

**TABLE DES MATIERES**

INTRODUCTION	1
CHAPITRE1.-BOMBARDEMENT D'ION ENERGETIQUE	3
« Toy ny voninkazo ampaniriana amin'ny tavy ny fahaizana tsy mandray faka amin'ny fahalalana ny sata sy fitendrazan'ny tena, ka met y harevaka sy ho azo afindrafandra etsy sy eroa, fa tsy hanjary hazobe hihinamboa na oviana na oviana..	3
ATOLOTRAY.....	4
Lalaniaina sy Njaka Rado.....	4
REMERCIEMENTS.....	5
Caractéristique cherchée.....	15
Très difficile.....	15
Bonne .....	15
INTERACTION DE L'ION INCIDENT AVEC LA MATIERE [1],[2].....	3
CHOCS NUCLEAIRES.....	4
Les systemes de references.....	4
Angle de diffusion.....	7
La perte d'énergie nucléaire.....	12
CHOCS ELECTRONIQUES.....	12
Le pouvoir d'arrêt électronique.....	13
Perte d'énergie électronique.....	14
NOTRE MODELE .....	14
II.1. ENERGIE LIMITE ET LIBRE PARCOURS MOYEN:.....	15
II.2. LES LIMITES DE CE MODELE:.....	15
II.4. LOCALISATION D'UN ION IMPLANTE:.....	17
RESULTAT.....	18
Facteur correctif.....	18
Implantation dans le silicium.....	19
I.cascades de collisions.....	23
GENERATION DE CASCADES .....	24
ENERGIE DE DEPLACEMENT Ed, RENDEMENT NUCLÉAIRE $\gamma$ .....	25
ENERGIE SEUIL D'ARRET $E_{min}$ .....	26
DEFAUTS.....	26
Les paires de Frenkel.....	26
Les substitutionnels.....	26
Les phonons.....	27
Position finale de la particule incidente.....	27
Modèle cascades de collisions.....	28
description.....	29
Résultats.....	32
Défauts des ions léger-intermediaire-lourd.....	32
Profil de l'implantation et profil des défauts.....	37
PRESENTATION DES INTERFACES.....	40
LES ENTREES.....	40
Création.....	41

Traitement.....	42
Autres.....	42
<b>RESULTATS.....</b>	<b>42</b>
Résultats d'implantation.....	43
Résultats de cascades.....	43
<b>INCONVENIENTS.....</b>	<b>45</b>
Limitation logicielle.....	45
Inconvénients matériels.....	45
<b>CHAPITRE 2.-CASCADES DE COLLISIONS</b>	<b>23</b>
<i>« Toy ny voninkazo ampaniriana amin'ny tavy ny fahaizana tsy mandray faka amin'ny fahalalana ny sata sy fitendrazan'ny tena, ka met y harevaka sy ho azo afindrafindra etsy sy eroa, fa tsy hanjary hazobe hihinamboa na oviana na oviana..3</i>	
<b>ATOLOTRAY.....</b>	<b>4</b>
Lalaniaina sy Njaka Rado.....	4
REMERCIEMENTS.....	5
<b>Caractéristique cherchée.....</b>	<b>15</b>
Très difficile.....	15
Bonne .....	15
<b>INTERACTION DE L'ION INCIDENT AVEC LA MATIERE [1],[2].</b>	<b>3</b>
<b>CHOCS NUCLEAIRES.....</b>	<b>4</b>
Les systemes de references.....	4
Angle de diffusion.....	7
La perte d'énergie nucléaire.....	12
<b>CHOCS ELECTRONIQUES.....</b>	<b>12</b>
Le pouvoir d'arrêt électronique.....	13
Perte d'énergie électronique.....	14
<b>NOTRE MODELE .....</b>	<b>14</b>
II.1. ENERGIE LIMITE ET LIBRE PARCOURS MOYEN:.....	15
II.2. LES LIMITES DE CE MODELE:.....	15
II.4. LOCALISATION D'UN ION IMPLANTE:.....	17
<b>RESULTAT.....</b>	<b>18</b>
Facteur correctif.....	18
Implantation dans le silicium.....	19
<b>I.cascades de collisions.....</b>	<b>23</b>
GENERATION DE CASCADES .....	24
ENERGIE DE DEPLACEMENT Ed, RENDEMENT NUCLÉAIRE $\gamma$ .....	25
ENERGIE SEUIL D'ARRET $E_{min}$ .....	26
DEFAUTS.....	26
Les paires de Frenkel.....	26
Les substitutionnels.....	26
Les phonons.....	27
Position finale de la particule incidente.....	27
<b>Modèle cascades de collisions.....</b>	<b>28</b>
description.....	29

---

<b>Résultats.....</b>	<b>32</b>
<b>Défauts des ions léger-intermédiaire-lourd.....</b>	<b>32</b>
Profil de l'implantation et profil des défauts.....	37
<b>PRESENTATION DES INTERFACES.....</b>	<b>40</b>
<b>LES ENTREES.....</b>	<b>40</b>
Création.....	41
Traitement.....	42
Autres.....	42
<b>RESULTATS.....</b>	<b>42</b>
Résultats d'implantation.....	43
Résultats de cascades.....	43
<b>INCONVENIENTS.....</b>	<b>45</b>
<b>Limitation logicielle.....</b>	<b>45</b>
<b>Inconvénients matériels.....</b>	<b>45</b>
<b>CHAPITRE 3.- LA LOGICIEL C.C.D.B.I.E.....</b>	<b>37</b>
« <i>Toy ny voninkazo ampaniriana amin'ny tavy ny fahaizana tsy mandray faka amin'ny fahalalana ny sata sy fitendrazan'ny tena, ka met y harevaka sy ho azo afindrafindra etsy sy eroa, fa tsy hanjary hazobe hihinamboa na oviana na oviana..</i> ..3	
<b>ATOLOTRAY.....</b>	<b>4</b>
<b>Lalaniaina sy Njaka Rado.....</b>	<b>4</b>
REMERCIEMENTS.....	5
<b>Caractéristique cherchée.....</b>	<b>15</b>
<b>Très difficile.....</b>	<b>15</b>
<b>Bonne .....</b>	<b>15</b>
<b>INTERACTION DE L'ION INCIDENT AVEC LA MATIERE [1],[2].....</b>	<b>3</b>
<b>CHOCS NUCLEAIRES.....</b>	<b>4</b>
Les systemes de references.....	4
Angle de diffusion.....	7
La perte d'énergie nucléaire.....	12
<b>CHOCS ELECTRONIQUES.....</b>	<b>12</b>
Le pouvoir d'arrêt électronique.....	13
Perte d'énergie électronique.....	14
<b>NOTRE MODELE .....</b>	<b>14</b>
II.1. ENERGIE LIMITE ET LIBRE PARCOURS MOYEN:.....	15
II.2. LES LIMITES DE CE MODELE:.....	15
II.4. LOCALISATION D'UN ION IMPLANTE:.....	17
<b>RESULTAT.....</b>	<b>18</b>
<b>Facteur correctif.....</b>	<b>18</b>
Implantation dans le silicium.....	19
<b>I.cascades de collisions.....</b>	<b>23</b>
<b>GENERATION DE CASCADES .....</b>	<b>24</b>
<b>ENERGIE DE DEPLACEMENT Ed, RENDEMENT NUCLÉAIRE <math>\gamma</math>.....</b>	<b>25</b>
<b>ENERGIE SEUIL D'ARRET Emin.....</b>	<b>26</b>

---

---

<b>DEFAUTS.....</b>	<b>26</b>
Les paires de Frenkel.....	26
Les substitutionnels.....	26
Les phonons.....	27
Position finale de la particule incidente.....	27
<b>Modèle cascades de collisions.....</b>	<b>28</b>
<b>description.....</b>	<b>29</b>
<b>Résultats.....</b>	<b>32</b>
<b>Défauts des ions léger-intermédiaire-lourd.....</b>	<b>32</b>
Profil de l'implantation et profil des défauts.....	37
<b>PRESENTATION DES INTERFACES.....</b>	<b>40</b>
<b>LES ENTREES.....</b>	<b>40</b>
Création.....	41
Traitement.....	42
Autres.....	42
<b>RESULTATS.....</b>	<b>42</b>
Résultats d'implantation.....	43
Résultats de cascades.....	43
<b>INCONVENIENTS.....</b>	<b>45</b>
<b>Limitation logicielle.....</b>	<b>45</b>
<b>Inconvénients matériels.....</b>	<b>45</b>
<b>CONCLUSION _____</b>	<b>46</b>
<b>ANNEXE _____</b>	<b>47</b>
<b>ANNEXE A : CHOCS ELASTIQUES _____</b>	<b>47</b>
<i>« Toy ny voninkazo ampaniriana amin'ny tavy ny fahaizana tsy mandray faka amin'ny fahalalana ny sata sy fitendrazan'ny tena, ka met y harevaka sy ho azo afindrafindra etsy sy eroa, fa tsy hanjary hazobe hihinamboa na oviana na oviana..3</i>	
<b>ATOLOTRAY.....</b>	<b>4</b>
<b>Lalaniaina sy Njaka Rado.....</b>	<b>4</b>
REMERCIEMENTS.....	5
<b>Caractéristique cherchée.....</b>	<b>15</b>
<b>Très difficile.....</b>	<b>15</b>
<b>Bonne .....</b>	<b>15</b>
<b>INTERACTION DE L'ION INCIDENT AVEC LA MATIERE [1],[2].....</b>	<b>3</b>
<b>CHOCS NUCLEAIRES.....</b>	<b>4</b>
Les systemes de references.....	4
Angle de diffusion.....	7
La perte d'énergie nucléaire.....	12
<b>CHOCS ELECTRONIQUES.....</b>	<b>12</b>
Le pouvoir d'arrêt électronique.....	13
Perte d'énergie électronique.....	14
<b>NOTRE MODELE .....</b>	<b>14</b>
II.1. ENERGIE LIMITE ET LIBRE PARCOURS MOYEN:.....	15
II.2. LES LIMITES DE CE MODELE:.....	15
II.4. LOCALISATION D'UN ION IMPLANTE:.....	17

---

---

<b>RESULTAT.....</b>	<b>18</b>
<b>Facteur correctif.....</b>	<b>18</b>
Implantation dans le silicium.....	19
<b>I.cascades de collisions.....</b>	<b>23</b>
GENERATION DE CASCADES .....	24
ENERGIE DE DEPLACEMENT Ed, RENDEMENT NUCLÉAIRE $\gamma$ .....	25
ENERGIE SEUIL D'ARRET Emin.....	26
DEFAUTS.....	26
Les paires de Frenkel.....	26
Les substitutionnels.....	26
Les phonons.....	27
Position finale de la particule incidente.....	27
<b>Modèle cascades de collisions.....</b>	<b>28</b>
<b>description.....</b>	<b>29</b>
<b>Résultats.....</b>	<b>32</b>
<b>Défauts des ions léger-intermédiaire-lourd.....</b>	<b>32</b>
Profil de l'implantation et profil des défauts.....	37
<b>PRESENTATION DES INTERFACES.....</b>	<b>40</b>
<b>LES ENTREES.....</b>	<b>40</b>
Création.....	41
Traitement.....	42
Autres.....	42
<b>RESULTATS.....</b>	<b>42</b>
Résultats d'implantation.....	43
Résultats de cascades.....	43
<b>INCONVENIENTS.....</b>	<b>45</b>
<b>Limitation logicielle.....</b>	<b>45</b>
<b>Inconvénients matériels.....</b>	<b>45</b>
<b>ANNEXE B :PARTICULE RELATIVE.....</b>	<b>50</b>
<b>ANNEXE C :PARAMÈTRE D'IMPACT.....</b>	<b>53</b>
<b>REFERENCE BIBLIOGRAPHIQUE.....</b>	<b>57</b>

---

---

## LISTES DES FIGURES ET DES TABLEAUX

figure I-1 :Collision de l'ion incident avec la particule ...	5
figure I-2 :Trajectoire des deux particules...	6
figure I-3 :Triangle de diffusion	7
figure I-4 :Trajectoire de la particule relative et ...	8
figure I-5 :Organigramme d'implantation ...	16
figure I-6 :Profil du bore selon la valeur du facteur correctif	18
figure I-7 (a) :Implantation du bore dans le silicium	20
figure I-7 (b) :Implantation du silicium dans le silicium	20
figure I-7 ( c ) :Implantation de l'antimoine dans le silicium	21
figure II-1 :Phénomène de cascades de collisions	23
figure II-2 :Défauts ponctuels d'implantation	27
figure II-3 :Organigramme de cascades de collisions	29
figure II-4 :Lacunes créés lors d'une implantation de bore...	31
figure II-5 :Histogramme des défauts ponctuels	31
figure II-6 :Répartition du silicium dans le silicium	32
figure II-7 :Effectif des défauts créés du Si à 50 keV	33
figure II-8 :Répartition des défauts de l'antimoine	33
figure II-9 :Histogramme des défauts de l'antimoine	34
figure II-10 :Comparaison des profils des défauts et implantation	36
figure III-1 :Interface principale de C.C.D.B.I.E.	38
figure III-2 :Interface de saisie de données	39
figure III-3 :Résultat d'implantation	40
figure III-4 :Choix du défaut à visualiser	41
figure A-1 :Position des deux particules...laboratoire	45
figure A-2 :Position des deux particules...centre de masse	47
figure A-3 :Composition des vitesses dans le deux systèmes	48
figure B-1 :Trajectoire de la particule relative	50
figure C-1 :Définition du paramètre d'impact	51
tableau 0-1 :Comparaison entre implantation ionique et diffusion	1
tableau I-1 :Influence du facteur de correction...	19
tableau I-2 :Comparatif des résultats	20
tableau II-1 :Nature et position de l'incident	26
tableau II-2 :Résumé des défauts dans le silicium	34
tableau II-3 :Comparatif des résultats statistiques	35
tableau III-1 :Touches de raccourci	41

---

---

## **Liste des abbréviations et paramètres**

$\alpha_e$  :facteur correctif relatif à la perte d'énergie électronique.

