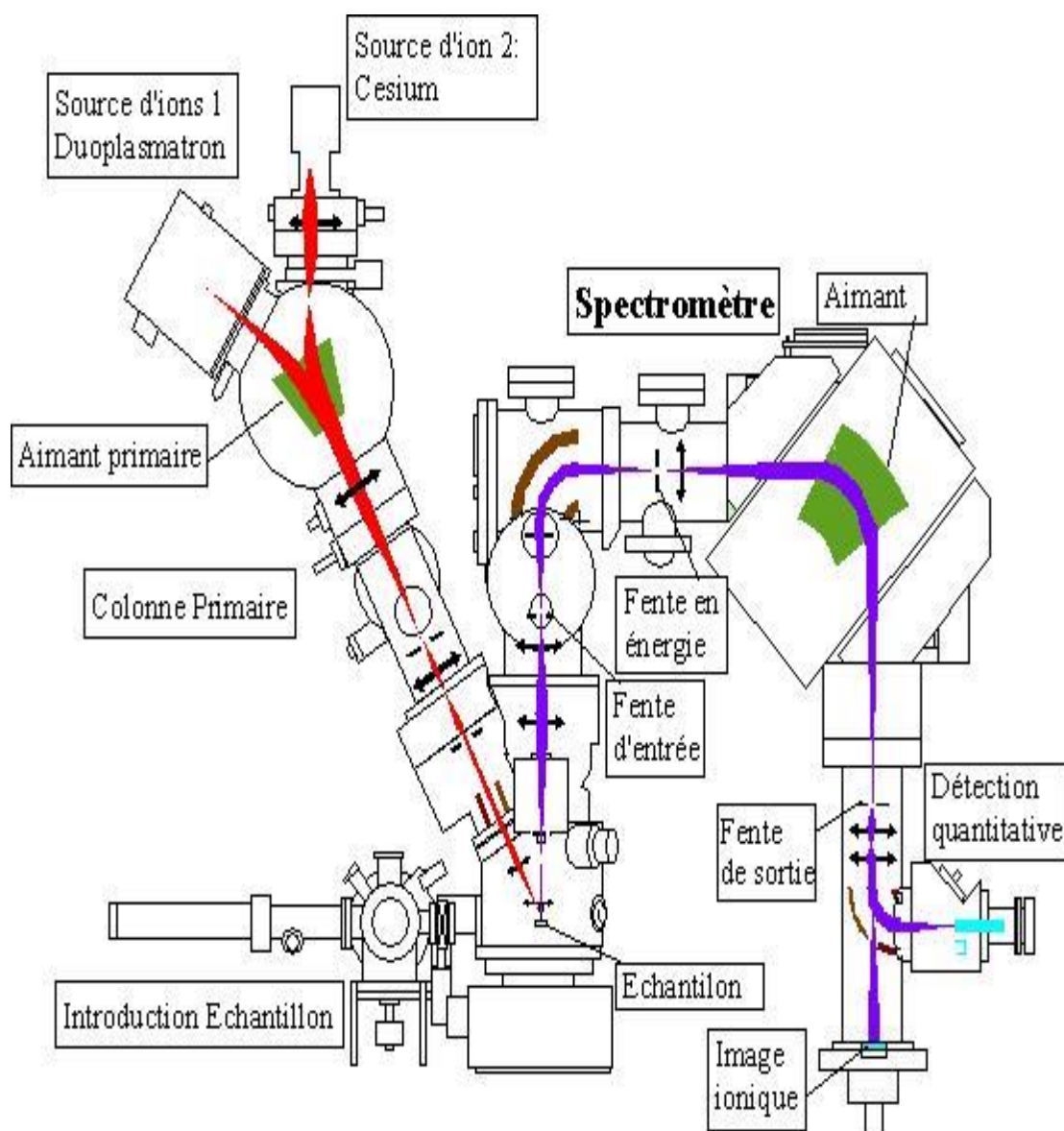


Figure (I-2) : Schéma de l'analyseur ionique CAMECA IMS 6f

Source d'ions primaires.

Les ions primaires utilisés habituellement en analyse SIMS peuvent être des ions d'Oxygène ou de Césium, mais on peut aussi prendre d'autres types d'ions comme l'Azote (N_2^{++}) ou le Xénon (Xe^+).

Une source d'oxygène peut produire des ions O^+ , O^- , O_2^+ , et O_2^- . C'est un duoplasmatron à cathode froide qui les crée, ce qui permet, en changeant la bouteille d'oxygène par une bouteille d'argon, d'obtenir des ions Ar^+ , également employés en SIMS. L'utilisation extensive d'ions O_2^+ tient au fait que le faisceau d'oxygène est réactif et provoque une modification de la composition des premières couches atomiques de la cible. Cette modification se traduit principalement par une augmentation du taux d'ionisation des éléments

électropositifs qui améliore fortement la dynamique du signal (le nombre de décade entre le maximum et le minimum du signal).

L'analyse par SIMS des éléments de la microélectronique (Arsenic, phosphore...) peut être également conduite sous faisceau de césium. Les ions Cs^- sont obtenus à partir d'un composé solide et non gazeux comme dans le cas du duoplasmatron.

Le bombardement par des ions Cs^+ exalte l'émission ionique secondaire des éléments électro négatifs. Leur utilisation connaît un regain d'intérêt grâce à ses vertus dans le domaine de la quantification des profils en profondeur. Dans certains cas, l'utilisation des ions en détection MCs^+ , où M est l'espèce étudiée, minimise les effets de matrice (le rendement d'ionisation d'un élément peut varier de plusieurs ordres de grandeur d'une matrice à l'autre), qui handicape la quantification des profils SIMS [12]. Les ions en détection MCs_2^+ sont aussi utilisés et présentent des avantages par rapport à MCs^+ [13, 14].

I.3. CARACTERISTIQUES GENERALES

I.3.1. Une analyse élémentaire ou isotopique

L'analyse se fait par spectrométrie de masse: toutes les espèces sont détectables de l'hydrogène (H) à l'uranium (U). On peut également réaliser des analyses isotopiques.

Il s'agit d'une méthode très sensible car contrairement aux techniques spectroscopiques, la détection des ions ne s'accompagne ni de rayonnement parasites, ni de fond continu. La sensibilité est de l'ordre du ppm pour beaucoup d'éléments, et même du ppb dans certains cas (Bore). C'est donc une technique très bien adaptée au domaine des semi-conducteurs où la détection de dopants, donc d'éléments présents en faible concentration dans une matrice donnée, est cruciale. La résolution en masse de la technique est tout aussi performante : on arrive à des pouvoirs de séparation ($M/\Delta M$) supérieurs à 10^4

I.3.2. Analyse de surface

La profondeur d'échappement des ions secondaires ne dépasse pas les trois premières couches atomiques sous la surface de l'échantillon. On peut donc obtenir des images ioniques de la surface, en balayant le faisceau primaire sur celle-ci. La résolution latérale est généralement meilleure que le μm .

I.3.3. Analyse en profondeur

Il s'agit de la collection des ions secondaires en fonction du temps pour obtenir le profil de concentration en profondeur. Ce dernier est donc un découpage plan par plan du volume de l'échantillon couplé à une mesure dans chaque plan de concentration de l'espace voulu. C'est un aspect très important qui se place au centre de notre travail.

I.3.3.1. Relation Temps-Profondeur

Moyennant l'hypothèse de vitesse d'érosion constante, la conversion temps d'analyse-profondeur peut être faite en mesurant la profondeur du cratère final au moyen d'un profilomètre. La calibration en profondeur peut être aussi faite au moyen d'un étalon de profondeur (une structure multi-deltas par exemple). Dans ce dernier cas, on peut déterminer la vitesse d'érosion pour un réglage de l'appareil donné, et l'on pourra l'utiliser pour calibrer le profil d'intérêt acquis dans les mêmes conditions d'analyse [15].

I.3.3.2. Relation Intensité-Concentration

Comme il n'existe pas de modèles théoriques fiables pour estimer la constante de proportionnalité entre intensité ionique et concentration, pour faire la conversion intensité concentration, on fait généralement usage d'un échantillon étalon (de dose connue) analysé dans les mêmes conditions que l'échantillon considéré.

I.3.4. Analyse en masse

Il est possible de faire une analyse en masse des ions secondaires de l'échantillon étudié sur un large spectre de masse, on distingue donc tout d'abord tous les ions simples relatifs au substrat avec des intensités dépendant de la composition mais aussi des différents taux d'ionisation et comportant tous les isotopes. Il apparaît également un grand nombre d'ions moléculaires formé à partir des atomes du substrat et des combinaisons ions primaire- substrat, ou encore des ions relatifs au gaz rares absorbés, simple ou combiné avec le substrat.

L'interprétation des spectres de masses est en général compliquée et le résultat est plutôt de type qualitatif. Trois types d'analyse en masse sont possibles :

I.3.4.1. Type basse résolution

Facile à mettre en œuvre, tout le spectre de masse est balayé puis l'analyse se fait par observation des intensités détectées à la sortie du spectromètre de masse. Dans ce cas la résolution en masse $R_p (R_p = M / \Delta M)$ est inférieure à 500.

I.3.4.2. Type moyenne résolution

Moins facile à mettre en œuvre, on sélectionne un intervalle de masse assez réduit afin de séparer entre autres les isotopes. On obtient alors un spectre de masse avec un R_p compris entre 500 et 2000.

I.3.4.3. Type haut résolution

Très difficile à mettre en œuvre en pratique, on sélectionne un intervalle beaucoup plus petit qu'en moyenne résolution afin de lever les interférences en masse principalement. On obtient alors un spectre haute résolution avec un R_p supérieure à 2000.

I.4. DIFFERENTS TYPES D'ANALYSE**I.4.1. Spectrométrie de masse**

Le but est de repérer la présence de certains éléments dans un échantillon donné. Le spectromètre de masse est donc réglé de manière à balayer une plage précise de valeurs du rapport masse/charge des ions secondaires et de repérer l'intensité ionique détectée correspondant à chaque valeur.

I.4.2. Imagerie ionique et SIMS statique

Ce type d'analyse est appelé SIMS statique, la profondeur d'échappement des ions secondaires ne dépasse pas les trois premières couches atomiques sous la surface de l'échantillon.

I.4.3. Profil en profondeur et SIMS dynamique

C'est le mode qui nous intéresse, il est très largement utilisé en microélectronique où la distribution en profondeur des dopants ou des éléments majeurs est une information très importante.

I.4.3.1. Dynamique du signal

La dynamique du signal est déterminée par le nombre de décade entre le maximum et le minimum du signal pour un profil d'un élément implanté dans une matrice donnée. C'est une caractéristique essentielle de l'analyse en profondeur (en SIMS dynamique), qui est utilisée pour valider les performances de l'analyse [16].

I.4.3.2. Sensibilité

L'un des manières d'exprimer la sensibilité est de donner la concentration minimale d'un élément donné détectable par le système. Ce paramètre est étroitement lié à la transmission de l'instrument mais il variera d'un élément à un autre en fonction de la capacité de l'élément à s'ioniser et à se pulvériser.

I.4.3.3. Résolution en profondeur

La résolution en profondeur dans la SIMS n'est plus la dynamique du signal; un profil qui présente une bonne dynamique du signal peut avoir une mauvaise résolution en profondeur !

La résolution en profondeur peut être théoriquement de quelques nanomètres [16, 17].

I.5. DIFFERENTS PROCESSUS DE L'ANALYSE SIMS**I.5.1. Le taux de pulvérisation**

Lors du bombardement ionique, la partie des cascades de collisions localisée vers la surface engendre l'éjection d'atomes hors de l'échantillon. Au bout d'un certain temps, tous les atomes sont bien sûr pulvérisés, mais il est intéressant de comparer le nombre d'atomes éjectés par rapport au nombre d'ions incidents. On définit pour cela le taux de pulvérisation qui correspond au nombre d'atomes de la cible pulvérisés par l'arrivée d'un ion primaire. Si la cible contient plusieurs espèces atomiques, auxquelles on associe l'indice k , on a :

$$Y_t = \sum_k Y_k \quad (\text{I.1})$$

Où Y_k est le rendement de pulvérisation spécifique à l'espèce k , $t Y$ est le taux de pulvérisation total. De plus, les atomes éjectés sont susceptibles de provenir de différentes profondeurs, si bien qu'on définit un rendement de pulvérisation différentiel en profondeur, y_k tel que [15] :

$$Y_k = \int_0^\infty y_k dz \quad (I.2)$$

A partir de la fonction $y(z)_k$, on peut définir une profondeur moyenne d'échappement. Une expérience a permis de déterminer sa valeur, dans le cas du silicium : Elle est de l'ordre de 2Å[18].

Le taux de pulvérisation pour un matériau donné parfaitement homogène, dépend principalement des paramètres du faisceau primaire : masse, énergie d'impact, angle d'incidence.

On note que les atomes de la cible ne sont pas forcément pulvérisés proportionnellement à leur concentration dans la matrice, c'est ce qu'on appelle la pulvérisation préférentielle. Ce phénomène provoque pour l'espèce pulvérisée préférentiellement un appauvrissement de la surface. L'appauvrissement d'une espèce, et donc l'enrichissement d'une autre à la surface de l'échantillon va initier un régime transitoire des concentrations locales jusqu'à ce qu'un certain rapport de concentration entre les deux espèces soit atteint[11]. Le régime permanent pour la pulvérisation est alors installé. Ce phénomène complique très sérieusement la quantification des profils .

I.5.2. Le taux d'ionisation

La sensibilité du SIMS dépend directement des taux d'ionisation des différentes espèces pulvérisées. Le taux d'ionisation représente en fait une probabilité d'ionisation d'une espèce après sa pulvérisation. Il est noté $\alpha_{n\pm}$ et représente le rapport du nombre de particules ionisées n fois sur le nombre total d'atomes pulvérisés pour cette espèce. De la même façon que le taux de pulvérisation, il est spécifique à un élément donné dans une matrice donnée et variera avec la composition de la matrice et les conditions expérimentales.

I.5.3. Le facteur de transmission

Les atomes pulvérisés puis ionisés seront acheminés vers le détecteur. Comme dans tout appareillage, la transmission n'est pas idéale. L'instrument ne détecte qu'une fraction des ions, puisque une partie seulement des ces ions est transmise à travers l'appareillage.

On définit donc un facteur de transmission T_k qui caractérise le nombre d'ions effectivement détectés par rapport au nombre d'ions créés à la sortie de l'échantillon. Il est noté avec indice k car il peut également varier selon l'espèce considérée.

I.5.4. L'équation ionique SIMS

A partir des taux de pulvérisation et d'ionisation, ainsi que du facteur de transmission, on peut comparer le nombre d'ions de l'espèce analysée avec le nombre d'ions primaires bombardés sur l'échantillon. En l'absence de pulvérisation préférentielle, on peut écrire:

$$I_K = I_P C_k Y_t \sigma_K^\pm T_k \quad (I.3)$$

Où I_P et I_K sont respectivement les intensités ioniques primaire et secondaire, C_k étant le profil de concentration de l'espèce k .

L'équation (I.3) est dite « équation SIMS de base ». Elle est utilisée dans la quantification de l'analyse SIMS [11]. Nous la donnons pour mémoire. Dans ce travail, l'accent sera mis sur la résolution en profondeur plutôt que sur la quantification.

I.6. LE BRUIT DANS L'ANALYSE SIMS

Il existe deux théories de la source de bruit dans l'analyse **SIMS** :

les spécialistes du traitement du signal considèrent que le bruit résulte du système de mesure des ions secondaires : nature statistique de l'émission ionique secondaire (phénomène aléatoire), bruit électronique dans la chaîne de mesure. En effet, le signal **SIMS** étant recueilli au moyen d'un compteur d'événement discret, on peut penser que le bruit qui se superpose à la mesure est un bruit de comptage de type Poissonien. Ce bruit de comptage pur (erreur du au non détection, ou au contraire à la détection erronée d'un ion) doit être très faible, mais il existe également un bruit, souvent rencontré en fin de profil, correspondant à la détection aléatoire d'un atome d'impureté présent « accidentellement » dans la matrice, ou provenant de la répulvérisation d'atomes d'impuretés présents sur les lentilles, ce bruit est additif [19] .

Alors que les spécialistes de l'analyse SIMS (physiciens) considèrent, en plus, une autre source de bruit intervenant avant l'entrée du système de mesure liée aux variations du courant primaire. L'influence de la variation du courant primaire est plus difficile à situer, car le courant primaire agit à la fois sur la densité de dommages déposée et sur la quantité d'ions pulvérisés. La concentration de la surface instantanée est le résultat d'une intégration de l'énergie (les variations du courant primaire ont donc peu d'influence), alors que le nombre d'atomes pulvérisés est proportionnel au courant primaire quasi-instantané. Donc la fluctuation du courant primaire est introduite dans la forme de la **DRF** [17] .

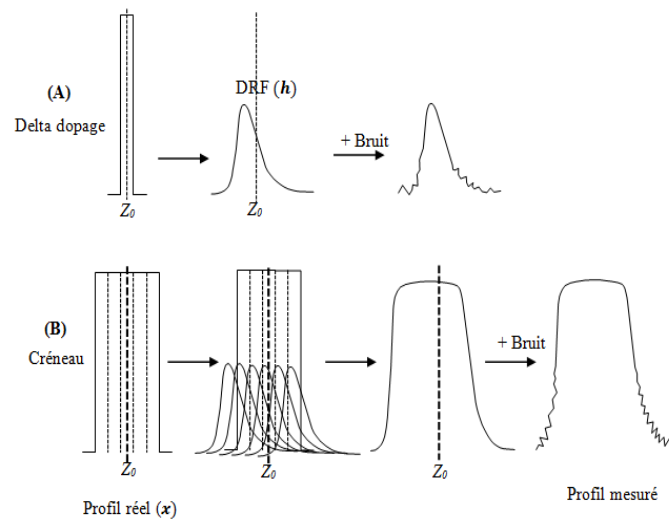


Figure (I-3) : Schéma montrant l'élargissement et le décalage des profils après leur analyse par SIMS A) Delta dopage B) profil rectangulaire (créneau).

