

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Ibn Khaldoun - Tiaret



Faculté des Sciences de la Matière
Département de Physique

Mémoire

Présenté par :
Boumaaza fatima zohra
Labdi fatma zohra

Pour obtenir le diplôme de
Master

Filière Physique
Spécialité : Nano physique
Thème :

***Simulation des Collisions Atomiques sur
des Surfaces (fcc) par la Méthode de
dynamiques Moléculaire***

Soutenu le : /09/2020

Devant le jury :

Mr Kh. Yannalah
Mr. M. Hassane
Mr. L. Halis

pr
MCA
MAA

Président
Examineur
Encadrant

ANNEE UNIVERSITAIRE: 2019/2020

Remerciement

"Nos yeux sont limités à quelques longueurs d'onde. Ils ne conviennent qu'aux phénomènes visibles, il faut aller au-delà de cette perception directe pour découvrir les lois de la nature. C'est le sujet de la physique."

A l'occasion de la présentation de notre mémoire, nous remercions tout d'abord ALLAH.

*Toute notre gratitude et nos remerciements chaleureux à M. **Halles Ladjel**, Professeur à l'Université des Sciences et Technologies Ibn Khaldoun Tiaret pour avoir mené ce travail avec beaucoup de patience et d'esprit d'équipe ainsi que pour sa présence, ses conseils, sa convivialité et sa fraternité. Ses grandes qualités humaines et scientifiques et la confiance qu'il nous a témoignée ont grandement contribué à l'achèvement de ce travail.*

Nous exprimons nos vifs remerciements au professeur Ammar Bouazza, professeur à l'Université des sciences et technologies de Tiaret Ibn Khaldoun Et le directeur du laboratoire de génie physique pour nous donner l'opportunité de dialoguer avec nous et de nous accueillir dans son laboratoire. Merci beaucoup, en particulier à M. Rashid Bagdad, professeur à l'Université Ibn Khaldun - Tiaret pour son aide et ses conseils, qu'il trouve ici comme une expression de notre sincère respect. Nous remercions encore une fois les éminents membres du jury d'avoir accepté de considérer ce modeste travail afin de me permettre de m'améliorer et d'atteindre l'esprit scientifique, ainsi que tous les étudiants du laboratoire de recherche. Nous voudrais le remercier H. Noureddine et B. Mesaouda pour un soutien moral.

Merci beaucoup à nos parents, Ceux qui étaient proches de nous grâce à leurs précieux conseils et leur coopération.

Nous tiens également à remercier tous ceux qui ont contribué directement ou indirectement à la réalisation de ce travail.



Dédicace

*Je dédie ce travail en signe de respect et
d'appréciation:*

*À mon cher père et à ma chère mère pour leur
amour et leur amour, que Dieu les protège et les
protège.*

*À mon frère et mes sœurs: Abd al-Rahman,
Nada, chaimaa.*

*À mon mari, que Dieu le protège
À mes amis, Samira, Naïma, Fatima.*

*Enfin, à tous ceux qui m'ont aidé à faire ce
travail.*





Dédicace

*Je dédie ce travail en signe de respect et
d'appréciation:*

*À mon cher père et à ma chère mère pour leur
amour et leur amour, que Dieu les protège et les
protège.*

*À mon frère et mes sœurs: Mouhamed, Houda,
Nour.*

*À mes amis, Hanane, ghania, sara, Samira,
Naïma.*

*Enfin, à tous ceux qui m'ont aidé à faire ce
travail.*



SOMMAIRE

Résumé.....	I
Liste des figures	VI
Liste des tableaux	XI
Introduction générale.....	1

Chapitre I : Interaction Ion-Cible

I-1.Introduction	5
I-2. Théorie de ralentissement dans la matière.....	5
I-2-1. Interaction ion-cible	5
I-2-2. LaCascade de collisions.....	6
I-2-3. Description générale	6
I-3. Les collisions binaires et le programme TRIM	8
I-4. Les collisions binaires et les pertes élastiques.....	8
I-5. Le potentiel d'interaction	10
I-6. L'expression de pouvoir d'arrêt.....	11
I-7.L'implantation ionique	12
I-8. Les lacunes et les défauts dans une cible.....	13
I-9.Dynamique moléculaire	13
I-9-1. Modèle des sphères dures	13
Références	15

Chapitre II : Le phénomène depulvérisation

II-1-.INTRODUCTION	17
II-2.Principe de la pulvérisation ionique	17
II-2-1. Transfert de l'énergie de l'ion incident.....	17
II-2-2.La conception de l'énergie de surface	18
II-3.Le flux de pulvérisation ionique.....	18
II-3-1. Le flux de pulvérisation et l'angle d'incidence.....	19
II-3-2.La nature des particules éjectées.....	20
II-4. Les applications du processus de la pulvérisation ionique	20
II-5.Le cuivre.....	21
II-5-1. Propriétés physiques	21
II-5-2. Propriétés chimiques.....	22

II-5-3. Propriétés optiques.....	22
II-6.Définition de projectile (ion d'Argon)	22
II-6-1.Propriétés physiques	22
Référence.....	24

Chapitre III :Code et simulation numérique

III-1. INTRODUCTION	26
III-2. Dynamique moléculaire et l'approximation des collisions binaires	26
III-2-1.Méthodes de calcul	27
III-2-2. Algorithme de Verlet.....	28
III-2-3. Conditions aux limites périodiques	28
III-2-4. La limite de la dynamique Moléculaire.....	29
III-3. Codes et logiciels de la dynamique moléculaire	29
III-3-1.Présentation de Kalypso	29
III-3-2.Les types de potentiels utilisés par le Kalypso	30
III-3-3. Méthode de Monte-Carlo	30
III-3-4.Les codes basés sur l'approximation des collisions binaire	30
III-3-4-1 .Cas des cibles amorphes.....	30
III-3-4-2. Cas des cibles mono-cristallines.....	30
III-4.Les codes basés sur l'approximation des collisions binaires	31
III-4-1.Pour les cibles amorphes	32
III-4-2le programme TRIM.....	32
III-4-3Pour les cibles cristallines	34
III-5.Remarques	34
Références	36

Chapitre IV : Résultats et discussions

IV-1.INTRODUCTION	38
IV-2.Basses des données (paramètres d'initialisation.....	38
IV-3.La correspondance entre le rendement de pulvérisation et les différentes grandeurs	40
IV-3-1.l'énergie d'incidence.....	40
IV-3-2. l'angle d'incidence	42
IV-3-3.Les plans cristallographiques	43
IV-3-4. la température.....	43

IV-3-5. La masse des projectiles.....	44
IV-3-6. Le potentiel d'interaction.....	46
IV-3-7. Le nombre d'impact.....	46
IV-4. La distribution énergétique et angulaire	47
IV-4-1. Distribution énergétique.....	47
IV-4-2. Distribution angulaire	48
IV.5. Résultats et discussions par le code SRIM.....	52
IV.5.1. Distribution des parcours	52
IV.5.2. Perte d'énergie et création de désordre	54
Références	56
CONCLUSION GENERALE.....	59

Liste des figures

Figure I .1 : Les types d'interaction rayonnement-matière

Figure I .2 Modélisation de la cascade de collisions

Figure I .3 : Représente tous les cas possibles pris en compte pour lesquels toute l'énergie de l'ion ne dépose pas dans la cible

Figure I .4 : Forme générale de la courbe du taux d'érosion Y en fonction de L l'angle d'incidence θ

Figure I .5 : Représentation d'une collision binaire dans un référentiel du laboratoire

Figure I .6 : Description d'une collision binaire

Figure I .7 : Composantes nucléaires et électroniques du pouvoir d'arrêt en fonction de la vitesse de l'ion incident

Figure I .8 : Principe de l'implantation ionique

Figure II 1 : Principe de base la pulvérisation ionique

Figure II 2 : Les différents états possibles de Cuivre

Figure II 3: Le schéma de la maille du cuivre

Figure III.1: Boite de simulation

Figure IV.1 Stockage des fichiers

Figure VI.2: Quelques vues de la cascade de collision par Kalypso

Figure VI. 3: Évolution du coefficient de pulvérisation en fonction de l'énergie incidente

Figure VI.4 : Principe de pulvérisation

Figure VI.5: Variation de rendement de pulvérisation en fonction de l'angle incidence pour le plan (111).

Figure VI.6 : Rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie incidente pour les trois plans Cristallographiques du Cuivre

Figure VI.7 : Variation du rendement de pulvérisation en fonction de température

Figure VI.8 : Variation du rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie incidente pour les différentes masses.

Figure VI.9 : Influence du potentiel d'interaction sur le rendement de pulvérisation

Figure VI.10 : Variation de taux de pulvérisation en fonction du nombre d'impact

Figure VI.11 : Distribution énergétique des atomes pulvérisés de Cuivre à différents plans

Figure VI.12 : Distribution angulaire des atomes pulvérisée de Cuivre sur le plan (111)

Figure VI.13 : Distribution angulaire des atomes pulvérisée de Cuivre sur le plan(100)

Figure VI.14 : Distribution angulaire des atomes pulvérisée de Cuivre sur le plan (110)

Figure VI.15 : Distribution en profondeur des ions d'argon

Figure VI.16 : Perte d'énergie et création de désordre

Liste des tableaux

Tableau II.1 : L'identification de cuivre.

