

Introduction

Le but de ce chapitre est la modélisation d'une décharge luminescente en tenant compte des effets de la pulvérisation cathodique sur la décharge. La pulvérisation est un phénomène qui intervient dans de nombreux dispositifs, (dépôts de couches minces, nettoyage de surfaces, gravure de semi-conducteurs, ...) ou non (érosion des électrodes des lampes à décharges, de la surface des satellites, ...). Pour cela, nous avons utilisé un modèle (Monte-Carlo pour l'ionisation par les collisions électron-neutre), que nous avons couplés à un modèle Monte-Carlo pour les ions et les neutres rapides. Ce modèle calcule le flux de particules pulvérisées de la cathode par le bombardement des ions et des neutres rapides. Nous avons réalisé une étude sur la pulvérisation cathodique au bon fonctionnement des modèles numériques (SRIM 2013).

A basse énergie de gaz (Xe^+ , Ar^+) la pulvérisation des rendements des énergies des ions de 100 eV et moins. Les données de rendement de pulvérisation à ces énergies sont importantes pour la conception de propulseur ionique et la prédiction de la durée de vie. Les bases principes des phénomènes de pulvérisation sont discutées. Un aperçu des différents types populaires de méthodes de rendement de pulvérisation expérimentales est présenté avec un accent sur les techniques qui ont été utilisées pour trouver Xe^+ -Mo pulvérisation les rendements dans le passé. Les rendements de pulvérisation dans cette étude se trouvent à la fois des modèles et des expériences. Les rendements de pulvérisation sont calculés à l'aide de la Sigmund, Bohdansky, Yamamura, et les formules Wilhelm. Les rendements de pulvérisation calculés pour ces modèles varient considérablement à faible consommation d'énergie. TRIM (le transport des ions dans la matière), un programme de simulation de Monte-Carlo, a été adapté pour étudier les rendements de pulvérisation, et de l'énergie et des distributions angulaires des atomes pulvérisés.

III.1. Caractéristiques des semi-conducteurs

Les matériaux semi-conducteurs sont des isolants au zéro absolu qui conduisent l'électricité de façon limitée à température ambiante. Parmi leurs caractéristiques principales, ils peuvent être dopés grâce à des impuretés pour altérer leurs propriétés électriques.

Les matériaux semi-conducteurs les plus communs sont des solides inorganiques cristallins ; ils sont classés suivant les groupes des atomes qui les composent. Les chiffres romains font référence aux colonnes I, II, III, IV, V, VI . . . etc du tableau périodique des éléments.

La classification des semi-conducteurs répartit ces derniers en différents groupes suivant leurs caractéristiques :

a) Semi-conducteurs élémentaires

- Silicium (Si)
- Germanium (Ge)

b) Semi-conducteurs composites

- Silicium-germanium (SiGe)

Un semi-conducteur III-V est un semi-conducteur composite fabriqué à partir d'un ou plusieurs éléments de la colonne III du tableau périodique des éléments (bore, aluminium, gallium, indium, etc.), et d'un ou plusieurs éléments de la colonne V ou pnictogènes (azote, phosphore, arsenic, antimoine, etc.). Les semi-conducteurs III V présentent un grand intérêt en raison de leurs propriétés :

- ils possèdent une conductivité thermique élevée.
- leur point de fusion est élevé.
- ils ont une bande interdite directe.

Ces matériaux sont principalement utilisés en microélectronique pour des circuits intégrés, dans les cellules photovoltaïques et dans les dispositifs optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes (DEL ou LED en anglais). L'AlN, le GaN et l'InN possèdent respectivement des énergies de bandes interdites de 6,2 eV¹, 3,4 eV¹ et ~0,7 eV².

C) Alliages binaires

- Nitrure de gallium (GaN).
- Arséniure de gallium (GaAs).

III.1.2. Gaz utilisés

Initialement connus en tant que "gaz inertes" puis "gaz rares" (ce qui n'est pas tout à fait exact pour plusieurs d'entre eux), ils furent ensuite appelés "gaz nobles". L'appellation "gaz monoatomiques" est une autre appellation possible pour cette famille d'éléments qui sont tous gazeux et monoatomiques dans la condition standard de température et de pression.

Cette famille d'éléments comprend : l'Hélium(He), le Néon(Ne), l'Argon(Ar), le Krypton(Kr), le Xénon(Xe), le Radon(Rn) et l'élément super lourd 118 (Uuo) dont la synthèse de quelques atomes a été réalisée récemment.

Dans notre travail, on a utilisé deux gaz : l'Argon(Ar), le Xénon(Xe).

III.1.3. Caractéristiques de ces deux gaz

a) L'argon est l'élément chimique de numéro atomique 18, de symbole Ar, Il appartient au groupe des gaz nobles (aussi appelé « gaz rares » ou « gaz inertes »)

Energie de première ionisation c'est : 1520 kJ.mol^{-1}

L'argon ultra-pur est utilisé pour la protection contre les impuretés (par exemple dans l'étirage des monocristaux de silicium et germanium), comme gaz porteur de molécules réactives. Sous forme ionique, l'argon est utilisé dans les procédés de fabrication de semi-conducteurs ou de matériaux à haute performances par sputtering, implantation, recuit ou gavage chimique.

L'argon est un gaz de protection utilisé dans le soudage à l'arc, le blindage du fond de filet ou le coupage par plasma. L'argon protège les soudures contre l'oxydation, et réduit les émissions de fumées lors du soudage.

b) Le xénon est l'élément chimique de numéro atomique 54, de symbole Xe. C'est un gaz noble, inodore et incolore. Dans une lampe à décharge, il émet une lumière bleue.

Energie de première ionisation : $1170.36 \text{ kJ.mol}^{-1}$

On utilise le xénon dans les lampes à incandescence (automobile et aviation) :

- Lampes flashes
- Ecrans plats de téléviseurs (écrans plasma)

Le xénon est obtenu en petites quantités à partir de la distillation fractionnée de l'air liquide.

Le xénon est beaucoup plus cher que les autres gaz nobles.

L'excitation électrique du xénon produit une lumière d'un blanc éclatant, les lampes à décharge au xénon ont une température de couleur proche de celle du soleil. Le xénon est utilisé pour le remplissage des lampes flash, il est utilisé depuis peu pour les phares d'automobile.

Le laser à excimère de chlorure de xénon a été utilisé par exemple pour des applications en dermatologie. Dans le domaine de la médecine, le xénon peut être utilisé en anesthésie, mais il intervient également dans des dispositifs d'imagerie médicale (émission gamma du radio-isotope ^{133}Xe).

Le xénon est le carburant le plus couramment utilisé pour la propulsion ionique des engins spatiaux. Il est aussi employé dans les chambres à bulles et dans l'industrie des réacteurs nucléaires.

III.2.Méthode de Monte Carlo

Plusieurs travaux sont réalisés dans le cadre de la modélisation des décharges luminescentes continues, en particulier, le modèle fluide cinétique et le modèle hybride qui est la combinaison entre la simulation de Monte-Carlo et le modèle fluide. Dans ce travail, on utilise seulement la méthode de Monte-Carlo, pour simuler une décharge luminescente continue dans un gaz électropositif (l'argon), Cette technique capable de coupler le mouvement des particules chargées avec l'équation du Poisson, elle permet aussi de calculer la distribution spatiale des courants électroniques et ioniques, la distribution de champ électrique et également la fonction de densité de probabilité des énergies électroniques dans le plasma.