I.7. LES LIMITES DE LA TECHNIQUE SIMS

Plusieurs limitations résultent du procédé de la mesure elle-même. Tout d'abord, l'analyse est destructive, puisque l'échantillon est soumis à une pulvérisation au cours de son analyse. A chaque analyse, il faut donc sacrifier une partie de la surface de l'échantillon (environ $500\text{ }\mu\text{m} \times 500\text{ }\mu\text{m}$). Il faudra donc effectuer les analyses avec circonspection si l'échantillon s'avère rare ou précieux.

Par ailleurs, la petitesse du cratère analysé ne permet d'obtenir qu'une étude locale de l'échantillon, et l'étude d'un échantillon hétérogène ou de structure latérale complexe n'est pas possible avec une seule mesure. On peut cependant accumuler des images à différentes profondeurs.

L'inconvénient majeur de l'analyse SIMS est la difficulté concernant la quantification des résultats obtenus. En effet, la complexité de chaque processus de la mesure ne permet pas de modéliser totalement l'analyse, et encore moins de la quantifier. Comme nous avons déjà vu, pour connaître une concentration, on a besoin d'un échantillon étalon mesuré dans les mêmes conditions expérimentales que l'échantillon à analyser. L'analyse est donc « semi-quantitative ». En microélectronique, on fait appel à des échantillons standards préparés par implantation ionique pour calibrer les mesures.

I.8. AMELIORATION DE LA RESOLUTION EN PROFONDEUR PAR DECONVOLUTION

Un problème inverse est un problème qui consiste à déterminer des causes connaissant des effets. Ainsi, ce problème est l'inverse de celui appelé problème direct, consistant à déduire les effets, les causes étant connues. La déconvolution consiste à déterminer le profil réel (signal d'entrée) à partir des données du profil mesuré (signal de sortie) et de la **DRF**. Elle est donc un problème inverse .

I.9. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons premièrement exposé brièvement les principes et les caractéristiques de l'analyse SIMS. Malgré les nombreux avantages de l'analyse par **SIMS**, les majeurs inconvénients de la technique sont la destruction de l'échantillon et l'altération du profil réel de concentration recherché. En effet le profil en profondeur n'est pas une image fidèle du profil existant réellement dans l'échantillon. Les phénomènes physiques qui gouvernent l'analyse **SIMS** conduisent à deux problèmes : Elargissement et décalage des profils mesurés par **SIMS**. L'amélioration de la résolution en profondeur est possible par la l'utilisation d'une opération de déconvolution.

Le chapitre suivant sera consacré à la description de l'analyse en profondeur, l'aspect où l'accent sera mis dans ce travail.

Chapitre II

Analyse et simulation des profils SIMS

II.1. INTRODUCTION

L'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires, comme toute technique de caractérisation en profondeur, est un système que s'identifie par la réponse impulsionnelle que représente sa fonction du transfert. Ce chapitre traite en premier temps l'importance de compréhension de la philosophie de la convolution, ce que nous amènera à définir la réponse impulsionnelle du système d'analyse, appelé fonction de résolution en profondeur (DRF). La modélisation de cette fonction par une forme analytique sera également examinée dans ce chapitre.

II.2. RAPPEL SUR LA CONVOLUTION

II.2.1. Définition

La convolution joue un rôle fondamental en traitement du signal. Elle est étroitement liée à la réponse impulsionnelle d'un système linéaire et invariant dans le temps[20]. Elle est caractérisée par l'équation l'intégrale suivante :

$$y(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(t - \tau)x(\tau)d\tau \quad (\text{II.1})$$

Où

$$y(t) = h(t) * x(t) \quad (\text{II.2})$$

$y(t)$ est le résultat de convolution de la fonction h par la fonction x . Supposons les fonctions h et x connues, alors l'équation (II.2) est dite équation de convolution.

II.3. RESOLUTION EN PROFONDEUR

II.3.1. Définition

L'une des utilisations les plus importantes de l'analyse SIMS en microélectronique est la réalisation de profils de concentration en profondeur.

Nous allons définir la résolution en profondeur plus en détail dans ce qui suit, mais on peut dire pour fixer les idées qu'elle est reliée à la largeur d'une couche supposée infiniment fine d'un élément dans une matrice donnée après analyse en profondeur. Elle fixe également la distance minimale entre deux couches contenant un élément donné pour qu'elles soient distinguées par la mesure[11].

II.3.2. Profil en profondeur

Lors d'un profil en profondeur, on collecte l'intensité ionique d'un élément donné en fonction du temps. Si la vitesse d'érosion est constante, l'échelle des temps pourra être convertie facilement en échelle des profondeurs à partir de la mesure de la profondeur du cratère final. Pour transformer l'intensité ionique en concentration on utilise le facteur de sensibilité relative (RSF)[21].

Ce mode d'analyse est très largement utilisé en microélectronique où la distribution en profondeur des dopants est une information très importante.

II.3.3. Les mécanismes essentiels gouvernant la résolution en profondeur

Il est fondamental de bien comprendre les mécanismes qui gouvernent la résolution en profondeur de l'analyse par SIMS afin d'espérer l'améliorer, tant par des moyens instrumentaux que par des moyens numériques. En effet, le processus d'analyse n'est pas parfait, et les paramètres mis en jeu lors de la pulvérisation de l'échantillon ont tendance à dégrader la résolution en profondeur.

Dans des conditions idéales, les ions pulvérisés proviennent tous de la couche la plus superficielle, et l'érosion de l'échantillon se fait monocouche par monocouche et permet de tracer la concentration d'un élément donné en fonction du nombre de monocouches érodées. Dans ces conditions, les interfaces abruptes et les couches très fines semblent inchangées après analyse. En réalité, outre que les ions pulvérisés ne proviennent pas tous de la première couche atomique, les ions primaires déclenchent des cascades de collisions sur une épaisseur significative en dessous de la surface d'une part, et s'incorporent dans la cible d'autre part. Pendant l'analyse, on a donc dans les premières couches atomiques de la cible un mélange composé du mixage de ces couches et des ions primaires. Le profil de concentration réel est modifié par ce mixage et le profil mesuré par l'analyse SIMS n'est pas rigoureusement identique au profil réel.

Par ailleurs, l'impact des ions primaires et leur interaction avec les ions de la cible provoquent d'autres phénomènes, qui dégradent également la résolution en profondeur: ségrégation, apparition d'une rugosité au fond du cratère...etc.

D'une manière générale, les phénomènes dégradant la résolution en profondeur contribuent à l'élargissement des profils. Une couche supposée infiniment fine par exemple, paraît lors de l'analyse avec une largeur Δz , cette largeur sert de référence pour caractériser la

résolution en profondeur. Il en résulte qu'une interface très abrupte, une couche très fine, ou encore deux couches très peu éloignées ne puissent être analysées avec une précision suffisante pour les caractériser entièrement.

II.3.3.1. Le mixage collisionne

Le mixage collisionne est par définition un phénomène totalement indissociable de la mesure elle-même, et résulte du transfert de l'énergie cinétique des ions primaires aux atomes de la cible. En effet, l'énergie cinétique des ions incidents transférée à l'intérieur de la cible sous forme de déplacement d'atomes. Il en résulte une nouvelle distribution locale des espèces.

Ce phénomène est le phénomène le plus problématique dans l'analyse SIMS, puisqu'il est inhérent de la mesure elle-même. Il se rencontre quel que soit la nature du solide étudié. Il sera toujours possible de le minimiser en optimisant les paramètres du bombardement, mais pas de l'éliminer totalement. Il est peut être classifié en deux types:

- Le mixage par choc direct (Recoil mixing): il concerne uniquement le premier choc de l'atome incident avec un atome de la cible. Ces chocs sont très énergétiques et fortement anisotropes : les atomes frappés par les chocs directs sont projetés de préférence vers l'intérieur du matériau.
- Le mixage par cascades (Cascad mixing): produit par l'ensemble des chocs secondaires entre les atomes de la cible. Ces chocs sont très nettement moins énergétiques que les précédents mais infiniment plus nombreux. Un seul atome incident provoque ainsi un nombre considérable de chocs par cascade jusqu'à ce que l'énergie transférable d'un atome à un autre devienne inférieure à l'énergie de déplacement des atomes de la cible, c'est-à-dire une vingtaine d'eV environ. Après un nombre de choc relativement faible, la cascade de collisions perd la mémoire de la direction initiale de l'ion incident et devient pratiquement isotrope. L'énergie cinétique restant après extinction des cascades de collisions se dissipe sous forme de phonons[22].

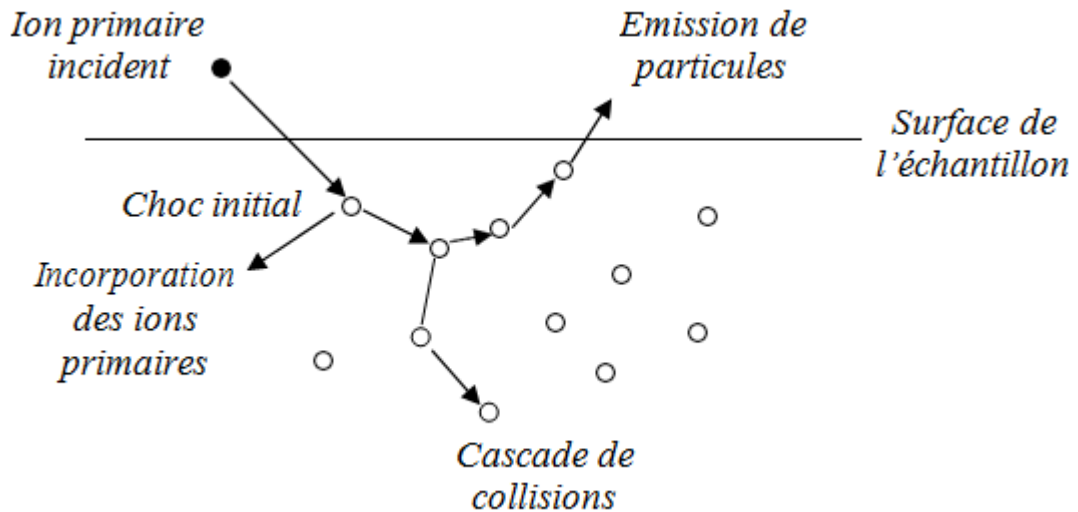


Figure (II-1) : principe du mixage collisionnel[9].

II.3.3.2. Développement de rugosité

On désignera par « rugosités » le relief ou le phénomène conduisant à l'apparition d'un relief sur la surface d'un matériau initialement plan et soumis à un bombardement ionique[15], elle est induite sous deux formes :

- Une rugosité induite par le faisceau primaire.
- Une rugosité induite à la surface de l'échantillon.

II.3.4. Evaluation de la résolution en profondeur

La résolution en profondeur est un paramètre essentiel de toute méthode d'analyse en profondeur. Elle est nécessaire pour quantifier l'aspect fidélité de la reproduction au profil réel.

Pour pouvoir comparer les performances de divers appareils et de divers expérimentateurs, on a besoin de pouvoir mettre des chiffres concrets sur la résolution en profondeur. Cela peut être fait de plusieurs façons, selon le processus de dégradation dont on veut rendre compte, ou bien selon le type d'échantillon analysé : on définira ainsi des résolutions adaptées à l'analyse d'interfaces, de couches minces rapprochées, ou de delta-dopages.

II.3.4.1. Evaluation par front montant ou descendant

Certains auteurs ont l'habitude de mesurer la résolution en profondeur directement à partir du profil mesuré d'une marche de concentration montante ou descendante supposée

parfaitement abrupte. Dans ce cas, la résolution en profondeur Δz est couramment définie comme l'intervalle où l'intensité du signal chute de 84 % à 16% du signal maximum, pour un front descendant. Ces bornes ne sont pas absolues : elles proviennent de l'hypothèse que l'interface possède après l'analyse par SIMS l'allure d'une fonction erreur, résultat de la convolution d'une interface abrupte avec une gaussienne d'écart-type σ . Dans ce cas, la distance $\Delta z_{16}^{84} = 2 \sigma$ (figure II-2)

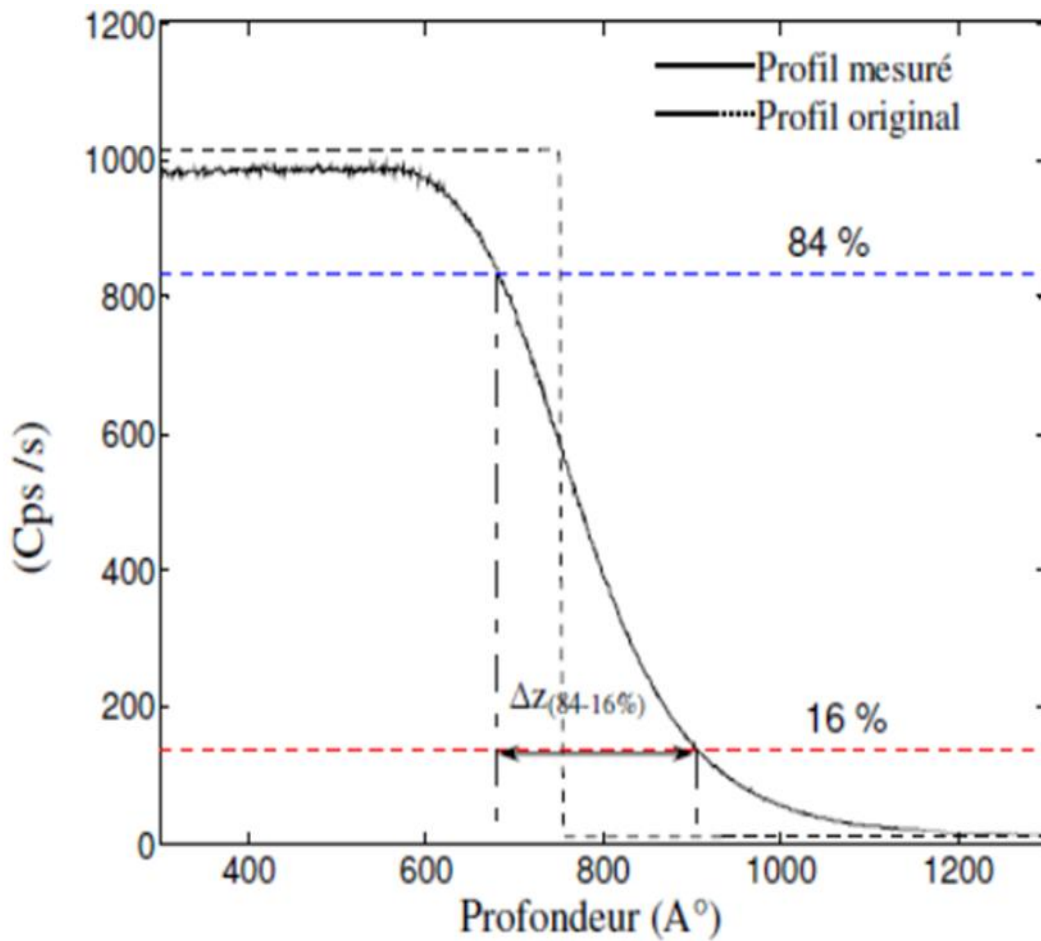


Figure (II-2) : Définition de la résolution en profondeur à partir d'une interface abrupte.

D'autres critères en relation avec la fonction erreur sont aussi utilisés dans la littérature : (90%-10%) du signal maximum, ce qui correspond à $\Delta z = 2.564 \sigma$, ou (95%-5%) pour $\Delta z = 3.29\sigma$.

II.3.4.2. Evaluation sur un delta-dopage

Un delta-dopage est par définition la plus petite structure géométrique qui puisse exister pour un couple impureté-matrice, c'est-à-dire une seule couche atomique contenant une impureté, à l'intérieur d'une matrice. La mesure d'un delta-dopage donne donc directement une idée de la plus petite largeur qu'il est possible d'obtenir lors de l'analyse SIMS. La courbe obtenue peut alors être considérée comme le résultat de la plus petite structure mesurable, et permet des comparaisons directes par l'un de ses paramètres caractéristiques.

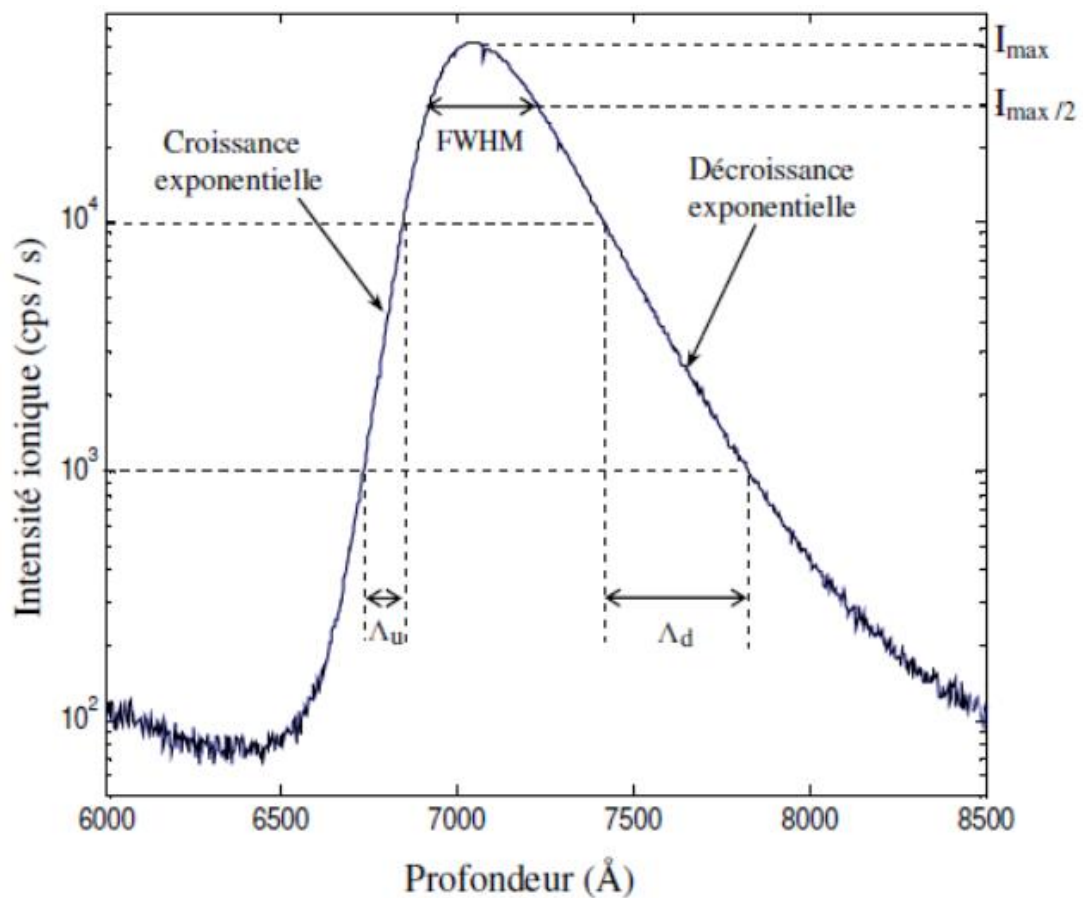


Figure (II-3) : Evaluation de la résolution en profondeur à partir du profil mesuré d'un delta-dopage.