Tableau III.1 : les principales particularités de ces deux groupes de codes

Tableau VI-1 : .perte d'énergie en fonction l'énergie d'ionisation, les défauts, les phonons

INTRODUCTION

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Le dépôt des couches minces exige actuellement une parfaite maîtrise des procédés afin d'assurer des propriétés spécifiques aux matériaux obtenus. Ainsi, les recherches sur les procédés de dépôt des films minces représentent un domaine d'intérêt tant pour les industriels, que pour la communauté scientifique académique. Des nouvelles applications s'appuient sur une très grande qualité des couches, concernant l'adhérence, la résistance à l'abrasion, l'uniformité, la structure cristalline...etc. Pour y parvenir, les industriels utilisent couramment le contrôle des procédés alors que les chercheurs s'attaquent à la compréhension poussée des phénomènes.

L'implantation ionique est une des techniques les plus utilisées dans l'industrie pour le dépôt des couches minces-procède de la famille PVD (Physical Vapor Déposition). Ce procédé consiste à arracher les atomes et d'implantés des ions sur des surfaces métalliques suite au bombardement de cette surface par des ions énergétiques, généralement créés par un plasma dans un gaz inerte.

Le développement des ions au cours de l'implantation est considéré comme un traitement de surface, dont nous parlerons par la suite au sein du manuscrit qui nous a permis d'obtenir des couches minces avec une bonne adhérence et des propriétés qui sont techniquement contrôlables par des paramètres des systèmes Ion-Cible.

L'objectif de ce mémoire est la caractérisation fine du processus de pulvérisation et de déplacement des atomes dans une cible monocristalline.

Le manuscrit est structuré de la manière suivante :

Le Chapitre 1 est consacré au :

L'étude des mécanismes d'interaction ions-cible. Nous y ferons alors le point sur les connaissances actuelles de l'interaction ion-cible, ainsi que sur les paramètres importants à prendre en compte lors de notre étude. La description de la technique d'élaboration utilisée pour effectuer ce travail fera l'objet du 2^{ème} Chapitre. Nous présenterons les notions de base de la pulvérisation ionique sur le plan théorique, nous nous intéresserons aux rendements de production des particules arrachées. Nous étudierons l'évolution des rendements de ces agrégats en fonction: de l'énergie incidente et l'angle des ions primaires. Ainsi que nous

présenterons les principales propriétés du Cuivre et une attention particulière est réservée à son application.

Le 3^{ème} Chapitre présente les modèles de calculs et de simulations, on aura étudié la pulvérisation par la modélisation numérique, en utilisant un code de simulation "KALYPSO" basé sur la méthode de la Dynamique Moléculaire et additivement le logiciel TRIM basé sur BCA. Nous terminerons ce chapitre en comparant « les approximations des collisions binaires » avec celle des Dynamiques Moléculaires.

Dans le dernier chapitre, est consacré à la présentation et la discussion de nos résultats obtenus. Nous terminerons l'exposé par une conclusion générale

CHAPITRE I

INTERACTION ION-CIBLE

I-1. Introduction :

Le terme "INTERACTION" a été largement étudié depuis des années 60, grâce à sa nécessité dans les recherches scientifiques. L'importance d'étudier ce phénomène dans les processus mécaniques, chimiques et technologique était engendrée essentiellement par son fonctionnalisation pour les matériaux et pour l'amélioration de leur caractéristiques.

Ce terme se compose de plusieurs branches secondaires, comme le présente le schéma suivante :

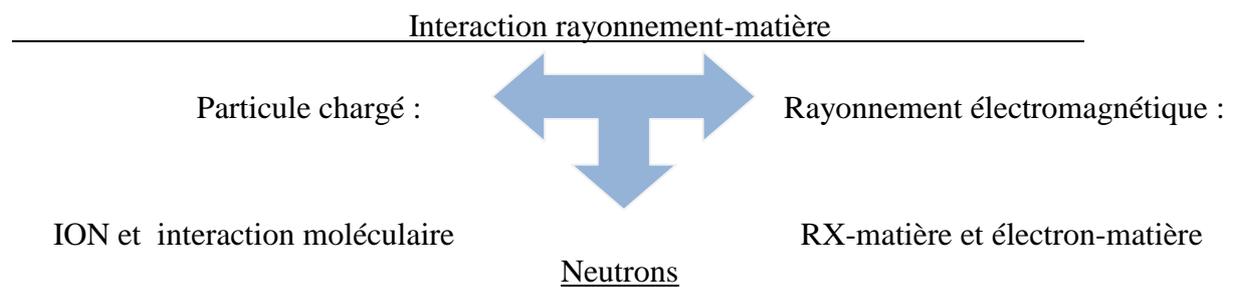


Figure I-1: Les types d'interaction rayonnement-matière.

Le dépôt [1] d'un matériau par des particules chargées conduit à une décharge métallique, cette métallisation est due au « bombardement »[2]. La cascade de collisions atomiques à l'intérieur d'un matériau provoque "l'érosion" et conduit à la projection d'atome de la surface du matériau, l'inter-agissement est alors caractérisée par: l'énergie de bombardement, l'incidence de la colonne ionique, l'implantation des ions et le taux d'érosion.

Ce contexte comme objectif de présenter une description du contact entre ion-cible en détaillant le principe générale menant l'érosion et nous verrons quelques détails de la physique à l'échelle de l'atome mis en jeu autour cette interaction.

I-2. Théorie de ralentissement dans la matière :

I-2-1. Interaction ion-cible :

Quand une particule assez énergétique atteint une cible, il interagit par répulsion électrostatique avec des atomes cible. En outre, pendant un choc, des cheminements mono électroniques comme: l'excitation, l'ionisation et la cristallisation (capture d'un électron intervenant) sont apparaît de façon instantané.

Toute fois, les atomes heurtés par l'ion reçoivent une grande d'énergie pour quitter leur site. L'effet de cette énergie est de provoquer un échauffement de la cible (phonons), ainsi que l'ion donne de l'énergie thermique, et finit par y être implanté [3].

I-2-2. Cascade de collisions :

On sait que les chocs élastiques entrain le déplacement des atomes cible et par la suite ces atomes entrent avec eux en collision successives. Ces déplacements sont connus sous: cascade de collisions, la cascade de collisions évolue jusqu'à ce que l'atome atteint une faible énergie suite a un ensemble de collisions.

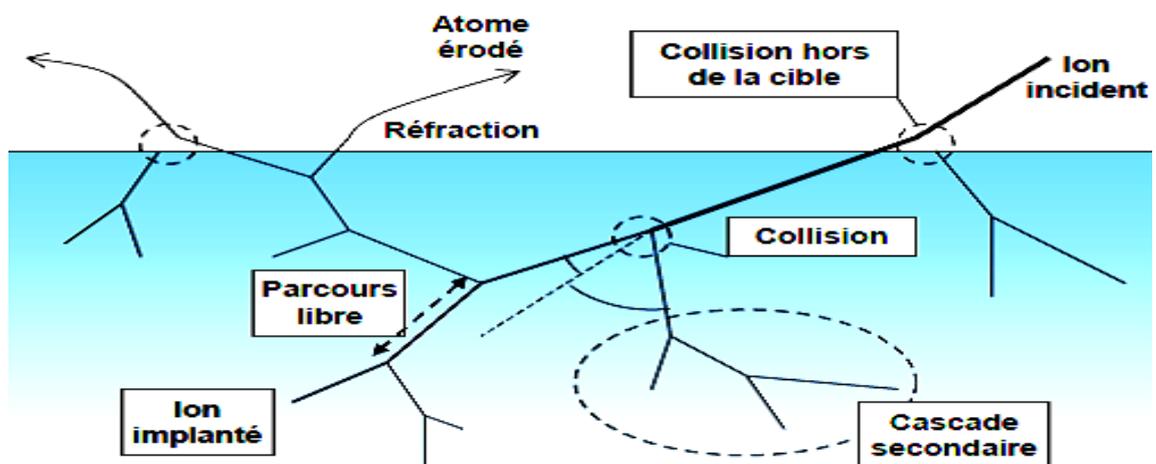


Figure I-2: Modélisation de la cascade de collisions [4].