L'axe des travaux dans les décharges luminescentes s'est tourné vers une modélisation plus détaillée de la décharge, une bonne modélisation permet de comprendre et de prédire leur comportement général, alors de contrôler et d'utiliser cette technologie dans les besoins industriels, talque, les semi-conducteurs, les panneaux de visualisation à plasma, le dépôt des couches minces, la gravure en micro-électronique et le traitement de surfaces

Il existe trois types de modèles : le modèle fluide qui consiste à résoudre les équations hydrodynamiques, ces dernières utilisent les moments de la fonction de distribution, qui sont accessibles à la mesure, mais ce modèle n'est plus valable que dans le cas de l'hors équilibre thermodynamique, le modèle cinétique basé sur la résolution directe de l'équation de Boltzmann, ou bien par un autre modèle statistique basé sur des lois stochastiques et simule les trajectoires des particules chargées, avec la technique appelée méthode de Monte-Carlo[22].

III.2.1.Théorie de Sigmund

Sigmund décrit le phénomène de pulvérisation de la façon suivante : Un ion incident fait une série de collisions avec les atomes de la cible. Les atomes de la cible qui récupèrent suffisamment d'énergie vont pouvoir faire des collisions secondaires avec d'autres atomes et de cette manière créer une autre génération d'atomes de recul. L'ion incident et les atomes de recul énergétiques ont la possibilité d'être éjectés de la cible après une série de collisions.[23]

L'énergie des particules éjectées provenant de la première génération constituent la plus grande part de l'énergie pulvérisée, mais ces particules ne représentent qu'une faible proportion du nombre total d'atomes pulvérisés. La distribution énergétique des atomes pulvérisés comporte un pic aux très faibles énergies. Les trajectoires des ions et des atomes de recul énergétiques sont

entourées par des nuages d'atomes de recul d'ordre supérieur mais qui ont une énergie très faible. Ces atomes ont une courte portée et ils ne peuvent seulement être pulvérisés que s'ils sont situés dans les premières couches de la surface. Mais ils sont si nombreux qu'ils forment la majeure partie du flux de particules pulvérisées [24].

Le calcul du coefficient de pulvérisation peut être fait en plusieurs étapes. Premièrement, il faut déterminer la quantité d'énergie déposée par les particules énergétiques (ions et atomes de recul) dans la zone proche de la surface. Puis, il faut convertir cette énergie en nombre d'atomes de recul de faible énergie ; il faut encore déterminer le nombre de ces atomes qui sont très proches de la surface et enfin sélectionner les atomes dont l'énergie est suffisante pour dépasser l'énergie de liaison de la surface. Les paramètres d'entrée sont les sections efficaces de collisions élastiques pour les ions et les atomes et les énergies de liaisons de la surface. Une des hypothèses fondamentales est la linéarité de la cascade, ce qui signifie que la cascade est tellement diluée qu'un atome déjà en mouvement a une probabilité nulle de rencontrer un autre atome en mouvement dans la cible. Cette théorie n'est valable ni pour les atomes lourds de haute énergie, ni pour les atomes légers de faibles énergies.

Les sections efficaces différentielles dépendent d'un coefficient m (compris entre 0 et d'une variable C qui dépend de λm). Suivant la région en énergie dans laquelle on trouve λm qui auront des valeurs différentes.

$$d\sigma = \frac{C}{E^m T^{1+m}} dT \quad (1)$$

Où, $d\sigma$ est la section efficace différentielle, E est l'énergie de la particule incidente et T est l'énergie de l'atome de recul. Dans l'expression du coefficient de pulvérisation, c'est la section efficace du pouvoir d'arrêt nucléaire $S_n(E)$ qui est employée. Avec la forme précédente pour la section efficace différentielle, la section efficace du pouvoir d'arrêt nucléaire s'écrit :

$$S_n(E) = \int_0^E T d\sigma = \frac{CE^{(1-2m)}}{1-m} \quad (2)$$

Pour les collisions élastiques, m est égal à 1. Pour des énergies de l'ordre de quelques keV et pour des particules de masses moyennes, m est égal à 1/2. Pour des énergies plus faibles, m est égal à 1/3. Pour des énergies de l'ordre de l'eV, m est égal à 0. De plus, Sigmund donne la valeur de l'énergie E^* jusqu'à laquelle l'hypothèse $m = 0$ est valable. Il y aura donc deux expressions du coefficient de pulvérisation, une valable pour des énergies inférieures à E^* et une autre pour des énergies supérieures à E (dans ce cas, m est égal à 1/3).

$$E^* = \left(\frac{3\lambda_{1/3}}{2\lambda_0} \right)^{2/3} \frac{M_1 + M_2}{M_2} \left(\frac{a_{12}}{a} \right)^3 \frac{Z_1 Z_2 e^2}{a_{12}} \quad (3)$$

Où λ_m est une constante sans dimension dépendante de m , a_{12} est le rayon d'écrantage, $M_{1(2)}$ et $Z_{1(2)}$ sont respectivement les masses et les numéros atomiques de la particule incidente et des atomes de la cible.

III.2.1.1. Pulvérisation donnée par Sigmund

Il serait trop long de développer les calculs qui ont permis à Sigmund d'obtenir le coefficient de pulvérisation. Il applique l'équation de Boltzmann aux atomes en mouvement dans le solide et il arrive à résoudre de façon analytique l'équation de Boltzmann en faisant un certain nombre d'approximations (approximation des collisions binaires, milieu infini, ...), ce qui permet de s'affranchir d'une résolution numérique [25].

Le coefficient de pulvérisation $Y(E)$ est proportionnel à l'énergie déposée dans une couche mince près de la surface ; cela est déterminé par le pouvoir d'arrêt nucléaire. Sigmund obtient la formule suivante pour une incidence normale :

❖ Pour des énergies inférieures à E (environ 1 keV)

$$Y(E) = \left(\frac{3}{4\pi^2}\right) \lambda \alpha \left(\frac{M_2}{M_1}\right) E/U_0 \quad (4)$$

Où λ est la fraction d'énergie transférée dans une collision binaire. Elle s'écrit :

Et α est une fonction tabulée par Sigmund du rapport des masses et U_0 est l'énergie de liaison

ou de sublimation. α Pour des énergies supérieures à E^* (environ 1 keV).

$$\lambda = 4M_1M_2/(M_1 + M_2)^2 \quad (5)$$

La relation entre le pouvoir d'arrêt nucléaire $S_n(E)$ et le pouvoir d'arrêt nucléaire réduit $S_n(\epsilon)$ est la suivante :

$$Y(E) = 0.042 \alpha \left(\frac{M_2}{M_1}\right) [S_n(E)/U_0] \quad (6)$$

On obtient alors l'expression suivante pour le coefficient de pulvérisation :

Et α est une fonction tabulée par Sigmund du rapport des masses et U_0 est l'énergie de liaison ou de sublimation.

❖ Pour des énergies supérieures à E^* (environ 1 keV)

$$S_n(E) = 84.78 \left[Z_1 Z_2 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2} \right] [M_1 / (M_1 + M_2)] S_n(\varepsilon) \quad (7)$$

$$= K S_n(\varepsilon)$$

La relation entre le pouvoir d'arrêt nucléaire $S_n(E)$ et le pouvoir d'arrêt nucléaire réduits $S_n(\varepsilon)$ est la suivante :

On obtient alors l'expression suivante pour le coefficient de pulvérisation :

$$Y(E) = 3.56 \alpha \left(\frac{M_2}{M_1} \right) \left[Z_1 Z_2 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2} \right] [M_1 / (M_1 + M_2)] [S_n(\varepsilon) / U_0] \quad (8)$$

Où $s_n(\varepsilon)$ est le pouvoir d'arrêt nucléaire réduit en fonction de l'énergie réduite

$$\varepsilon = \frac{0.03255}{Z_1 Z_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \frac{M_1}{(M_1 + M_2)} E \quad (9)$$

Le résultat de la théorie est simple : l'expression du coefficient de pulvérisation est donnée en fonction des masses des particules cibles et incidentes, de l'énergie de ces dernières et du pouvoir d'arrêt nucléaire. On a aussi besoin de l'énergie de liaison de la cible et du coefficient α . Pour les énergies supérieures à 1 keV, il faut rajouter la charge des particules et le pouvoir d'arrêt nucléaire réduit.