➤ Paramètres exponentiels et partie arrondie

Comme le montre la figure (II-3), la mesure d'un delta-dopage par SIMS conduit à une courbe asymétrique possédant un front montant de montée rapide et une traîne exponentielle décroissante beaucoup moins rapide. On se focalise généralement sur la pente exponentielle décroissante, puisque c'est elle qui reflète en grande partie la perte de résolution en profondeur due au mixage collisionnel.

➤ Largeur à mi-hauteur

Ce type de courbes peut être aussi caractérisé par la largeur à mi-hauteur FWHM (pour « Full Width at Half Maximum »). Ce paramètre est simple à obtenir et assez intuitif, mais il faut l'utiliser avec précaution étant donné la nature asymétrique de la courbe. Dans le cas d'une gaussienne, la FWHM est donnée par la relation :

$$\text{FWHM} = 2.355 \sigma \quad (\text{II.1})$$

Où σ représente l'écart type de la gaussienne.

➤ Moments

S'il existe une forme analytique qui s'ajuste de manière satisfaisante à la mesure, une manière précise d'évaluer la résolution en profondeur est de calculer le moment centré d'ordre 2 de cette forme analytique (dispersion de la fonction autour de sa valeur moyenne). L'avantage de ce moment est son objectivité, c'est-à-dire le fait qu'il prenne en compte la totalité de la courbe, ce qui n'est pas le cas ni pour la FWHM, ni pour les paramètres exponentiels.

II.3.5. La fonction de résolution en profondeur (la réponse impulsionnelle en SIMS)

Nous allons maintenant nous pencher sur le moyen de quantifier la résolution en profondeur au niveau analytique. Avant de chercher à approfondir les techniques de résolution de problèmes inverses, il est nécessaire de bien définir les éléments faisant l'interface entre les phénomènes physiques réels, la modélisation de ces phénomènes, et leur intégration dans les équations de traitement du signal.

Quelles que soient les méthodes de résolution que nous utiliserons dans ce problème inverse spécifique, nous aurons besoin de connaître une certaine quantité d'informations sur le système étudié. Comme la plupart des systèmes, il est en grande partie caractérisé par sa réponse impulsionnelle, ou fonction de transfert, transformant le signal d'entrée - ici le profil réel de concentration - en signal de sortie (le profil mesuré).

La réponse impulsionnelle en SIMS

Par définition, la réponse impulsionnelle d'un système est la réponse de ce dernier à un signal d'entrée égal à un Dirac. Le Dirac est une fonction théorique d'épaisseur nulle, d'amplitude infinie et dont l'intégrale sur $\mathbf{R}$ est égale à 1. Il va de soi que dans le domaine de la physique, un tel signal n'existe pas, et il est remplacé par un signal fini d'épaisseur non nulle ("pseudo-Dirac").

Si on se place dans le domaine continu, le "pseudo-Dirac" pourra typiquement être une fonction nulle ou quasi nulle sur tout son domaine de définition, sauf sur un intervalle très petit autour de 0. Son intégrale devra aussi être égale à 1. Voici quelques exemples de fonctions assimilées à un Dirac et souvent utilisées :

- créneau d'épaisseur d , de hauteur $1/d$.
- gaussienne de paramètre et d'amplitude $1/\sqrt{2\pi\sigma}$.
- fonction "triangle", de base a et de hauteur $1/(2a)$.

Dans notre cas, il ne s'agit pas de signal électrique ou optique, mais de successions de plans atomiques. La plus petite structure existante sera alors une couche atomique, ce qui veut dire que dans la réalité, et comme dans tout système réel, on n'obtiendra jamais la vraie réponse impulsionnelle, mais au mieux la réponse à une couche atomique, que l'on peut assimiler à un créneau d'épaisseur égale à la distance moyenne inter-atomique.

Dans toute la suite de ce travail, la réponse à ce « pseudo-Dirac » sera donc assimilée à la vraie réponse impulsionnelle SIMS. En outre, étant donné que c'est elle qui donne la mesure de la plus petite structure existante, elle fixera une limite : la résolution en profondeur maximum sera donnée par la mesure d'un "Dirac" ou delta-dopage. On appellera cette réponse impulsionnelle "Fonction de Résolution en Profondeur", ou DRF, pour "Depth Resolution Function".

La réponse impulsionnelle est par définition normée :

$$\sum_{i=-\infty}^{+\infty} h(i) = 1 \quad (\text{II.3})$$

Le signal de sortie doit donc posséder la même aire que le signal d'entrée.

II.3.5.1. modélisation de la DRF

Il y a plusieurs avantages à modéliser la DRF :

- Suppression du bruit : on considère que le bruit n'est pas propre à la DRF mais vient s'y ajouter de manière aléatoire. Le fittage effectue un lissage local de la courbe représentant la DRF et permet de supprimer le bruit qui s'ajoute à la fonction de résolution lors de la mesure. De ce fait, les calculs seront plus justes et plus précis lorsque une forme analytique de la DRF est utilisée, et non la DRF telle qu'elle est mesurée. En particulier, L'existence d'une forme analytique permet de donner des chiffres précis pour la résolution en profondeur, grâce au moment centré d'ordre 2 dont nous avons déjà parlé.

- Echantillonnage adaptable : lorsque qu'on mesure un profil par SIMS, l'appareil effectue des acquisitions régulièrement espacées d'un intervalle de temps dt . Ce laps de temps dt correspond à une profondeur érodée dz . Selon la vitesse d'érosion de l'échantillon, à dt fixé, dz pourra varier de plusieurs fois sa valeur (en particulier en fonction de l'intensité ionique primaire). Lorsqu'on veut effectuer un traitement numérique sur un profil, on a souvent besoin de la DRF. Si on la mesure à partir d'un delta-dopage situé sur un autre échantillon, il y a toutes les chances pour que le pas d'échantillonnage soit différent de celui du profil à traiter (à cause de la variation de la vitesse d'érosion). La déconvolution est dans ce cas impossible, à moins d'effectuer un ré-échantillonnage, qui peut être source d'imprécision. La connaissance de la DRF par une forme analytique permet d'échantillonner cette dernière avec la bonne valeur pour la déconvolution.
- Calculus de profils : avec une « bonne » fonction de fittage pour la DRF, on peut prévoir de manière analytique le profil SIMS d'une structure particulière supposée connue. La comparaison avec le ou les profils mesurés de cette structure permettra éventuellement de déterminer les performances de l'appareil ou de vérifier que l'échantillon a été bien fabriqué.

La DRF est caractérisée par trois parties remarquable : parties exponentielles les deux zones de faible signal, c'est-à-dire de part et d'autre de la partie arrondie de DRF.

Les parties exponentielles de la DRF peuvent aisément être fittées par une famille de fonctions appelées double exponentielle. Une double exponentielle est définie comme suit :

$$D_{\text{exp}}(z) = A \begin{cases} \exp\left(\frac{z-z_0}{\lambda}\right) & z < z_0 \\ \exp\left(\frac{-(z-z_0)}{\lambda}\right) & z > z_0 \end{cases} \quad (\text{II.4})$$

Cette fonction seule n'est pas suffisante pour être assimilée à la DRF, car la zone autour de z_0 n'est pas arrondie (par rapport aux profils expérimentaux), et il y a un point anguleux en z_0 . Pour corriger ce problème, on utilise l'astuce de convoluer cette 1^{ère} fonction avec une autre, de préférence symétrique, afin « d'arrondir » la partie anguleuse.

$$G_{\text{auss}}(z) = (B/(\sqrt{2\pi}\sigma)) \exp(-z^2/2\sigma^2_{\text{gauss}}) \quad (\text{II.5})$$

$$h(z) = \text{Dexp}(z) * \text{Gauss}(z) \quad (\text{II.6})$$

Comme toute réponse impulsionnelle d'un système, la DRF doit être normalisée. Les amplitudes relatives A et B sont donc éliminées. En rappelant que : $\text{erf}(z) = 2/\pi \int_0^z e^{-t^2} dt$, le résultat final est :

$$h(z) = 1/2(\lambda_u + \lambda_d) \left\{ \exp\left(\frac{z-z_0}{\lambda_u}\right) + \frac{\sigma_g^2}{2\lambda_u^2} \right\} * \left[1 + \text{erf}\left(\frac{-(z-z_0)}{(\sqrt{2\sigma_g})} - \frac{\sigma_g^2}{\sqrt{2\lambda_u}}\right) \right] \\ + \exp(-(z-z_0)/\lambda_d + \sigma_g^2/2\lambda_d^2) \times [1 + \text{erf}((z-z_0)/\sqrt{2\sigma_g} - \sigma_g/\sqrt{2\lambda_d})] \quad (\text{II.7})$$

z_0 représente l'abscisse du point anguleux de la double exponentielle. Il faut noter que cette valeur n'a pas de signification physique réelle, contrairement à ce que l'on pourrait croire, et se borne à autoriser le positionnement correct du fittage sur la DRF mesuré.

Comme nous allons le voir, l'expression analytique de la DRF obtenue ici (nommé: Analytical Resolution Function (ARF), par Wittmaack [23]), conduit à un très bon fittage des données expérimentales.

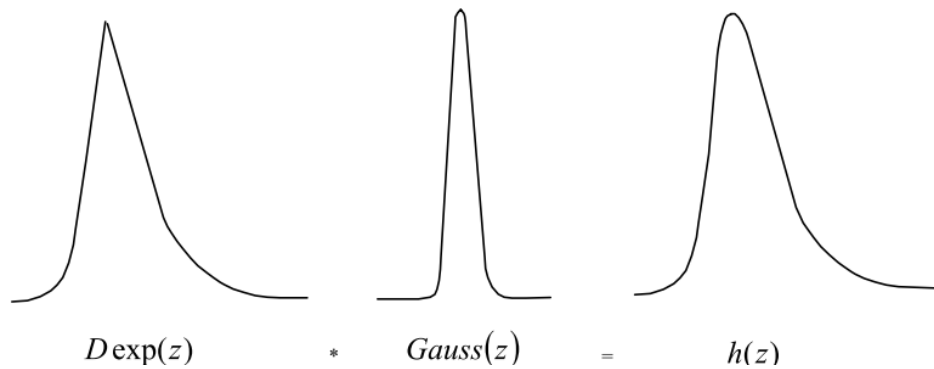


Figure (II-4) : Dessin schématisant l'obtention de la DRF à partir de la convolution d'un double exponentiel avec une fonction gaussienne.

II.4. BRUIT SIMS

Comme tout signal expérimental, les profils SIMS contiennent une composante de bruit. En effet, toute mesure physique, quel que soit sa nature (électronique, optique, etc...), est entachée de divers signaux parasites, constitués ensemble le bruit de mesure.

Il faut cependant différencier entre deux types de signaux « parasites » qui viennent s'ajouter au signal utile. Le bruit est considéré comme un signal aléatoire, c'est à dire qu'on ne peut pas prédire sa valeur au temps t_2 à partir de celle relevée au temps t_1 . Les autres signaux parasites, comme par exemple un signal sinusoïdal ou une composante continue, ne seront pas considérés comme faisant partie du bruit, puisqu'on peut parfaitement les distinguer et donc les éliminer du signal mesuré [11].

Le bruit de mesure est à l'origine de la plupart des difficultés de la déconvolution. En effet, la séparation entre le bruit et le signal utile est très difficile, et ces difficultés seraient résolues si cette discrimination pouvait être effectuée de manière certaine.

Avant de parler du cas particulier du bruit SIMS, nous allons tout d'abord exposer les différentes caractéristiques d'un bruit.

II.4.1. Différents types de bruit

II.4.1.1. Caractéristiques fréquentielles d'un bruit

Le bruit fait certes partie des signaux aléatoires, mais ceci ne signifie pas qu'on ne peut pas distinguer certaines caractéristiques déterministes, notamment dans le domaine des fréquences .

✓ Le bruit blanc

Par souci de simplification, l'hypothèse de bruit blanc est la plus répandue en traitement du signal. Un bruit blanc est un signal aléatoire dont la densité spectrale de puissance DSP (la DSP est la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation) est constante sur un intervalle de fréquence infini. Autrement dit, ce bruit contient toutes les fréquences de $-\infty$ à $+\infty$ avec une proportion égale.

✓ Le bruit rose

Le bruit rose ou « blanc à bande limitée » est défini de la même manière que le bruit blanc, mais sur un intervalle de fréquences fini. Ce cas est plus réaliste que celui du bruit blanc puisqu'aucun signal physique ne possède un spectre à support infini .

II.4.1.2. Caractéristiques probabilistes d'un bruit

Le bruit est un signal aléatoire pour lequel il n'existe pas de description temporelle, mais il est possible de le caractériser par sa densité de probabilité $p(P)dP$, qui est toujours normée :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(P)dP = 1 \quad (\text{II.8})$$

✓ Bruit Gaussien

On dit qu'un bruit est Gaussien si sa densité de probabilité prend la forme d'une gaussienne. Si on désigne par P_c le centre de cette gaussienne, et par σ sa dispersion, la loi de p s'écrit :

$$p(P) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(P-P_c)^2}{2\sigma^2}} \quad (\text{II.9})$$

P_c et σ^2 sont respectivement la valeur moyenne et la variance de ce bruit. L'hypothèse de bruit Gaussien est très souvent prise en traitement de signal, et ceci pour les raisons suivantes:

- Tous les moments de la variable aléatoire peuvent être calculés à partir des moments du premier et de second ordre
- théorème central limite, très connu en statistique, affirme que lorsque plusieurs processus aléatoires de types quelconques s'ajoutent, le résultat tend vers un processus gaussien sans que le nombre de processus aléatoires n'ait besoin d'être très important (5 ou 6 processus suffisent [24]).
- lorsque plusieurs processus gaussiens de paramètres différents s'ajoutent, le résultat est encore une gaussienne.

✓ Bruit Poissonien

La densité de probabilité d'un bruit Poissonien est donné par:

$$P(K) = \frac{\lambda^K}{K!} e^{-\lambda} \quad K \in N \quad (\text{II.10})$$

où λ est la variance.

Dans le cas d'un bruit Poissonien, la probabilité d'avoir n impulsion de bruit pendant une durée T est :

$$P(n, T) = \frac{(KT)^n}{n!} e^{-KT} \quad (\text{II.11})$$

Où K est le paramètre de Poisson. $1/K$ est le nombre d'événements moyen par unité de temps. Il faut noter que la loi de Poisson tend vers une loi de Gauss lorsque le paramètre K devient grand.

Les variables aléatoires poissonniennes sont typiquement rencontrés dans tous les phénomènes de comptage.

II.5. SIGNAUX-TYPES UTILISES POUR LES SIMULATIONS

Nous avons choisi de simuler des signaux typiques, rencontrés en traitement de signal ainsi qu'en SIMS :

II.5.1. Gaussienne

Les profils gaussiens peuvent être rencontrés dans le cas des implantations de dopants dans une matrice ou des diffusions Fickiennes : Un delta-dopage subit un recuit aboutit en principe à un profil parfaitement gaussien.

La fonction gaussienne est l'un des cas analytique les plus simples et les plus intéressants. Elle présente l'avantage d'être entièrement caractérisée par son écart-type σ qui définit une largeur à mi-hauteur FWHM (pour «Full WidthatHalf Maximum») égale à 2.335σ .

II.5.2. Créneau

Le créneau se retrouve fréquemment dans les échantillons à analyser, avec des fronts montant et descendant plus ou moins abrupts. Dans nos simulations les fronts sont supposés parfaitement abrupts.

II .5.3. Delta-Dopage

Les deltas-dopage sont les profils les plus affectés par la mesure lors de l'analyse SIMS. Ils constituent donc des structures idéales pour évaluer les méthodes de déconvolution.

II.6. PROCEDURE DE SIMILATION

La simulation des profils SIMS est basée sur l'approche suivante : un « profil réel » est construit analytiquement. Ce profil est convolué ensuite avec une DRF également analytique

dont les paramètres sont tirés à partir d'une mesure expérimentale, pour aboutir dans un premier temps à un « signal parfait », c'est-à-dire sans bruit ajouté. Enfin, une composante de bruit est ajoutée au résultat de la convolution. Le profil résultant de cette procédure sera appelé « profil mesuré ».

Pour simuler le bruit qui s'ajoute au signal, nous avons construit un bruit gaussien de valeur moyenne nulle par rapport au signal (ce qui veut dire que la variation du signal due au bruit, par rapport au signal analytique parfait, peut être positive ou négative avec une distribution de probabilité gaussienne autour de la valeur parfaite). L'écart type de ce bruit est assujetti à la relation empirique utilisée par Allen et al [25]. (cf. chapitre 2) : $\sigma \approx 1.7\sqrt{M}$, où M est la valeur moyenne du signal parfait .

Comme nous avons vu dans le chapitre 2, le modèle Poissonien est également proposé pour le bruit SIMS. Cependant, nous avons préféré introduire un bruit de type gaussien pour nos simulations, et ceci pour les raisons suivantes:

- A partir de l'étude de Makarov [26], on pourrait penser qu'utiliser un bruit Poissonien est plus en conformité avec le mode de comptage de l'acquisition du profil de concentration. Cependant, la référence [11], le bruit de comptage doit être considéré comme Poissonien uniquement dans le cas d'une analyse « parfaite », c'est-à-dire où le bruit de mesure proviendrait exclusivement de la détection des ions secondaires. Dans la réalité, le bruit est le résultat de plusieurs composantes aléatoires : variation de l'intensité des ions primaire, nature statistique de la pulvérisation et de l'ionisation, espèces préexistantes dans l'appareil (effet mémoire), etc... et d'après le théorème central limite, lorsque plusieurs processus aléatoires de types quelconques s'ajoutent le résultat tend vers un processus gaussien.
- Il a été vérifié que le type de bruit (Poissonien ou Gaussien) n'avait aucune influence sur le résultat des déconvolutions [10]. Ceci est confirmé par une autre étude [27]. Cette étude montre que les méthodes basées sur la méthode des moindres carrés (donc comme les méthodes utilisées dans ce travail) sont relativement insensibles à la nature du bruit (Poissonien ou Gaussien), bien qu'elles résultent de l'hypothèse d'un bruit Gaussien.
- Le bruit Poissonien est beaucoup plus long à construire numériquement.