$\delta$  :terme correctif

$\epsilon$  :énergie réduite

$\phi$  :fonction d'écran

$\gamma$  :rendement nucléaire

$\theta$  :angle de déviation au centre de masse

$\rho$  :rayon de courbure

$\sigma$  :section efficace

$\tau$  :vecteur tangente (polaire)

$\psi$  :angle de déviation au laboratoire

$\mathfrak{R}_n$  : nombre aléatoire

$a$  :rayon d'écran

$A$  :angstrum

$a_0$  :rayon de Bohr

$B$  :paramètre d'impact réduite

B.B. : Bethe Bloch

$c$  :célérité de la lumière

$d$  : (de) déplacement

$dx, dy, dz$  : déplacement élémentaire

$e$  :1. (ind) électronique

2. charge de l'électron

$E$  :énergie

eV :électron-Volt

$f_c$  :force centrifuge

$G$  : 1. centre de masse

2. (ind) relatif au centre de masse

$L$  : libre parcours

2.(ind) relatif au laboratoire

L.S.S. :Linhardt, Scharff, Schiott

$m$  :masse atomique

$n$  :nucléaire

$N$  :densité atomique par unité de volume

$p$  :paramètre d'impact

$P$  :perte d'énergie

$r$  : distance relative

$R$  référentiel

$r_0$  :distance minimale d'approche

$R_0$  :distance minimale d'approche réduite

$S$  :pouvoir d'arrêt

$T$  : perte d'énergie nucléaire

$u_x, u_y, u_z$  :cosinus directeurs

$v$  :vitesse

$V$  :potentiel

$v_0$  :vitesse de l'électron dans l'atome de Bohr

$X, Y, Z$  :coordonnées:

$Z_i$  :numéro atomique

---

# INTRODUCTION

La recherche d'une technologie optimale pour la conception des circuits intégrés devenait, à partir des années 1970, un problématique d'envergure. L'apparition des circuits intégrés à grande échelle d'intégration V.L.S.I. ne fait qu'accroître cette difficulté. En effet, l'optique était orientée vers une possibilité d'intégration plus poussée, répondant en même temps aux performances désirées : rapidité et faible consommation. On assiste alors à l'évolution de techniques de fabrication : diffusion, oxydation, gravure,... Les imperfections des méthodes utilisées :rétrécissement involontaire du canal, une trop grande profondeur de jonction, firent naître l'implantation ionique . L'implantation ionique pallie ces imperfections. En effet, le tableau 1.1 compare les avantages et les inconvénients entre l'implantation ionique et la diffusion [1].

Caractéristique cherchée	<i>Diffusion</i>	<i>Implantation ionique</i>
<b>Choix substrat</b>	Limité	Non limité
<b>Choix dopant</b>	Limité	Non limité
<b>Température nécessaire</b>	Considérable	Peu important
<b>Contrôle profondeur</b>		Facile
<b>Uniformité en profondeur</b>	Médiocre	Excellente
<b>Définition de jonction</b>		Excellente
<b>Le dopant se répand latéralement</b>	Moyenne	Excellente
	Oui	Non

**Tableau 0.1 :Comparaison entre implantation ionique et diffusion.**

Découverte par SHOCKLEY en 1954 [1], l'implantation ionique est une technique qui permet d'introduire des particules chargées énergétiques dans un matériau cible. Ces impuretés pénètrent dans la cible et y prennent place. Sa principale application est le dopage de dispositif micro-électronique. EN effet, la fabrication d'un circuit intégré passe au moins une fois par le biais de l'implantation ionique :dopage, piégeage d'impureté, création de couches dopées enterrées.

Ces ions énergétiques vont pénétrer dans la cible, ils vont interagir avec les noyaux de cette dernière. Le chapitre 1 présente d'une

---

**Bombardement d'ions énergétiques**  
part l'étude de ces interactions et d'autres part le modèle que nous avons utilisés et les résultats de simulation que nous avons obtenu.

Le bombardement de la cible avec des ions énergétiques est connu pour provoquer certainement des défauts à l'intérieur de la cible. Ces défauts peuvent être de très courtes durées ou permanents. C'est le phénomène de cascades de collisions. Le chapitre 2 traitera l'étude de ce phénomène, c'est à dire, l'étude des défauts ponctuels dus à l'implantation et les résultats de simulation de ces cascades.

Enfin, le troisième et dernier chapitre présentera notre logiciel de simulation. Ce logiciel simule à la fois l'implantation ionique et les cascades de collisions. Les limitations de ce logiciel, la présentation des interfaces utilisateurs seront les vifs sujets de ce dernier chapitre.

## **BOMBARDEMENT D'IONS ENERGETIQUES**



Lorsque l'on bombarde un solide ou une cible par des ions énergétiques, les ions vont pénétrer dans la cible. Cependant, au fur et à mesure de la pénétration, les ions perdent une partie de leur énergie et s'arrêtent ou s'implantent. Cette technique de bombardement s'appelle « l'IMPLANTATION IONIQUE ».

L'implantation ionique est une technique de dopage qui permet d'introduire des ions étrangers d'énergie de quelques dizaines d'eV à une dizaines de MeV [1]. La perte d'énergie pendant l'implantation ionique est due aux interactions de l'ion incident avec les électrons et les atomes du matériau cible [1,2]. En toute rigueur, définir l'interaction de ces particules incidentes avec le réseau est inabordable à mettre en oeuvre. Aussi, des hypothèses simplificatrices sont nécessaires: on suppose donc que les chocs peuvent être décomposés en deux non corrélés l'un de l'autre: d'une part chocs avec les noyaux, et d'autre part chocs avec les électrons.

La première partie de ce chapitre est consacrée à l'étude de l'interaction de l'ion avec la matière. La deuxième partie s'occupe du modèle de l'implantation ionique et les résultats obtenus.

### INTERACTION DE L'ION INCIDENT AVEC LA MATIERE [1],[2]

Dans ce paragraphe, on traite l'interaction de l'ion incident énergétique avec la matière. Cette interaction se présente sous deux formes [1,2]:

- un choc élastique entre l'ion incident et les noyaux des atomes de la matière. Nous appelons ce type de choc: «choc nucléaire»,
  - un choc inélastique entre l'ion incident et les électrons.
- C'est le choc "électronique".

***CHOCS NUCLEAIRES***

Ce sont des chocs supposés élastiques entre noyaux celui de l'ion incident et celui de l'atome cible. Comme c'est un choc élastique, nous nous placerons dans le cadre de la mécanique classique du point matériel pour étudier les deux particules en collision. La particule incidente  $P_1$  de masse  $m_1$  est caractérisée par son énergie  $E_1$  donc sa vitesse  $v_1$ , l'atome cible  $P_2$  de masse  $m_2$  est supposé au repos ( $v_2 = 0$ ).

Ce choc est régi par [3]:

- La loi de conservation de l'énergie totale
- La loi de conservation de la quantité de mouvement.

L'application de ces lois nécessite l'utilisation des systèmes de référence. Elle nous permet aussi de définir des relations entre les vitesses donc énergie et les angles des deux particules

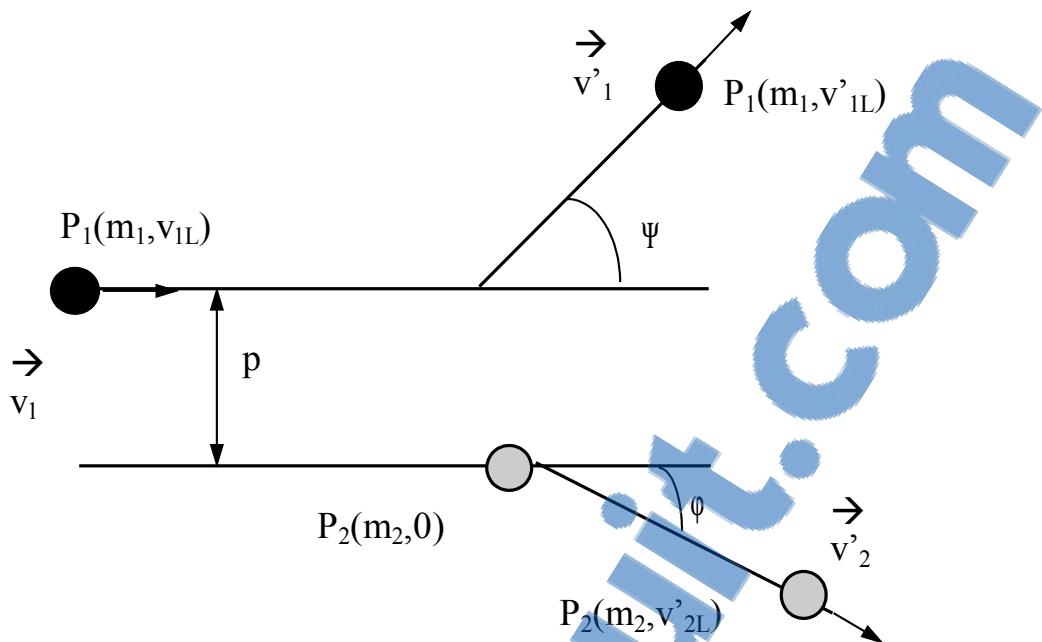
***Les systèmes de références***

Le système de référence du laboratoire  $R_L$

Dans ce système, avant le choc, l'ion incident  $P_1$ , d'énergie  $E_{1L}$  se dirige vers la particule cible  $P_2$  de vitesse  $v_2$  nulle située à une distance  $p$ , appelée « paramètre d'impact », de sa trajectoire.

$$E_{1L} = \frac{1}{2} * m_1 * v_{1L}^2 \quad (I-1).$$

Quand elle arrive à une distance  $r_0$ , appelée "distance minimale d'approche", de la particule cible, sa trajectoire commence à se dévier et la particule cible se met en mouvement (cf. fig. I-1).



**Figure I-1 :Collision de l'ion incident avec la particule cible dans le référentiel du laboratoire**

Après le choc, la particule incident  $P_1$  se déplace suivant une direction faisant un angle  $\Psi$  avec sa direction initiale et la particule  $P_2$  suivant une direction faisant un angle  $\varphi$  avec la direction initiale de la particule incident  $P_1$ .

$\Psi$ : Angle de déviation de la particule  $P_1$  dans le référentiel du laboratoire.

$\varphi$ : Angle de diffusion de la particule cible  $P_2$  dans le référentiel du laboratoire.

Dans ce système, le centre de masse  $G$  des deux particules se déplace avec un mouvement rectiligne uniforme de vitesse (cf. annexe A) :

$$V_{GL} = \frac{m_r}{m_1} * V_{1L} \text{ où } m_r = \frac{m_1 * m_2}{m_1 + m_2} \quad (1-2)$$

Le système de référentiel au centre de masse  $R_G$

Le système de référence lié au centre de masse  $R_G$  est un système dont l'origine est le centre de masse  $G$  des deux particules.

Dans ce système, les trajectoires des deux particules sont parallèles et de sens opposés.

L'énergie cinétique valable dans  $\mathcal{R}_G$  s'écrit alors :

$$E_G = \frac{m_1}{m_2 + m_1} * E_{1L} \quad (I-3).$$

Avant le choc, l'ion incident possède une vitesse  $v_{1G}$  telle que:

$$\vec{V}_{1G} = \vec{V}_{1L} - \vec{V}_{GL} \quad (I-4).$$

tandis que la particule cible  $P_2$  posséda une vitesse  $v_{2G}$  telle que:

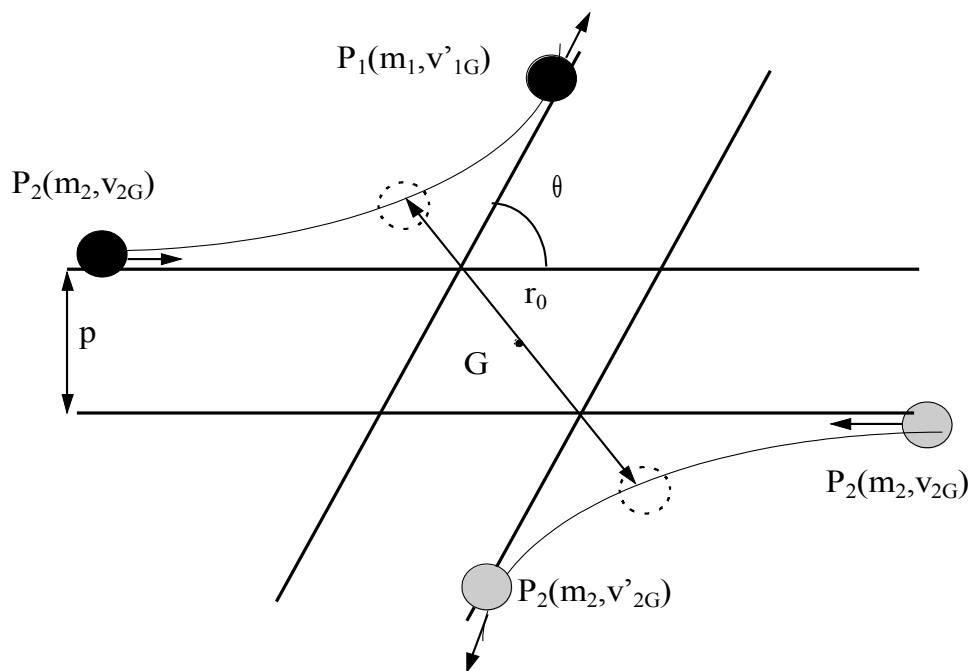
$$\vec{V}_{2G} = -\vec{V}_{GL} \quad (I-5).$$

Elles se dirigent vers le centre de masse G.

Après le choc, les deux particules se déplacent suivant une direction faisant un angle  $\theta$  de leur trajectoire initiale [4],[5].(cf. fig I-2).

$\theta$  s'appelle angle diffusion dans le système du centre de masse.

Dans  $\mathcal{R}_G$ , les vitesses restent constantes en module , avant et après le choc.



**Figure I-2: Trajectoire des deux particules dans le système lié au centre de masse.**

## Relation entre les angles dans les systèmes

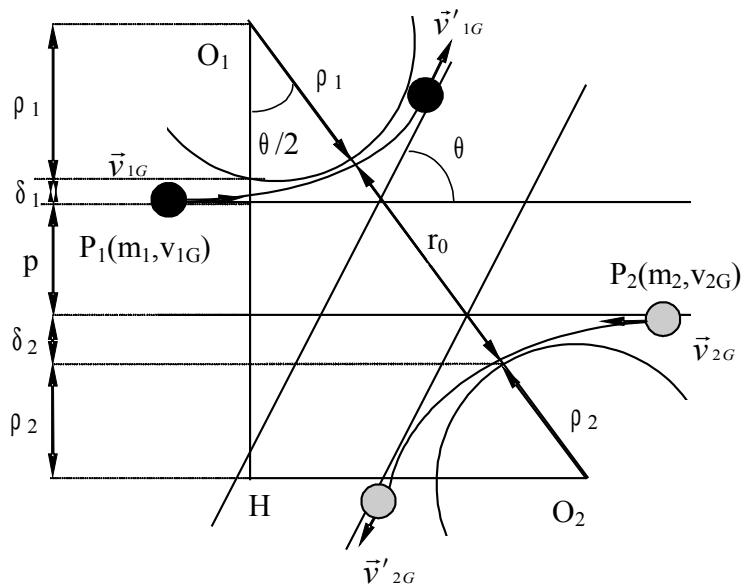
A partir d'un diagramme vectoriel représentant les vitesses (cf. annexe A), on a:

$$\tan\psi = \frac{\sin\theta}{\cos\theta + \frac{m_1}{m_2}} \quad (I-6).$$

$$\phi = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2} \quad (I-7)$$

## Angle de diffusion.

Pour trouver l'angle de diffusion, BIERSACK [1] a proposé un modèle appelé: " LE TRIANGLE DE DIFFUSION ". Ainsi nous nous placerons dans le référentiel lié au centre de masse. D'après la figure I-3, on peut déduire l'évaluation analytique de l'angle de diffusion  $\theta$  dans ce système.