III.2.2. Améliorations faites par d'autres auteurs

De nombreux écarts ont été constatés par rapport à la théorie élaborée par Sigmund. La formule qu'il donne pour calculer le coefficient de pulvérisation ne traduit pas bien les expériences réalisées avec des ions légers ou des particules incidentes ayant des énergies proches du seuil de pulvérisation. En 1980, Matsunami *et al.* proposent une première formule semi-empirique qui tient compte du seuil de pulvérisation pour une incidence normale. Trois ans plus tard, Yamamura *et al.* [26] présentent une nouvelle formule empirique du coefficient de pulvérisation sous incidence normale. Leur expression provient d'une interpolation entre une formule analytique pour la pulvérisation des ions lourds de faible énergie et une autre formule pour la pulvérisation par les ions légers de grande énergie. Cette formule inclut deux paramètres ajustables, α^* et E_{th} contenus dans l'expression suivante :

$$Y(E) = 0.042 \left[\alpha^* \left(\frac{M_2}{M_1} \right) Q K \frac{S_n(\varepsilon)}{U_0 (1 + 0.35 U_0 S_n(\varepsilon))} \right] \left[1 - \left(\frac{E_{th}}{E} \right)^{1/2} \right]^{2.8} \quad (10)$$

Avec E est l'énergie des ions incidents, Q est un paramètre empirique.

U_0 est l'énergie de liaison ou de sublimation.

α^* est une fonction du rapport M_2/M_1 , dont la dépendance en fonction du rapport des masses peut être déterminée par la méthode des moindres carrés.

K est un facteur de conversion entre les sections efficaces du pouvoir d'arrêt nucléaire en fonction de l'énergie réduite et en fonction de l'énergie incidente, soit $S_n(E) = K s_n(\varepsilon)$, $s_n(\varepsilon)$ et $s_e(\varepsilon)$ sont les sections efficaces des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique, données par

Lindhard *et al.* [27] en fonction de l'énergie réduite ε qui dépend du potentiel d'interaction choisi et E_{th} correspond à l'énergie du seuil de pulvérisation.

En 1984, Matsunami et Yamamura utilisent la formule précédente et donnent une première compilation de coefficients de pulvérisation pour différents couples ion incident-atome de la cible. Cette formule inclut la section efficace de pouvoir d'arrêt électronique, ce qui permet de faire des calculs même pour des ions légers.

Bohdansky [28] a eu la même démarche de calculer le coefficient de pulvérisation près du seuil et pour des particules incidentes légères. Il obtient l'expression suivante pour le coefficient de pulvérisation en fonction de l'énergie de la particule incidente:

$$Y(E) = 0.042 \left[\alpha^* \left(\frac{M_2}{M_1} \right) \frac{s_n(\varepsilon)}{U_0} \right] \left[1 - \left(\frac{E_{th}}{E} \right)^{2/3} \right] \left[1 - \left(\frac{E_{th}}{E} \right) \right]^2 \quad (11)$$

On peut donc ajuster les paramètres de cette formule avec les résultats expérimentaux.

Les paramètres ajustables α^* et E_{th} peuvent être déterminés pour chaque couple ion - cible. Les collisions de type inélastiques ne sont pas prises en compte explicitement dans la formule, mais elles sont incluses dans le premier des deux paramètres ajustables.

Nous faisons juste quelques remarques sur les taux de pulvérisation donnés par ces théories :

- ❖ Ils ne sont valables que pour les matériaux monoatomiques, les composés ne sont pas traités.
- ❖ Ils sont en fonction des masses et des numéros atomiques des particules incidente et cible.
- ❖ Ils utilisent des paramètres semi-empiriques lissés à partir de données expérimentales.
- ❖ Le taux de pulvérisation est souvent donné pour un faisceau de particules arrivant sur le matériau avec une incidence normale à la surface.

Une des théories les plus récentes a été développée par Y. Yamamura et H. Tawara. C'est cette méthode que nous avons utilisée : nous allons la décrire dans le paragraphe suivant.

III.3. Model de YAMAMURA et al.

En 1996, Yamamura et Tawara donnent une nouvelle formule semi-empirique pour le coefficient de pulvérisation. Ils extrapolent deux formules, une pour les ions lourds et une autre pour les ions légers. Ils obtiennent alors une formule "universelle" pour le coefficient de pulvérisation. En plus de cette formule, Yamamura et Ishida [29] ont développé un code Monte-Carlo - ACAT - qui calcule le coefficient de pulvérisation en faisant l'approximation des collisions binaires. Ils donnent alors une compilation de données en y incluant leurs résultats de calcul. Si on considère une particule incidente de masse atomique M_1 et de numéro atomique Z_1 , un matériau cible composé d'atomes de masse atomique M_2 et de numéro atomique Z_2 , le taux de pulvérisation pour une incidence normale $Y(E)$ s'écrit :

$$Y(E) = 0.042 \frac{Q(Z_2) \cdot \alpha^* (M_1/M_2)}{U_s} \frac{S_n(\varepsilon)}{1 + \Gamma k_e \varepsilon^{0.3}} \left[1 - \sqrt{\frac{E_{th}}{E}} \right]^s \quad (12)$$

Avec E énergie en eV et où ε est l'énergie réduite :

$$\varepsilon = \frac{0.03255}{Z_1 Z_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \times \frac{M_2}{M_2 + M_1} E \quad (13)$$

$S_n(\varepsilon)$ et $k_e \varepsilon^{0.3}$ représentent, respectivement, les pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique :

U_s est l'énergie de sublimation que l'on suppose égale à l'énergie de liaison. $Q(Z_2)$ et s sont des paramètres empiriques à ajuster avec les données expérimentales.

Le facteur Γ permet de pondérer le pouvoir d'arrêt électronique en fonction de la masse de la particule incidente. En effet, les pertes d'énergie par collisions avec les électrons du matériau ne sont pas négligeables pour les ions légers. Ce facteur s'écrit :

$$\Gamma = \frac{W(Z_2)}{1 + (M_1/7)^3} \quad (14)$$

Où W est un paramètre empirique, caractéristique du matériau.

α^* dépend du rapport des masses M_1/M_2 et représente les phénomènes collisionnels inélastiques. Il a été tabulé pour un grand nombre de couples projectile/cible ce qui permet à

Yamamura d'obtenir une formule lissée pour ce coefficient :

$$\alpha^* = 0.249 \left(\frac{M_2}{M_1}\right)^{0.56} + 0.0035 \times \left(\frac{M_2}{M_1}\right)^{1.5} \text{ pour } M_1 \geq M_2 \quad (15)$$

$$\alpha^* = 0.0875 \left(\frac{M_2}{M_1}\right)^{-0.15} + 0.165 \times \left(\frac{M_2}{M_1}\right) \text{ Pour } M_1 \leq M_2$$

Le seuil de pulvérisation E_{th} lui aussi a été tabulé à partir de données expérimentales.