La relation utilisée ici pour construire le bruit n'est valable que pour les valeurs du signal non nulles. Pour simuler le comportement des profils quand le signal devient très faible, nous avons procédé de la même manière que la référence [10]: Lorsque le signal est inférieur à 1 coup par seconde, alors la valeur moyenne de bruit ne suit plus celle de signal mais est conservée à 1 coup par seconde.

Les profils utilisés dans nos simulations seront construits avec un pas d'échantillonnage de 1 nm. Ils seront, dans la plupart des cas, présentés sur quatre décades : le maximum de profils simulés est situé autour de 104 coups par secondes. Dans la majorité des cas le rapport signal sur bruit (SNR) a été fixé à 40 dB.

La programmation a été effectuée sous MATLAB selon l'organigramme ci-dessous :

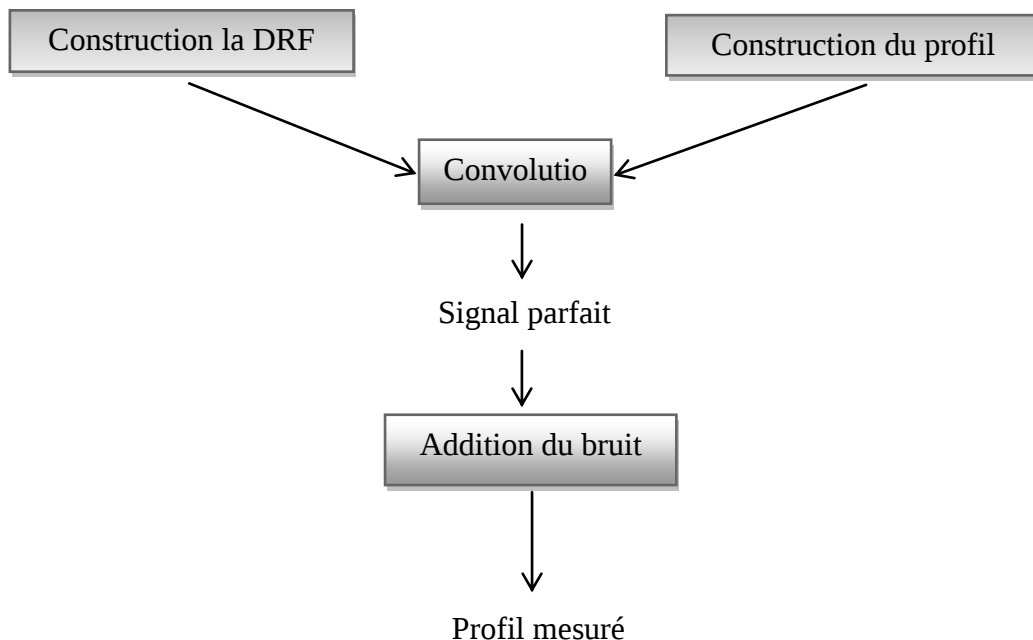


Figure (II-5) : Procédure de simulation sous MATLAB.

Ce chapitre est consacré à la simulation des profils SIMS. La déconvolution de ces profils sera effectuée dans le chapitre suivant.

✓ Positionnement des profils simulés

Suivant la référence [28], pour simuler correctement un profil SIMS, il faut le décaler vers la surface avec une distance $\Delta z = z_0 - z_i$, où z_0 est la profondeur du delta dopage utilisé pour calculer la DRF du modèle MRI et z_i la profondeur du premier point de ce DRF.

La DRF utilisé dans nos simulations est calculée avec $z_0 = 7 \text{ nm}$ et $z_i = 0 \text{ nm}$ (mêmes valeurs que réf. [28]). Les profils simulés sont donc décalés vers la surface avec $\Delta z = 7 \text{ nm}$.

Les paramètres de la DRF utilisé dans ce travail sont tirés de la référence [29]. Ces paramètres sont typiques pour un profil en profondeur SIMS analysé à $2 \text{ keV} / \text{Cs}^+$: $w = 2,3 \text{ nm}$, $\sigma = 1,4 \text{ nm}$, $\lambda = 0,3 \text{ nm}$. Cette DRF est représentée sur la figure (II-5). Elle est normalisée à 1.

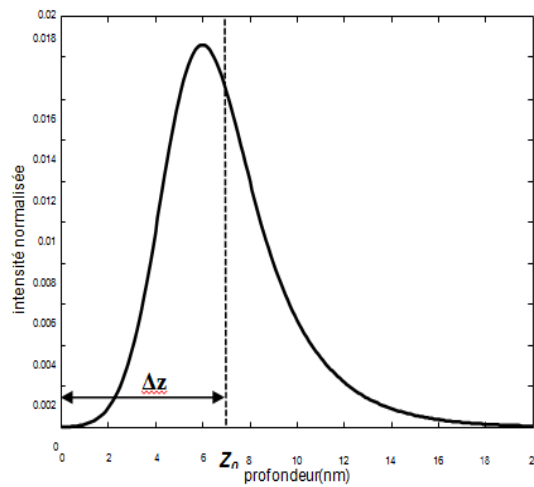


Figure (II-6) :DRF analytique du modèle MRI tracé pour : $w = 2.3 \text{ nm}$,

$$\sigma = 1.4 \text{ nm}, \lambda = 0.3 \text{ nm}, z_0 = 7 \text{ nm} \text{ et } z_i = 0 \text{ nm}.$$

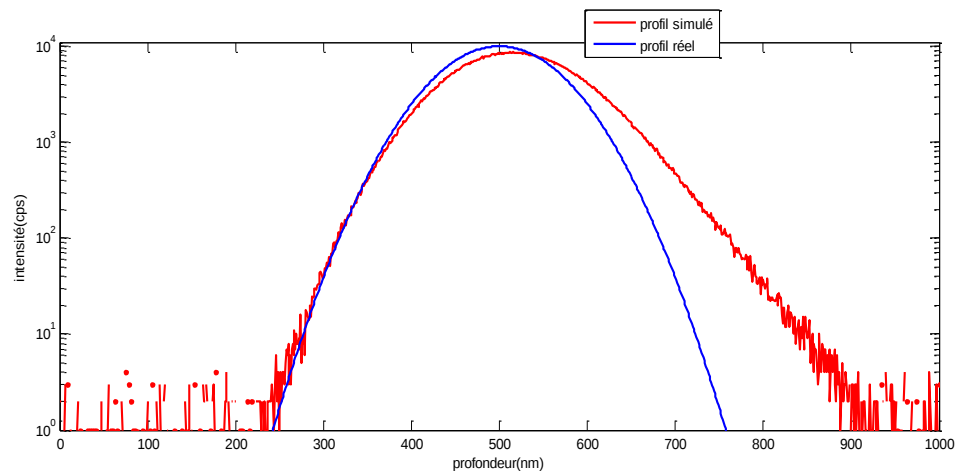
II.7. SIMULATION DES PROFILS SIMS

Nous allons simuler analytiquement les trois structures, mentionnés ci-dessus: gaussien, créneau et delta-dopage.

➤ Simulation des profils gaussiens

Les figures (II-7) et (II-8) représentent la simulation de deux profils gaussiens d'écart-types $\sigma = 12 \text{ nm}$ et $\sigma = 22.5 \text{ nm}$, pour deux valeurs du SNR, 30 dB et 40 dB .

A/



B/

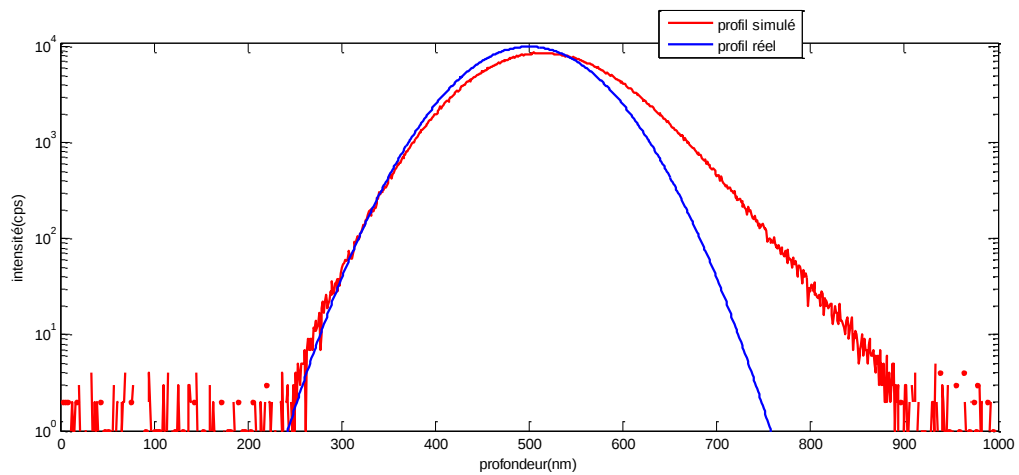
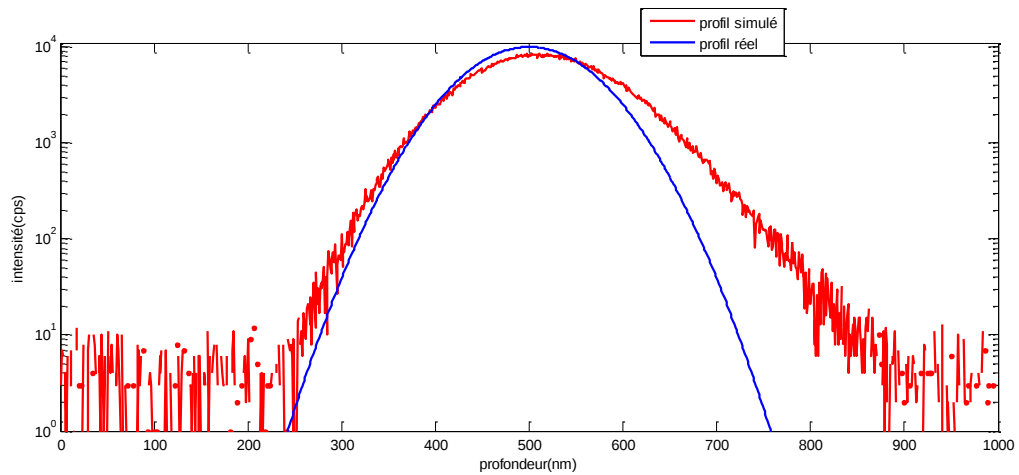


Figure (II-7) :simulation d'un profil gaussien de $\sigma = 12\text{nm}$. A)SNR = 30dB.

B)SNR = 40 dB.

A/



B/

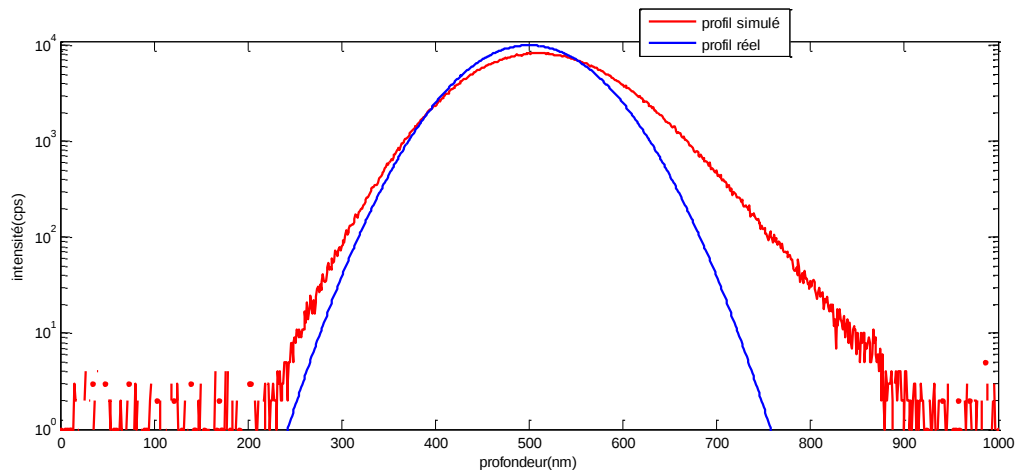


Figure (II-8) : Simulation d'un profil gaussien de $\sigma = 22.5\text{nm}$. A) $\text{SNR} = 30\text{ dB}$.

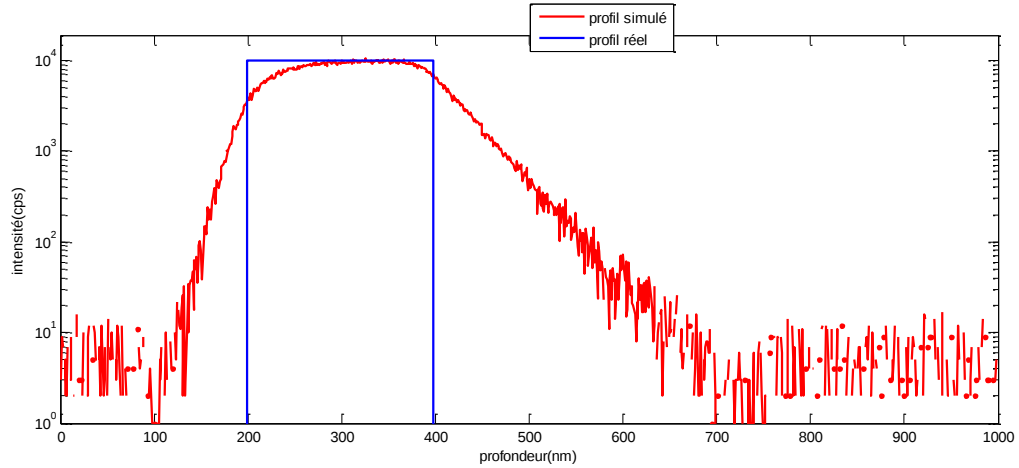
B) $\text{SNR} = 40\text{ dB}$.

A partir des figures (II-7) et (II-8), on peut constater que lorsque la largeur du gaussien est de plus en plus grand par rapport à celle de la DRF, le profil obtenu par simulation est de plus en plus proche du profil réel. On remarque aussi que la diminution du SNR conduit à un signal plus bruité.

➤ Simulation des profils créneaux

Les figures (II-8) et (II-9) représentent la simulation de deux profils créneaux $\sigma = 12nm$ et $\sigma = 22.5nm$, de largeur, pour deux valeurs du SNR , 30 dB et 40 dB.

A/



B/

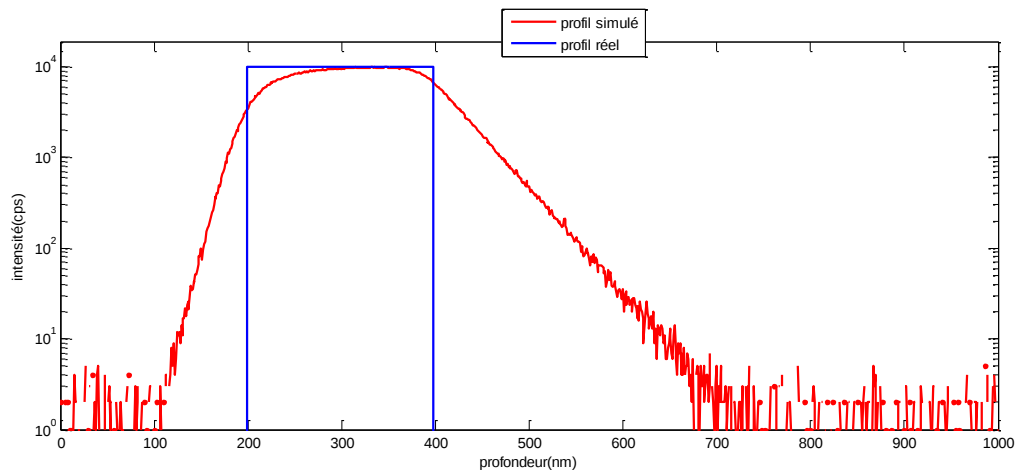
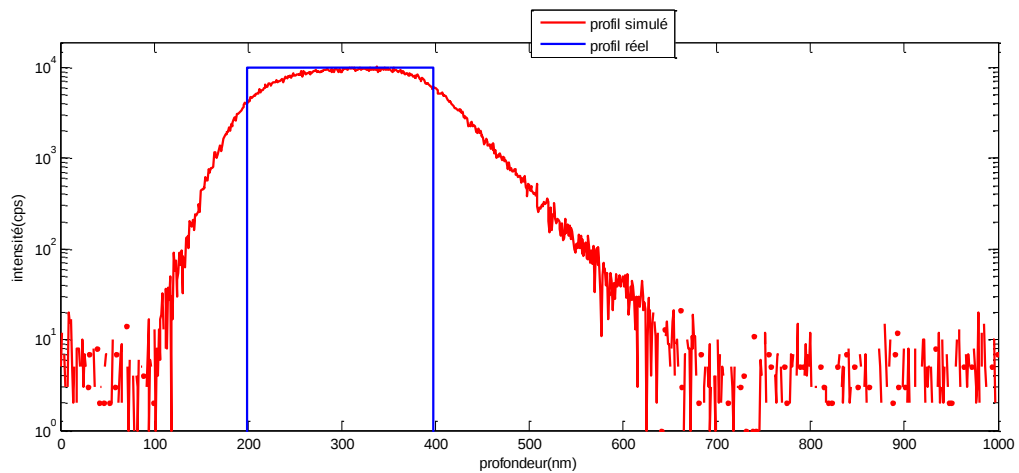


Figure (II-9) :Simulation d'un profil créneau de $\sigma = 12nm$. A) $SNR = 30dB$.

B) $SNR = 40dB$.