**Figure I-3 : Le triangle de diffusion.**

Au point où la distance  $r_0$  est minimale, les centres de courbure de leur trajectoire sont  $O_1$  et  $O_2$ , les rayons de courbure respectivement  $p_1$  et  $p_2$ . Le triangle de diffusion est le triangle rectangle  $O_1HO_2$  dont les côtes  $O_1H$  et  $O_2H$  sont perpendiculaires ( $O_2H$  est parallèle à la direction des particules avant le choc) et l'angle  $HO_1O_2$  est égal à l'angle  $\theta/2$ . En

portant sur le côté  $O_1H$ , les rayons  $\rho_1, \rho_2$  et les segments  $\delta_1, \delta_2$  (appelés termes correctifs) on obtient directement  $\theta$  [5]. En posant  $\rho = \rho_1 + \rho_2$ ,  $\delta = \delta_1 + \delta_2$ .

la figure I-3 nous permet d'écrire :

$$\cos \frac{\theta}{2} = \frac{p + \delta + \rho}{\rho + r_0} \quad (I-8)$$

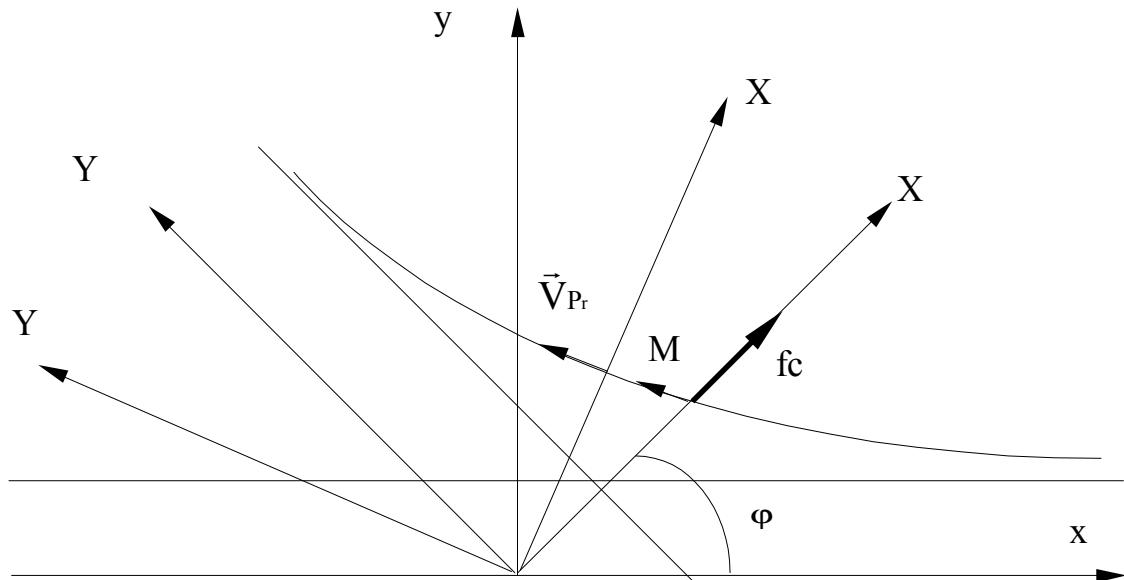
Il suffit de trouver les termes  $p$ ,  $\rho$ ,  $\delta$  et  $r_0$  et on peut déterminer  $\theta$  et puis  $\Psi$  et  $\varphi$ .

Les différents paramètres de l'angle de diffusion.

#### Distance minimale d'approche $r_0$ .

La distance minimale d'approche  $r_0$  entre les deux particules est déterminée à partir des équations de mouvement des deux particules. Si

on choisit le référentiel lié au centre de masse  $R_G$ , il suffit de traiter le mouvement de la particule relative  $P_r$ . (cf. annexe B).



**Figure I-4: trajectoire du particule relative  $P_r$  et localisation de  $r_0$ .**

L'équation du mouvement du particule relative  $P_r$  est obtenue en utilisant les lois de la conservation de moment cinétique et de la conservation de l'énergie totale

La loi de conservation du moment cinétique s'écrit :

$$\left( \frac{dp}{d\tau} \right)^2 = 2 * E_c * p^2 * \frac{1}{m_r + r^4} \quad (I-9).$$

La loi de conservation de énergie totale s'écrit:

$$E_c = V(r) + \frac{1}{2} * m_r * \left[ \left( \frac{dr}{d\tau} \right)^2 + r^2 * \left( \frac{dp}{d\tau} \right)^2 \right] \quad (I-10).$$

Cette équation de mouvement s'écrit

$$\left( \frac{dr}{d\tau} \right)^2 = v_{1L}^2 * \left[ 1 - \frac{V(r)}{E_c} - \frac{p^2}{r^2} \right] \quad (I-11)$$

$$\text{ou } E_c = \frac{m_r}{m_1} * E_{1L}$$

$r_0$  est obtenue lorsque la particule relative  $P_r$  a une vitesse perpendiculaire à l'axe polaire GM(cf. Figure I-4).Alors

$$dr/dt=0$$

Donc la distance minimale d'approche  $r_0$  est obtenue en résolvant équation :

$$1 - \frac{V(r)}{E_c} - \frac{p^2}{r^2} = 0 \quad (I-12).$$

En utilisant la méthode de NEWTON, on obtient  $r_0$  [6,7].

#### Paramètre d'impact p

Le paramètre d'impact p est défini par l'expression (cf. annexe B) :

$$p = \sqrt{\frac{\mathfrak{R}_n}{\pi * N * L}} \quad (I-13)$$

Où  $\mathfrak{R}_n$  :un nombre aléatoire compris entre 0 et 1.

L :vol libre

N :densité en atomes par unité de volume de la cible.

Mais pour une énergie élevée, le paramètre d'impact  $p$  est mieux représenté par [1] :

$$p = \sqrt{\frac{-\log(\mathfrak{N}_n)}{\pi * N * L}} \quad (I-14)$$

#### Les rayons de courbure $\rho_1$ et $\rho_2$

Dans le référentiel du centre de masse  $R_G$ , on appelle force d'interaction  $f_c$  la force qui s'exerce entre les deux particules. C'est une force centrifuge définie par :

$$f_c = \frac{m_1 v_{1G}^2}{\rho_1} = \frac{m_2 v_{2G}^2}{\rho_2} \quad (I-15).$$

Donc

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 = \frac{m_1 v_{1G}^2 + m_2 v_{2G}^2}{f_c} \quad (I-16).$$

Cette force est aussi la dérivée spatiale de l'énergie potentielle  $V(r)$ . Comme les expressions  $m_1 * v_1^2$  et  $m_2 * v_2^2$  ne sont autre que de l'énergie cinétique qui peut être exprimées en fonction de  $E_c$  et de  $V(r)$ . Au point d'approche minimale:

$$\rho = 2 * \frac{E_c - V(r_0)}{V'(r_0)} \quad (I-17).$$

#### Les termes correctifs $\delta 1$ et $\delta 2$ [1]

En notant  $Z_1$  et  $Z_2$  les numéros atomiques de l'ion incident et de l'atome cible, et  $e$  la charge électrique d'un électron, on appelle énergie réduite  $\varepsilon$  le paramètre défini par :

$$\varepsilon = \frac{a * E_c}{Z_1 * Z_2 * e^2} \quad (I-18).$$

ou  $a$  le rayon d'écran, proposée par FIRSOV:

$$a = \frac{0,8853 * a_0}{(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}} \quad (I-19).$$

avec

$a_0=0.529$  Å rayon de Borth.

La formule d'ajustement de  $\delta$  s'écrit:

$$\Delta = A^* \frac{R_o - B}{1 + G} \quad (I-20).$$

Ou A et G sont des constantes.

### Conclusion

En posant  $R_c = \rho/a$ , l'angle de diffusion au centre de masse peut être obtenu par:

$$\cos \frac{\theta}{2} = \frac{B + R_c + \Delta}{R_o + R_c} \quad (I-21).$$

Mais pour une énergie élevée ( $\varepsilon \gg 10$ ), l'angle de diffusion est mieux représenté par:

$$\sin \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{1}{1 + (2 * B^* \varepsilon)^2}} \quad (I-22).$$

Le potentiel d'interaction interatomique [1],[8]:  $V(r)$

La plupart des paramètres donnant  $\theta$  dépend du potentiel d'interaction. Alors une aperçue de ce potentiel nous serons très utiles.

La formule donnant  $V(r)$  s'écrit:

$$V\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{Z_1^* Z_2^* e^2}{r} * \phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (I-23).$$

ou  $\phi(r/a)$  désigne la fonction d'écran:

$$\phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_1^3 C_i^* \exp\left(-B_i^* \frac{r}{a}\right) \quad (I-24).$$

En général,  $\phi(r/a)$  varie de 0 à 1.

Les coefficients  $C_i$  et  $B_i$  dépendent du potentiel utilisé:

Pour un potentiel coulombien:

$$\phi\left(\frac{r}{a}\right) = 1 \quad (I-25),$$

Pour un potentiel de MOLIERE:

$$\phi\left(\frac{r}{a}\right) = 0,35 \exp\left(-0,3 \frac{r}{a}\right) + 0,55 \exp\left(-1,2 \frac{r}{a}\right) + 0,1 \exp\left(-6 \frac{r}{a}\right) \quad (I-25')$$

Le choix du potentiel prend en compte le domaine de l'énergie considérée. Ainsi nous utilisons le potentiel coulombien pour une énergie élevée; tandis qu'en basse énergie, nous optons pour le potentiel de Molière.

### ***La perte d'énergie nucléaire***

Lorsque la particule incidente énergie  $E_1$  entre en collision avec un atome cible, elle cède une certaine quantité énergie  $T$ . En appelant  $E'_1$  son énergie après le choc, la loi de conservation de l'énergie s'écrit [3] :

$$E_1 = E'_1 + T \quad (I-26).$$

A l'aide d'un diagramme vectoriel (cf. annexe A), nous obtenons directement l'énergie perdue par l'incident par[1,5]:

$$T = \frac{m_1 * m_2}{(m_1 + m_2)^2} * E * \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (I-27).$$

Cette perte d'énergie est absorbée par l'atome cible au cours d'un choc.

### ***CHOCS ELECTRONIQUES***

Au cours de la traversée d'ions énergétiques dans la cible (comme silicium), non seulement les ions vont interagir avec les noyaux des atomes cible mais aussi, avec le nuage d'électrons. La perte d'énergie électronique est continue.

### ***Le pouvoir d'arrêt électronique***

Pour calculer les pertes d'énergie de l'ion par interaction avec les électrons de la cible, il est commode d'introduire le concept de pouvoir d'arrêt électronique  $Se(E)$  qui est fonction de l'énergie  $E$  de l'ion.

Les pertes d'énergie électronique sont alors exprimées par unité de distance parcourue  $dR$  dans la cible et s'écrivent:

$$-\left. \frac{dE}{dR} \right)_e = N^* Se(E) \quad (I-28)$$

Le calcul de  $Se$  donne des résultats différents suivant l'énergie de l'ion.

A faible énergie Modèle LSS

L'expression classique de  $S_e$  dans le modèle L.S.S. (LINHARDT, SCHARFF et SCHIOTT) [2] à basse énergie est une fonction de type :

$$Se(E)_{LSS} = k^* E^{1/2} \quad (I-29)$$

où  $k$  est une constante bien définie par le couple ion incident cible.

$$k = \frac{1,212^* Z_1^{7/6} * Z_2}{\left( Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{3/2} * m_1^{1/2}} \quad (I-30).$$

En fait, le pouvoir d'arrêt électronique est mieux représenté par une loi de la forme [1] :

$$S_e(E)_{L.S.S.} = k^* E^p \quad (I-31)$$

$p$  est un coefficient variant de 0,4 à 0,58 déterminé expérimentalement. Lorsque  $p$  n'est pas connu, il est nécessaire d'ajuster le paramètre  $k$  par un facteur de correction  $\alpha_e$  compris entre 1 et 2

$$Se(E) = \alpha_e * k^* E^{1/2} \quad (I-32).$$

A énergie élevée- Modèle de BETHE et BLOCH.

Le traitement en haute énergie du pouvoir d'arrêt électronique utilise le modèle de BETHE et BLOCH. Ce modèle tient compte de la

vitesse de l'ion incident. En appelant  $m_e$  la masse de l'électron,  $v_0$  la vitesse de l'électron dans l'atome de Bohr,  $I_0$  l'énergie d'excitation ( $Z_2 I_0$  énergie moyenne d'excitation de  $Z_2$  électrons), le pouvoir d'arrêt électronique s'écrit :

Si  $v > v_0 * Z_1^{2/3}$  avec  $v_0 = C/137$ ,

$$Se_{BB} = \frac{4 * \pi * Z_1^2 * e^2 * Z_2}{m_e * v} \log\left(\frac{2 * m_e * v^2}{Z_2 * I_0}\right) \quad (I-33).$$

A énergie intermédiaires

Pour les énergies intermédiaires, BIERACK [1] suggère une interpolation

$$Se^{-1} = Se_{L.S.S}^{-1} + Se_{B.B}^{-1} \quad (I-34).$$

### ***Perte d'énergie électronique***

Les expressions donnant  $Se$  montrent que  $Se$  est une fonction croissante de  $E$ , la perte énergie électronique est considérable tant que énergie de l'ion est suffisamment élevée.