I-2-3. Description générale :

Le protocole I-3 représente tous les cas possibles pour la description d'une cascade de collisions, aussi le faisceau d'ions incident a une énergie et un angle d'incidence initial, tel qu'il avant la diffusion dans la cible peut faire des heurtés avec lui même, en aboutissant il cède une partie de son énergie a un atome de la cible. Cette atome déplacée par la suite et crée ce qu'on apelle **la cascade secondaire**. Puisqu'un ion ressort de la cible, il Transfert alors très peu d'énergie après un ensemble de collisions. L'échelle énergétique considéré dans les modèles présentés est de qq (ev), le bombardement des ions lourds sont fonctionnels à des chocs élastiques(l'érosion, l'oxydation,...) et l'implantation ionique nécessite des hautes énergies, d'environ de 50 keV à 6 MeV. [4]

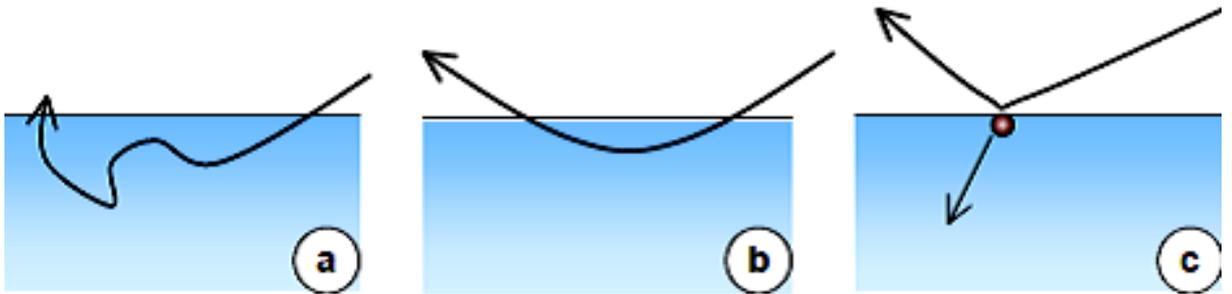


Figure I-3: Représente tous les cas possibles pris en compte pour lesquels l'énergie de l'ion ne perd pas leur énergie totalement dans la cible [4].

- 1^{ère} cas** Désigne l'émission d'un ion, après un grand nombre de déviations arbitraires pendant les chocs, jusqu'à ou il quitte la cible et fait un faible échange d'énergie cinétique avec cette dernière.
- 2^{ème} cas** Description de la trajectoire de l'ion pour un seul chocs avec la cible. Donc l'ion sera redirigé vers l'extérieur de la cible.
- 3^{ème} cas** L'ion est extrêmement rebondi sans diffusion dans la cible et perdre une grande fraction de son énergie. C'est le cas d'un choc particulier.

Pour les incidences rasantes, en considérant que l'interaction Ion-Atome due a un seule choc, ce qui signifié que la cible absorbe toute l'énergie de l'ion .

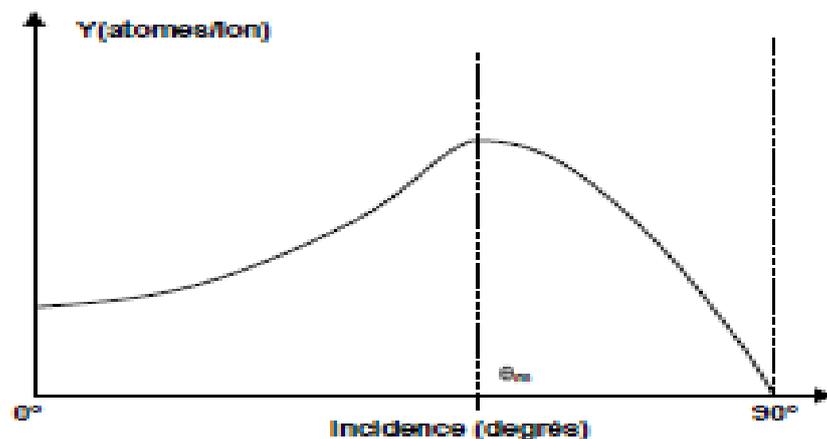


Figure I-4:Forme générale de la courbe du taux d'érosion Y en fonction de L'angle d'incidence θ [5].

On y observe un minimum local d'érosion à incidence nul jusqu'à une incidence de 40° et qu'elle croit ensuite rapidement. On atteint ainsi une incidence d'érosion maximale θ_m à partir duquel le flux de la pulvérisation commence à diminuer jusqu'à s'annuler à l'incidence de 90° [5].

I-3. Les collisions binaires et le programme TRIM :

Pour une maîtrise parfaite de la collision binaire, on introduit le programme de simulation **TRIM** qui modélise tous les paramètres mis en jeu dans les cascades de collisions, tel qu'il est avantageuse. Ce type de collision est définie dans un référentiel barycentrique et dans un référentiel du laboratoire[6], en effet, l'utilité de l'énergie et la quantité de mouvement contribuent d'acquérir les nouvelles directions et l'énergie de deux particules de système d'interaction 'ION-ATOME', les collisions binaires fait que toutes les chocs sont indépendamment considérés. Concernant le référentiel barycentrique les notation de la masse, l'angle et la vitesse coïncide avec ceux du référentiel du laboratoire et sont notés avec une barre, par contre le référentiel de laboratoire, la masse des atomes est notée M , les vitesses des ions incidents et ces luis qui réfléchies durant un choc sont respectivement v, v' , ainsi que les angles de déflexion θ_1 et θ_2 .

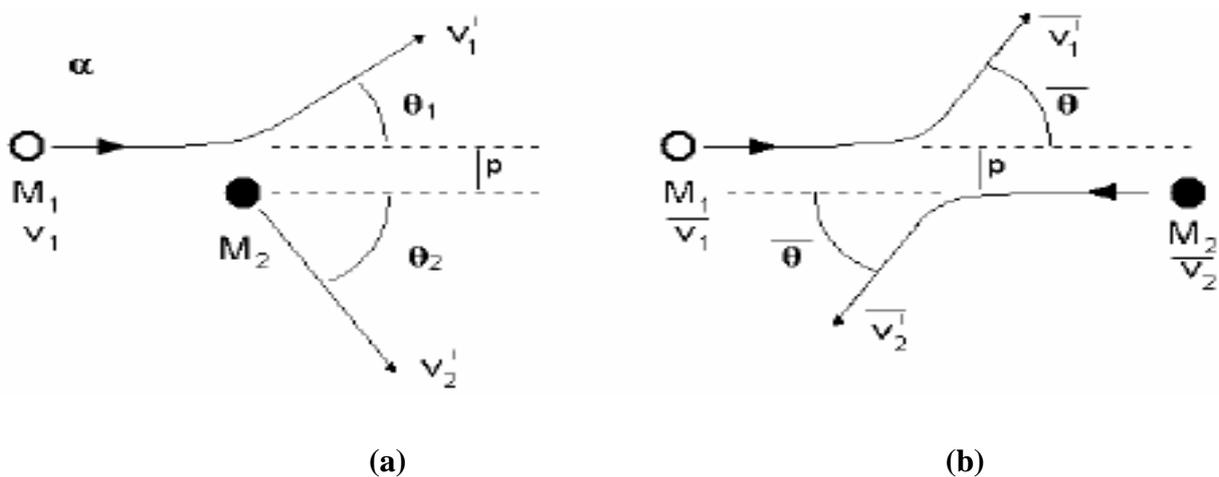


Figure I-5 : Représentation d'une collision binaire dans un référentiel du laboratoire (a) et dans le référentiel barycentrique (b) [6].

La description d'une collision élastique dans un référentiel de laboratoire facilite la compréhension du mouvement entre deux masses, alors que le référentiel du centre de masse facilite les calculs, ainsi que cette particularité inclut des aspects remarquables dans cette dernière référence.

I-4. Les collisions binaires et les pertes élastiques:

La figure I-6 qualifie un choc, où nous verrons que le lieu de déviation de la trajectoire initiale était limité par l'incidence normal et passe de l'atome déplacé. [7]

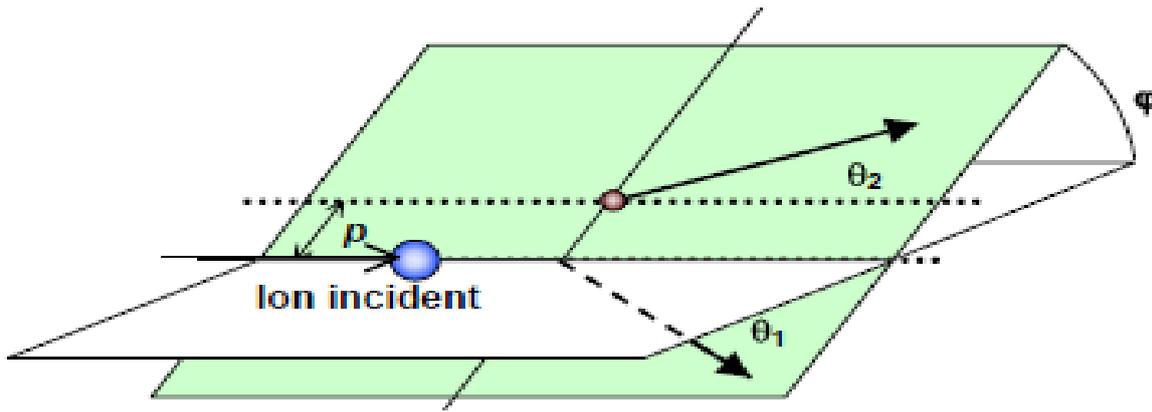


Figure I-6: Description d'une collision binaire

Dans cet état de collision, les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie permettent de relier les angles de déviation dans le plan du laboratoire à la déviation dans la référence barycentrique.