A/



B/

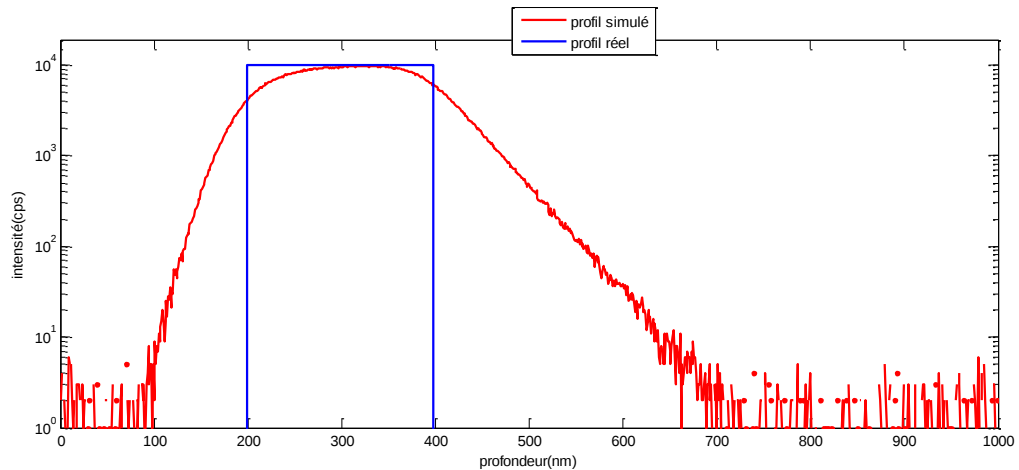


Figure (II-10) : Simulation d'un profil créneau de $\sigma = 22.5\text{nm}$. A) SNR = 30 dB.

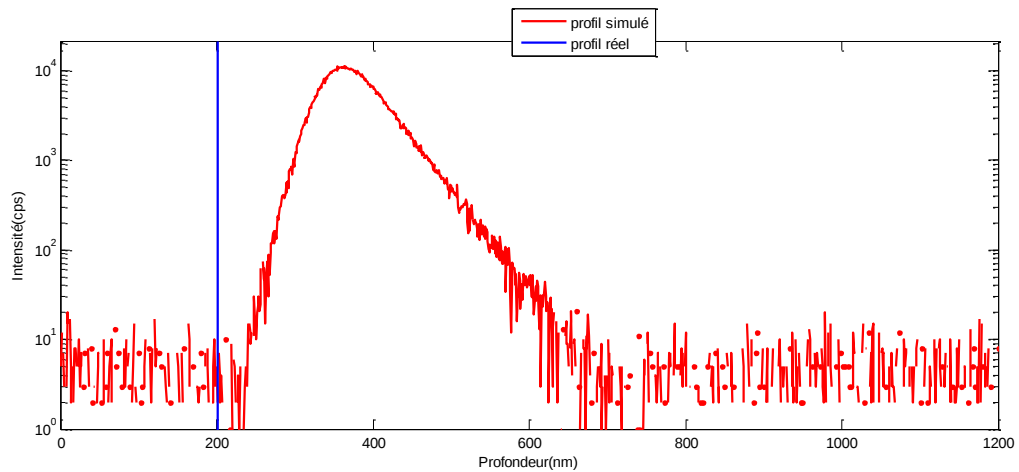
B) SNR = 40dB.

La simulation des profils créneaux représentée par les figures (II-9) et (II-10), permet de tirer , le profil obtenu est presque plat au sommet. On obtient des signaux plus bruités pour une valeur du SNR plus faible.

➤ Simulation d'un profils delta-dopage

Les figures (II-11) représentent la simulation d'un profil d'un delta-dopage de $\sigma = 22.5\text{nm}$. pour deux valeurs du SNR , 30 dB et 40 dB.

A/



B/

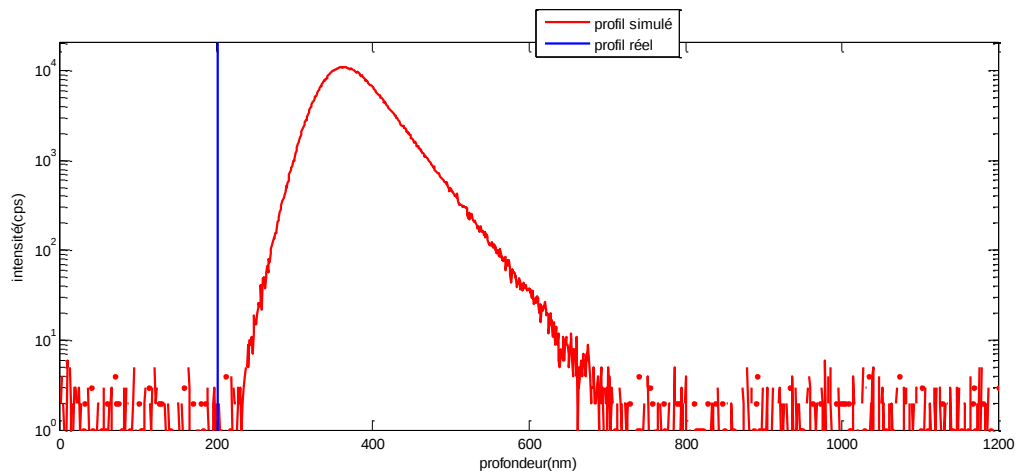


Figure (II-11) :Simulation d'un profil delta-dopage de $\sigma = 22.5\text{nm}$.

A) SNR = 30dB. B) SNR = 40 dB.

En simulant un profil d'un delta dopage, au lieu d'obtenir un profil de 22.5nm nous avons obtenu un profil assez élargi et bruité aux niveaux bas. Une déconvolution est indispensable afin de restituer le profil réel.

II.8. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons simulé des signaux typiques rencontrés en SIMS. Nous avons conclu :

- On obtient des signaux plus bruités pour une valeur du SNR plus faible.
- Lorsque la largeur de la gaussienne est plus grande, le profil simulé est plus proche du profil réel.
- Un créneau de petite largeur, nous donne un profil simulé assez élargi avec une diminution considérable de son amplitude par rapport au profil réel, par contre quand la largeur est plus grande, on obtient un profil avec un sommet presque plat.
- Dans le cas d'un profil constitué par deux deltas-dopage séparés d'une distance d , pour une très faible distance les deux deltas-dopages sont indiscernables dans les profils simulés, par contre pour une distance plus grande, les deux deltas dopages sont presque totalement séparés. La distance d entre les structures influe donc beaucoup sur les résultats obtenus par SIMS.
- La déconvolution est indispensable pour restituer les profils réels.

Chapitre III

Déconvolution des profils simulés

III.1. INTRODUCTION

Nous avons montré dans le chapitre précédent la nécessité de l'utilisation des techniques de traitement numérique pour l'amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS. Parmi les techniques de traitement du signal les plus utilisées dans de nombreuses disciplines, la déconvolution. Dans ce chapitre, nous allons donc déconvoluer les signaux trouvés dans le chapitre précédent. Ceci permet d'étudier sa efficacité. En effet, l'utilisation des profils simulés permet de bien vérifier les performances de l'algorithme en termes de qualité de restauration des profils réels. Dans ce cas, les profils réels sont construits par nous-mêmes, ce qui permet de vérifier la qualité de restauration par une simple comparaison visuelle entre le profil déconvolué et le profil réel et /où par le calcul de l'erreur entre le profil réel et le profil déconvolué (l'erreur vraie). De plus, l'évolution de l'erreur vraie en fonction des itérations permet d'étudier la convergence de la technique.

Dans ce chapitre, nous allons exposer les principes de la déconvolution, nous nous attacherons en particulier à son application en SIMS.

III.2. GENERALITES SUR LA DECONVOLUTION

III.2.1. Définitions

On propose en général les définitions suivantes :

- La déconvolution est la résolution de l'équation de convolution.
- La déconvolution se présente comme étant le problème inverse de la convolution.

Dans les sciences appliquées l'équation de convolution donne lieu à deux problèmes inverses de grande importance [30].

- a. L'identification : c'est la détermination des paramètres d'un système dont on connaît le signal d'entrée et sa mesure.
- b. Le filtrage inverse : c'est la reconstruction d'un signal à partir de sa mesure via un système caractérisé par une réponse impulsionnelle parfaitement connue.

La déconvolution peut être un filtrage inverse ou une identification.

III.2.2. La déconvolution : un problème inverse mal posé

Un problème inverse est un problème qui consiste à déterminer des causes connaissant des effets. Ainsi, ce problème est l'inverse de celui appelé problème direct, consistant à déduire les effets, les causes étant connues. La déconvolution consiste à déterminer le profil réel (signal d'entrée) à partir des données du profil mesuré (signal de sortie) et de la DRF. Elle est donc un problème inverse. Dans un livre célèbre, Hadamard[31], a introduit dès 1923 la notion de problème bienposé. Il s'agit d'un problème dont:

- La solution existe.
- Elle est unique.
- Elle est stable : une petite variation des entrées entraîne une petite variation des sorties.

Les problèmes qui ne satisferont pas à ces exigences sont dits mal posés. Malheureusement, les problèmes inverses ne vérifient souvent pas l'une ou l'autre de ces conditions, voire les trois ensembles. En utilisant le formalisme matriciel, et en supposant un cas idéal où le bruit n'existe pas, l'équation de convolution s'écrit tout simplement par : $y = Hx$. La division des deux membres de cette équation par H conduit directement à une solution formelle :

$x = H^{-1}y$. En pratique, il est impensable de vouloir effectuer une mesure physique sans que le résultat ne soit entaché d'une part plus ou moins importante du bruit, et l'équation de convolution devenu donc : $y = Hx + b$.

Si on applique la même méthode que précédemment à cette équation, on aura une solution estimée x_{est} qui aura l'expression :

$$x_{est} = \frac{y}{H} = \frac{Hx}{H} + \frac{b}{H} \Leftrightarrow x_{est} = x + H^{-1}b \quad (III.1)$$

Pour que la solution x_{est} existe, il faut que la matrice H soit inversible. Cependant, la matrice H n'est pas une matrice carrée, elle est donc non inversible. L'une des manières de résoudre ce problème est d'utiliser la convolution circulaire, où la matrice de Toeplitz de h est carrée et donc inversible. Dans ce qui suit, seule la convolution circulaire est utilisée. On rappelle, que le résultat obtenu dans les deux cas (convolutions linéaire et circulaire) est identique.

La matrice $\mathbf{H}$ est très mal conditionnée. Cela signifie qu'elle peut avoir des valeurs propres très petites. Soit λ_{min} et λ_{max} la plus petite et la plus grande des valeurs propres de $\mathbf{H}$, le conditionnement est alors défini par $\text{cond}(\mathbf{H}) = \sqrt{|\lambda_{max}|/|\lambda_{min}|}$. Plus ce nombre est grand, moins le problème est conditionné.

Même si la solution x_{est} existe, elle n'est pas stable, car lors de l'inversion, les petites valeurs propres de $\mathbf{H}$ donneront des valeurs extrêmement grandes, ce qui a pour effet d'amplifier considérablement le bruit, au point de rendre méconnaissable le résultat obtenu (Ceci est expliqué par la présence du terme $\mathbf{H}^{-1}\mathbf{b}$ qui s'ajoute au signal réel (x)). Dans ces conditions, il est encore possible que l'unicité de la solution du problème de déconvolution soit impossible à garantir.

Une autre façon d'expliquer le problème peut être faite en effectuant les calculs dans l'espace de Fourier. La relation (3.1) s'écrit :

$$X_{est}(f) = X(f) + \mathbf{H}^{-1}(f)B(f) \quad (\text{III.2})$$

On voit que $X_{est}(f)$ est composé du profil réel $X(f)$ auquel s'ajoute le terme $\mathbf{H}^{-1}(f)B(f)$. On constate que le spectre est principalement constitué de basses fréquences. Ses composantes chutent rapidement de plusieurs décades à partir d'une certaine fréquence de coupure. $\mathbf{H}(f)$ est donc un filtre passe-bas, son inverse $\mathbf{H}^{-1}(f)$ agit comme un amplificateur hautes fréquences, et le bruit sera fortement amplifié par ce terme. Il en résulte une solution $X_{est}(f)$ qui a un spectre « saturé » de bruit dans les hautes fréquences, et dont l'image $x_{est}(f)$ dans le domaine temporel est un signal fortement oscillatoire et inutilisable.

III.2.3. Solution du problème de déconvolution par la méthode des moindres Carrés

Une solution estimée x_{est} du problème de déconvolution peut être obtenue par minimisation d'un critère au sens des moindres carrés. Dans ce cas, on cherche une solution estimée x_{est} telle que $y = \mathbf{H}x_{est}$ soit le plus proche que possible de y au sens de moindres carrés. On part donc de l'idée que la présence de bruit dans les profils mesurés ne permet pas d'accéder à la solution exacte x , mais il existe une solution estimée x_{est} redonnant le signal mesuré après avoir été convolué par h (au bruit près). Nous devons minimiser le terme :

$$\|y - \mathbf{H}x_{est}\|^2 \quad (\text{III. 3})$$

Où Hx_{est} représente le signal reconstruit. Ce signal va nous permettre de vérifier si la convolution de x_{est} par h donne bien le signal mesuré y . on effectue une minimisation de (III.3) par rapport à x_{est} en utilisant les propriétés des produits scalaires et des dérivées, que nous avons présenté au début de ce chapitre, on obtient:

$$\mathbf{H}^T \mathbf{H} x_{est} = \mathbf{H}^T y \quad (\text{III.4})$$

d'où

$$x_{est} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T y \quad (\text{III.5})$$

L'équation (III.5) est appelée équation normale et x_{est} solution des moindres carrés [32]. Cette solution assure la plus grande fidélité aux données mesurées. Cependant, elle n'est pas acceptable, et ceci pour les raisons suivantes :

- Elle n'est pas nécessairement unique : La condition de proximité du signal reconstruit et du signal mesuré peut être satisfaite par plusieurs solutions.
- Nous avons vu que la matrice $\mathbf{H}$ est mal conditionnée. Si $\mathbf{H}$ est mal conditionnée, $\mathbf{H}^T \mathbf{H}$ l'est encore plus et cette solution pourra donc n'avoir aucune signification physique.

Nous nous trouvons donc face à un problème de stabilité du système. Les solutions, quand elles existent, sont inutilisables car multiples et/ou physiquement inacceptable.

Il est alors nécessaire de régulariser le problème en faisant un choix d'une solution physiquement acceptable parmi celles mathématiquement possibles. Ce choix se fait en imposant à la solution de vérifier certaines propriétés selon les connaissances a priori dont on dispose, comme la régularité. Cette modification du cahier des charges du problème de la déconvolution est très utilisée en traitement du signal, et est désignée sous le nom de régularisation.

III.2.4. Régularisation d'un problème mal posé

III.2.4.1. Introduction à la régularisation

Comme nous venons de voir, la déconvolution de signaux SIMS fait certes partie des problèmes inverses mal posés. Les seules données, de la mesure et de la réponse impulsionnelle du système, ne permettent de définir qu'une classe de solutions mathématiquement possibles,

contenant les solutions physiquement acceptables et celle qui ne le sont pas. Pour choisir parmi les solutions possibles celle que nous aurons jugé la plus acceptable, il faut donc inclure une connaissance préalable concernant la solution cherchée dans le processus de résolution du problème, ceci est appelé régularisation. Cette information à priori sera par la suite formulée par un autre critère couplé au critère des moindres carrés (équation III.3).

L'idée principale de la régularisation est donc d'abandonner l'espoir d'obtenir la solution exacte à partir des données bruitées, de définir une classe des solutions admissibles, et de sélectionner à partir de cette classe la solution qui sera considérée comme acceptable, dans le sens qu'elle est compatible avec une certaine information à priori.

On note que l'apport d'information par la régularisation constitue un choix subjectif et dépendra des caractéristiques que l'opérateur souhaite privilégier pour la solution recherchée. La solution obtenue n'est donc pas la seule solution possible, mais une de celles qui sont acceptables.

III.2.4.2. Formulation générale de la régularisation

La solution régularisée est généralement définie par [33]:

$$x(y, \alpha) = \arg \min \{J_1(y, \mathbf{H}x) + \alpha J_2(x)\} \quad (\text{III.6})$$

Où « argmin » signifie l'argument qui minimise l'expression entre crochet. Le terme $J_1(y, \mathbf{H}x)$ est consacré à la minimisation de la distance entre la solution convoluée par $\mathbf{H}$ et le profil mesuré, dans le but d'assurer, à un certain degré, la fidélité de la solution aux données. $\alpha J_2(x)$ est le terme de régularisation désigné pour favoriser certaines propriétés désirables qui résument les connaissances a priori sur la solution. $\alpha > 0$ est le paramètre de régularisation.

La sélection de $J_1(y, \mathbf{H}x)$ et $\alpha J_2(x)$ est un choix qualitatif qui détermine comment la régularisation est faite. A deux sources d'informations. Une fidélité parfaite aux données mesurées y est obtenue pour $\alpha = 0$, alors qu'une fidélité parfaite à l'information a priori est obtenue pour $\alpha = \infty$, sans forcément avoir une solution correspondant aux données mesurées. La régularisation consiste à trouver une solution intermédiaire, en ajustant le paramètre de régularisation α qui fixe un compromis entre ces deux solutions.

Différentes formes de régularisation sont proposées dans la littérature, chacune étant plus ou moins adaptée selon le domaine d'application. Nous nous sommes intéressé, à la

régularisation de Tikhonov-Miller, la méthode la plus connue, et la plus utilisée. Le terme $\alpha J_2(x)$ sera appelé terme de régularisation.

III.2.5. Contraintes dures appliquées à un signal

Nous avons vu que la régularisation est indispensable pour garantir l'unicité et la stabilité de la solution. Cependant, le fait de régulariser le problème ne suffit pas encore à obtenir une solution acceptable physiquement. En particulier, la solution peut contenir des valeurs négatives, ce qui est gênant pour un profil SIMS. En effet, les données mesurées lors de l'acquisition d'un profil SIMS représentent la concentration relative d'une espèce dans un échantillon en fonction de la profondeur, et les profils en profondeurs, sans aucun doute, ne contiennent pas des valeurs négatives. Il est très intéressant donc de pouvoir introduire cette connaissance (la positivité) dans la procédure de déconvolution. On peut penser aussi à introduire d'autres connaissances si on a d'autres informations supplémentaires sur la solution recherchée.