Ainsi, pour un vol libre de longueur  $L$  la perte énergie électronique est:

$$- dE = L * N * Se(E) \quad (I-35)$$

### **NOTRE MODELE**

Nous avons développé un logiciel de l'implantation ionique en utilisant la méthode de Monte Carlo. [1]

Notre modèle est une approche microscopique de phénomènes stochastiques. Il consiste à suivre la trajectoire d'ion implanté jusqu'à ce qu'il s'arrête. La méthode est basée sur l'utilisation de nombres aléatoires générés entre 0 et 1 pour simuler numériquement des distributions de probabilité, elle fait appel à de nombreux tirages au sort.

Dans ce modèle, l'ion perd petit à petit son énergie à cause des interactions avec les noyaux et sur les électrons sur sa trajectoire.

---

## **II.1. ENERGIE LIMITE ET LIBRE PARCOURS MOYEN:**

Le calcul du pouvoir d'arrêt électronique diffère en haute et en basse énergie. Il est donc nécessaire d'évaluer l'intervalle de chaque domaine d'énergie. [1]

Une première approche a été faite en considérant l'énergie réduite  $\varepsilon$  du couple ion - cible. Plusieurs auteurs [1] reconnaissent que pour une  $\varepsilon$  supérieur à 10 quel que soit le couple (ion, cible), on est dans la zone des hautes énergies. Cependant, il est difficile de mettre un seuil pour les énergies faibles car  $\varepsilon$  dépend surtout du couple ion - atome.

Néanmoins, à partir de la basse énergie, l'ion incident se déplace en distance interatomique. Il suffit donc de chercher  $\varepsilon$  correspondant à cette distance pour un couple donné.

La relation entre le libre parcours moyen  $L$  et  $\varepsilon$  s'écrit:

$$L = \frac{0,02 \left[ 1 + \left( \frac{m_1}{m_2} \right) \right]^2}{4 * \pi * a^2 * N} * \frac{\varepsilon^2 + 0,05 * \varepsilon^{1,32}}{\ln(1 + \varepsilon)} \quad (I-36)$$

Cette formule est appliquée en haute énergie. A basse énergie, nous prenons  $L$  égale à la distance interatomique.

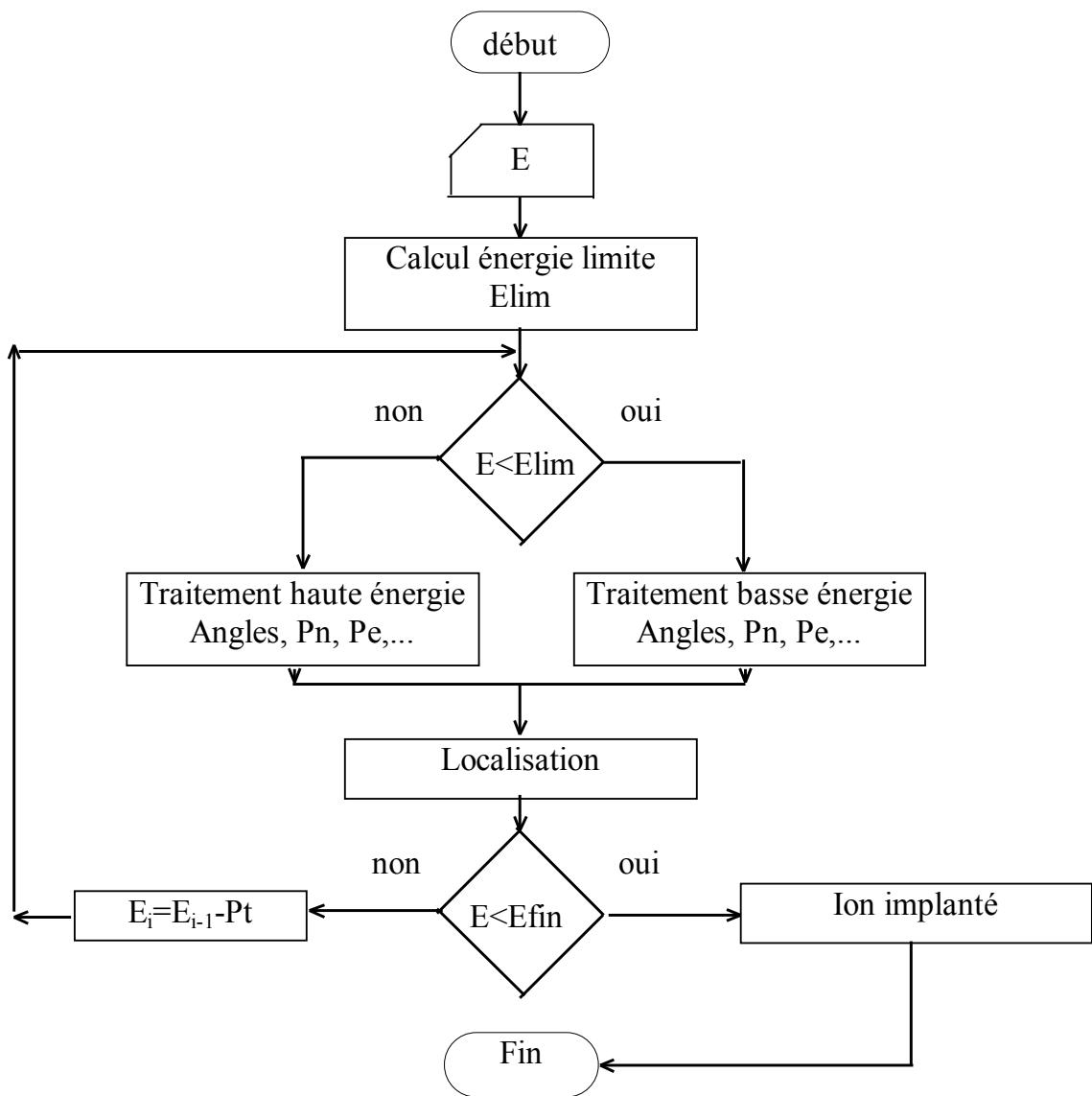
$$L = N^{-\frac{1}{3}} \quad (I-37)$$

## **II.2. LES LIMITES DE CE MODELE:**

L'énergie couramment utilisée en implantation ionique est généralement inférieure au MeV, donc une énergie nettement inférieure à l'énergie de cohésion du noyau ( $\Rightarrow 8\text{MeV}$ ). Le modèle ne tient donc pas compte des réactions nucléaires au cours de la simulation. Nous négligerons également les interactions entre les ions incidents.

### II.3. ORGANIGRAMME:

Le paragraphe I que nous venons d'élaborer est la base générale de notre modèle. La figure I.5 représente l'organigramme d'implantation d'un ion incident. En notant  $Pe$  la perte électronique et  $Pn$  la perte nucléaire, et la perte totale d'énergie  $Pt$  est égale à  $Pe + Pn$ .



**Figure I-5: Organigramme d'implantation d'un ion incident.**

## II.4. LOCALISATION D'UN ION IMPLANTE:

Maintenant, notre problème est de savoir où se trouvent ces ions implantés ? A quelle profondeur sont-ils arrêtés ? Sachant calculer les paramètres utiles, le problème devient alors un problème purement géométrique.

Dans toute la suite, nous utilisons un repère orthonormé direct Oxyz dans le référentiel du laboratoire où xOy est le plan horizontal correspondant à la surface de la cible, Oz l'axe vertical donnant la profondeur.

La position de l'ion est repérée après chaque vol libre L par ses coordonnées (x,y,z) dans le référentiel du laboratoire ( $R_L$ ). A partir de sa position  $(x,y,z)_{i-1}$  avant la collision, on détermine sa position  $(x,y,z)_i$  après le choc.

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_i = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{i-1} + L * \begin{pmatrix} ux \\ uy \\ uz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{i-1} + \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} \quad (I-38)$$

ou  $(ux,uy,uz)$  les coefficients directeurs d'un vecteur unitaire (cf. annexe D)

$$\begin{cases} ux = \cos\theta * [\cos\phi * \sin\theta_i * \cos\phi_i + \sin\phi * \cos\phi_i] - \sin\theta * \sin\phi * \sin\phi_i \\ uy = \sin\theta * [\cos\phi * \sin\theta_i * \cos\phi_i + \sin\phi * \cos\phi_i] - \cos\theta * \sin\phi * \sin\phi_i \\ uz = \cos\phi * \cos\phi_i - \sin\phi * \sin\phi * \cos\phi_i \end{cases} \quad (I-38')$$

avec  $\theta_i$  : angle azimuthal égal à  $2\pi R_1$ ,  $R_1$  est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1.

et  $\phi_i$  angle de déviation de  $P_1$  dans le référentiel du laboratoire.

$$\begin{cases} \cos\phi = dz / L \\ \sin\phi = \sqrt{dx^2 + dy^2} / L \end{cases} \quad (I-39)$$

$$\begin{cases} \cos\theta = dx / \sqrt{dx^2 + dy^2} \\ \sin\theta = dy / \sqrt{dx^2 + dy^2} \end{cases} \quad (I-40)$$

Ce qui permet d'aboutir à la position de l'ion implanté lorsque toute son énergie est consommée.

## RESULTAT

Dans ce paragraphe, les simulations sont effectuées avec 10000 ions à une énergie de 100keV. Nous avons choisi trois types d'ions de masses différentes pour la simulation dans le silicium.

### *Facteur correctif*

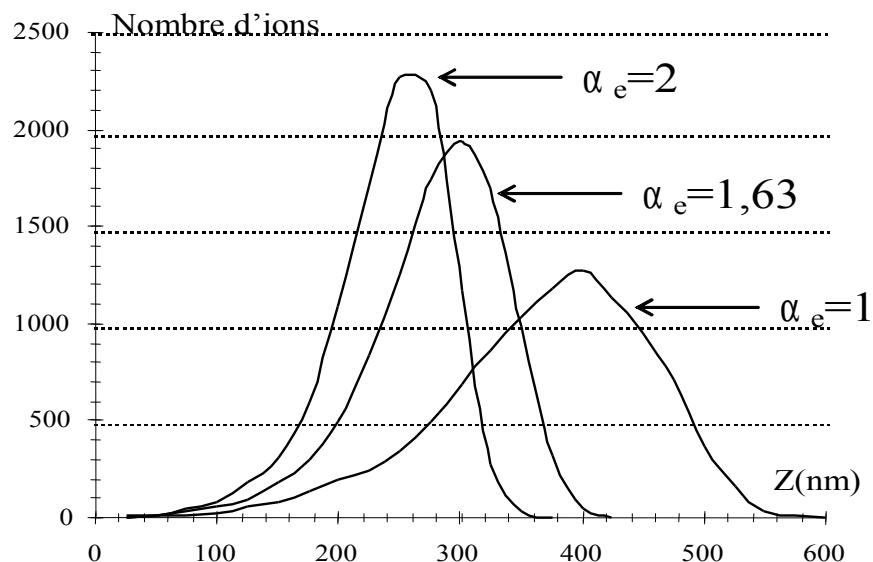
La perte d'énergie pendant un parcours L est :

$$E_1(r) = L * N * S_e(E) + T \quad (I-41)$$

avec  $S_e(E) = \alpha_e * k * E^{1/2}$

$\alpha_e$  désigne le facteur correctif.

Selon la valeur de ce facteur, les courbes de l'implantation changent. La figure I-6 illustre l'effet de  $\alpha_e$  sur le profil des ions.



**Figure I-6 :profil du bore selon la valeur du facteur correctif**

Pour  $\alpha_e$  égale à 2, le profil est plus pointu tandis que pour  $\alpha_e$  égale à 1, la courbe s'étale. Le premier cas donne des profondeurs élevées que celles du second. Les ions du second cas sont alors rapidement implantés. En effet, plus la valeur de  $\alpha_e$  est grande, plus la perte d'énergie est élevée provoquant une implantation « rapide ».

Le tableau I-1 récapitule les profondeurs moyennes.

$\alpha_e$	1	1.63	2
<b>profondeur moyenne</b>	3850	2925	2540
<b>déviation standard</b>	850	564	470

**Tableau 1-1 :influence du facteur de correction sur les résultats implantation de bore à 100keV dans le silicium.**

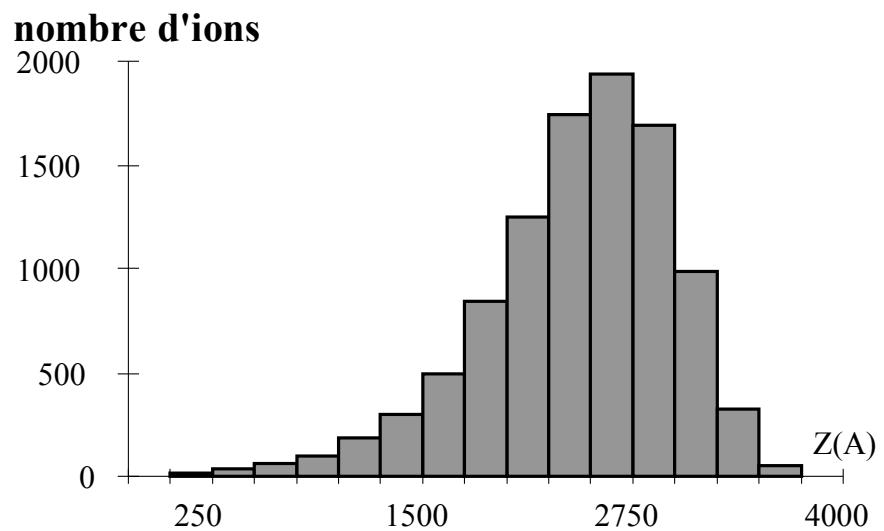
La déviation standard est également affectée. Les ions « corrigés » avec un facteur égale à 2 admettent une fluctuation faible décroît.

Le choix de  $\alpha_e$  est dicté par l'expérience. Ainsi par exemple, le facteur correctif pour le bore dans le silicium est de 1,63 [4].