Sachant que :

$$\theta_2 = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta'}{2} \quad \text{et} \quad \tan(\theta_1) = \frac{M_2 \sin(\theta')}{M_1 + M_2 \cos(\theta')} \quad (\text{i-1})$$

Donc:

Le transfert d'énergie T de l'atome cible en fonction de l'énergie de l'ion E_0 est défini par la relation :

$$T = y \cos^2(\theta_2), \quad (\text{i-2})$$

y est représenté le transfert maximum d'énergie, et définie par la relation ci-dessous:

$$y = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2} \quad (\text{i-3})$$

Aux conditions initiales d'une collision, toutes les inconnus qui sont les angles de déviation et la vitesse des deux particules en fonction de la vitesse incidente dans le centre de masse, sont données par la connaissance de l'angle θ' :

$$V_{ion} = V_0 - V_C = V_0 \frac{M_T}{M_1} \quad (\text{i-4})$$

$$V_{atome} = V_C = V_0 \frac{M_T}{M_2} \quad (\text{i-5})$$

tel que : M_T est inféré "la masse réduite"

$$M_T = \frac{M_1 * M_2}{M_1 + M_2} \quad (i-6)$$

$$\theta_{max} = \arctan\left[\frac{M_1 * M_2 * \sin(\arccos(-M_2 / M_1))}{M_{12} - M_{22}}\right] \quad (i-7)$$

RAPPEL:

θ_{max} est l'angle de déviation maximale d'une collision entre deux masses M_1, M_2 respectivement d'un atome lourd, atome plus léger.

On conclura l'énergie résiduelle de l'ion :

$$E_r = E_i - T - \Delta E_p \quad (i-8)$$

Où : ΔE_p représente la perte d'énergie inélastique.

Par ailleurs, cette interaction doit être corrigée par la fonction d'écran causée par l'interpénétration des cortèges électronique .Ainsi, toute la description de la collision est également répartir sur la description de l'ecrantage.

I-5. Le potentiel d'interaction:

La formule du potentiel d'interaction entre deux particules de numéros atomiques Z_1 et Z_2 s'écrite:

$$V(r) = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right] \phi(r) \quad (i-9)$$

ϕ : est la fonction d'écran qui défini comme le référence entre le potentiel réel et le potentiel colombien sans effet des nuages d'électrons:

$$\phi_u(x) = \frac{v(x)}{(z_e/r)} \quad (i-10)$$

Avec: e la charge de l'électron $1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ c}$.

Actuellement, il existe différents types de potentiels d'interaction $V(r)$: Thomas-Fermi-Bohr- Molière et Lorentz-Jonser décrivons de façon satisfaisante par plusieurs théories. Le programme TRIM utilise un potentiel universel qui est représenté par la fonction d'ecrantage $\phi_u(x)$ qui est défini par :

$$\phi_u(x) = 0.1818e^{(3.1998x)} + 0.5099e^{(0.94229x)} + 0.2802e^{(0.4029x)} + 0.2817e^{(0.2016x)}. \quad (i-11)$$

I-6. L'expression de pouvoir d'arrêt :

Toutefois, dans le domaine d'énergie qui nous intéresse, la connaissance de l'expression de pouvoir d'arrêt repose sur la connaissance du pouvoir d'arrêt nucléaire et électronique. Ce pouvoir d'arrêt noté $S(E)$ est définie par :

$$S(E) = \frac{dE}{Ndx} = Sn \quad (i-12)$$

Comme le montre la figure (I-6) représente l'allure générale de la variation du pouvoir d'arrêt en fonction de la vitesse du projectile, et possède trois zones différentes.

D'une part, on y observe dans la première zone qui est limitée par $V_0 Z_1$ une augmentation progressive de pouvoir d'arrêt nucléaire à la vitesse de l'ion, ainsi qu'il est proportionnel à la masse ionique.

Et d'autre part, le pouvoir d'arrêt électronique peu Concordance avec la vitesse de l'ion, et soit la racine de l'énergie initiale.

Ensuite, la 2^{ème} zone était caractérisée par le pouvoir d'arrêt électronique qui atteint le maximum à partir duquel la vitesse fixe à la valeur $(2Z_1)$, au-delà, l'ionisation d'un ion sera plus probable et le taux de collision électronique commence à diminuer jusqu'à où l'entrée de 3^{ème}

zone 'la zone de Bethe block' tel que le pouvoir d'arrêt chute également trop vite pour les forts énergies.

Important:

Cette courbe une 4^{ème} zone liée aux énergies relativistes pour lequel le pouvoir d'arrêt électronique sera confondu linéairement à la vitesse de l'ion incident résultant de libération de photons par la cible. Ces conséquents relative a des vitesses des ions allant jusqu'à 10^7 ev/amu.

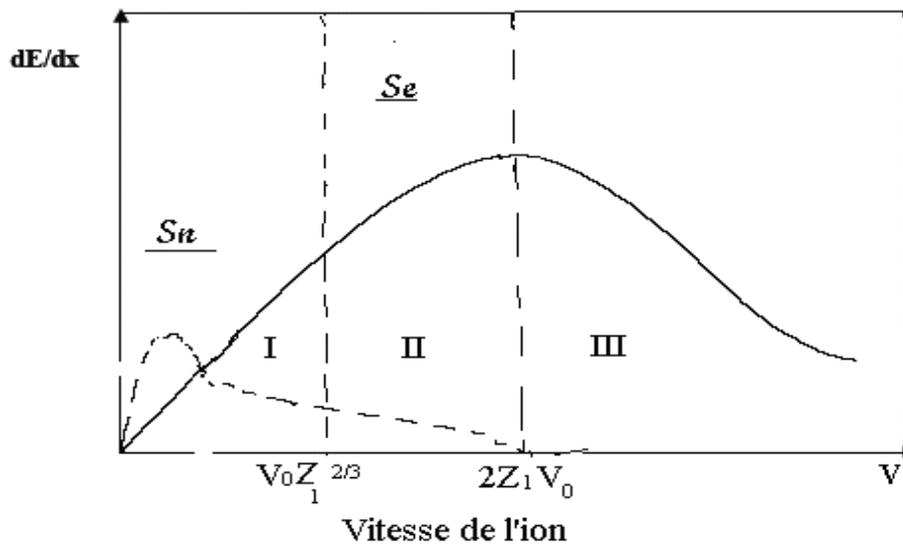


Figure. I-6: Composantes nucléaires et électroniques du pouvoir d’arrêt en fonction de la vitesse de l’ion incident [1].

I : arrêt nucléaires – **II :** arrêt électroniques – **III :** Zone de Bethe-Block

I-7. L’implantation ionique :

Les ions qui ont implantés massivement dans la cible ils peuvent modifier la nature de la surface d’érosion ainsi que les cascades de collision, par effet, l’émission et le taux d’érosion sont sensibles à l’implantation ionique, c.-à-d. des effets relatifs comme : amorphisation, diffusion et pulvérisation.

La répartition finale des ions est bien représentée par une courbe de Gauss, caractérisée par la position R_p de son maximum et sa demi-largeur à mi-hauteur ΔR_p .

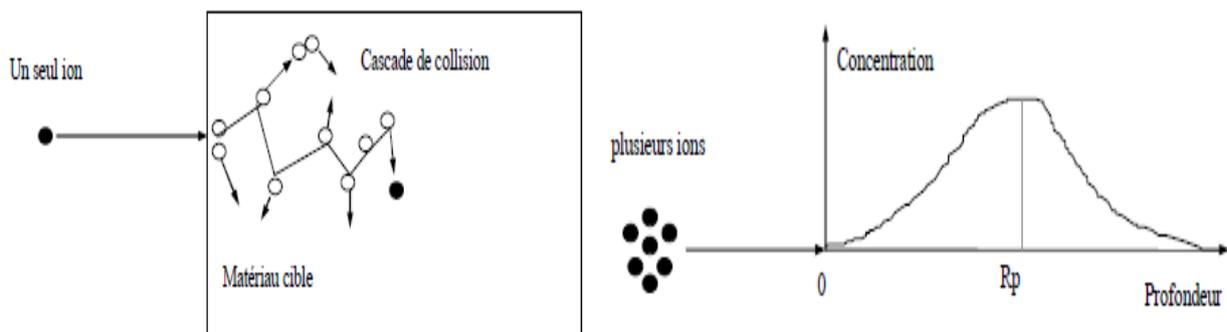


Figure I:8. Principe de l’implantation ionique[8].

I-8. Les lacunes et les défauts dans une cible:

Les lacunes, interstices et les impuretés introduisent librement dans la structure cristalline "défauts de Schottky et Frenkel", ainsi qu'ils ont identifiés par l'existence d'une pairs de Frenkel ; des déplacements atomiques avaient lieu quand l'énergie transmettre aux atomes de la cible est satisfaisante.

Durant un choc, si l'atome être transportée regagnée une certains valeur d'énergie, il ya une probabilité de céder cette dernière énergie à des autres atomes voisins afin de créer des doubles de Frenkel. Donc, nous avons la puissance d'évaluer le nombre d'atomes déplacés par un ion d'énergie dans la cible [8] :

$$N(E) = (0.8 \frac{dE}{dX} n * \Phi_0) / 2Na \quad (i-13)$$

Avec:

- $(dE/dX)_n$ La perte d'énergie nucléaire.
- Φ_0 est le quanta d'implantation.
- N_a densité atomique du réseau.

I-9. Dynamique moléculaire :

La modélisation par la dynamique moléculaire demande l'utilisation d'une cible avec des dimensions finies. Pour les systèmes atomiques en consistant sur un potentiel de Lennard-Jonser, et les temps de ralentissement des phénomènes sont très inferieures à 10^{-8} s et la dynamique moléculaire serait très bon outil.