Yamamura en donne alors une expression générale dans laquelle ce coefficient ne dépend que de l'énergie de liaison et des masses du projectile et de la cible :

$$\frac{E_{th}}{U_s} = \frac{6.7}{\gamma} \text{ Pour } M_1 \geq M_2 \quad (16)$$

$$\frac{E_{th}}{U_s} = \frac{1 + 5.7 \times (M_1/M_2)}{\gamma} \quad (17)$$

Avec :

$$\gamma = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (18)$$

III.4.Simulation par SRIM

La méthode de Monte-Carlo est utilisée pour la simulation des trajectoires de particules individuelles à travers leurs collisions successives avec les atomes de la cible.

Les collisions nucléaires et électroniques sont calculées de façon indépendante, et la sommation des pouvoirs d'arrêt est faite sur un nombre N de trajectoire (en général $N > 1000$). Chaque ion arrive à la surface de matériau avec une énergie, une position et une direction données. L'ion change ensuite la direction à chaque collision nucléaire, et il suit un chemin supposé rectiligne de longueur L_d entre les deux chocs élastiques. Les pertes d'énergie subies le long de ce chemin sont alors entièrement dues aux collisions inélastiques électroniques. L'histoire de la particule se termine lorsque son énergie descend au-dessous d'une valeur spécifiée au préalable. L'approche numérique consiste à discrétiser la cible en tranches élémentaires d'épaisseurs Δx , et à effectuer ensuite une sommation le long du chemin parcouru. SRIM (Stopping and Range of Ion in the Matter) est basé sur la méthode de Monte-Carlo. SRIM c'est un groupe de programmes dédiés aux calculs des pertes d'énergie et du parcours des particules chargées dans la matière. Initialement créée en 1983 par J.F. Ziegler et J.P Biersack [26], la dernière version de ce programme date de 2010. Le calcul de transport dans un matériau se base sur le programme TRIM (Transport of Ion in the Matter) dont la dernière version date aussi de 2010. TRIM accepte une définition de cible selon une géométrie en couches parallélépipédiques successives. Un dictionnaire complet de matériaux composés programmés est disponible. L'utilisateur peut choisir entre plusieurs modes de calcul lors des simulations

TRIM :

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

On simule le parcours des ions du néon et du xénon à partir de SRIM – 2013. D'habitude, on simule pour un certain nombre d'ions, pour notre cas on a pris $N = 10000$ ions.

L'énergie d'implantation que l'on a considérée est de 100keV selon un angle d'incidence droit à la surface de l'échantillon. Les figures qui suivent présentent les résultats de simulation. Chaque fois qu'un ion soit du xénon ou bien du néon subit une collision nucléaire avec les atomes de cible (SiO_2, \dots), une partie de son énergie initiale est transférée au noyau de l'atome – cible. Si la valeur de cette énergie est supérieure à l'énergie de liaison de ce dernier, celui-ci quitte son site et se déplace dans le matériau, constituant à son tour un projectile. Ainsi que chaque ion incident peut provoquer un déplacement de plusieurs atomes cibles au cours d'une trajectoire : c'est l'effet de recul.

III.5. Modèle numérique – SRIM2013 (TRIM)

Parallèlement aux modèles théoriques présentés au paragraphe précédent, il existe aussi des modèles numériques permettant d'évaluer la pulvérisation d'un matériau.

Le code SRIM2013 (Stopping and Range of Ions in Matter) développé par Ziegler *et al* [30] est un modèle Monte-Carlo qui simule le transport et l'interaction d'un faisceau d'ions à la surface d'un matériau cible et qui permet aussi de déterminer le taux de pulvérisation. Ce modèle, comme pour la théorie de Sigmund, fait l'hypothèse de collisions binaires : ils'applique donc plutôt pour des énergies bien supérieures au seuil de pulvérisation. Le modèle possède plusieurs paramètres d'entrée (énergie de déplacement) mais le plus important, pour la partie pulvérisation, est l'énergie de liaison du matériau cible : les autres paramètres influencent moins les résultats.

III.5.1. Taux de pulvérisation calculé par SRIM

Pour nos simulations, nous avons utilisé le logiciel SRIM [31] (stopping range ions matter), c'est un logiciel qui suit le programme standard TRIM, nous rappelons que : dans le programme standard TRIM, l'énergie transférée à un atome-cible est analysée Pour :

- L'ionisation induite par les atomes repoussés.
- Le nombre de lacunes et d'interstitiels créés suite à une cascade de collisions.

- Le nombre de collisions transférant des énergies inférieures à E_d et qui produisent des phonons.

- Le code TRIM couple deux méthodes :

Celle de Kinchin-Pease modifiée pour les calculs locaux et celle de la cascade de collisions (le suivi des atomes individuels reculés jusqu'à ce que leur énergie devienne inférieure à E_d). Cette dernière donne directement la distribution spatiale des défauts Ziegler, Il nous est donné le principe de ce raisonnement.

III.6.Résultats

Comme pour la formule de Y.Yamamura *et al.*, le modèle SRIM a été validé pour les Métaux. (Semi-conducteur). Nous présentons, ci-dessous, une comparaison entre les métaux par le modèle numérique et la base de la formulé de Yamamura. Cela nous permet de comparer entre les métaux avec différent gaz on a choisie les gaz les plus ionisés (Ar^+ ,Xe).

III.6.1. Rendement de pulvérisation Pour le gaz de l'Ar

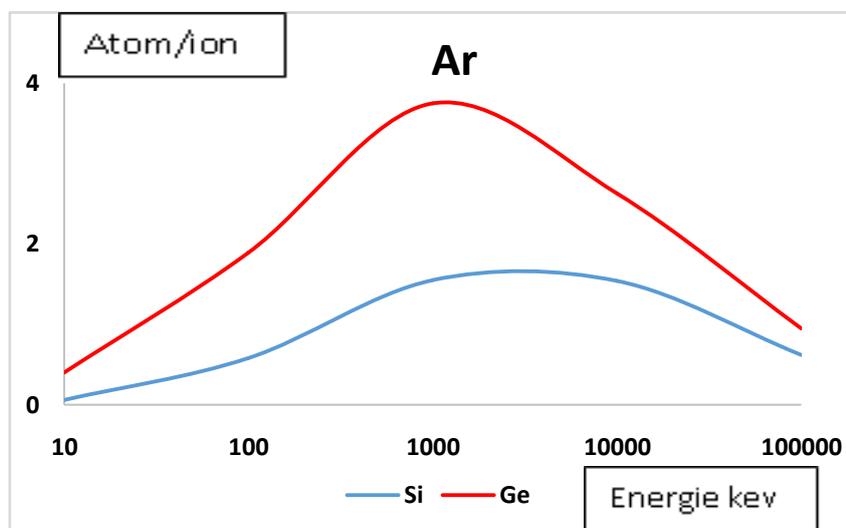


Figure 3.1. : Taux de pulvérisation du (Si, Ge, Te) pour un faisceau d'ions d'argon

Les figures 4-2 : montrent le résultat obtenu à partir d'un calcul TRIM, concernant Les résultats du calcul des rendements de pulvérisation cathodique pour faisceau d'ion d'argan avec les semi-conducteur (Si, Ge.) L'implantation de ce travail consiste à envoyer un faisceau d'ions accélérés sur la façade d'un matériau et permet ainsi d'introduire un élément (sous forme d'ion).