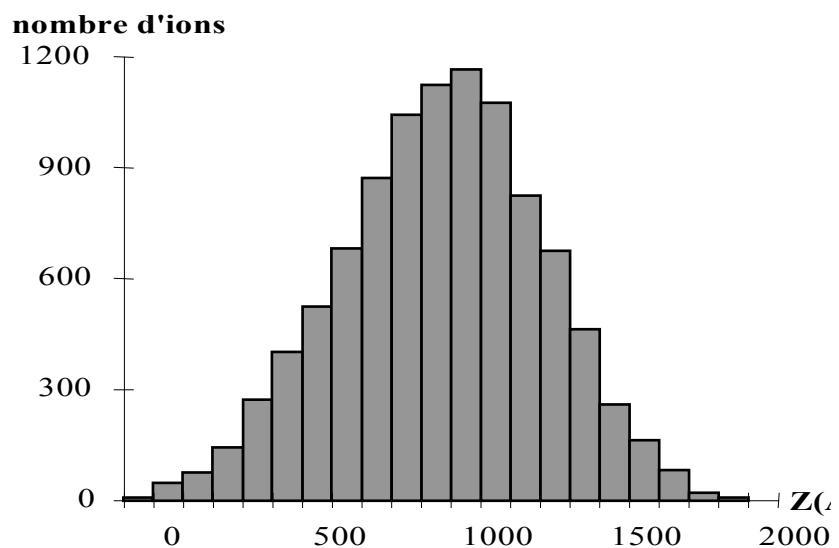
### ***Implantation dans le silicium***

Dans ce paragraphe, nous allons présenter les résultats des simulations du bore (ion léger), du silicium (ion intermédiaire), de l'antimoine (ion lourd) à 100KeV dans le silicium.

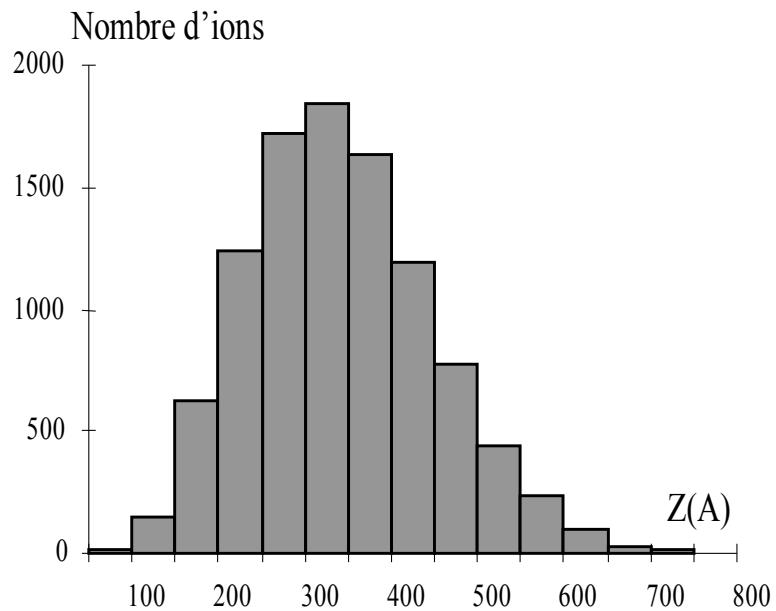
Les figures 1-7 illustrent l'histogramme de ces implantations. Chaque histogramme est obtenu en comptant le nombre des ions implantés dans chaque tranche.  $\Delta z$  correspondant au pas de comptage. Ce pas est fonction de la profondeur maximale obtenue. Nous avons choisi 250A, 100A, et 50A respectivement pour le bore, le silicium et l'antimoine.



**(a)**



**(b)**



(c)

**Figure 1-7: implantation de 100KeV dans le silicium**

(a) : cas du bore

(b) : cas du silicium

(c) : cas de l'antimoine.

Les profils obtenus sont différents, ce qui illustre que le phénomène de ralentissement des ions n'est pas le même pour le bore, le silicium et l'antimoine. Pour les ions légers, la perte d'énergie électronique est prépondérante par rapport à celle de la nucléaire. Pour les ions lourds, c'est l'inverse.

Le tableau 1-2 compare ces histogrammes.

	Bore	silicium	antimoine
<b>Moyenne</b>	2925	1070	390
<b>écart type</b>	564	340	105
<b>classe modale</b>	2750-3000	1100-1200	350-400
<b>montée</b>	lente	moyenne	rapide
<b>descente</b>	rapide	moyenne	lente

**Tableau 1-2 : comparatif des résultats**

Nous pouvons déduire de ce tableau que la profondeur des ions est tributaire de la masse de l'impureté. Plus elle est légère, plus les ions vont plus loin en profondeur. De même, les profils des ions sont

différentes. Pour le bore, la montée est lente tandis que la descente est rapide. C'est l'inverse pour les ions lourds comme l'antimoine. Pour le silicium, la courbe est proche d'une gaussienne.

Les résultats que nous avons obtenus sont cohérents avec ceux de la littérature. Le tableau I-3 les récapitule

Moyenne(A)	Notre résultat	Ref Favenne[1]	Ref Biersack[9]
<b>Bore</b>	2925	2994	3384
<b>Silicium</b>	1070	1468	1469
<b>Antimoine</b>	390	450	500

**Tableau I-3 : Les résultats d'implantation ionique**

## Chapitre 2 :

# CASCADES DE COLLISIONS

Dans ce chapitre, nous abordons le phénomène de cascades de collisions. Après la description phénoménologique et la définition des paramètres caractéristiques, nous présenterons le modèle que nous avons utilisé. Les résultats sont discutés à la fin du chapitre.

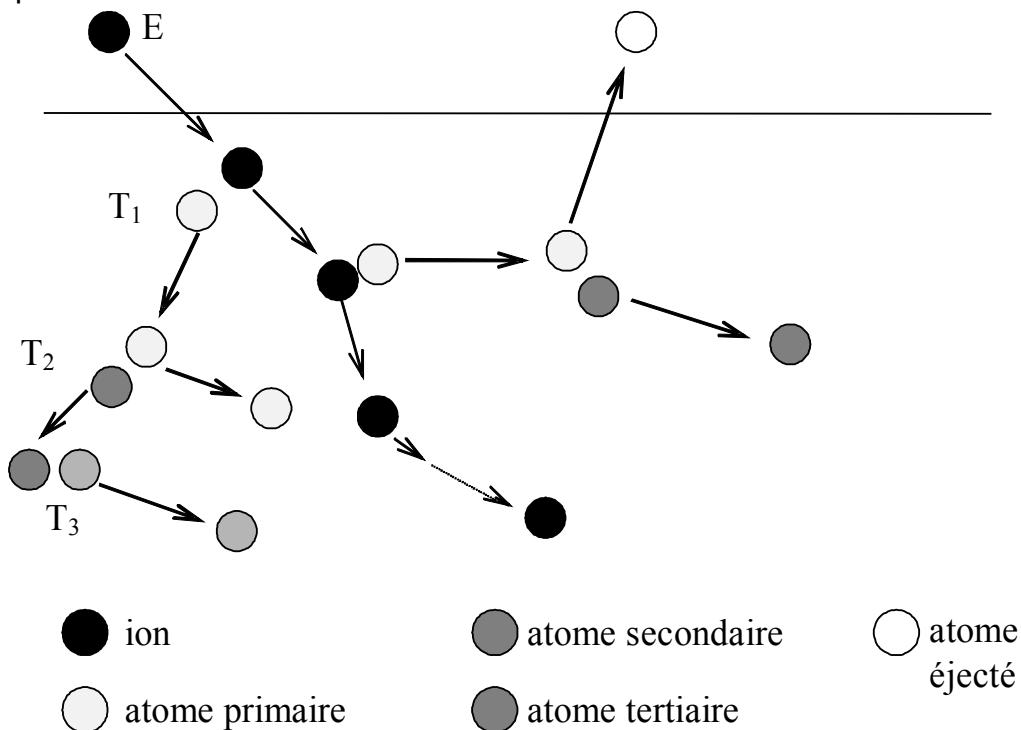
### I. cascades de collisions

Un ion énergétique bombardant une cible perd son énergie sous deux formes:

- par freinage électronique: interaction avec les nuages d'électrons,
- par des collisions élastiques: avec les noyaux

## GENERATION DE CASCADES

L'implantation ionique est connue pour créer des défauts dans le réseau cristallin. Dans ce paragraphe, nous nous intéressons uniquement aux déplacements des atomes dans la cible.



**Figure 2.1:Phénomène de cascades de collisions**

Au cours de chocs avec les noyaux, l'énergie perdue par l'ion incident, est transférée à l'atome cible. Si l'énergie cédée est supérieure à  $E_d$ , énergie seuil de déplacement, ce dernier quitte son site et laisse une place vacante ou une lacune. Nous appelons cet atome l'atome primaire. Si l'énergie de l'atome primaire est suffisamment grande, il peut générer à son tour des

déplacements d'autres atomes secondaires. Les secondaires, à leur tour, peuvent produire des tertiaires et ainsi de suite jusqu'à ce que l'énergie de chacun des atomes déplacés soit inférieure à  $E_d$ : c'est le phénomène de cascades de collisions. Si l'énergie transférée aux atomes de la cible, près de la surface, est suffisante ceux-ci peuvent être émis de la cible: c'est le phénomène de pulvérisation.(cf. fig II-1)

***ENERGIE DE  
DEPLACEMENT  $E_d$ ,  
RENDEMENT  
NUCLÉAIRE  $\gamma$***

Le paramètre important dans les cascades de collisions est l'énergie de déplacement  $E_d$ . Elle représente l'énergie seuil au-dessus de laquelle l'énergie transférée à l'atome occasionne son délogement. L'ion incident éjecte alors un atome cible de son site.

Dans la littérature [2], la valeur de  $E_d$  varie entre 10 à 30 eV. Pour le silicium, nous avons  $E_d$  égale à 15 eV.

$E_d$  permet de définir approximativement le nombre de cascades qu'un atome d'énergie  $T$  peut produire. Ce nombre  $N_d$  est donnée par:

$$N_d = \frac{T}{2 * E_d} \quad (\text{II-1})$$

Rappelons que pendant un choc élastique,  $T$  est de la forme:

$$T = 4 * \frac{m_1 * m_2}{(m_1 + m_2)^2} * E * \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (\text{II-2})$$

où  $E$  est l'énergie de la particule incidente avant l'impact.

Pour  $\theta = \pi$ ,  $T = T_{\max}$

$$\text{si } m_1 = m_2 \quad T = E * \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

On appelle rendement nucléaire le facteur tel que:

$$\gamma = \frac{T_{\max}}{E} \quad (\text{II-3})$$

Il est très sensible au rapport des masses entre la particule incidente et la cible. Il est maximale lorsque la particule incidente s'identifie à celle de la cible.

L'autre paramètre important dans le phénomène de cascades de collisions est l'énergie seuil d'arrêt  $E_{min}$ . C'est l'énergie limite pour laquelle la particule est supposée arrêtée. Elle représente l'énergie de liaison d'un atome à un site. Si l'énergie  $E$  de la particule est inférieure à  $E_{min}$ , alors elle est piégée par le site.  $E_{min}$  est de l'ordre de quelques eV (5 à 10 eV).

### ***DEFAUTS***

Ces défauts peuvent être classés en deux catégories :

- \* Les défauts transitoires

Ces défauts n'existent que pendant un temps très court( $\mu$ s). On peut citer l'excitation des électrons, et les phonons.

- \* Les défauts permanents:

Ces défauts restent plus longtemps, peuvent être mobiles.

Citons parmi eux ;les défauts ponctuels: lacunes, atomes substitutionnels, les atomes intersititiaux, les défauts linéaires: les dislocations, ...

Comme nous nous intéressons aux cascades, nous nous restreignons aux atomes déplacés.

#### ***Les paires de Frenkel***

La paire de Frenkel correspond à la formation de lacune et d'intersitituel. La particule incidente éjecte l'atome de son site, ce dernier se déplace et se met en position intersitituelle. Les sites intersititiaux sont les défauts importants des cascades de collisions.

#### ***Les substitutionnels***

Certains atomes délogés, selon leur énergie, regagnent des sites vacants du réseau cristallin. Ces ions ou atomes deviennent des impuretés en position substitutionnelle.

## Les phonons

Lorsqu'un incident (ion ou atome) ne s'arrête, et en plus, l'énergie transférée ne déplace pas l'atome cible, cette énergie est consommée sous de forme de vibrations du réseau ou phonons.

### Position finale de la particule incidente

Le problème est maintenant de savoir, quelle position un incident aura à la fin de son parcours.

Le tableau II.1 récapitule les sites occupés par cette particule:

	$E_1 < E_{\text{MIN}}$	$E_1 > E_{\text{MIN}}$
$T < E_d$	intersititiels	phonons
$T > E_d$	substitutionnels	Lacunes

**tableau II.1 Nature et position de l'incident**

Dans ce tableau,  $E_1$  désigne l'énergie incidente,  $T$  l'énergie transférée,  $E_d$  l'énergie seuil de déplacement et  $E_{\text{min}}$  l'énergie seuil d'arrêt

► Pour  $E_1 < E_{\text{min}}$  et  $T < E_d$ , la particule incidente s'arrête et se met en position d'insertion dans le réseau. Si la particule incidente est un atome, on a alors la position de recul de l'atome.

► Dans le cas où  $E_1 < E_{\text{min}}$ ,  $T > E_d$ , l'incident s'arrête, et se met à la place de l'atome qui devient à son tour une particule incidente;

◆ Si  $Z_1 = Z_2$ , il n'y a pas de changement.

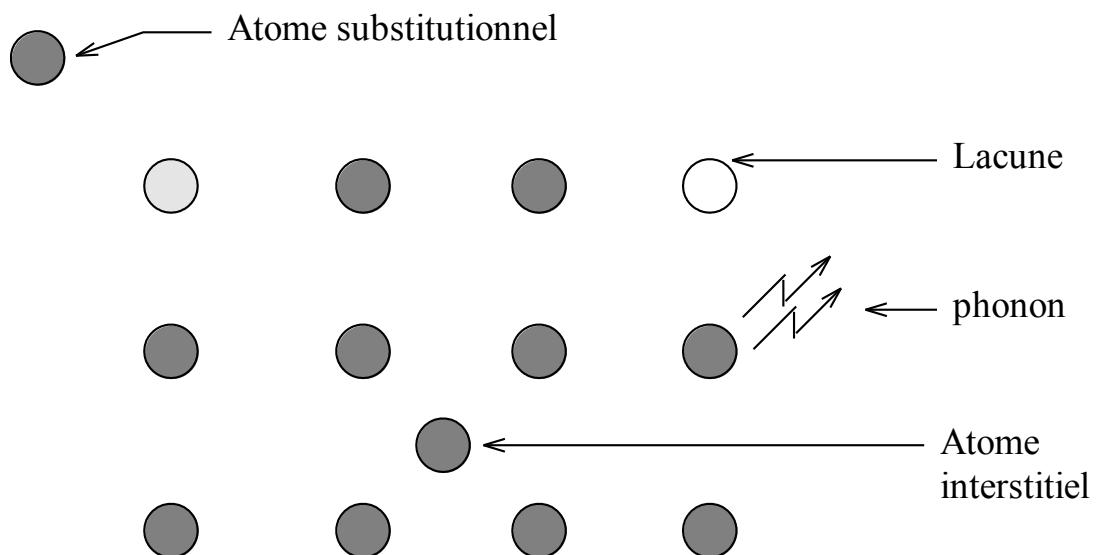
- ♦ Si  $Z_1 \neq Z_2$ , la particule occupe le site de l'atome déplacé.