I-9-1. Modèle des sphères dures :

Ce modèle est représenté par le Hamiltonien suivant :

$$H = \sum (\frac{1}{2Mv^2} + u(r_i - r_j)) \quad (i-14)$$

$$u(r_i - r_j) = \begin{cases} +\infty & |r_i - r_j| \leq \sigma \\ 0 & |r_i - r_j| > \sigma \end{cases} \quad (i-15)$$

Tel que: σ le diamètre des deux sphères.

Ce mode couvre un vaste domaine, soit sur le plan théorique, soit sur le plan statistique. Lorsque nous avons interprété dans un milieu peu condensé, le modèle des sphères dures inélastiques est un bon outil, dont les interactions entre particules dépendent de collisions instantanées.

Entre deux collisions, les particules sont déplacées suivant un trajet rectiligne et la probabilité que trois sphères soumettent à un choc instantané est infinitésimale, alors la dynamique moléculaire serait retournée à une chaîne de collisions binaires.

Tenir compte, deux sphères de même masse et de vitesses respectivement V_1, V_2 avant la collision puis V_1', V_2' , après la collision.

$$\text{Sachant qu'on a : } |V_1|^2 + |V_2|^2 = |V_1'|^2 + |V_2'|^2 \quad (\text{i-16})$$

D'où: la conservation de quantité de mouvement donne :

$$V_1 + V_2 = V_1' + V_2' \quad (\text{i-17})$$

$$\text{En notant: } \Delta V_i = V_i - V_i' \quad (\text{i-18})$$

$$\text{Donc: } \Delta V_1 = -\Delta V_2 \quad (\text{i-19})$$

Nous allons valider que la composante normale de la vitesse est inversement proportionnel avec la collision:

$$(V_2' - V_2')(r_2 - r_1) = -(V_1 - V_1')(r_2 - r_1) \quad (\text{i-20})$$

De plus, on a entre les deux particules i et j , les équations de mouvement ci-dessous:

$$r_1 = r_1^0 + v_1 t \quad (\text{i-21})$$

$$r_j = r_j^0 + v_j t \quad (\text{i-22})$$

Où: t c'est le temps de collision et r_i et r_j sont les positions des particules i et j après la dernière collision, cette condition s'est vérifiée, la solution retenue est celle qui donne double produit.

$$(r_i^0 - r_j^0)(v_i - v_j) < 0 \quad (\text{i-23})$$

Références

- [1] H. LADJEL Thèse magistère 2005 'Université des sciences et de la technologie d'Oran 'Mohamed Boudiaf'.
- [2] Thomas Tondu Thèse doctorat Étude de la pulvérisation ionique Applications aux effets de jet de la propulsion plasmique 2005 École Doctorale: Matériaux-Structures-Mécanique de l'ONERA-centre de Toulouse.
- [3] J.F.Ziegler ,J.P.Biersach ,U. Liittmark, "the Stopping and Range of Ions in Solids" Vol 1 of the Stopping and ranges of Ions of Ions in Matter ,Ed J.F .Ziegler ,pergamon press ,New York (1985).
- [4] Lindard J.,Scharff M.and Shiott H. E, Mat .Phys. Medd, 33 (1963), 14, Range,concepts and heavy ion ranges.
- [5] J.P. Biersack and L.G.Haggmark,Nucl Inst Meth 174,257 1980.
- [6] M. Bertin, J. P. Faroux et J. Renault, Mécanique Classique de Systèmes de Points et Notions de Relativité, Dunod Université, I, (1985).
- [7] Balanzat, E. Bouffard, Solid State Phenomena, 31-32 (1993) 7.
- [8] H. kinchin, R. S. Pease, Rep. Progr. Phys, 18, 1, (1955).

CHAPITRE II :

LE PHENOMENE DE LA PULVERISATION

II-1. INTRODUCTION:

L'étude de la surface nécessite des activités intellectuelles sur leurs propriétés diversifiées qui sont considérés comme une cartographie d'une surface. Cette surface est susceptible soit a des changements structuraux, soit a des changements locaux aux niveaux des microstructures au cours du bombardement d'ions [1] (érosion ,rugosité, adhérence et l'uniformité...) qui était en suite conforme l'émission d'atomes neutres ou charges 'pulvérisation'.

Le phénomène de pulvérisation (SPUTTERING) est l'équivalent de l'éjection d'atome ou groupes d'atomes d'une cible projetés par une particule [2].

Historiquement, ce processus a été mis en 1852 [3], par W.R.Groove, et au départ, elle utilisa pour la déposition des couches minces de métal « métallisation », ce dernière était due sous l'action d'un bombardement de la cathode par des ions provient par la décharge.

Les demandes technologiques usuelle être indispensables de voir des méthodes et mécanismes synchrones imprègnent cette progression.

II-2. Principe de la pulvérisation ionique:

II-2-1. Transfert de l'énergie de l'ion incident :1717

On considère une cible constitue d'atomes, frappée par un faisceau d'ions a une énergie très élevée, une partie de l'énergie de faisceau est variée d'une manière élastique a l'atome accueillie. Pour des ions a basse énergie, une grande portion de leur énergie est attribuée a la cible électriquement en mettant les atomes de réseau en mouvement, en outre, les interactions entre les nuages électroniques sont également provoquant le freinage inélastique d'ions du faisceau. Ces interactions inélastiques être apparent nettement sous l'action d'ionisation de l'atome cible et le long du parcours de l'ion.

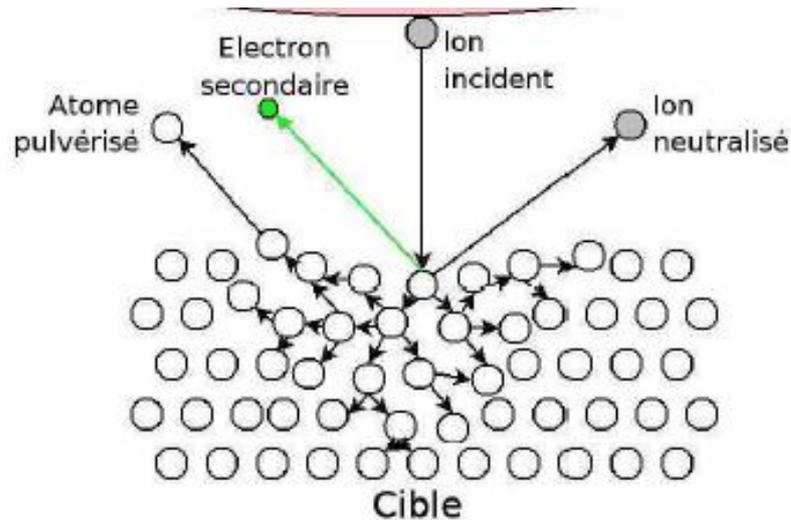


Figure II-1: Principe de base la pulvérisation ionique[2].

II-2-2. La conception de l'énergie de surface :

Les atomes en sorte de la matrice dépassent un obstacle de potentiel pour quitter la matrice. Ce potentiel est aussi dit "énergie de surface", tel qu'il joue un rôle de filtre en énergie sur les particules susceptibles d'être érodées.

En bref [4], la pulvérisation ionique s'était le résultat d'un ensemble de collisions au sein d'une cible générée par le transfert élastique de l'énergie cinétique d'un ion assez énergétique.

II-3. Le flux de pulvérisation ionique :

Avec les collisions, le flux des atomes pulvérisés est l'autre aspect important de la pulvérisation ionique. Cette quantité d'atomes arrachés serait quantifiée par le pourcentage d'érosion Y (rendement de pulvérisation), il est généralement définie comme le suivant [5]

$$y = \text{Atomes pulvérisés} / \text{Ions incidents} \quad (\text{ii-1})$$

On voit donc , que le flux des atomes pulvérisés est caractérisé par la nature de la cible considérée ,de l'ion incident ,de son énergie et de son angle d'incidence .En conséquent, la cascade de collisions est indispensablement lié du duel ION-ATOME .

Au contraire, le flux des atomes pulvérisés est ne correspond plus du flux d'ions. Il nécessite afin de l'extraire des atomes cible du puits de potentiel qu'identifier la cible une quantité de mouvement capable de transmettre assez d'énergie à des atomes recueillies.

Par ailleurs, on trouve des formules théoriques aident nous de développer les calculs permettant d'obtenir le coefficient de pulvérisation, ces formules nécessitent des paramètres que l'on ne peut pas connaître à priori, et ne sont pas prédictives. Inversement elles permettent d'interpoler ou d'extrapoler des données empiriques. Parmi ces formules, la

formulation de **Bohdansky [6]** qui détermine le flux de pulvérisation au -dessus du seuil d'érosion :

$$Y(E, \theta^\circ) = K. E \left[1 - \left(\frac{E_{th}}{E} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \left(\frac{1 - E_{th}}{E} \right)^2 \quad (ii-2)$$

Une énergie seuil existe réellement, elle attribuée par l'énergie de surface. Bohdansky proposa une loi pour calculer E_{th} , en introduisant l'énergie de surface et

$$y = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2} \quad (ii-3)$$

Avec : y transfert maximum d'énergie.

$$E_{th} \begin{cases} E_s/y(1-y) & \text{pour } M_1/M_2 < 0.2, \\ 8E_s(M_1/M_2)^{\frac{2}{5}} & \text{pour } M_1/M_2 > 0.2. \end{cases} \quad (ii-4)$$

La formule de Bohdansky est très satisfaisante à basse énergie, mais l'écartement au-delà de keV. Dans ce cas, la détermination de la fonction $Y(E, \theta^\circ)$ nécessite quatre paramètres [7]: E_{th} , Q, f, et θ_m .