Ces connaissances prendrant le nom de contraintes dures, par opposition aux contraintes imposées par les méthodes de régularisation : contraintes douces. Une contrainte dure se définit par une transformation du signal x de manière à ce qu'il vérifie les propriétés demandées par un opérateur C spécifique.

III.2.6. Méthode de déconvolution en SIMS sans terme de régularisation

En utilisant l'algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures, au cours de notre étude, nous avons observé dans des essais de déconvolution des profils constitués par des deltas-dopage qu'il est possible d'obtenir des résultats très satisfaisant en prenant tout simplement $\alpha = 0$. Nous avons au début attribué ce bon résultat aux faibles valeurs généralement obtenues pour α lors de l'utilisation de la régularisation de Tikhonov-Miller. Nous avons ensuite négliger totalement ce paramètre, et décidé de faire une étude complète du comportement de l'algorithme obtenu dans ce cas.

En prenant $\alpha = 0$, ceci conduit à la suppression du terme de régularisation $\sigma D^T D$ dans l'expression précédente de l'algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures, et l'obtention de l'algorithme suivant :

$$\begin{cases} x_{n+1} = Cx_n + H^T[y - HCx_n] \\ x_0 = H^T y \end{cases} \quad (\text{III.7})$$

Il est très important de noter que la suppression du terme de régularisation $\alpha D^T D$ dans le cas de l'inversion directe conduit directement à la solution par les moindres carrée qui est inacceptable (équation III .5). Ce terme garde toute son importance ici, et il ne faut pas perdre de vue qu'il a été ajouté au terme des moindres carrés afin de transformer le problème mal posé en un problème bien posé. L'algorithme donné par l'équation (III.7) ne constitue finalement qu'une méthode itérative pour la résolution du problème des moindres carrés avec introduction des contraintes dures. Au contraire de l'opération de l'inversion directe, cette procédure permet l'obtention des résultats stables, et constitue une autre manière de régularisation où l'indice d'itération lui-même joue le rôle de paramètre de régularisation. Nous allons voir ceci en détail dans ce chapitre .

Dans une première vue, il apparaît que cet algorithme possède les avantages suivant par rapport à l'algorithme de base :

- Gain de temps de calcul : le calcul de α et $\mathbf{D}$ est évité.
- Simplicité : La déconvolution d'un profil mesuré est possible par la seule connaissance de la DRF.

Une étude détaillée de performances de cet algorithme sera présentée dans ce chapitre

Pour terminer, mentionnons que nous avons abouti à l'expression (3.7) en se basant sur l'algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller et contraintes dures. L'expression (3.7) est finalement équivalente à celle de l'algorithme de Landweber projeté (Projected Landweber Algorithm) [34], qui est basé sur l'algorithme de Landweber [35], un algorithme très connu dans le domaine de traitement des images.

Pour des raisons de rapidité, la plupart des calculs dans ce travail sont effectués dans l'espace de Fourier, bien qu'il soit parfaitement possible de les effectuer dans le domaine matriciel. L'introduction des contraintes dures non linéaires comme la contrainte de positivité ou d'amplitude n'étant pas possible dans l'espace de Fourier, il faut l'effectuer dans le domaine temporel. A chaque itération on aura donc besoin de deux FFT, une transformation de Fourier inverse avant la contrainte et une transformation directe après.

III.2.7. Calcule des erreurs

Pour mesurer la qualité d'une déconvolution, il est très intéressant de calculer les erreurs. On a deux types d'erreur, l'erreur vraie, commise entre les profils réel et déconvolué, et l'erreur de reconstruction, entre les profils mesuré et reconstruit [36, 10, 11].

III.2.7.1. Erreur vraie

L'idéal dans une opération de déconvolution serait de disposer de l'erreur vraie (l'erreur exacte). Malheureusement, elle n'est accessible qu'en simulation. Dans des conditions réelles, le profil réel est bien sûr inconnu, et c'est lui-même qu'on cherche à estimer par l'opération de déconvolution. Par contre, sera une donnée précieuse lors des simulations, où elle permet de vérifier les performances théoriques d'une méthode de déconvolution. Elle peut être exprimée sous deux formes :

- Sous forme d'un vecteur :

La différence point à point entre le profil déconvolué à l'itération n (x_n) et le profil réel (x) :

$$e_{vv} = x_n - x \quad (\text{III.8})$$

III.2.7.2. Erreur de reconstruction

Cette erreur est accessible dans le cas de la déconvolution des profils simulés et même expérimentaux. Comme dans le cas de l'erreur vraie, elle peut être exprimée sous deux formes :

- Sous forme d'un vecteur :

La différence point à point entre le profil mesuré (y) et le profil reconstruit (Hx_n) :

$$E_{rv} = y - Hx_n \quad (\text{III.9})$$

III.3. PROCEDURE DE DECONVOLUTION

Le principe de la simulation de ce problème de déconvolution consiste à choisir une réponse impulsionnelle h et à lui rajouter une composante de bruit. En fait, le profil simulé est équivalent à celui que l'on aurait fabriqué en convoluant un Dirac numérique avec la réponse impulsionnelle, dont les paramètres sont tirés à partir d'une mesure expérimentale, pour aboutir dans un premier temps à un « signal parfait », puis en rajoutant du bruit. Le profil résultant de cette procédure sera appelé « profil mesuré ». Puis, on applique à ce dernier la technique de déconvolution pour à voir le profile reconstitué[11].

La procédure de convolution/ déconvolution est défini par l'organigramme ci-dessous :

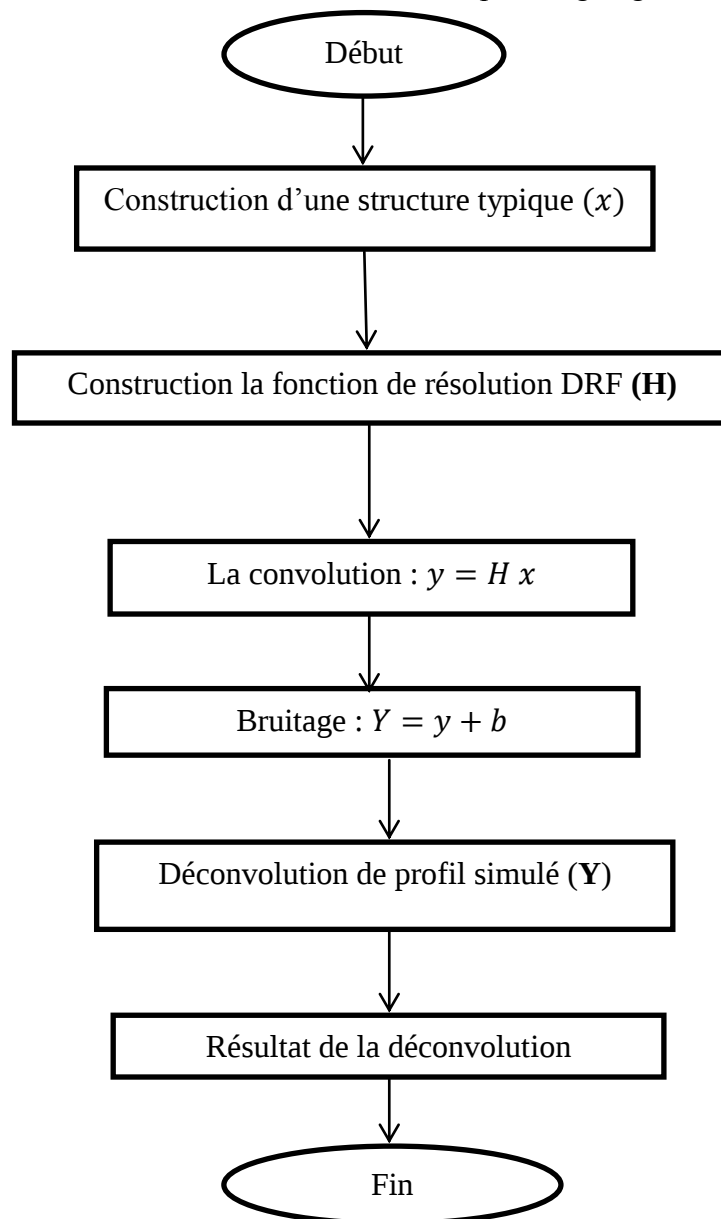


Figure (III-1) : Organigramme de déconvolution.

III.4. DECONVOLUTION DES PROFILS SIMULES

Dans cette section, nous allons examiner les performances de la technique de déconvolution en l'appliquant aux profils précédemment simulés dans le chapitre II.

III.4.1. semi-convergence

Le comportement de l'erreur vraie (Figure (III-2)) indique que l'algorithme de Landweber présente une semi-convergence. Les meilleurs résultats de déconvolution sont bien sûr obtenus après n_{opt} itérations où l'erreur vraie atteint sa valeur minimale. Dans ce travail, les profils déconvolués, dans le cas des signaux gaussiens et créneaux, sont obtenus en utilisant n_{opt} itérations.

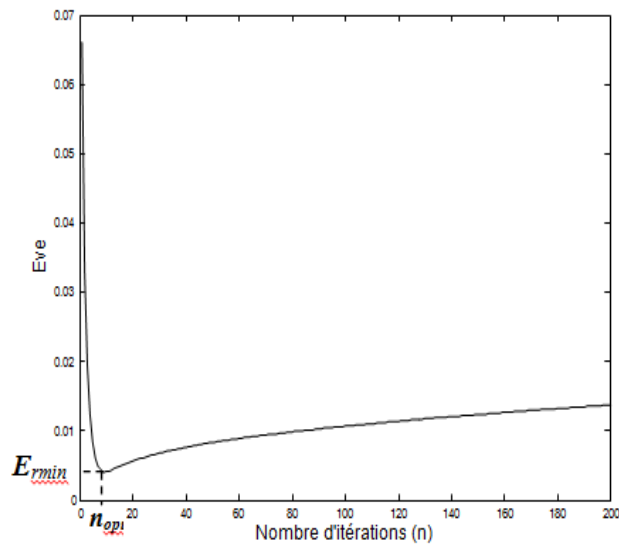
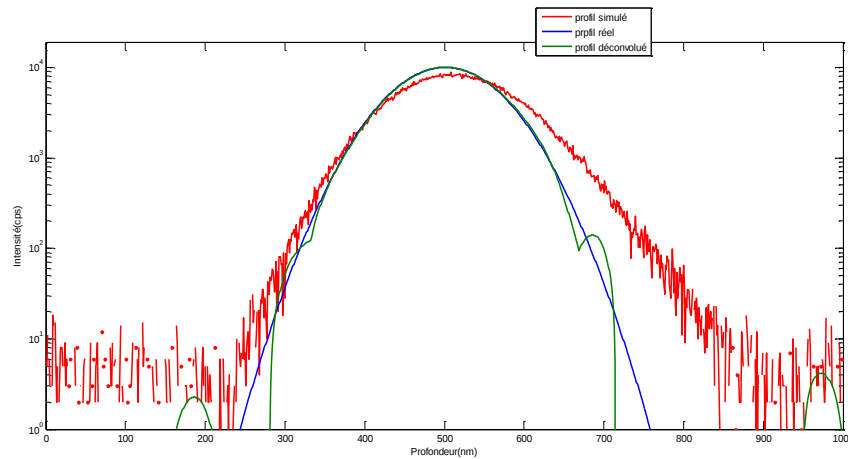


Figure (III-2) : Comportement de semi-convergence.

➤ Déconvolution des profils gaussiens

les figures (III-3) représentent la simulation de deux profils gaussiens d'écart-types $\sigma = 12nm$, pour deux valeurs du SNR= 30dB et SNR=40dB.

A/



B/

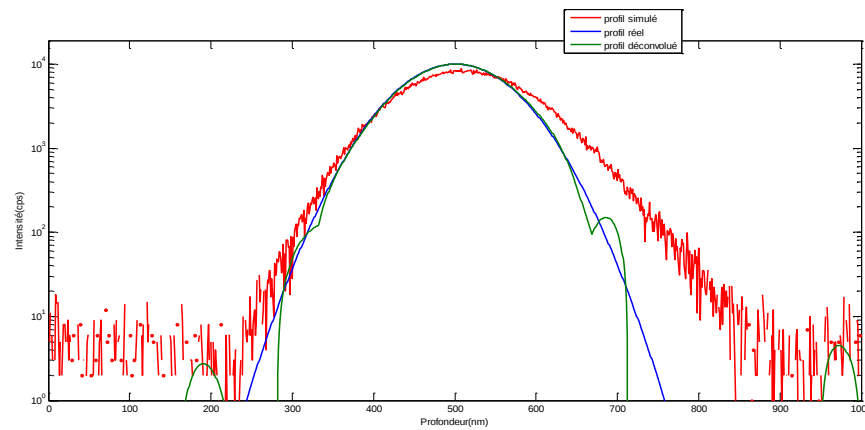


Figure (III-3) : Déconvolution d'un profil gaussien de $\sigma = 12 \text{ nm}$. A) $SNR = 30 \text{ dB}$.

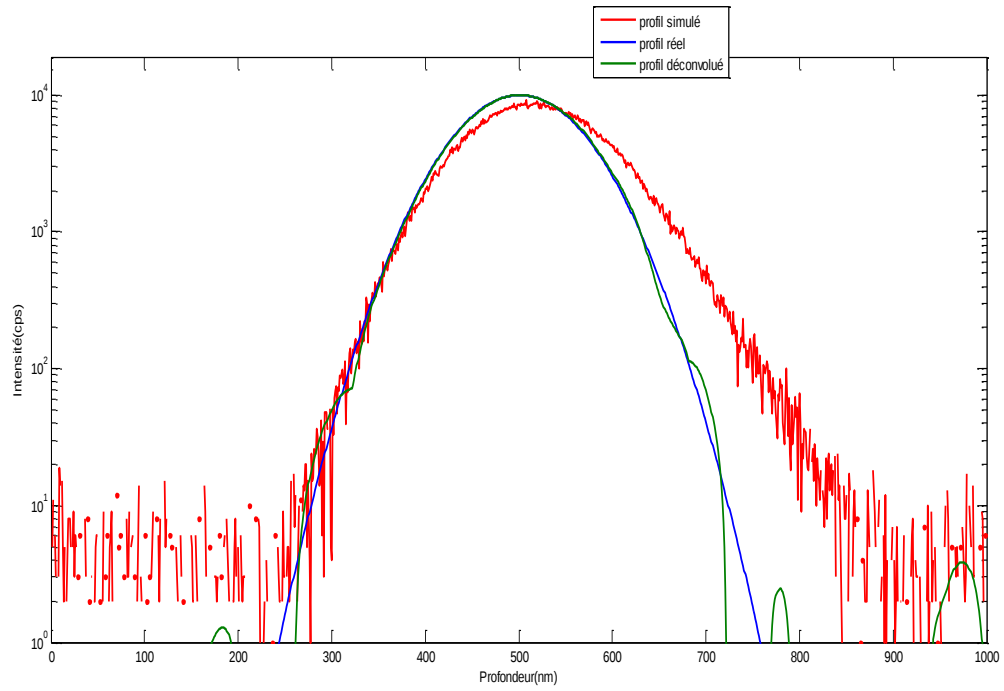
B) $SNR = 40 \text{ dB}$

- Les valeurs de n_{opt} dans le cas de la déconvolution des profils gaussiens sont citées dans le tableau suivant:

SNR	Largeur	n_{opt}
30dB	12nm	13
	22.5nm	18
40dB	12nm	18
	22.5nm	18

Tableau (III-1): Nombre optimal des iterations n_{opt} . Cas des profil gaussiens.

A/



B/

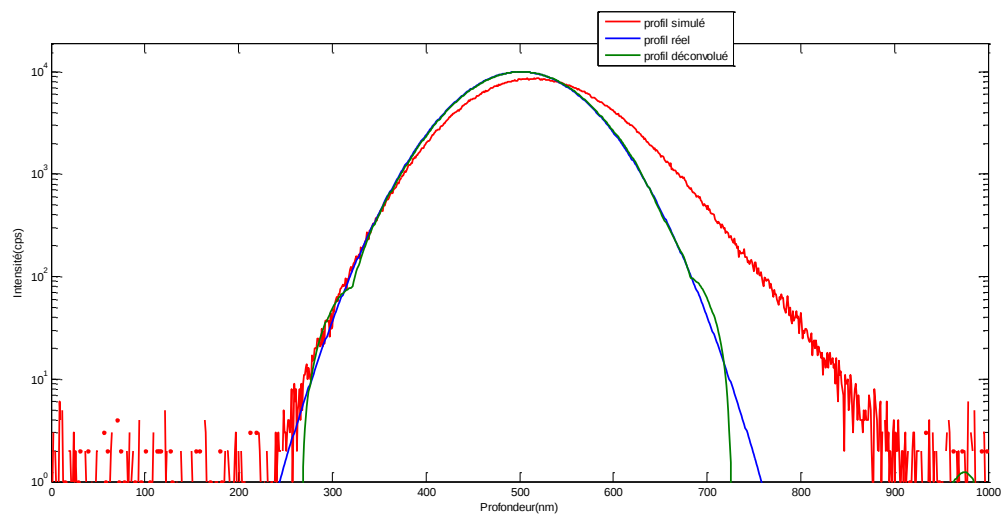
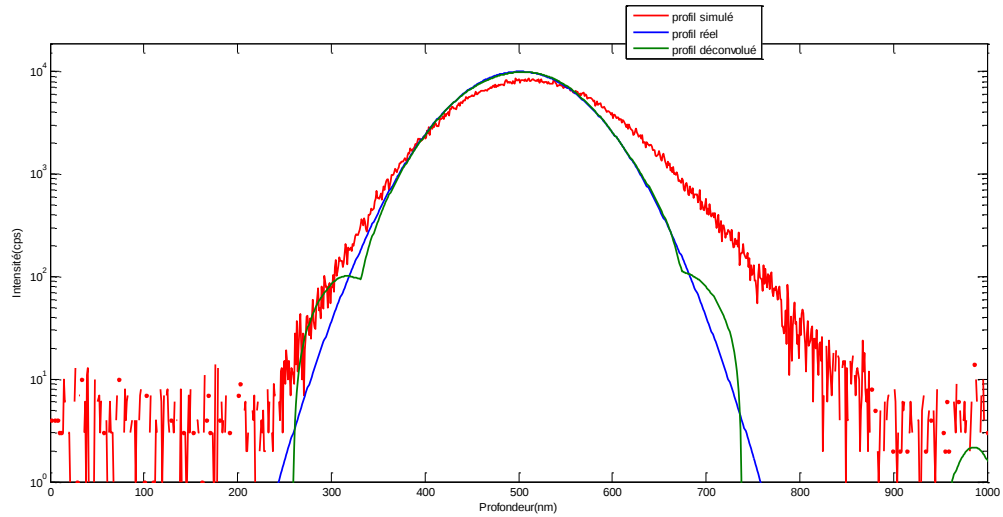


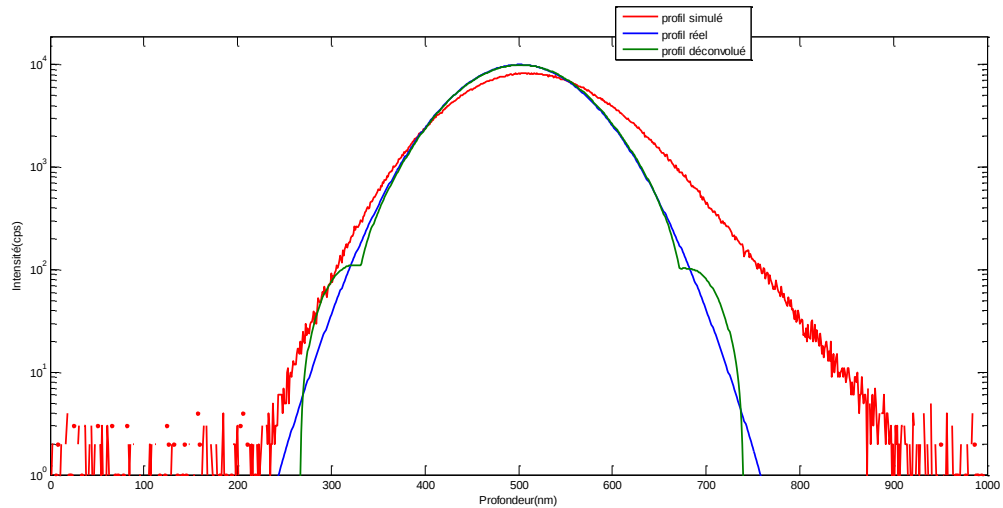
Figure (III-4) : Déconvolution d'un profil gaussien de $\sigma = 12\text{nm.}$, A) $\text{SNR} = 30\text{ dB.}$

B) $\text{SNR} = 40\text{ dB.}$

A/



B/



Figure(III-5) : Déconvolution d'un profil gaussien de $\sigma = 22.5nm$,. A) $SNR = 30 dB$.