♦ Si  $E_1 > E_{\min}$  et  $E_2 > E_D$ , l'atome cible d'énergie  $E_2$ , quitte son site et laisse une lacune.

♦ Si  $E_1 > E_{\min}$  mais  $T = E_d$ , l'énergie transférée n'est pas suffisante pour déplacer un atome. Elle est alors consommée sous forme d'phonons. L'incident continue son chemin.

L'itération de chaque cas donne la répartition des défauts créés pendant l'implantation.

La figure 2-2 illustre ces défauts.



**Figure 2.2 Défauts ponctuels d'implantation.**

Modèle cascades de collisions

Notre modèle de cascade de collision est le même que celui de l'implantation ionique avec la possibilité de considérer les atomes déplacés comme particule incidente.

Le nombre de défauts créés est fonction de l'énergie d'implantation. Un seul ion incident occasionne, à lui seul, un grand nombre de défauts ponctuels, à titre d'exemple, l'implantation d'un ion d'antimoine de 50 KeV dans le silicium provoque :

phonons : 2814

lacunes :2052

atomes interstitiels :2052

atomes substitutionnels :439

Il n'est pas donc nécessaire de simuler les défauts de tous les ions, parce que nous assisterons à un fort désordre. Ce fort désordre ne nous sera guère utile pour mieux apprécier le profil des défauts. Nous traiterons donc les défauts par un seul ion incident.

Cette simplification amène la remarque suivante le profil des défauts dépend du parcours de l'ion, il est fort possible qu'il n'existe de relation directe entre le profil des défauts et le résultat général d'implantation.

#### *description*

La figure 2-3 montre l'organigramme de cascades de collisions. Le problème est de résoudre comment on garde les atomes déplacés. Pour ce faire, nous utilisons un système à pile. Pour garder les caractéristiques de chaque atome incident, nous utilisons une pile de type L.I.F.O.(Last In First Out).

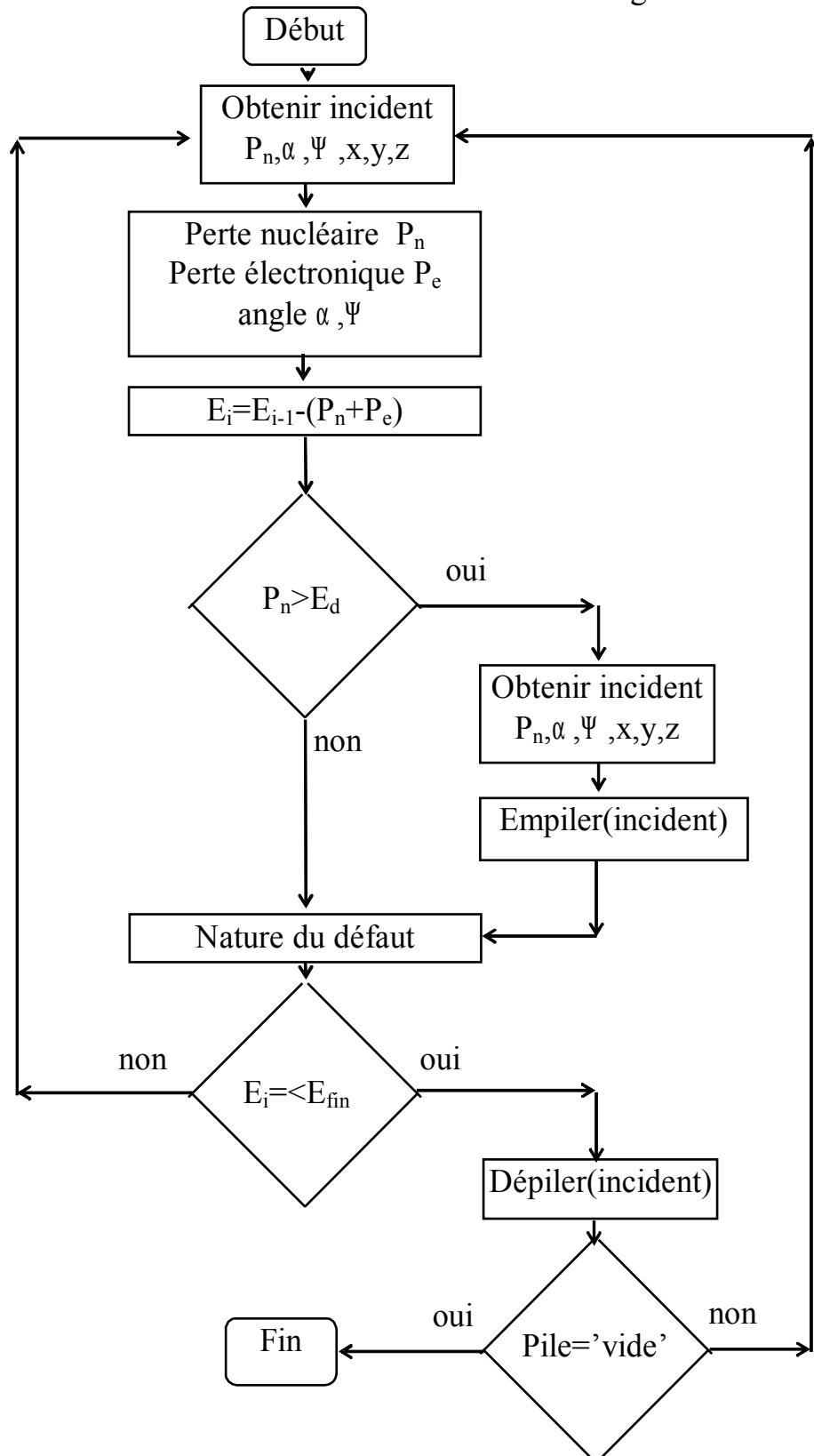
Considérons une entité abstraite nommée « incident ». Cette entité possède comme attributs :l'énergie, les cosinus directeurs, les coordonnées. Elle a pour rôle de rendre une particule incidente, après obtention, prête au traitement. Le traitement d'un incident est identique à celui de l'implantation ionique.

#### **Figure II-3 : organigramme de cascades de collisions**

Etant donnée un incident énergétique, lorsque l'énergie transférée par cet incident au cours d'un choc nucléaire est supérieure à l'énergie de déplacement, l'atome « heurté » devient à son tour un incident. Pour pouvoir traiter ultérieurement ce dernier, il sera identifié par l'instruction « obtenir incident », et sauvegardé dans la pile. Ainsi la pile est-elle incrémentée à chaque fois que cette énergie transférée est

supérieure à  $E_d$ . Il faut ensuite déterminer la nature du défaut créé.

Quand l'énergie de l'incident en cours ne lui permet plus de se déplacer, la pile est décrémenté en renvoyant un nouvel incident. Ce processus ne prend fin que lorsque la pile est vide.



**Figure II-3 : Organigramme de cascades de collisions**

## Résultats

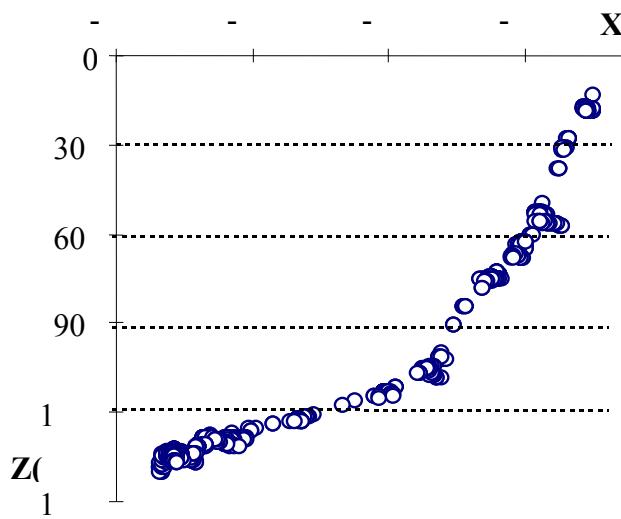
Dans ce paragraphe, nous allons présenter les résultats de simulation de cascades. Nous verrons d'abord les défauts créés par le bore, par le silicium, l'antimoine dans le silicium. Puis, nous essayerons de comparer le profil d'implantation de bore avec celui des défauts ponctuels créés.

### *Défauts des ions léger-intermédiaire-lourd*

L'énergie d'implantation est de 50 KeV. Le choix de  $\alpha_e$  est respectivement de 1,63, 1,5 et 1,5 pour le bore, le silicium et l'antimoine.

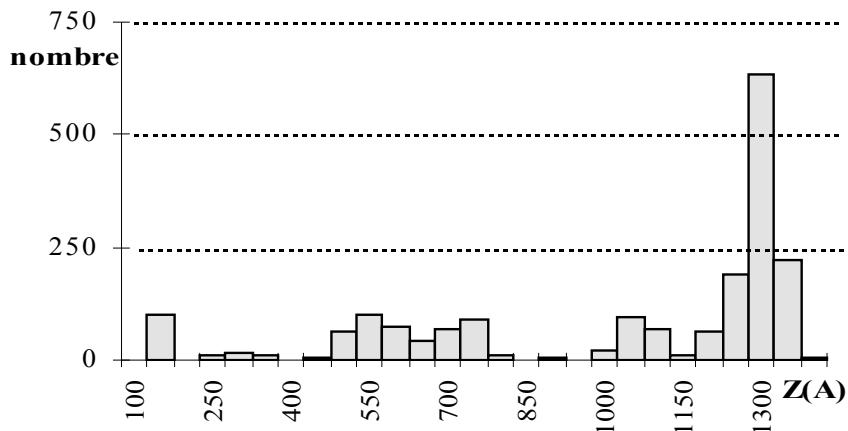
#### Cas du bore

Bien que le rendement nucléaire du bore sur le silicium est assez grande (environ 0,81), La figure II-4 nous montre que l'énergie n'est importante qu'à la fin du parcours. En effet, c'est à ce stade que nous constatons la forte présence de lacunes. Le début de parcours est dépourvu de lacunes, l'ion étant encore très énergétique, la perte d'énergie nucléaire est faible. Le milieu de parcours présente des lacunes groupés, intermittents, ceci se traduit par des ouvertures aléatoires de l'angle de déviation au centre de masse, puis au laboratoire.



**Figure II-4 : lacunes créés lors d'une implantation de bore de 50 KeV dans le silicium.**

La figure II-5 montre l'histogramme de l'ensemble des défauts ponctuels.



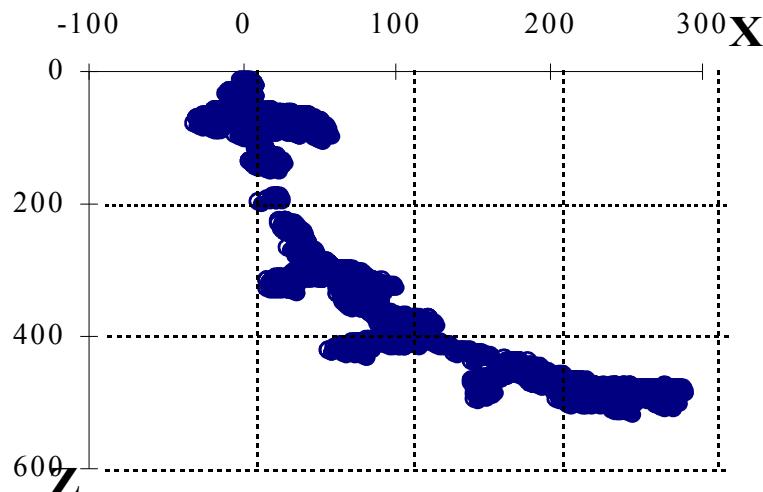
**Figure II-5 : Histogramme des défauts ponctuels**

Cet histogramme est obtenu avec un pas de 50 A.. la moyenne des défauts se situe à 1060 A, une fluctuation de 370 A autour de cette dernière. Cet histogramme réaffirme que les principaux défauts se trouvent en fin de parcours, c'est-à-dire à partir de 1050 A. Enfin, cette simulation a engendrée 1374 phonons, 851 paires de Frenkel et 207 substitutionnels.

#### Cas de silicium

Le profil de défauts du silicium dans le silicium est caractérisé par la quasi-présence des défauts tout au long du parcours de l'ion. En effet, bien qu'en haute et basse énergie, l'énergie transférée à chaque collision est importante, ceci du fait que la perte d'énergie nucléaire est uniquement fonction de l'angle  $\theta$ , le rendement étant maximal.

La figure II-6 illustre la répartition des défauts.

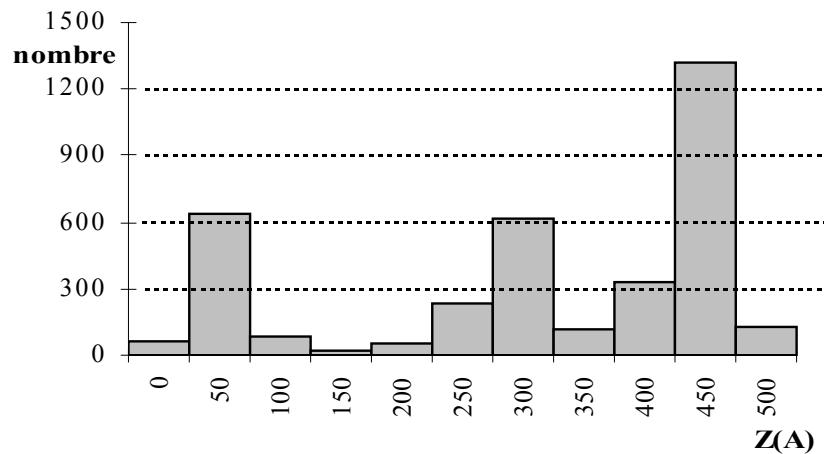


**Figure II-6 : Répartition des défauts du silicium dans le silicium**

Cette répartition montre également que les atomes primaires peuvent créer des défauts significatifs. Mais ces derniers sont situés proches du parcours de l'ion.

La figure II-7 est un histogramme montrant le nombre de défauts suivant la profondeur.