Donc, la formule d'amamura est couramment utilisée [8] pour définir ces paramètres :

$$y(E, \theta) = y(E, 0^\circ). [(\cos(\theta))^f e^{(f(1-(\cos(\theta))^3)\cos(\theta_m))}] \quad (ii-6)$$

Avec : f et θ_m sont deux paramètres d'ajustement.

A vois thermodynamique, Sigmund arrive a résoudre l'équation de Boltzmann en considérant une nombreuse approximation (approximation de collisions binaires, milieu infini) qui donne la relation pour le coefficient de pulvérisation [9].

$$\text{La formule de Sigmund est : } Y = \frac{0.042}{U_s} \alpha \left(\frac{M_2}{M_1} \right) S_n(E) \quad (ii-7)$$

II-3-1. Le flux de pulvérisation et l'angle d'incidence :

L'incidence angulaire a une influence considérablement importante sur l'efficacité du rendement de pulvérisation. Quand l'angle d'incidence croit, l'existence de la cascade de collisions de la surface souscrit à élevé la probabilité de rendement comme l'indique la relation : [10]

$$Y(\theta) = Y_0 (\cos \theta)^{-n} \quad (ii-8)$$

Avec : Y_0 : Taux de pulvérisation sous incidence normale.

θ : Angle d'incidence, et n:l'indice de diffraction.

D'autre côté, lorsqu'on a un gap énergétique très cour, le flux de pulvérisation sera varié beaucoup moins et chute forcément avec une angle d'incidence.

Au fur et à mesure, les recherches sur les procédés de pulvérisation s'appuient sur un grand nombre de mécanismes et techniques typiquement concernant : le libre parcours moyen entre deux particules et le rendement de pulvérisation.

Pour une détermination empirique de rendement de pulvérisation, nous nous citons les principales techniques habituelles [10] :

1ère technique : s'intéresse à mesurer le rendement suivant des bouleversements de l'objet avant et après l'éclairage. Afin de calculer la quantité de particules éjectées.

2ème technique : il s'agit d'une caractérisation par la spectroscopie de masse pour la composition du flux de particules, soit d'ions secondaires (SIMS), soit d'atomes neutres secondaires (SNMS).

3ème technique : désignée par la méthode « collecteur », tel qu'un matériau attire les extraits de cible, ces particules condensent sur le plan de ce matériau. La détection des nucléons se fait : par SIMS, AES (spectroscopie d'électrons Auger).[11] ...etc.

II-3-2. La nature des particules éjectées :

Durant le déplacement de diverses particules vers l'extérieur de la cible, et après un certain nombre de collisions, on veut filtrer ces particules éjectées chacune à leur nature, tel que les ions incidents sont de nature excités ou stables, ainsi que la cible sera les transporter et neutraliser. La nature donc était métallique à l'état fondamentale.(80% , 95%).[12]. Par contre une très faible quantité contient : ions, électrons et protons sera réémet (<10%) à cause de leur potentiel d'interaction avec la surface qui est plus important que celui des atomes.

On conclut donc que les particules éjectées sont des atomes neutres à l'état initial.

II-4. Les applications du processus de la pulvérisation ionique :

L'intérêt technologique et industriel du processus de pulvérisation ionique a prouvé essentiellement à ses nombreuses utilisations.

Dans cette optique, on aura mentionné quelques applications :

- L'élaboration et la synthèse des films minces.
- Amélioration des variantes propriétés des métaux ex : le Fe, Co, Ni ont été déposés pour des couches avec des propriétés magnétiques.
- À l'utilisation de la propulsion à plasma sur les satellites et sondes spatiales.

Nous avons maintenant manifesté les caractérisations fondamentales de cuivre (**Cu**) et argon (**Ar**) utilisées pour le synthétiser en couche mince, en outre nous citons les différentes applications qui résument l'utilité de ce métal.

II-5. Le cuivre :

Le cuivre est un élément chimique de symbole **Cu** et de numéro atomique **Z=29**. Naturellement présent dans la fraîche terrestre, il est moins abondant. On trouve usuellement le cuivre, comme la plupart des métaux à usage industriel ou commercial, sous une forme poly cristalline à grains fins, en suite, il possède une conductivité thermique et électrique [13]. Ce métal très pur et très résistant à la corrosion, mais aussi très mouillée. On va détailler par la suite les différentes propriétés.



Image II-2 : Les différents états possibles de Cuivre.

Symbole	Numéro atomique Z	Masse atomique g/mole	Rayon atomique pm	Rayon de van der Wall pm	Groupe, bloc, période
CU	29	63,546	135	140	11,d,4

Tableau II-3: L'identification de cuivre.

II-5-1. Propriétés physiques :

On résume quelques caractéristiques apparaître dans la liste suivante :

État ordinaire	Solide.
Masse volumique	= 8,96 g·cm ⁻³ .
État(s) d'oxydation	= 2 , 1.
Dureté (Mohs)	= 3.
Volume molaire	= 7,11×10 ⁻⁶ m ³ ·mol ⁻¹ .
Vitesse du son	= 3 570 m·s ⁻¹ .

Clivage absent.

II-5-2. Propriétés chimiques :

Le métal de cuivre classé Parmi les 'métaux de transition'. [14] et cristallise selon la structure 'cubique a face centré' (c.f.c.) avec le paramètre de maille $a=0,362\text{nm}$. et la maille élémentaire peut être décrit par 4 atomes de cuivre.

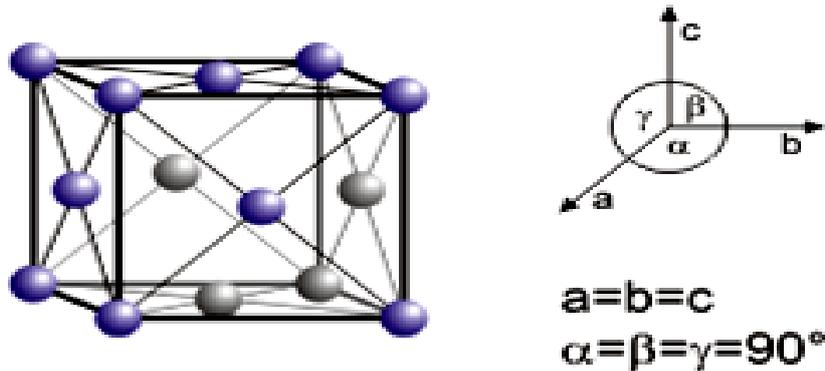


Image II-4 : Le schéma de la maille du cuivre.

La compacité du cristal : c'est le rapport du volume occupé par les atomes au volume de la maille. Donc à partir le volume de la maille conventionnel de Cu : $4,6656 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$. La compacité de cuivre est égale 0,74.

II-5-3. Propriétés optiques :

Transparence : opaque.

Trait : rouge métallisé, rouge pâle.

Éclat : métallique.

Fluorescence : aucune.

II-6. Définition d'argon:

Nom, symbole, numéro	Argon, Ar, 18.
Série chimique	Gaz rare.
Groupe, période, bloc	18, 3, p.
Couleur	Incolore.
Masse atomique	39.948
Structure cristallin	Cubique à faces centrée.

II-6-1. Propriétés physiques :

État ordinaire : Gaz (non magnétique).

Volume molaire = $22,414 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$.

Vitesse du son = 319 m·s⁻¹ à 20 °C.

Références

- [1] N. Moncoffre N.These 1986 IPN Université Claude Bernard Lyon I France.
- [2] W.R. Grove, Philos. Mag. 5, 203 (1853).
- [3] C.Vitelaru thèse en co-tutelle Université Paris -Sud 11,LPGP-210, Campus d'Orsay France.
- [4] M.T. Robinson, in: R. Behrisch (Ed.), 'Sputtering by Ion Bombardment I', Topics in Applied Physics, Springer, Berlin, 1981, p.16.
- [5] Philibert, Vignes, Brechet, Combrade, Métallurgie:du minerai au matériau <<Cohésion, structure et propriétés physique>>,Editeur Masson, p249.
- [6] L.Pauling Journal of the American Chemical Society Vol54, p3570-3582(1932).
- [7] W. Eckstein, Sputtering yields, Vacuum 82 (2008) 930–934
- [8] J.Bohdansky,J. Roth, H. Bay, J. Appl. phys.51(1980)2861 et 52 (1981) 1610.
- [9] D.Rosenberg, G.K. Wehner J. Appl.Phys. Vol 33 No 5 1962.
- [10] Y. Yamamura Radiation effects, 1984, Vol. 80,pp 57-72.
- [11] J.E. Mahan, A.Vantomme, 'A simplified collisional model of sputtering in the linear cascade regime' J.Vac. Sci. Techno. A 15(4), Jul/Aug 1997.
- [12] P. Sigmund, Phys. Rev., 187, p.768, 1969.
- [13] K.Wasa, M. Kitabatake, H. Adachi, 'Thin film Materials technology sputtering of compound Materials', Springer, 2004.
- [14] C.H. Townes, 'Theory of cathode sputtering in low voltage discharge', Phys. Rev. 65, 319-327 (1944).