Les particules métalliques présentes dans la décharge peuvent donc être ionisées. Si ces ions métalliques atteignent la gaine, ils vont alors être accélérés dans le champ électrique et provoquer à leur tour la pulvérisation du matériau cathodique.

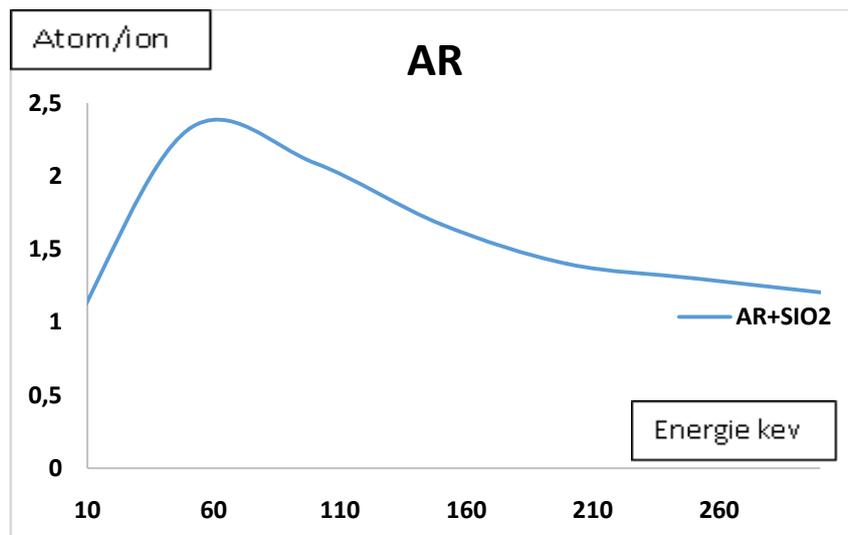


Figure 3.2 : Taux de pulvérisation du SiO₂ pour un faisceau d'ions d'argon

On remarque que le rendement des métaux SiO₂ avec le gaz d'argon commence après une énergie de 10 k ev qui est correspond à l'énergie nécessaire pour l'ionisation de ce gaz. Après cette énergie, le rendement du métal se croit proportionnellement en fonction de l'énergie d'ionisation jusqu'à une valeur de 50 k ev. Après cette énergie le rendement des métaux commence à décroître tant que la valeur de l'énergie décroît.

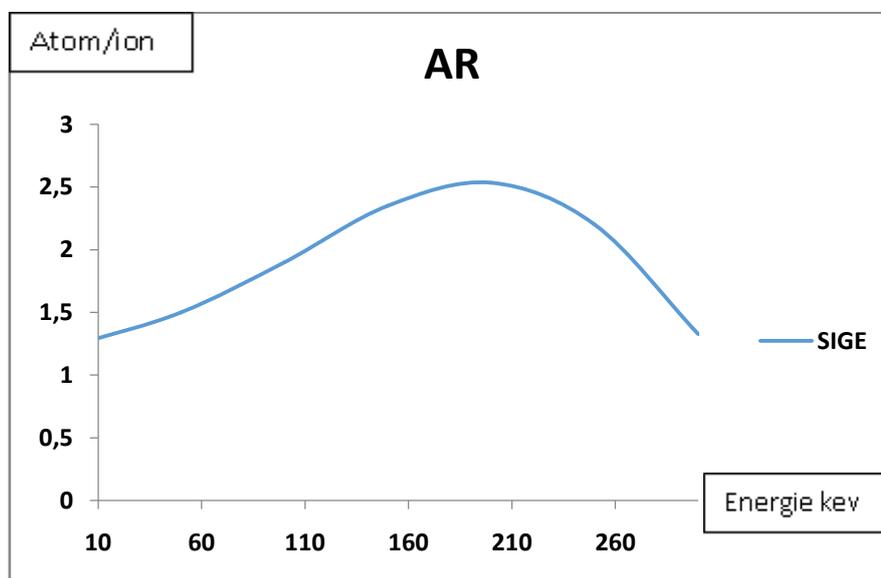


Figure 3.3. : Taux de pulvérisation du SiGe pour un faisceau d'ions d'argon

On remarque que le rendement de métal SIGE avec le gaz d'argon commence après une énergie de 10 k ev qui est correspond à l'énergie nécessaire pour l'ionisation de ce gaz. après cette énergie le le rendement des métaux se croit proportionnellement en fonction de l'énergie

d'ionisation jusqu'à une valeur de 200 k ev. Après cette énergie le rendement de métal commence à décroître tant que la valeur de l'énergie décroît.

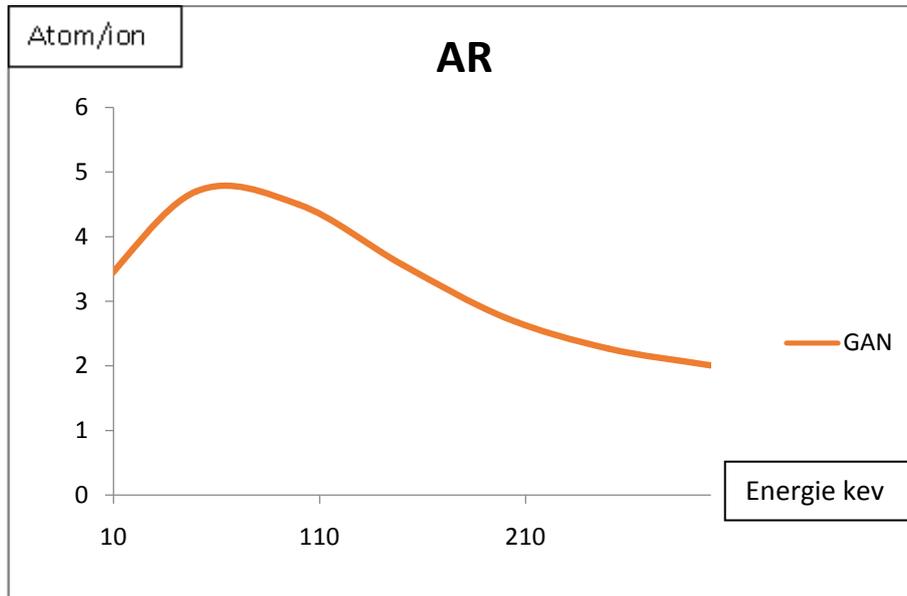


Figure 3.4. : Taux de pulvérisation du GaN pour un faisceau d'ions d'argon

On remarque que le rendement des métaux GaN avec le gaz d'argon commence après une énergie de 10 k ev qui est correspond à l'énergie nécessaire pour l'ionisation de ce gaz. Après cette énergie le rendement du métal croit proportionnellement en fonction de l'énergie d'ionisation jusqu'à à une valeur de 100 k ev. Après cette énergie le rendement du métal commence à décroître tant que la valeur de l'énergie décroît.