Cet histogramme est obtenu avec un pas de 50 A. Nous observons les principaux défauts à la fin du parcours( à partir de 400 A). Nous pouvons apprécier également le nombre de défauts créés proche de la surface (à 50 A). La profondeur moyenne des défauts est estimée à 340 A, avec un écart-type de 156 A..

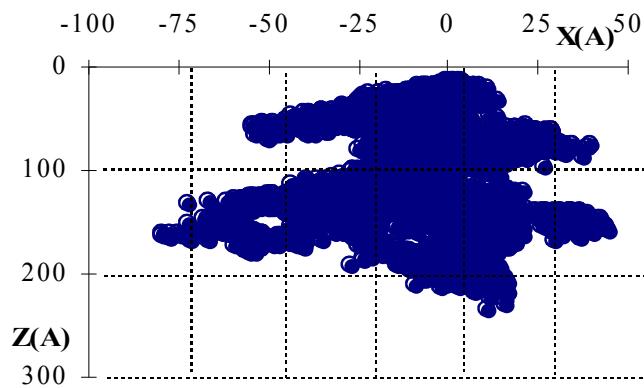


**Figure II-7 : Effectif des défauts créés du silicium à 50 keV dans le silicium**

Nous avons recensé 346 atomes substitutionnels, 1625 paires de Frenkel, 2809 phonons.

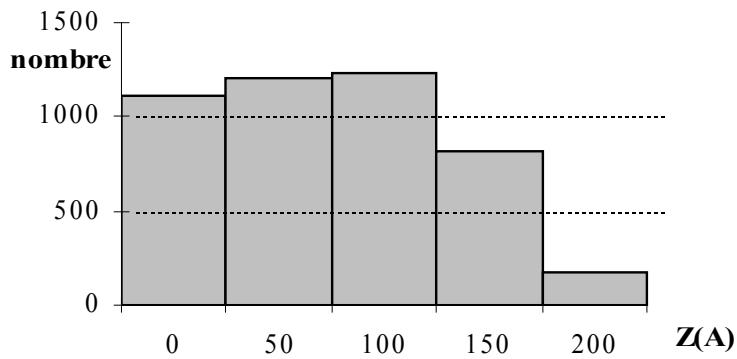
#### Cas de l'antimoine

Le rendement nucléaire est de 0,31. Bien que ce rendement faible, l'antimoine provoque un désordre latéralement large, dès la surface à la profondeur moyenne des défauts. L'angle de déviation au centre de masse joue un rôle considérable pour transférer autant d'énergie responsable de défauts. La figure II-8 illustre la répartition des défauts.



**Figure II-8 : Répartition des défauts de l'antimoine à 50 keV dans le silicium.**

De plus, l'histogramme (cf. fig.II-9) montre que les principaux défauts sont situés avant et autour de la profondeur moyenne . Déjà, lors des premiers chocs, l'ion perd beaucoup d'énergie pour obtenir les défauts proche de la surface. D'ailleurs, cette perte d'énergie est importante tout au long du parcours. l'énergie à la fin du parcours étant faible, les défauts créés en profondeur sont alors minimes.



**Figure II-9 :Histogramme des défauts de l'antimoine dans le silicium.**

La moyenne des défauts se situe à 100A, d'écart type de 50 A. 439 substitutionnels, 2052 lacunes ainsi que 2052 d'intersticiels, 2814 phonons sont créés lors de cette simulation.

conclusion

Le tableau II-2 résume le nombre des types de défauts créés.

	BORE	SILICIUM	ANTIMOINE
intersticiels	851	1625	2052
lacunes	851	1625	2052
substitutionnels	1374	2304	2814
phonons	207	346	439
total (ponctuels)	1909	3596	4543

**Tableau II-2 :Résumé des défauts dans le silicium.**

Le nombre de défauts créés augmente avec la masse et le numéro atomiques de l'impureté. Plus elle est lourde et grosse, plus, elle

engendre des défauts. Pour le bore, le profil des défauts décèle les principaux défauts à la fin du parcours, des défauts singuliers existent tout au long du parcours. Pour l'antimoine, les défauts sont localisés dès la surface jusqu'à la profondeur moyenne, et s'amenuisent en fin de parcours. Le cas du silicium semble être le compromis entre ces deux cas.

### ***Profil de l'implantation et profil des défauts***

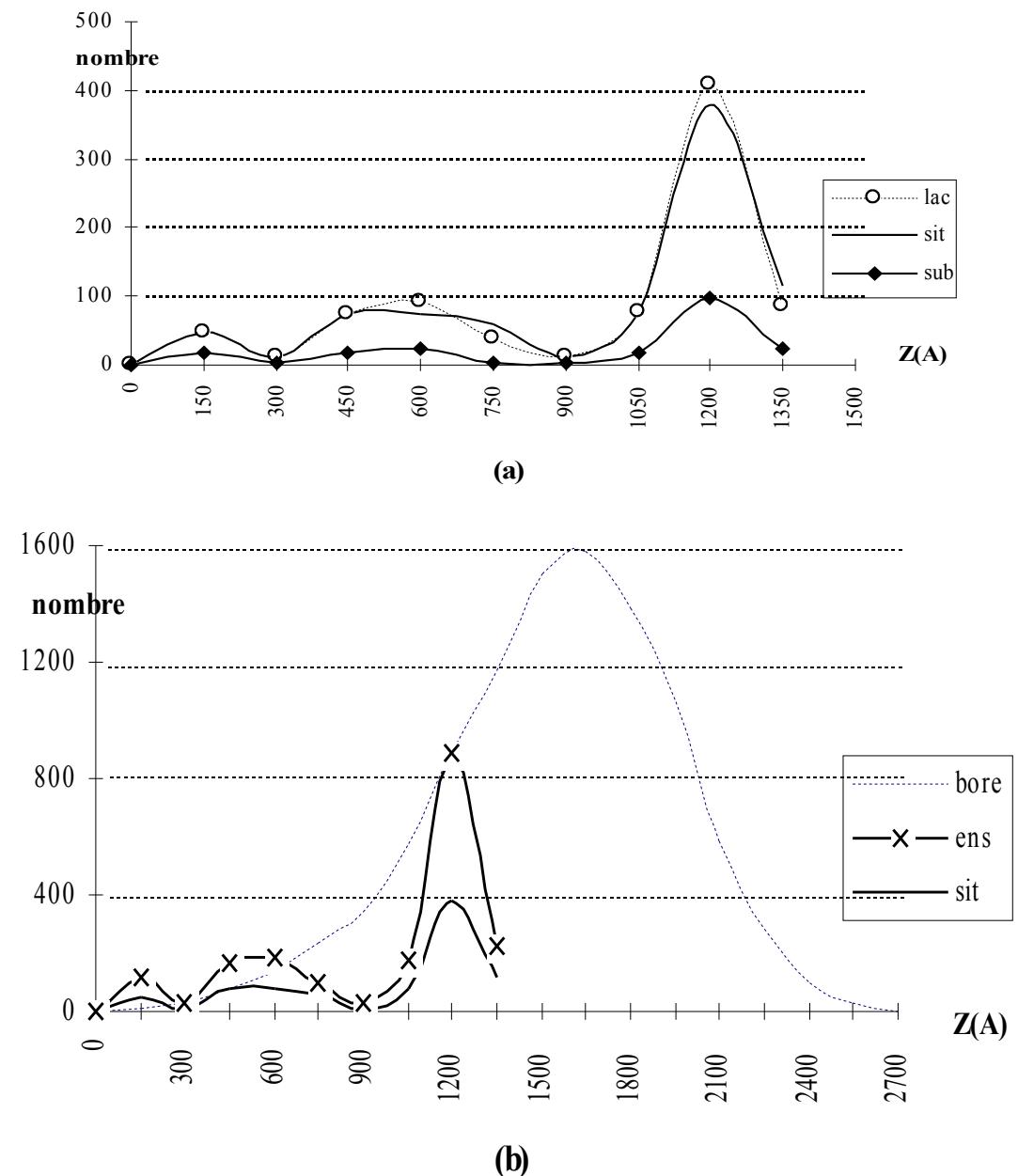
Le tableau II-3 donne un résumé statistique des défauts créés d'un bore de 50 keV dans le silicium et le résultat d'une simulation 10000 bores de 50 keV dans le silicium.

	<b>bore</b>	<b>inter- stitiels</b>	<b>substi- tutionnels</b>	<b>lacunes</b>	<b>ens. Défauts</b>
<b>effectif</b>	10000	851	207	851	1909
<b>moyenne</b>	1620	1060	1050	1055	1055
<b>écart-type</b>	395	370	385	370	370
<b>classe modale</b>	1650-1800	1200 - 1350	1200 -1350	1200 - 1350	1200-1350
<b>dont</b>	1582	380	98	408	886

**Tableau II-3 : Comparatif des résultats statistiques**

La moyenne des impuretés est située à 1620 A. Celles des défauts avoisinent les 1050 A. Le rapport de ces moyennes donne 0,64. Cependant, en considérant les classes modales( nous y observons le maximum d'effectif), le rapport de leur centre donne 0,75. La profondeur des défauts maximaux est située 0,75 de celle des impuretés maximales. Remarquons que les ions et les défauts ont la même fluctuation.

Les figures II-10 montrent les profils des lacunes, substitutionnels et des interstitiels. Les profils des défauts ponctuels sont identiques. Seulement, celui des substitutionnels est décalé. Les paires de Frenkel ont des courbes presque adjacentes (a). En sommant les défauts créés, nous avons l'ensemble des défauts. Son profil est donné par la figure III-10 (b). Cette figure compare le profil de l'ensemble des défauts avec le profil des bores et des interstitiels.



**Figure II-10 :Comparaison des profils des défauts et implantation**

**(a) lacunes - interstitiels - substitutionnels**

**(b) interstitiels - ensemble défauts - implantation**

**Chapitre 3 :**

**LE LOGICIEL C.C.D.B.I.E**

Le logiciel C.C.D.B.I.E (Cascades de Collisions Dûs au Bombardement d'Ions Énergétiques) est un logiciel conçu pour traiter à la fois le processus d'implantation ionique et les défauts ponctuels créés par les cascades. Ce logiciel est réalisé en langage orienté objet C++. Il est valable pour les ions incidents implantés dans les cible mono-élément et mono-couche, en l'occurrence le silicium. A partir d'un fichier d'entrée contenant toutes les caractéristiques des particules incidentes et de la cible nécessaires au traitement, l'utilisateur a le choix:

- ou traiter uniquement l'implantation ionique, dans ce cas, on peut aller jusqu'à 10000 ions simulés,
- ou traiter l'implantation ionique et les cascades générées par un seul ion incident.

Deux sortes de fichiers résultats sont éventuellement disponibles:

- ◊ résultat de l'implantation ionique,
- ◊ résultat des cascades.

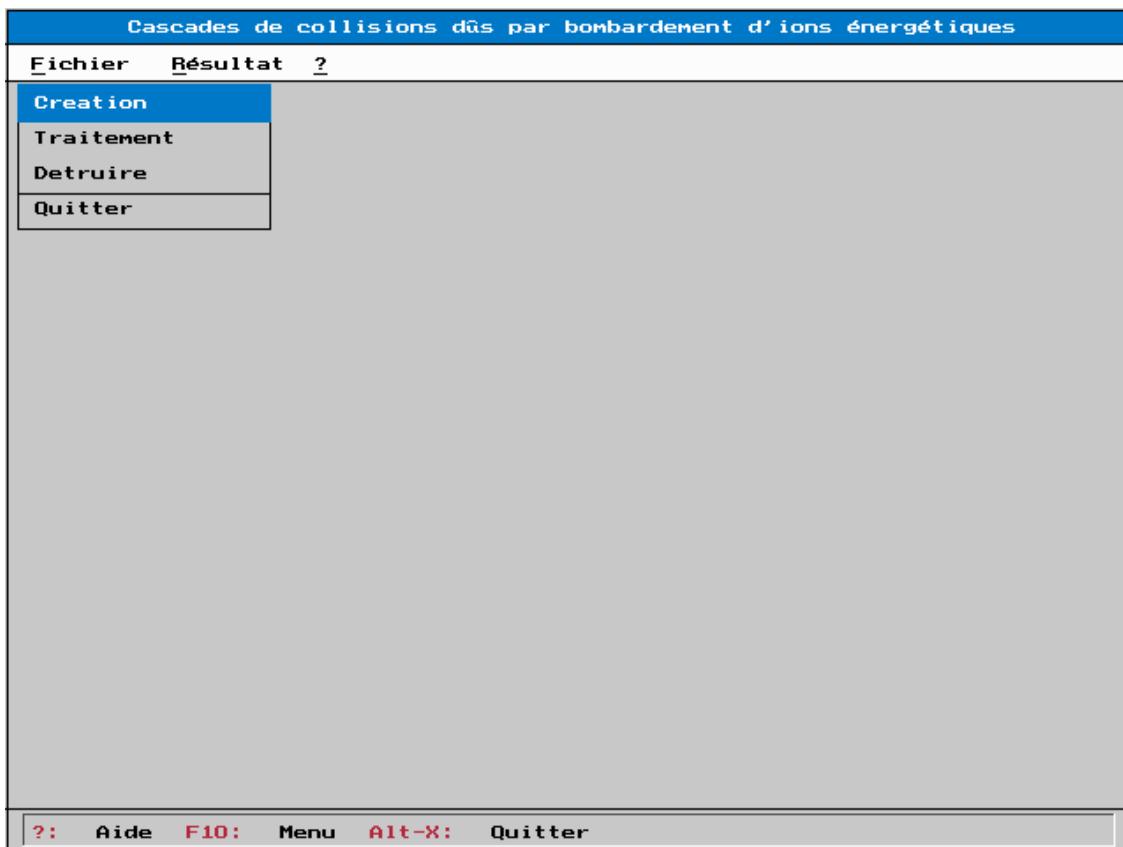
Ce chapitre a pour but de présenter d'une part quelques interfaces utilisateur et d'autre part les limitations du logiciel.

### PRESENTATION DES INTERFACES

Dans ce paragraphe, nous allons faire un tour de notre logiciel, de l'entrée des données aux représentations des résultats.