CHAPITRE III

CODE ET SIMULATION NUMERIQUE

III-1. INTRODUCTION:

Durant les dernières années concernant l'évolution de la recherche scientifique dans des nombreux domaines, cependant des nouvelles méthodes dépend de la simulation numérique des divers phénomènes apparaissent.

Les méthodes de simulation que nous intéressent (l'interactions atomiques dans les solides) commencent à provenir progressivement dans les débuts des années 60. Elles sont un des outils de modélisation théoriques qui permettent la simulation de prévisions réalisées afin de pouvoir analyser des résultats futurs (logicielle Kalypso) et réduire les erreurs d'approximations pour traiter un problème analytique.[1]

A présent, il est remarquable que l'existence de plusieurs choix de logiciels était suffisamment satisfaisants. On peut classer ces codes en deux méthodes de calcul [2]:

- Méthode de dynamique moléculaire.
- Méthode d'approximation des collisions binaires.

Les calculs faisant appel au minimum d'approximations sont les calculs de Dynamique Moléculaire (DM).

III-2. Dynamique moléculaire et l'approximation des collisions binaires :

La dynamique moléculaire simule une cible de dimensions finies dont tous les atomes soient pris en compte [2] durant la cascade de collisions « un ensemble des particules », tel qu'on peut prévoir des interactions simultanées avec un nombre d'atomes, et qu'il peut arriver que deux atomes ou moléculaires se rapprochent exceptionnellement à une distance infinitésimale, et il se produit alors une interaction plus ou moins forte.

Ce genre de modèles donne des résultats rapprochés à la réalité, mais ils perdent beaucoup de temps de calculs [3].

Pour traiter ces problèmes de temps de calcul, on trouve une autre méthode qui calcule de façon classique « l'approximation des collisions binaires BCA [3] (Binary Collision Approximation) » dont, ne considère pas des interactions avec tous les atomes cible, ce pendant on en force uniquement à l'étude en régime de collision simple (ion + atome), et tous les événements seront considérés distinctement les uns des autres. Ces simulations reproduisent des issues très satisfaisantes, ainsi qu'elles permettent un grand gain de temps de calcul.

Important :

Les simulations de type (**BC: BINARY COLLISION**) utilisant des programmes pour déterminer les compositions et les structures des atomes de la cible, ainsi que le suivi temporel du cascade de collisions n'est pas effectuée.

III-2-1 Méthodes de calcul :

L'utilisation efficace d'un nouvelle outil repose sur la connaissance de ces possibilités, les ordres de grandeurs des systèmes accessibles à la puissance des ordinateurs permettent d'appréhender le type de phénomène que l'on veut étudier grâce à la dynamique moléculaire. [2] la dynamique moléculaire consiste à l'intégration numériquement des équations différentielles du mouvement des atomes (le traitement par la mécanique classique de Newtonne), est prendre en considération le choix de potentiel d'interaction.

L'équation d'évolution du système peut s'écrire formellement comme :

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}_i(t)) \quad (\text{iii-1})$$

Avec :

- m_i : La masse atomique de particule i.
- F_i : Force exercée sur la particule
- r_i : Position de la particule i.

La force s'exerce à chaque atome dans le cas de potentiels paires est de la forme :

$$\vec{F}_i = - \sum_j \vec{\nabla} V(r_{ij}) \quad (\text{iii-2})$$

Avec r_{ij} : désigne le parcours inter-particules i et j.

Pour intégrer numériquement des équations différentielles, il est important de les discrétiser aux moments de temps très court (le pas d'intégration). Ainsi que le problème de résolution des systèmes d'équations différentielles dépend aux plusieurs algorithmes insistants sur des approximations de l'intégration sur une variable continue par une sommation sur une variable qui prend des valeurs discrètes du type:

$$t_i = (i-1)dt \quad (\text{iii-3})$$

Où dt : le pas d'intégration dont la valeur est petite mais finie.

Cette intégration est vérifié par des algorithmes comme : l'algorithme de Range-KuttaGill, la méthode des différences centrales, méthode d'Euler - Cauchy, méthode de Verlet, méthode de Liouville et le modèle des sphères durs.

Ces grandes variétés de choix sont a priori limitées par les lois fondamentales de la dynamique classique qui généralement sont dépendent de la conservation de l'énergie du système à la cour du temps, de l'impulsion totale et du moment angulaire.

III-2-2. Algorithme de Verlet :

L'algorithme proposée par L-Verlet, historiquement [4] est l'un des premiers introduit, et il reste encore l'un des plus utilisé actuellement.

Pour des raisons compliquées on considère un système conservatif qui possède un nombre de particules de densité N , notant r un vecteur à $3N$ composantes (r_1, r_2, \dots, r_N) au r désigne le vecteur position.

D'après le principe de la dynamique, l'équation de mouvement s'écrit :

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = f(r(t)) \quad (\text{iii-4})$$

En faisant un développement de Taylor.[5], on aura :

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{f(r(t))}{2m}(\Delta t)^2 + \frac{d^3 r}{dt^3}(\Delta t)^3 + o(\Delta t)^4 \quad (\text{iii-5})$$

De même :

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{f(r(t))}{2m}(\Delta t)^2 - \frac{d^3 r}{dt^3}(\Delta t)^3 + o(\Delta t)^4 \quad (\text{iii-6})$$

Par la sommation de (iii-5) et (iii-6), trouve

$$r(t + \Delta t) + r(t - \Delta t) = 2r(t) + \frac{f(r(t))}{m}(\Delta t)^2 + \vartheta((\Delta t)^4) \quad (\text{iii-7})$$

Le calcul de la nouvelle position effectué avec une précision d'ordre 4, cet algorithme n'utilise pas des vecteurs les vitesses des particules pour calculer la nouvelle position ; on peut toute fois déterminer celles - ci de la façon suivant:

$$V(t) = \frac{r(t+\Delta t) - r(t-\Delta t)}{2\Delta t} \vartheta((\Delta t)^2) \quad (\text{iii-8})$$

III-2-3. Conditions aux limites périodiques :

Pour simuler un milieu fini, on utilise dans une simulation des conditions aux limites périodiques. Le calcul de la force interagissant entre deux particules i et j se fait souvent entre l'image de j notée (j') la plus proche voisin de particule i et non entre les deux particules appartenant à la boîte simulation ci-dessous.

Important :

Avec les conditions aux limites périodiques, la distance la plus courte entre i et j n'est pas r mais r' .

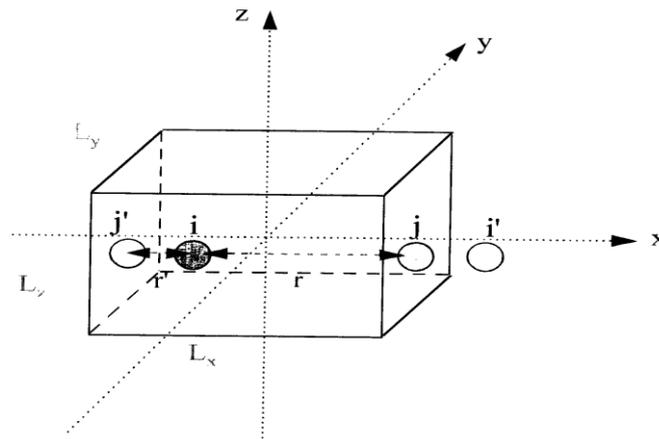


Figure III.1 : Boîte de simulation.

III-2-4. La limite de la dynamique moléculaire :

La limite intrinsèque de la modélisation Monte Carlo de ce qu'on ne considère pas la dynamique 'réelle' du système. Pour des systèmes continus définis à partir d'un Hamiltonien classique, il est probable de résoudre les équations du mouvement pour un ensemble des particules.

Pour des systèmes atomiques en dehors de la région critique, cela est très suffisant, mais se révéla très limitant pour des édifices moléculaires plus complexes comme les molécules biologiques.

III-3. Codes et logiciels de la dynamique moléculaire :

Le suivi temporel du système (ion+atome) est effectué en intégrant les équations dynamiques du mouvement de Newton. Les données d'entrée sont : les positions et les énergies initiales de l'injecteur et de l'ensemble d'atomes constituée la matière, la plupart du temps, on supposera donc que le réseau a une structure cristalline.

Nous nous intéressons plus particulièrement aux logiciels utilisant la (DM). Ainsi que nous allons étudier KALYPSO beaucoup qui est le logiciel de référence.

III-3-1. Présentation de Kalypso :

L'un des logiciels de simulation les moins célèbres est Kalypso, il est disponible gratuitement. Kalypso effectue une simulation particulièrement performante en temps de calcul.

Ce logiciel de type Monte Carlo simule l'interaction entre un ion (un gaz rare (Ar, Xe, Kr, ...)) simple ou un atome métallique. [5] et un solide, en se basant sur la méthode de « Dynamique Moléculaire ». Un grand nombre de collisions est générée, ce qui permet d'obtenir des données statistiques comme : le rendement de la pulvérisation, les profondeurs de l'injection des ions, et encore le déplacement des atomes recueils.