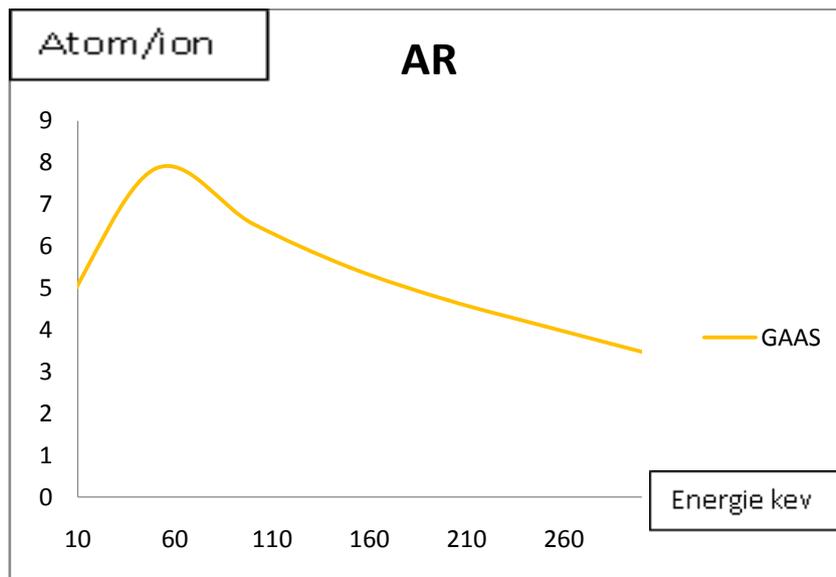


Figure 3.5. : Taux de pulvérisation du GaAS pour un faisceau d'ions d'argon

On remarque que le rendement des métaux GaAS avec le gaz d'argon commence après une énergie de 10 k ev qui est correspond à l'énergie nécessaire pour l'ionisation de ce gaz .après

cette énergie le rendement des métaux croît proportionnellement en fonction de l'énergie d'ionisation jusqu'à une valeur de 50 keV. Après cette énergie le rendement de métal commence à décroître tant que la valeur de l'énergie décroît.

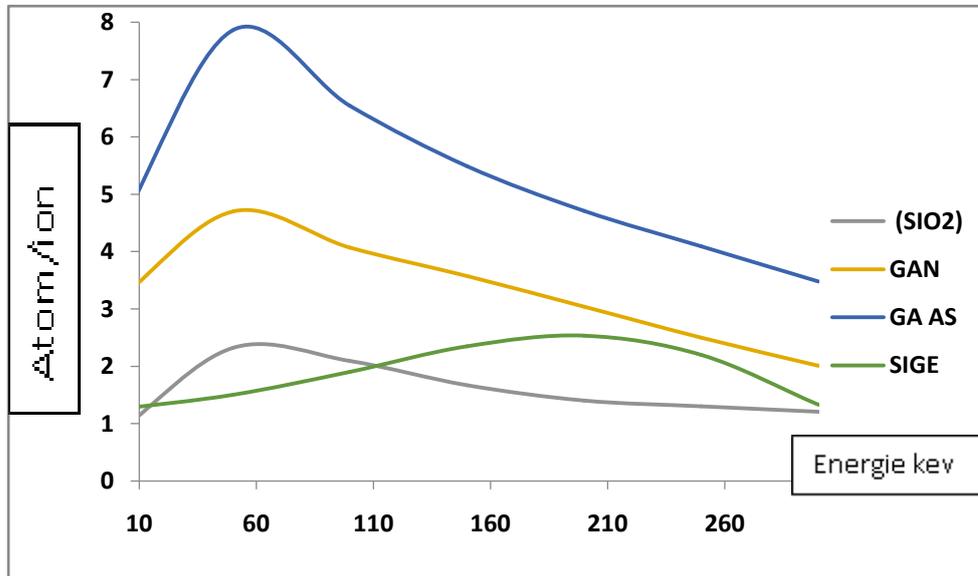


Figure 3.6. : Taux de pulvérisation du (SiO₂, GaN, GaAS, SIGE) pour un faisceau d'ions d'argon

On constate d'après la figure **Figure 4.2** que le coefficient de pulvérisation des ions du GaAS est supérieur à celui de GaN et de SIGE et de SiO₂, pour des énergies supérieures à 100 keV.

On remarque que le rendement des métaux SiO₂, GaN, GaAS, SIGE avec le gaz d'argon commence après une énergie de 10 keV qui correspond à l'énergie nécessaire pour l'ionisation de ce gaz. Après cette énergie le rendement des métaux se croît proportionnellement en fonction de l'énergie d'ionisation jusqu'à une valeur de 100 keV. Après cette énergie le rendement des métaux commence à décroître tant que la valeur de l'énergie décroît.

On distingue trois parties dans cette figure qui représente les variations du coefficient de Pulvérisation $Y(E)$ avec l'énergie.

Dans la première partie, l'énergie est trop basse pour que la pulvérisation puisse avoir lieu. Elle n'existe pas, cette énergie est insuffisante pour l'arrachement de la surface.

Dans la deuxième partie, la pulvérisation devient possible. Les particules incidentes ont suffisamment d'énergie pour que les atomes puissent briser les liaisons qui les lient à la surface. Le coefficient augmente rapidement pour une faible variation de l'énergie. Avec l'augmentation de l'énergie, on voit que le coefficient augmente de façon linéaire avec l'énergie des particules incidentes. Ces valeurs de coefficient sont suffisamment élevées pour pouvoir réaliser des dépôts.

Dans la troisième partie, les particules incidentes pénètrent plus profondément dans la cible quand à leur énergie elle augmente et les atomes de recul seront créés en plus grande quantité. Le coefficient de pulvérisation est supérieur à un. Il y a donc plus de particules éjectées que de particules incidentes.

Le coefficient de pulvérisation passe par un maximum dans la troisième partie. La profondeur de Pénétration des particules incidentes est suffisamment grande pour provoquer la diminution du coefficient de pulvérisation

En conclusion, nous pouvons décomposer la courbe du coefficient de pulvérisation en fonction de l'énergie de la particule incidente en trois grandes parties. Dans la région du seuil de pulvérisation, aucune particule n'a une énergie suffisante pour que des particules de la cible soient éjectées. Puis, le coefficient augmente avec l'énergie de la particule incidente.

Et, enfin, le coefficient passe par un maximum dû à une plus grande profondeur de pénétration.

III.6.2. Rendement de pulvérisation Pour le gaz de l'Xénon:

Les résultats : montrent le rendement obtenu à partir d'un calcul TRIM, concernant les résultats du calcul des rendements de pulvérisation cathodique pour faisceau d'ion d xénon avec les semi-conducteur (S_iO_2 , GaAS, GaN). L'implantation de ce travail consiste à envoyer un faisceau d'ions accélérés sur la façade d'un matériau et permet ainsi d'introduire un élément (sous forme d'ion).

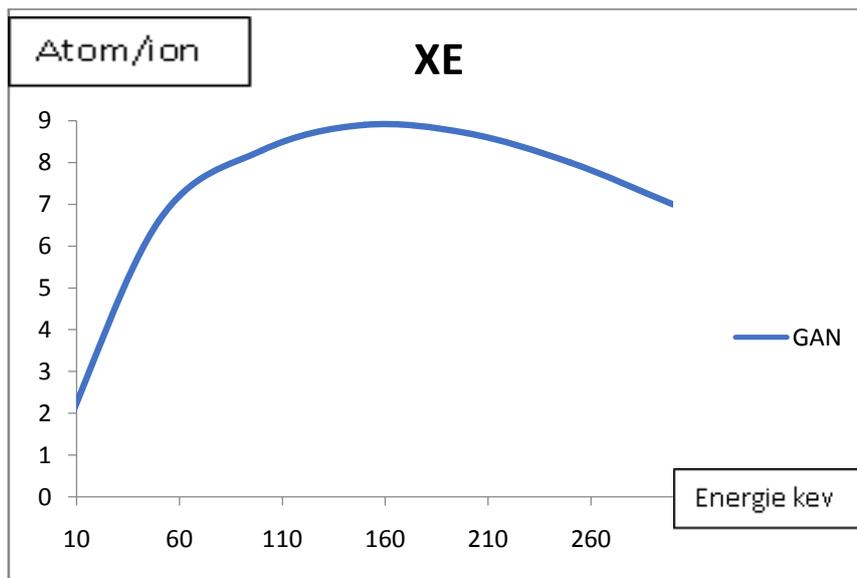


Figure 3.7. : Taux de pulvérisation du GaN pour un faisceau d'ions de xénon

On remarque que le rendement du métal GaN avec le gaz d xénon commence ares une énergie de 10 k ev qui est corresponds à l'énergie nécessaire pour l'ionisation du ce gaz .après cette énergie le le rendement de métalse croit proportionnellement en fonction de l'énergie d'ionisation jusqu'à à une valeur de 100 k ev .Après cette énergiele rendement de métalcommence à décroit quelques tant que la valeur de l'énergie décroit