B) $SNR = 40 dB$.

La figure (III-4) et (III-5) représente des résultats de la déconvolution des profils gaussiens.obtenu dans le cas de : $\sigma = 12nm$, $\sigma = 22.5nm$. et $SNR = 30dB$, $SNR = 40dB$.

La liaison gaussienne par DRF n'entraîne pas de perte d'information en filtrant les hautes fréquences. Par conséquent, l'enveloppement gaussien par DRF n'a pas d'effet significatif sur la partie principale du spectre DRF.

Ceci explique également la faible différence observée entre le profil mesuré et le profil réel.

✓ **Erreurs**

Les courbes des erreurs, dans le cas du profil gaussien de $\sigma = 12nm$ ($SNR = 30\text{ dB}$) sont représentées sur les figure suivantes:

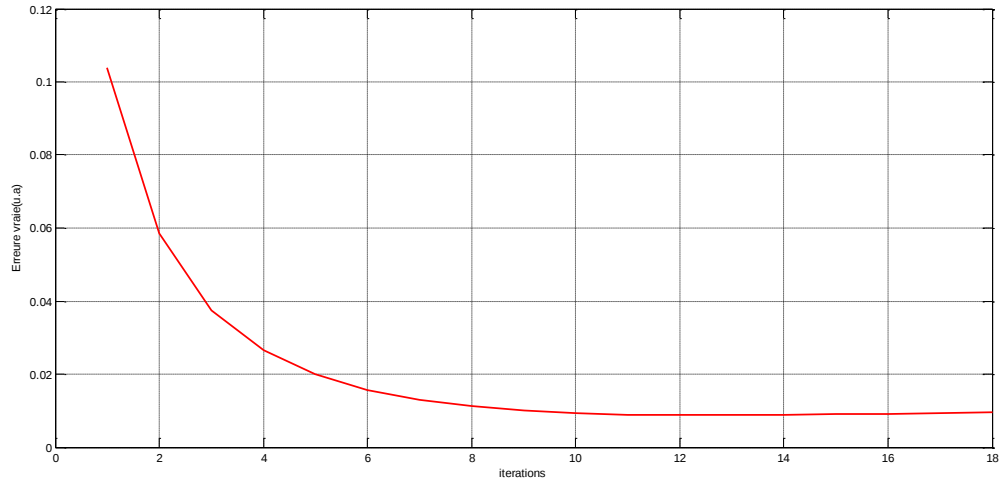


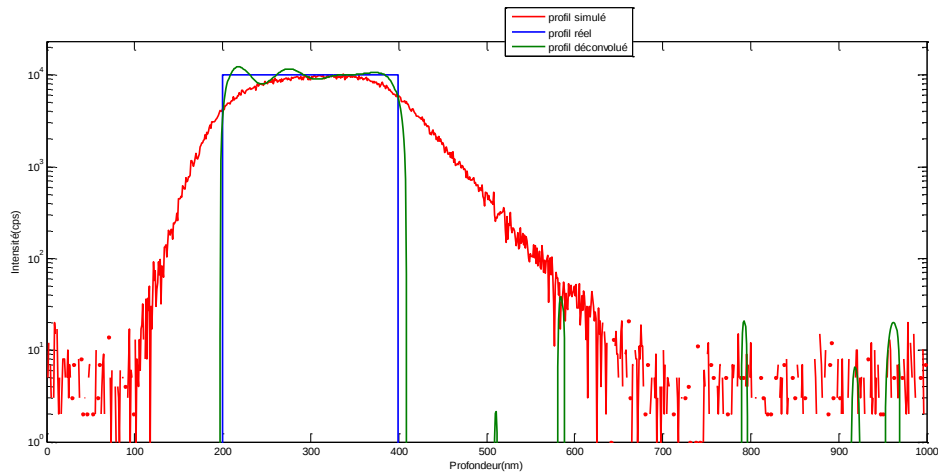
Figure (III-6) : Evolution de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itérations. Cas du profil gaussien.

La figure (III-6) représente la variation de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itération n_{opt} . On observe que l'erreur diminue avec l'augmentation du nombre des itérations jusqu'à atteindre sa valeur minimale, puis augmente de nouveau.

➤ **Déconvolution des profils créneaux**

les figures (III-7) représentent la simulation de deux profils créneaux d'écart-types $\sigma=12nm$, pour deux valeurs du $SNR= 30dB$ et $SNR=40dB$.

A/



B/

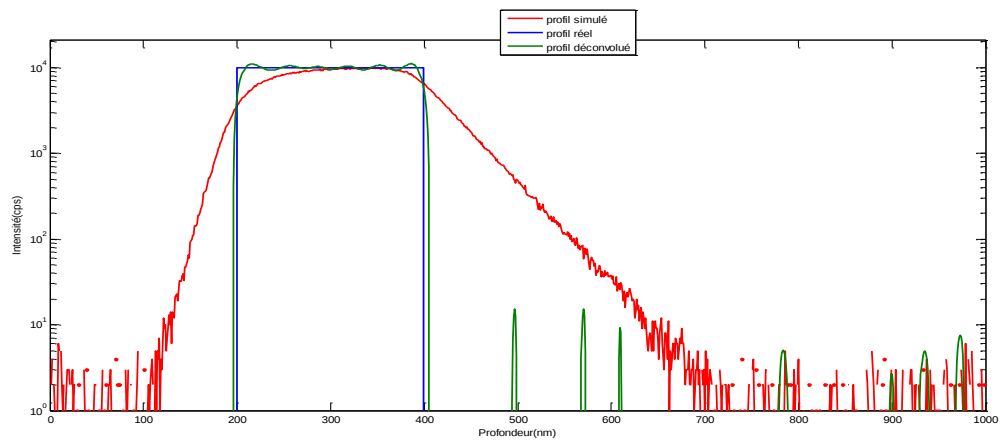


Figure (III-7) : Déconvolution d'un profil créneaux de $\sigma = 12$ nm. A) $SNR = 30$ dB.

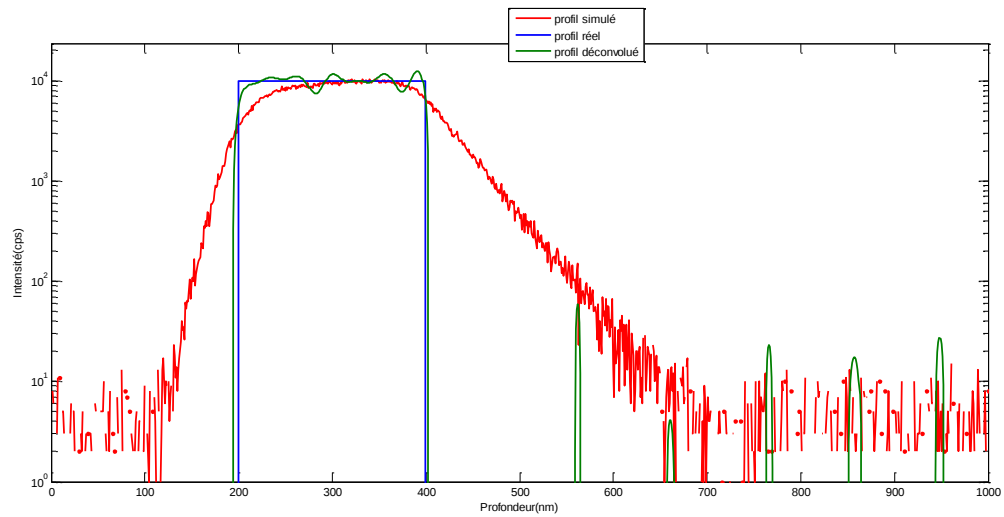
B) $SNR = 40$ dB.

- Les valeurs de n_{opt} dans le cas de la déconvolution des créneaux sont citées dans le tableau suivant :

SNR	Largeur	n_{opt}
30Db	12nm	1193
	22.5nm	760
40dB	12nm	3806
	22.5nm	3269

Tableau (III-2): Nombre optimal des iterations n_{opt} . Cas des profils créneaux.

A/



B/

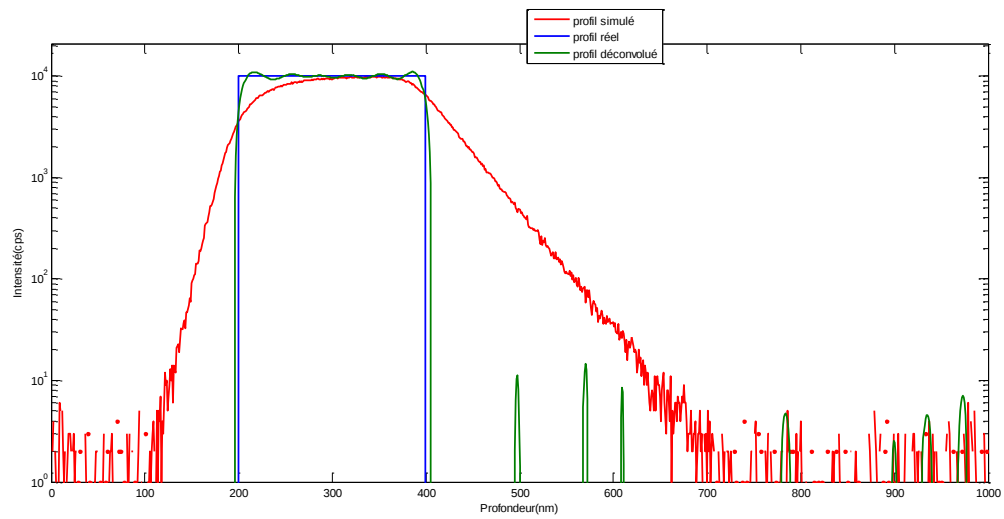
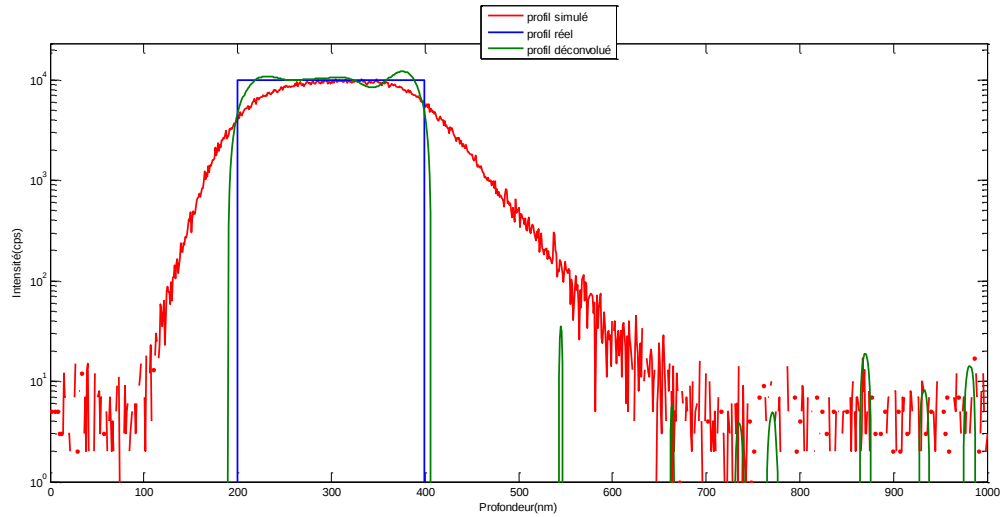


Figure (III-8) : Déconvolution d'un profil créneaux de $\sigma = 12$ nm. A) $SNR = 30$ dB.

B) $SNR = 40$ dB.

A/



B/

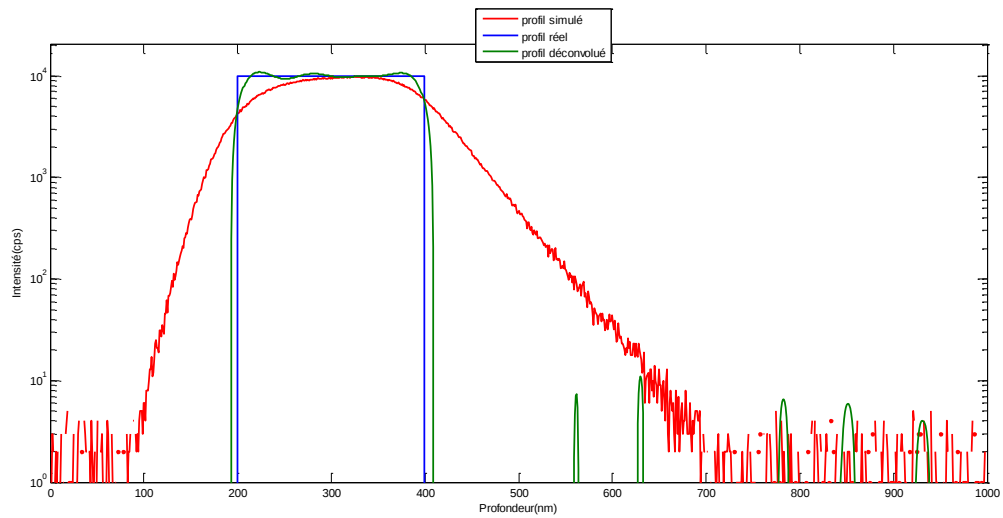


Figure (III-9) : Déconvolution d'un profil créneaux de $\sigma = 22.5$ nm. A) $SNR = 30$ dB.

B) $SNR = 40$ dB.

D'après les figures (III-8) et (III-9), on observe :

- Après déconvolution, les fronts montant et descendants des profils créneaux sont pratiquement restaurés. Les pentes exponentielles, visibles dans les profils mesurés disparaissent. Cependant, il y a apparition d'oscillations sur les plateaux des créneaux.
- Aux niveaux bas, il y apparition des artéfacts de déconvolution assez négligeables.

✓ **Erreurs**

Les courbes des erreurs, dans le cas du profil créneau de $12nm$ de largeur ($SNR = 30dB$), sont représentées sur la figure (III-10). D'après la courbe de l'erreur vraie, on observe que la propriété de semi-convergence est moins prononcée par comparaison avec le cas de la déconvolution des profils gaussiens.