#### ***LES ENTREES***

Les données d'un traitement sont enregistrées dans un fichier d'entrée nommé (\*.ent). Un fichier d'entrée contient les caractéristiques du dopant (masse et numéro atomiques) et celles de la cible (masse et numéro atomiques, densité), l'énergie d'implantation, le facteur de correction, l'angle d'incidence initiale, et les coordonnées initiales. Si l'un ou plusieurs de ces données changent, il est nécessaire de créer un nouveau fichier. Pour ce faire, il faudrait accéder à l'interface principale (cf. figure III-1)



**figure III-1 :interface principale de C.C.B.D.I.E**

### *Création*

La première étape pour obtenir un fichier d'entrée est la création.(cf. fig III-2). Elle permet d'effectuer le choix du couple(ion-cible), de saisir les données d'implantation, d'enregistrer ces dernières dans un fichier nommé.Pour passer à l'interface de saisie de données, il suffit de sélectionner « suivant » et valider. « précédent » permet de revenir à l'interface de sélection couple ion-cible. « enregistrer » enregistre ces données dans un fichier d'extension (\*.ent).

Ces étapes étant terminées, le fichier est maintenant prêt pour le traitement.



**Figure III-2 : Interface de saisie de données.**

### ***Traitemet***

Dans « Traitement », le logiciel effectue le traitement d'un fichier d'entrée disponible. Il faudrait d'abord l'ouvrir. Après sa sélection, l'utilisateur doit sa choisir entre traiter l'implantation seul ou l'implantation et les cascades. Un diagramme sectoriel informera l'utilisateur de l'avancement du traitement.

### ***Autres***

D'autres commandes sont également disponibles sur l'interface principale de C.C.B.D.I.E :détruire et quitter

« détruire » offre à l'utilisateur de supprimer dans la liste des fichiers d'entrées un fichier d'entrée.

« quitter » permet de sortir du programme et revenir au système d'exploitation.

### ***RESULTATS***

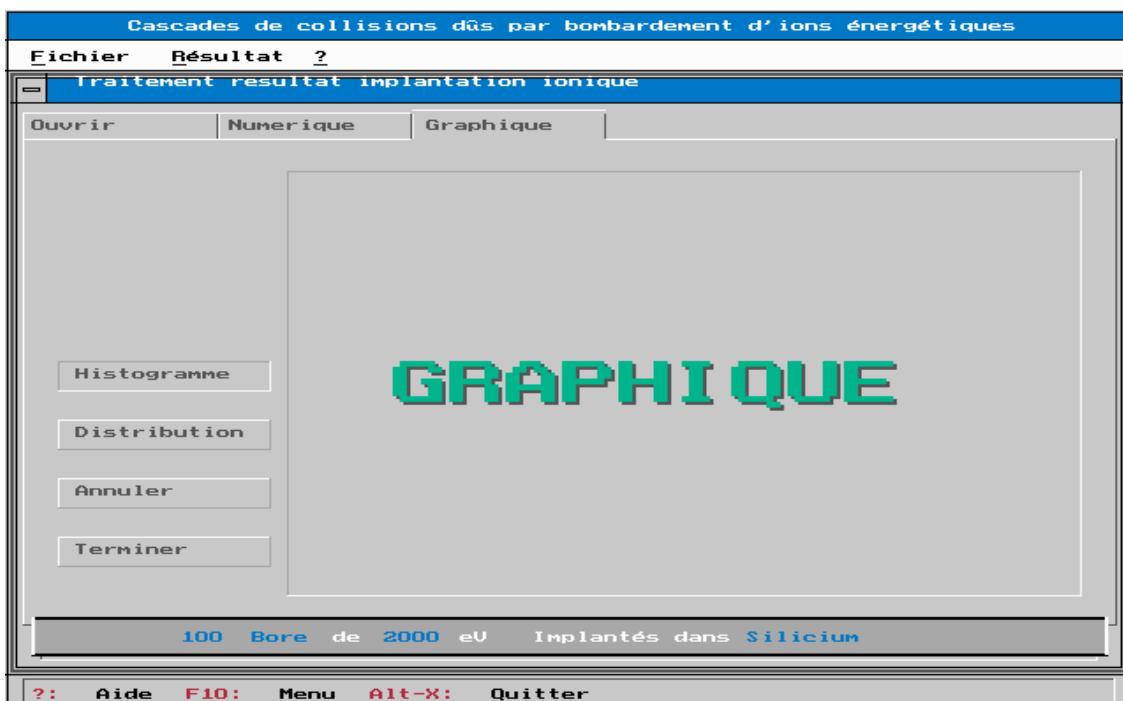
Les résultats d'un traitement sont enregistrés dans des fichiers. Ces résultats sont les coordonnées des ions implantés pour l'implantation ionique et les coordonnées, le type de défaut pour les cascades. Il existe alors un

fichier résultat (\*.hst) pour l'implantation, un fichier résultat (\*.rcl) pour les cascades.

Dans ce fichier, nous avons la distribution spatiale à 3D des ions ou des défauts ponctuels. Il faut donc les traiter pour avoir les autres résultats comme l'histogramme, profondeur moyenne, ...

### ***Résultats d'implantation***

Les résultats d'implantation sont de deux types : numériques et graphiques. Les résultats numériques sont issus d'une étude statistique descriptive : la moyenne de l'échantillon, l'écart type. Les représentations graphiques donnent l'histogramme de l'échantillon, et une répartition dans le plan(xOz).. La figure III-3 présente l'interface de résultat d'implantation.

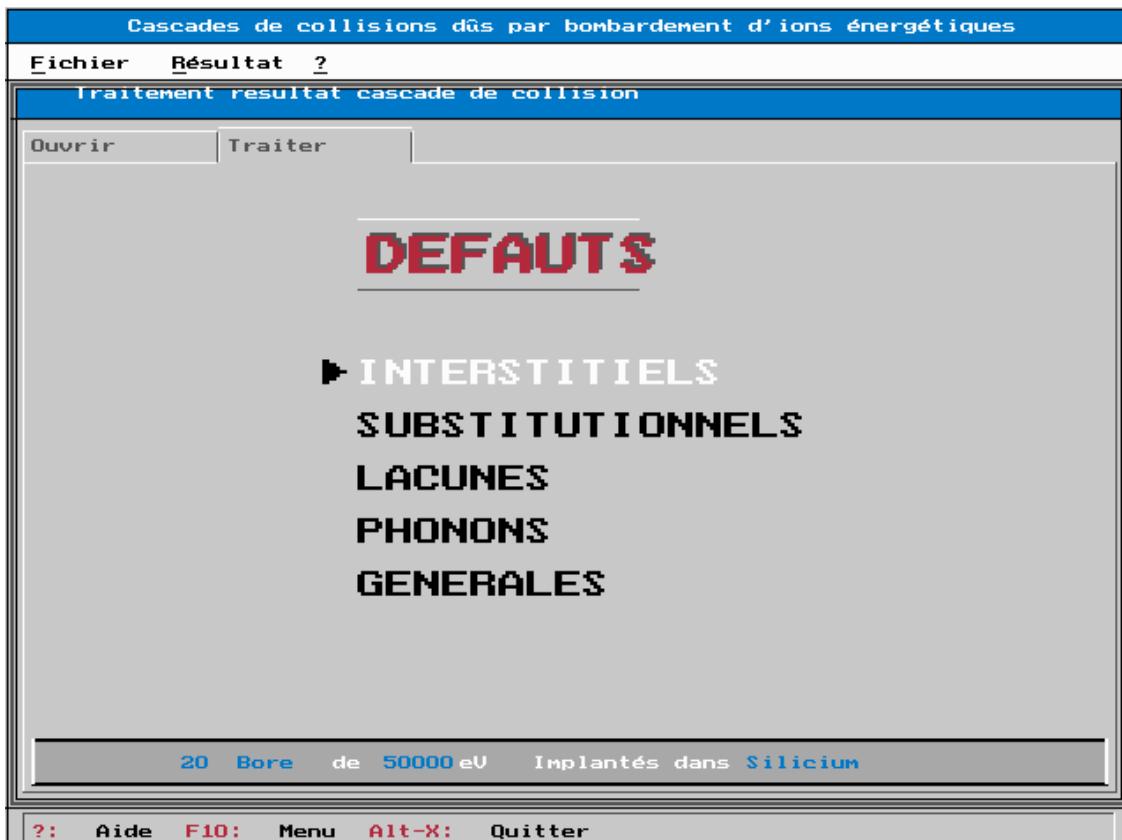


**Figure III-3 :interface résultat d'implantation**

### ***Résultats de cascades***

Comme ceux de l'implantation, l'utilisateur peut accéder aux résultats numériques, et aux représentations graphiques d'un fichier d'entrée traité avec cascade. Un aperçu général donne l'ensemble des résultats(

nombre d'intersitIELS, nombre de substitutionNELS,...). On peut visualiser un type bien défini de défauts.(cf. figure III-4) Les résultats numériques donnent le nombre du type créé, la déviation standard, l'intervalle de profondeur où on observe le maximum de défauts. L'histogramme et la répartition en xOz restent disponibles.



**Figure III-4 :Choix du défaut à visualiser**  
I.3. REMARQUE

le tableau suivant résume les touches de raccourci du logiciel

touche	action
<b>F10</b>	accéder au menu
<b>Alt+F</b>	menu Fichier
<b>Alt+R</b>	menu Résultat
<b>F1,</b>	Aide
<b>Alt+X,</b>	Quitter

**tableau III-1 :Touches de raccourci**

## INCONVENIENTS

### *Limitation logicielle*

La limitation logicielle de notre logiciel est qu'elle est figée sur une cible monocouche et monoatomique. Bien évidemment, rien n'empêche l'extension ultérieure pour les cibles multicouche, polyatomique comme du  $\text{Si}_3\text{N}_4$  sur  $\text{SiO}_2$  et Si.

Ainsi, si l'on veut améliorer notre logiciel, il faudrait tenir compte des caractéristiques de la cible :

- cible polyatomique : exemple  $\text{SiO}_2$

La perte d'énergie électronique s'écrit :

$$-\frac{dE}{dR} \Big|_e = \frac{dE}{dR} \Big|_{e_{\text{Si}}} + 2 * \frac{dE}{dR} \Big|_{e_{\text{O}}}$$

Pour la perte d'énergie nucléaire, il faut choisir un autre nombre aléatoire pour savoir avec quel composant monoatomique l'ion incident ait subi le choc, ceci en respectant la stochiométrie.

- Cible multicouche : exemple  $\text{SiO}_2 + \text{Si}$

Le traitement est identique pour le calcul, seulement il faut tenir compte des caractéristiques (épaisseur, densité,...) de chaque couche.

### *Inconvénients matériels*

Le logiciel nécessite un ordinateur assez rapide pour son traitement, au moins un 486. Pour avoir un résultat significatif, il faudrait un grand nombre d'échantillon (plus de 1000). Cependant, plus on traite plusieurs ions, plus le temps de traitement est élevé. Pour une machine 386 (25 Mhz), La simulation d'un bore de 100 keV sur le silicium requiert environ 30s, alors pour 10000 bores , cela occupe un temps assez élevé pour bloquer la machine (environ 8 h ).

Donc, il faut un compromis entre le nombre d'ions à simuler et le temps de traitement.

En outre, le logiciel occupe également un espace assez grand pour sauvegarder ces résultats. En effet la simulation de 10000 ions demande 250 ko d'espaces disque pour l'implantation ionique et 60 ko pour les cascades d'un seul ion. Ces chiffres augmentent si l'on veut enregistrer en sus d'autres données.

De plus, il faudrait une mémoire minimale de 300 ko pour les allocations de la pile.

En conclusion, ce logiciel nécessiterait une machine supérieure à 486, d'espace disque minimale de 1Mo et une mémoire conventionnelle de 300Ko.

## CONCLUSION

L'implantation ionique est sans doute l'une des techniques de dopage plus facile à contrôler. Cependant, les défauts créés pendant l'implantation sont une fonction croissante de l'énergie et de la dose à introduire. Plus, ces chiffres augmentent, plus les défauts sont considérables. Néanmoins, les défauts créés sont proches des uns des autres (atomes déplacés - lacunes). À la fin de l'implantation, la cible est fortement endommagée. Il est donc nécessaire de guérir ces défauts par un recuit.

Un recuit peut être considéré comme une diffusion thermique de courte durée. Suite à cet apport d'énergie, les atomes déplacés regagnent les sites vacantes pour être électriquement actifs.

## **REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES**

- [1]. **J.P. BIERSACK et L.G. HAGGMARK**, « A monte carlo computer program for transport of energetic ions in amorphous targets », Nuclear Instruments and Methods 174(1980).
- [2]. **P.N. FAVENNEC**, « L'implantation ionique », L'echo de recherche n°123 (1er trimestre 1986).
- [3]. « Cours de mécanique générale »Département Tronc commun, Ecole Supérieure Polytechnique d'Antananarivo, 1995.
- [4]. **M. DUQUESNES**, « Initiation à la physique nucléaire expérimentale fascicule III»,Les cours de Sorbonne, Centre de documentation universitaire, PARIS V.
- [5]. **L. RAJAONARISON** , « Développement d'un logiciel particulaire Monte Carlo 3D simulant l'implantation ionique localisée dans les composants microélectroniques », Thèse de Doctorat, Université de Paris Sud, Orsay,1992
- [6]. « Cours d'analyse numérique » 3 Année Département Electronique, Ecole Supérieure Polytechnique d'Antananarivo, 1997.
- [7]. « Cours de Génie logiciel » 4 Année et 5 Année Département Electronique, Ecole Supérieure Polytechnique d'Antananarivo, 1998-1999.
- [8]. **W.D. WILSON and L.G. HAGGMARK**, « Calculation of nuclear stopping, ranges, and straggling in the low energy region », Physical review B,vol.15, N°5 p2458-2468.

**Auteurs :** RADANIELA Njaka RADANIELA Radomalala\*  
RAKOTOARIAMANANA Lalaina Lyvestor \*\*

**Titre:**

## ETUDE DES DEFAUTS PONCTUELS CREES PAR L'IMPLANTATION IONIQUE

**Nombre de pages :** 57

**Nombre de figures :** 29

**Nombre de tableaux :** 9

---

### RESUME

Ce travail a pour but d'étudier les défauts ponctuels créés par l'implantation ionique. Ces défauts sont générés au cours des cascades de déplacement d'atomes au sein de la cible. Pour de faire, un logiciel de simulation a été développé en C++.

La définition des interactions prises en compte, le Modèle Carlo utilisé, les résultats et les discussions constituent les vifs sujets de ce manuscrit.

---

**Mots clés :** implantation ionique, cascades de collisions, lacunes, substitutionnels, interstitiels, phonons, paires de Frenkel, Monte Carlo, simulation.

**RAPPORTEUR :** Madame RABEHERIMANANA Lyliane Irène

**ADRESSES DES AUTEURS :**

- \*LOT 26 C 70 Tsarasaotra Antsirabe 110.
- \*\* Batiment 68 Porte 4 Fort Duchesne Antananarivo