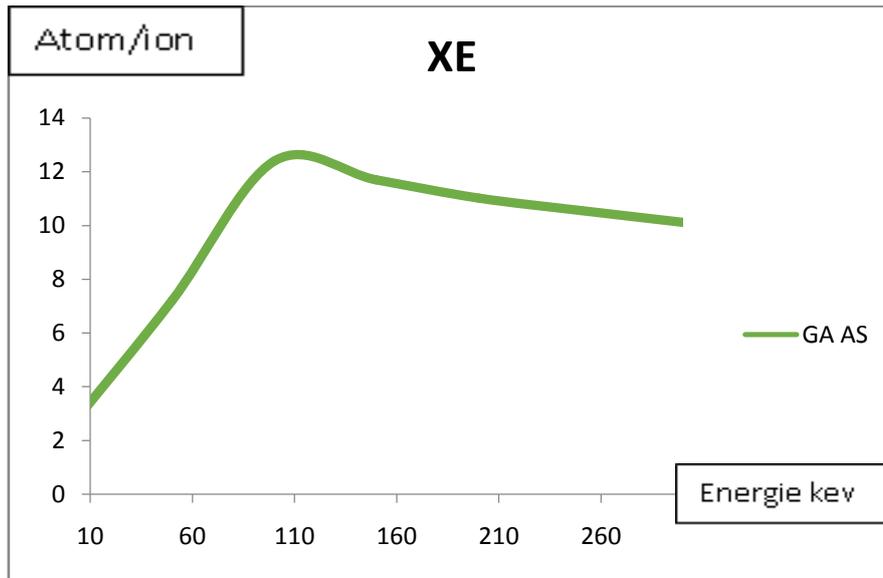


Figure 3.8. : Taux de pulvérisation du GaAS pour un faisceau d'ions De xénon

On remarque que le rendement du métal GaAS avec le gaz d'argan commence après une énergie de 10 k ev qui est corresponds à l'énergie nécessaire pour l'ionisation du ce gaz.Après cette énergie le rendement de métalse croit proportionnellement en fonction de l'énergie d'ionisation jusqu'à à une valeur de 100 k ev.Après cette énergiele rendement des métaux commence à décroitre tant que la valeur de l'énergie décroit.

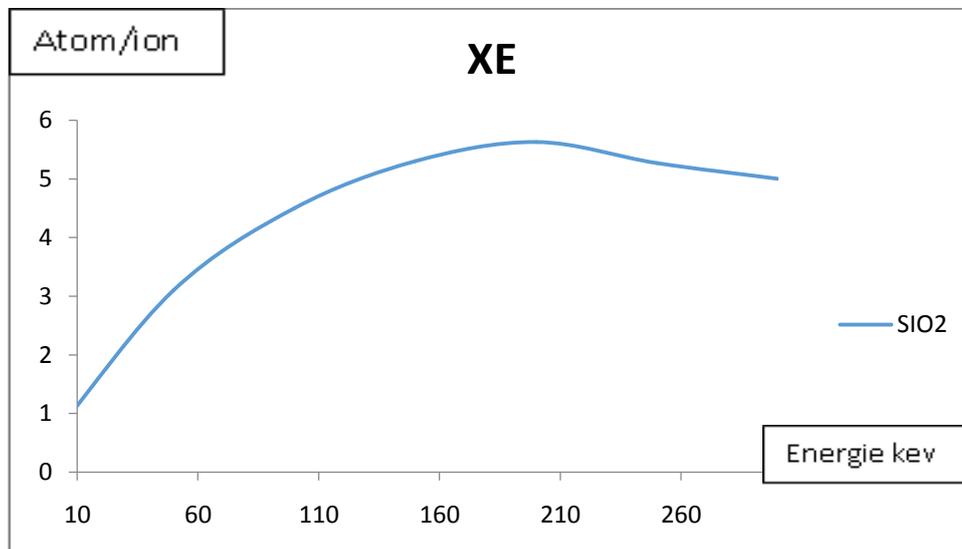
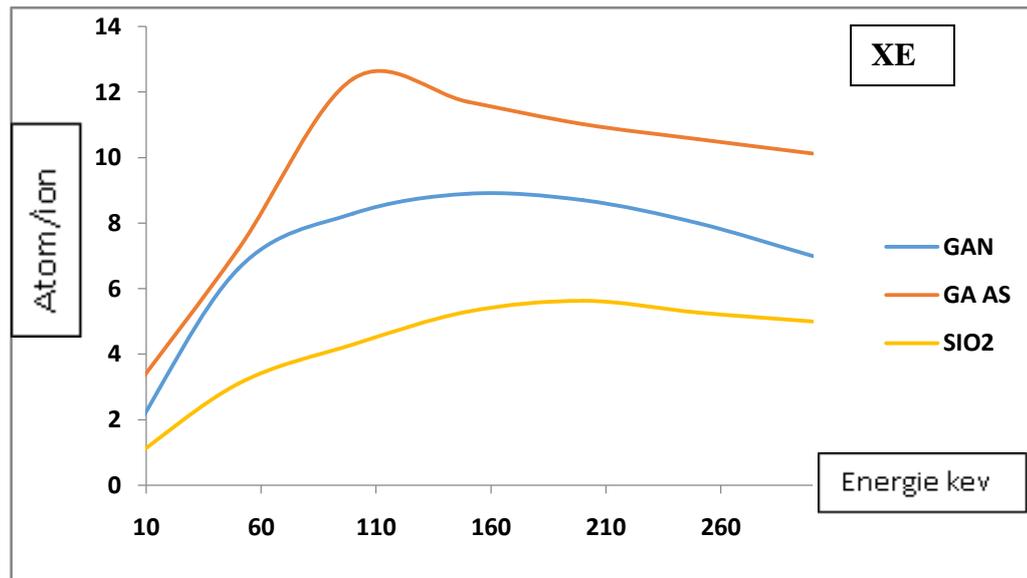


Figure 3.9. : Taux de pulvérisation du SiO_2 pour un faisceau d'ions De xénon

On remarque que le rendement du métal SiO_2 avec le gaz De xénon commence après une énergie de 10 k ev qui est correspond à l'énergie nécessaire pour l'ionisation du ce gaz. Après cette énergie le rendement de métal se croit proportionnellement en fonction de l'énergie d'ionisation jusqu'à à une valeur de 150 k ev. Après cette énergie le rendement de métal commence à décroître tant que la valeur de l'énergie décroît.

**Figure 3.10.** : Taux de pulvérisation du (SiO_2 , GaAS, GAN) pour un faisceau d'ions De xénon d'ions d xénon

On remarque que le rendement des métaux SiO_2 , GAN, GaAS avec le gaz de xénon commence après une énergie de 10 k ev qui est correspond à l'énergie nécessaire pour l'ionisation du ce gaz. Après cette énergie, le rendement des métaux se croit proportionnellement en fonction de l'énergie d'ionisation jusqu'à une valeur de 100 k ev c'est le seuil maximal. Après cette énergie, le rendement des métaux commence à décroître quelques tant que la valeur de l'énergie décroît.