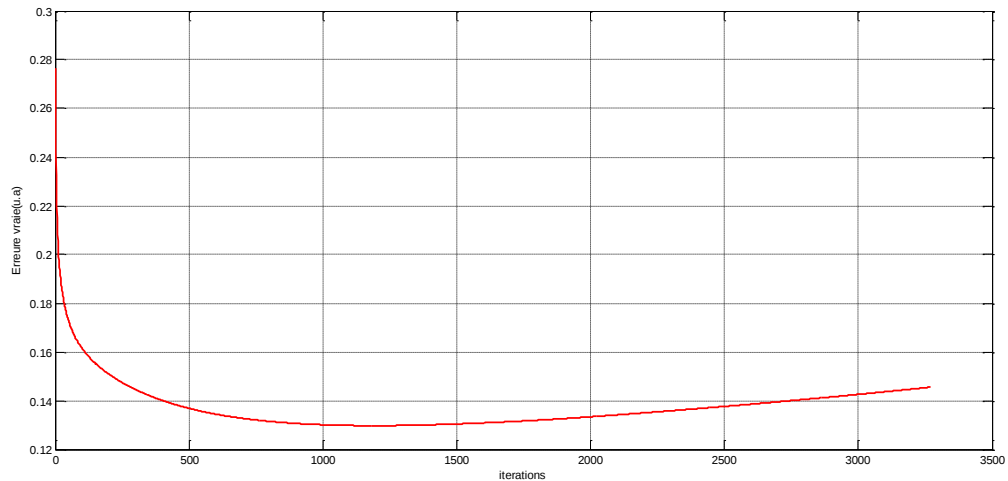


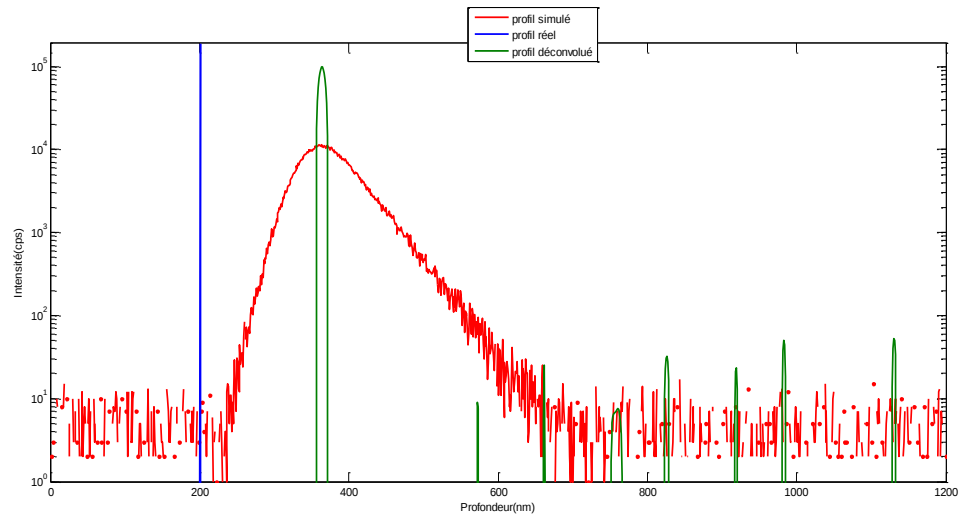
Figure (III-10) : Evolution de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itération. Cas du profil créneau.

La figure (III-10) représente la variation de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itération n_{opt} . On observe que l'erreur diminue avec l'augmentation du nombre des itérations jusqu'à atteindre sa valeur minimale, puis augmente de nouveau.

➤ **Déconvolution d'un profil delta-dopage**

les figures (III-11) représentent la simulation de deux profils delta-dopage d'écart-types pour deux valeurs du SNR : A) $SNR = 30dB$ et B) $SNR = 40dB$.

A/



B/

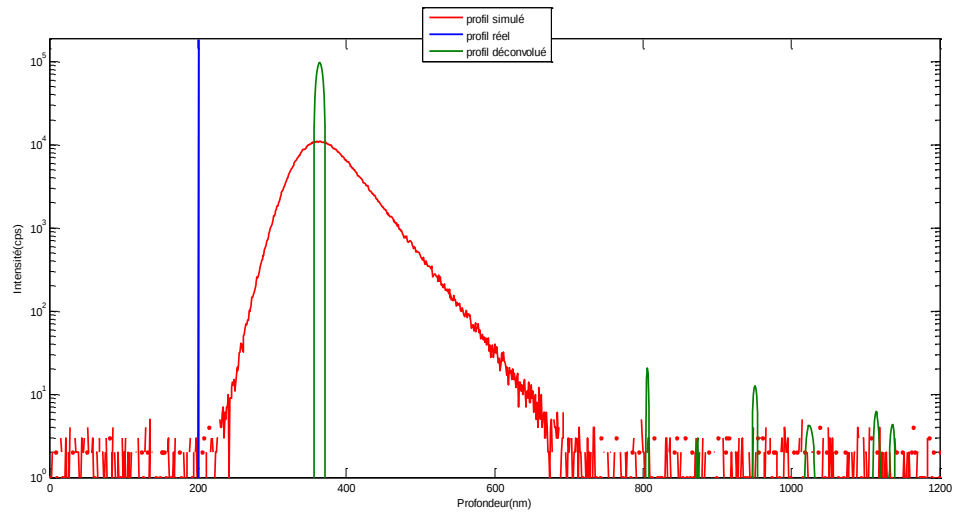


Figure (III-11) : Déconvolution d'un profil delta-dopage de $\sigma = 22.5$ nm. A) $SNR = 30$ dB.

B) $SNR = 40$ dB.

✓ *Erreurs*

La figure (III-12) représente l'erreur vraie. On peut voir clairement que l'erreur vraie décroît toujours, et ceci quelque soit le nombre d'itérations effectué.

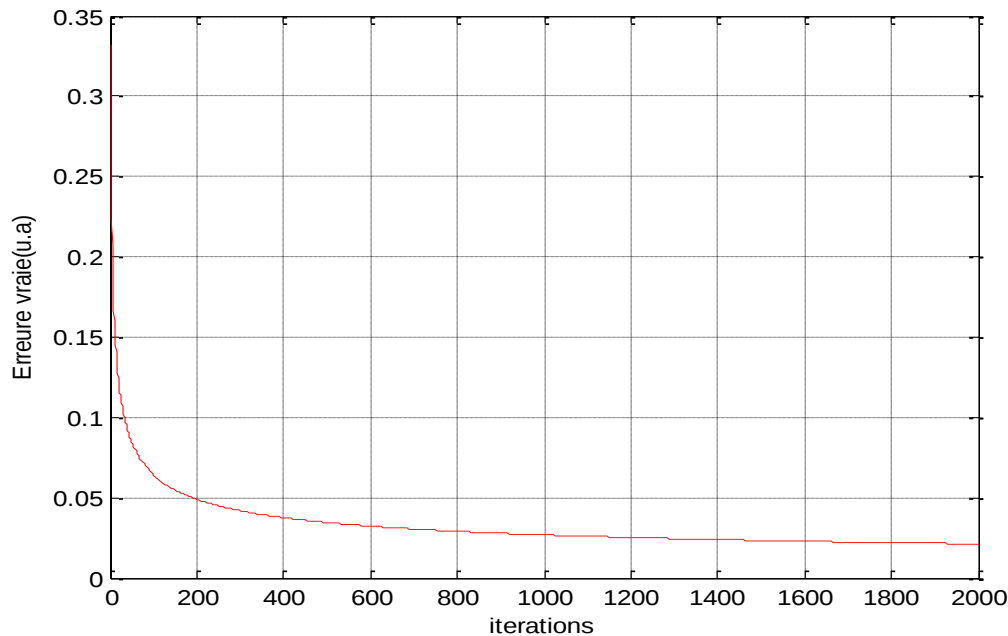


Figure (III-12) : Evolution de l'erreur vraie en fonction du nombre d'itérations. Cas d'un profil delta dopage.

Lors de la déconvolution, nous avons observé que le profil déconvolué obtenu est tronqué sur les bords. Ici l'opération de la déconvolution cherche à restaurer un profil réel composé par un seul point. A chaque itération le profil déconvolué s'approche de plus en plus du profil réel. L'opération de déconvolution doit normalement conduire finalement à un profil déconvolué composé aussi par un seul point. Or on sait que la déconvolution n'est pas supposée restaurer complètement le profil réel. Le profil déconvolué sera, dans tous cas, intermédiaire entre le profil mesuré et le profil réel .

Les résultats de la déconvolution sont représentés sur la figure (III-11). Le profile déconvolué nous montre une nette amélioration de la résolution en profondeur : On observe une réduction notable de la largeur de δ -dopage avec une suppression complète des pentes exponentielles de part et d'autre du pic.

Cet effet de la décroissance de l'erreur vraie figure (III-12) peut être expliqué par le grand écart qui existe entre le profile mesuré et le profile original, puisque les deltas-dopage

sont des structures très affectées par la convolution. En effet, au cours des itérations, le profil déconvolué s'approche de plus en plus vers le profil original.

III.5. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons essayé de donner une vision claire sur le principe de la restauration des données perdues, par l'application d'une technique de déconvolution où nous avons mis en place une procédure de déconvolution pour Profilage en profondeur SIMS.

Nous avons tout d'abord commencé par évaluer les performances de l'algorithme en l'absence du terme de régularisation proposé dans ce travail. Cette évaluation est effectuée sur des profils simulés, en particulier les trois signaux-types : Gaussien, créneau et delta dopage. Nous avons observé que l'algorithme sans terme de régularisation, est capable de produire des solutions régulières, avec une convergence plus rapide.

Nous nous sommes attachés ensuite à la technique de déconvolution traitée dans ce travail.

- La déconvolution des profils gaussiens et en créneaux nous a montré que l'algorithme est semi-convergent. Il s'agit donc d'une méthode de régularisation par critère d'arrêt.
- Il a été observé également, que dans le cas de deltas-dopage l'algorithme converge toujours, au moins dans la gamme étudiée.

CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

Les travaux présentés dans cette thèse portent sur l'amélioration de la résolution en profondeur dans l'analyse SIMS, et plus généralement sur la restauration d'information aux caractéristiques de profondeur avec des techniques de déconvolution.

Notre approche du problème a débuté par une description de la technique d'analyse par SIMS ainsi que des mécanismes responsables de la dégradation de la résolution en profondeur. L'observation des profils de concentration mesurés, en particulier les deltas dopage, a conduit à une modélisation semi-empirique mais simple du mixage collisionnel, considéré comme principal responsable de la dégradation de la résolution. La fonction de résolution trouvée devient ainsi la réponse impulsionnelle du système de mesure, dont la connaissance est essentielle à la mise en œuvre de la déconvolution. Nous avons ensuite exposé les bases des techniques de restauration d'informations. Les profils dégradés par l'analyse SIMS font partie des grandes familles de problèmes mal posés pour lesquels la solution de l'équation de convolution bruitée n'est pas stable. Nous avons donc un moyen de stabiliser la solution et de la rendre compatible avec ce que nous devrions attendre du signal de l'analyse SIMS.

Notre étude s'est poursuivie par la déconvolution de profils simulés de différentes formes et plus ou moins dégradés. L'étude des deltas-dopage simulés nous a permis de cerner les performances ultimes de notre méthode de déconvolution.

Les principaux éléments auxquels ce travail a aboutit sont:

- Malgré ses performances (sa sensibilité et ses performances en matière de résolution en profondeur) le profil en profondeur mesuré par SIMS n'est pas une image fidèle du profil original (profil dit « réel ») existant réellement dans l'échantillon avant l'analyse. Ceci conduit à l'utilisation des algorithmes de déconvolution pour améliorer la résolution en profondeur de l'analyse SIMS.
- La procédure de déconvolution peut conduire à une nette amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS.
- L'algorithme traité constitue finalement une méthode de régularisation par critère d'arrêt, ce qui nous a conduit à présenter quelques techniques pour stopper les itérations avant l'apparition de la divergence. Il a été remarqué cependant que la convergence est très lente dans le cas des structures très abruptes. Dans ce cas, l'arrêt de l'algorithme lors de la déconvolution ne constitue donc pas un vrai problème.

Notre perspective est d'appliquer cette technique de déconvolution à des profils expérimentaux, ce qui nous a permis de tester ses performances dans des conditions où les facteurs expérimentaux entrent en jeu. Aussi la possibilité d'introduire l'intelligence artificielle (Les méthodes méta-heuristiques) dans le processus de restauration d'information et la comparé avec la méthode utilisée dans ce travail.

REFERENCES

Références

- [1] **Seebauer.E.G., Barlaz.D.E.,** SIMS for analysis of nanostructures, Current Opinion in Chemical Engineering, Vol 12, pp. 8-13.2016.
- [2] **Hofmann.S.,** Sputter depth profiling: Past, present, and future, Surf. Interface Anal. Vol 46, pp. 654–662.2014.
- [3] **Drozdov Yu. N., Drozdov M. N., Novikov A. V., Yunin P. A., et Yurasov D. V.,** Layer-by-layer analysis of structures containing δ -layers by secondary ion mass spectrometry taking into account the TOF.SIMS-5 depth resolutions Function, Journal of Surface Investigation, Vol 6, N° 4, pp. 574-577.2012.
- [4] **Wittmaack K.,** Detailed évaluation of the Analytical résolution Function, Journal of Applied Surface Science, Vol 203-204, pp. 268-272.2003.
- [5] **Portavoce A., Rodriguez N., Daineche R., Grosjean C., et Girardeaux C.,** Correction of secondary ion mass spectrometry profiles for atom diffusion measurements, Journal of Materials Letters, ELSEVIER, Vol 63, pp. 676-678.2012.
- [6] **Postawa .Z., Rzeznik .L., Paruch.R., Russo.M.F., Winograd., N and Garrison B.,** Depth profiling by cluster projectiles as seen by computer simulations, Surf. Interface Anal, Vol 43 , pp. 12–15.2011.
- [7] **Kudriavtsev Y., Gallardo S., Villegas A., Ramirez G., et Asomoza R.,** Depth-Profile Analysis of Nanostructures by SIMS: Depth Résolution Function, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, Vol 72, N°. 7, pp. 895-898. 2008.
- [8] **Y. Lamrani.,** Contribution à l'étude expérimentale et à la simulation de la diffusion anormale du Bore dans le Silicium, Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier Toulouse III, 176p.2005.
- [9] **Prudon G.,** Etude de la sensibilité et de la résolution en profondeur lors de l'analyse par SIMS. Application à la silice et au silicium. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon .1990.
- [10] **Gautier B.,** Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par SIMS. Détermination de la fonction de résolution pour le bore dans le silicium, mis au point d'une procédure de déconvolution et applications. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon.1997.

- [11] **Mancina G.**, Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS par déconvolution, algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la microélectronique silicium. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon.2001.
- [12] **Gnazer H., Oechsner H.**, SIMS depth profile analysis using MCs^+ molecular ions, Journal of Analytical Chemistry: Vol 54, pp. 341.1999.
- [13] **Marie Y., Bieck W., Migeon H. N.**, MCs^+ and MCs_2^+ relative ion yields of 16 elements implanted in Si, SiG and SiO₂, In: Benninghoven et al ,pp. 685.1997.
- [14] **Holliger P., Laugier F., Dupuy J.C.**, SIMS depth profiling of ultrashallow P, Ge, and As implants in Si using MCs^+ ions, Surface and Interface Analysis: Vol 34, pp. 472.2002.
- [15] **Baboux N.**, Analyse ultime par Spectrométrie de Masses des Ions Secondaires des matériaux de la microélectronique avancée : Contribution à l'interprétation des profils de bore dans le silicium. Thèse de Doctorat, INSA de Lyon.2001.
- [16] **Boulakroune M.**, Restitution des signaux lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires. Contribution à l'amélioration de la résolution en profondeur par déconvolution multirésolution. Application aux couches de silicium dopées par le Bore. Thèse de doctorat, Université El Hadj Lakhdar de Batna.2008.
- [17] **Behrish R. Et Wittmaack K.**, Sputtering by particle bombardement III, characteristics of sputtered particles, Technical applications, Springer-Verlag Berlin-Heidelberg, Germany, pp. 416.1991.
- [18] **Wittmaack K.**, Energy- and angle-resolved depth of origin of isotopes sputtered from an elemental Target, Physical Review: Vol 56, N°10 ,pp. 5701.1997.
- [19] **DAHRAOUI N.**, Traitement numérique du signal secondaire de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires. Quantification des profils en profondeur et mise au point d'une procédure de déconvolution. Cas des structures TiSi₂/ Si(B) et TiSi₂/ Si(As), Thèse de Magister, Université Kasdi Merbah de Ouargla , pp. 87.2014 .
- [20] **Raïs El hadi B.**, Fondements du traitement signal, presse de l' Office des Publications Universitaires(OPU), Algérie, 4^{ème} édition, pp. 213.2008.
- [21] **Hofmann S.**, Atomic mixing, surface roughness and information depth in high-resolution AES depth profiling of a GaAs/AlAs superlattice structure, Surface and Interface Analysis: Vol 21, pp. 673.1994.

- [22] **Cooley J.W., Tukey J.W.**, An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series, *Mathematics of Computation*: Vol 19, pp. 297.1965.
- [23] **Wittmaack K.**, Detailed évaluation of the Analytical résolution Function, *Applied Surface Science*: pp .203-204-268.2003.
- [24] **Max J. et col.**, Méthodes et techniques de traitement du signal et applications aux mesures physiques, Paris : Masson. 1972.
- [25] **Allen P.N., Dowsett M.G., Collins R.**, SIMS profile quantification by maximum entropy déconvolution. *Surface and Interface Analysis*: Vol 20, pp. 696. 1993.
- [26] **Makarov V.V.**, Nature of noise in SIMS depth profiling data, *Surface and Interface Analysis*: Vol 27, pp. 801.1999.
- [27] **Vio R., Bardsley J., Wamsteker W.**, Least-Squares méthode with Poissonian noise: Analysis and comparaison with the Richardson- Lucy algorithm. *Astronomy and Astrophysiques*: pp. 436-741.2005.
- [28] **Boulsina F., Gautier B.**, Itérative déconvolution using the MRI model for removing expérimental broadening and shift effects in SIMS depth profiles. *Surf Interface Anal*, vol 50, pp.1336-1342 .2018.
- [29] **Yunin PA., Drozdov YN., Drozdov MN.**, Expérimental shift allowance in the déconvolution of SIMS depth profiles. *Surf Interface Anal*, vol 45, pp. 1228-1232. 2013.
- [30] **Kasmi H.**, Développement d'une méthode de déconvolution temporelle et récursive. Mémoire de Magister, Université Ferhat Abbas, SETIF1, pp. 87. 2014.
- [31] **Hadamard J.**, Lectures on Cauchy's Problème in Linear Partial Différentiel Equations. Yale Université Press, New Haven.1923.
- [32] **Demoment G.**, Image reconstruction and réstoration: overview of Common estimation structures and problème, *IEEE Transactions on Acoustics, Speech and Signal Processing*: Vol 37, N°12. 2024.
- [33] **Gautier B., Prost R., Prudon G., Dupuy J.C.**, Déconvolution of SIMS depth profiles of Boron in Silicon, *Surface and Interface Analysis*: Vol 24, pp. 733. 1996.
- [34] **Eicke B.**, Iterations méthode for convexly constrained ill-posed problèmes in Hilbert space, *Numerical Functional Analysis and Optimisations*: Vol 13, pp. 413. 1992.

- [35] **Landweber L.**, An itération formula for Fredholm intégral équations of the first kind, American Journal of Mathematics: Vol 73, pp. 615. 1951.
- [36] **Boulsina F.**, Contribution à l'amélioration de la résolution en profondeur lors de l'analyse SIMS par des techniques de traitement du signal. Thèse de Doctorat, Université Mentouri de Constantine , Algérie.2009.