On distingue trois parties dans cette figure qui représente les variations du coefficient de Pulvérisation $Y(E)$ avec l'énergie.

Dans la première partie, l'énergie est trop basse pour que la pulvérisation puisse avoir lieu. Elle n'existe pas, cette énergie est insuffisante pour l'arrachement de la surface.

Dans la deuxième partie, la pulvérisation devient possible. Les particules incidentes ont suffisamment d'énergie pour que les atomes puissent briser les liaisons qui les lient à la surface. Le coefficient augmente rapidement pour une faible variation de l'énergie. Avec l'augmentation de

l'énergie on a que le coefficient augmente de façon linéaire avec l'énergie des particules incidentes. Ces valeurs de coefficient sont suffisamment élevées pour pouvoir réaliser des dépôts.

Dans la troisième partie, les particules incidentes pénètrent plus profondément dans la cible quand à leur énergie, elle augmente et les atomes de recul seront créés en plus grande quantité. Le coefficient de pulvérisation est supérieur à un. Il y a donc plus de particules éjectées que de particules incidentes.

Le coefficient de pulvérisation passe par un maximum dans la troisième partie. La profondeur de pénétration des particules incidentes est suffisamment grande pour provoquer la diminution du coefficient de pulvérisation.

En conclusion, nous pouvons décomposer la courbe du coefficient de pulvérisation en fonction de l'énergie de la particule incidente en trois grandes parties. Dans la région du seuil de pulvérisation, aucune particule n'a une énergie suffisante pour que des particules de la cible soient éjectées. Puis, le coefficient augmente avec l'énergie de la particule incidente.

Et, enfin, le coefficient passe par un maximum dû à une plus grande profondeur de pénétration.

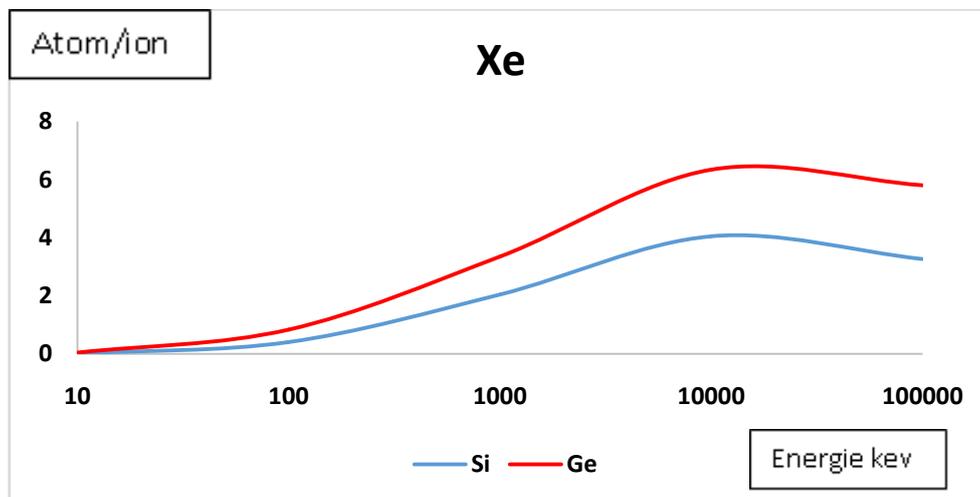


Figure 3.11. : Taux de pulvérisation du (Si, Ge, Te) pour un faisceau d'ions de xénon

On remarque que le rendement des métaux SiO_2 , GAN, GaAS, SIGE avec le gaz d'argon commence après une énergie de 10 keV qui correspond à l'énergie nécessaire pour l'ionisation de ce gaz. Après cette énergie, le rendement des métaux se croît proportionnellement en fonction de l'énergie d'ionisation jusqu'à une valeur de 100 keV. Après cette énergie, le rendement des métaux commence à décroître tant que la valeur de l'énergie décroît.

III.6.3. Variation du taux de pulvérisation pour des ions SiO_2 les gaz d'argon et xénon

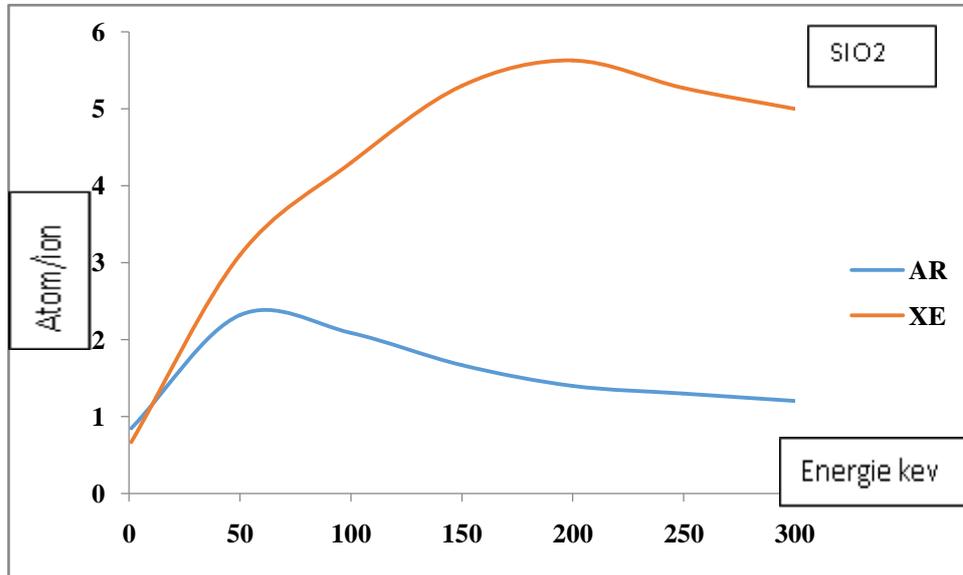


Figure 3.12. : Taux de pulvérisation du SiO_2 pour un faisceau d'ions de xénon et d'ions d'argon

On remarque que le rendement du SiO_2 avec les gaz de xénon et d'argon commence après une énergie de 10 keV qui correspond à l'énergie nécessaire pour l'ionisation de ces métaux. Après cette énergie, le rendement des métaux se croît proportionnellement en fonction de l'énergie d'ionisation jusqu'à une valeur de 50 keV. Pour l'argon, la valeur est de 200 keV. Pour le gaz de xénon, c'est le seuil maximal pour les deux gaz. Après ces valeurs, le rendement de métaux commence à décroître quelque peu tant que la valeur de l'énergie décroît.

Les figures représentent le nombre d'atomes de SiO_2 avec les gaz de xénon et d'argon pulvérisés en fonction de leurs énergies.

Lorsque l'énergie des ions est inférieure à 100 keV, l'énergie transférée est suffisante pour éjecter les atomes de la cible mais trop faible pour provoquer des collisions en cascade. Pour des ions possédant une énergie comprise entre 100 keV et plus, les atomes de la cible acquièrent assez d'énergie pour entrer en collisions avec leurs voisins. Si l'énergie est supérieure à 100 keV, il se produit un important mouvement des atomes situés dans la zone d'interaction de l'ion incident.

Conclusion

On conclut d'après les résultats que le rendement du gaz d'argon et le rendement du gaz xénon, que le gaz xénon est un rendement plus élevé que l'argon alors et plus efficace dans l'arrachement de la surface.