Les paramètres physiques d'entrée de Kalypso sont les caractéristiques de l'ion et du solide. Ainsi, ce code était spécifié par 6 fichiers input : cible, projectile, run, model, impact et inelastic. Ces fichiers sont générés par un programme utilitaire appelé « SPIDER ». Pour l'exécution des fichiers "input", on lancera le programme (Kalypso). En fin le traitement et l'interprétation des résultats effectuée par le programme (Winnow).

III-3-2. Les types de potentiels utilisés par le kalypso:

A vu analytique, le potentiel d'interaction pour tout couple d'atomes est une fonction du seul paramètre (le rayon réduit). Le Kalypso utilise un potentiel dit le potentiel de coulomb écranté est définie par l'expression :

$$V(r_{ij}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \sum_{k=1}^N c_k \exp(-b_k r_{ij}/a) \cdot \quad (\text{iii-10})$$

Où l'index d'addition k varie de 1 à 3 pour les potentiels Molière, et de 1 à 4 pour le potentiel ZBL (Ziegler-Biersack-Littmark), et c_k , b_k et a (le rayon d'écrantage) sont les coefficients définis différemment pour les divers potentiels

III-3-3. Méthode de Monte Carlo :

Parmi les techniques de simulation, pour objectif de modélisation de l'interaction ion-cible, sont plus appropriés pour l'étude des collisions binaires [7]. La méthode de Monte Carlo considère que la cible à l'état amorphe, ainsi que leurs constituants étaient susceptibles particulièrement à les collisions binaires. Ce type de code a une bonne statistique, nécessite des temps très réduits [8].

III-3-4. Les codes basés sur l'approximation des collisions binaires :

Elles sont plus simple à l'usage, une durée de temps très raisonnable. On cite deux composés de codes principaux liés à l'approximation des collisions binaires :

III-3-4-1. Cas des cibles amorphes :

Le considérablement de cible est toujours à une structure "désordonnée", les deux particules de système ion-cible étaient isolées, tel que la potentielle compagne est de type "colombien écrantée" qui joue un rôle de simulation d'un groupe de collisions "une cascade de collisions", et la pulvérisation induite.

III-3-4-2. Cas des cibles mono-cristallines :

Ce type de logiciel a l'objectif de traiter la cible ex: code de Marlowe [9], et les emplacements atomiques dans la cible doivent être donnés.

En point comparative, la différence entre ces codes et le code Kalypso intervenant sur la possibilité d'introduire une dépendance temporelle, ainsi que la simulation des collisions entre deux atomes en mouvement dans la cascade.

Le tableau ci -dessous donne les principales particularités de ces deux groupes de codes :

BCA		Dynamique Moléculaire
BCA: Approximation des Collisions Binaires		Toutes les interactions sont considérées.
		KALYPSO
Cibles amorphes Monte Carlo	Cibles cristallines et aussi amorphes	
TRIM (ne tient pas compte de la structure de la cible)	MARLOWE (cristallographie de la cible et prend en charge la température de la cible)	
Temps de calcul		
Rapides		Longs
Bonne statistique		
pour des énergies variables allant de quelques eV jusqu'au KeV		uniquement à faible énergie
Paramètres d'entrée		
énergie de liaison, de surface et de déplacement, le nombre d'ions incidents, l'angle d'incidence,....		position et énergie du projectile et des atomes de la cible + potentiel d'interaction des atomes de la cible avec eux-mêmes et avec l'ion incident

Tableau III.1 : les principales particularités de ces deux groupes de codes

III.4. Les codes basés sur l'approximation des collisions binaires

La méthode utilisant l'approximation des collisions binaires est plus simple à mettre en œuvre et plus rapide en temps de calcul, ce qui est un facteur de choix important. On distingue deux catégories de codes basés sur cette approximation [10]:

III.4.1. Pour les cibles amorphes :

Ces codes de type Monte Carlo supposent que le solide est désordonné « amorphe » et que les particules sont soumises uniquement à des collisions binaires. On utilise alors un potentiel d'interaction simplifié de type coulombien écranté. Le choix d'un tel potentiel associé à l'approximation de collision binaire permet de simuler les cascades de collisions et la pulvérisation résultante [11].

Les distributions théoriques des parcours, des défauts, des phonons, des ionisations, ... peuvent être calculées par des méthodes statistiques [12, 13,14] (code TRIM et ACAT), ou par des méthodes analytiques (code Marlowe ou BCA), à partir des quatre premiers moments.

III.4.2. le programme TRIM :

Le programme TRIM a d'abord été conçu pour modéliser le parcours des ions incidents dans une cible amorphe [15]. Il a été ensuite modifié de façon à tenir compte des collisions des atomes de recul, dans l'étude de la pulvérisation [16]. En effet, au terme de plusieurs collisions, la direction des atomes de recul à une probabilité non nulle d'être orientée vers la surface et les atomes éjectés peuvent ainsi être comptabilisés.

Le principe de fonctionnement de TRIM dans sa version actuelle est le suivant. Un ion est envoyé sur une cible amorphe et son parcours est suivi pas à pas dans le matériau. Les collisions binaires de cet ion, avec un atome choisi aléatoirement dans la cible, puis les collisions de cet atome de recul, sont étudiées. Quand un second ion arrive, il voit la cible telle qu'elle était à l'origine. Cet événement est donc indépendant du précédent. Il n'existe donc pas de notion de mémoire de la cible et même si les atomes éjectés peuvent être comptabilisés, la cible garde toujours les mêmes dimensions (épaisseur et concentration). C'est un premier point important qui sera corrigé dans notre version pour rendre compte des effets de diffusion.

L'ion incident est suivi jusqu'à ce qu'il cède suffisamment d'énergie à la cible pour que son énergie restante soit inférieure à un seuil fixé, de l'ordre de 5 eV, ou bien qu'il traverse la cible. Les orientations cristallines ne sont pas prises en compte : la cible est considérée comme amorphe. Le paramètre qui caractérise le composé est sa densité. Cette méthode s'applique sur un large spectre d'énergie, de 0,1 KeV jusqu'au MeV. Elle permet l'accès au rendement de pulvérisation, à la distribution des ions implantés, au taux de

création de lacunes et de phonons. Elle s'applique pour une cible contenant jusqu'à quatre éléments dans trois couches distinctes.

Les avantages des résultats de ce calcul dans la gamme d'énergie de notre domaine de modélisation, sont de plusieurs ordres :

- 1- suivre toutes les distributions de parcours des ions implantés,
- 2- les pertes d'énergies électronique et nucléaire,
- 3- les déplacements atomiques dans la cascade de collision,
- 4- les dégâts créés à travers les couches superficielles de la cible,
- 5- la concentration des ions implantés dans le matériau cible.

Tous ces points sont pris en considération dans notre travail. Ils sont détaillés dans le quatrième chapitre. Le programme TRIM basé sur la théorie suivante : Dans une cible amorphe, le parcours d'un ion s'effectue comme suit. L'ion se déplace sur une trajectoire rectiligne entre deux chocs. Avant un impact, il est nécessaire de connaître son énergie, sa direction, sa position. L'atome cible est choisi de manière aléatoire. Seules sont calculées les pertes énergétiques de l'ion incident ainsi que les angles pris au terme de la collision. La méthode originale de TRIM est de travailler dans le référentiel de centre des masses et d'utiliser des énergies réduites.

Comme nous l'avons détaillé précédemment, les pertes énergétiques sont de deux sortes, les pertes inélastiques et les pertes élastiques. Ces dernières vont déterminer les différents angles de diffusion et de recul des atomes par des collisions nucléaires avec les noyaux qui produisent des phonons (vibration des atomes) et des déplacements atomiques (création des désordres) [17].

Dans le programme standard TRIM, l'énergie transférée à un atome cible est analysée pour donner les résultats suivants : l'ionisation induite par les atomes repoussés, le nombre de lacunes et d'interstitiels créés suite à une cascade de collisions, et également le nombre de collisions transférant des énergies inférieures à E_d (énergie de déplacement), 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 (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 [18].

Nous donnons ici de façon très schématique le principe global de raisonnement. Soit Z_1 le numéro atomique de l'ion, et Z_2 celui de l'atome cible. E_1 et E_2 sont les énergies des deux particules après la collision.

Si $E_2 > E_d$, l'atome bousculé a assez d'énergie pour quitter son site : c'est le **déplacement**. Si, en plus, $E_1 > E_d$, l'ion incident quitte également le site. L'atome cible devient à son tour une particule incidente, d'énergie égale à E_2 moins son énergie de liaison cristalline. En cas de déplacement de l'atome, mais si $E_1 < E_2$, deux cas de figure peuvent se présenter: (1) $Z_1 = Z_2$ l'ion incident reste sur le site, c'est une **collision de remplacement** (équivalente à un 'carreau' au jeu de pétanque) ; (2) $Z_1 \neq Z_2$ l'ion devient **substitutionnel** (et électriquement actif).

Si $E_2 < E_d$, l'atome éjecté n'aura pas assez d'énergie et il retournera alors à son site en créant des **phonons**. Si, de plus, $E_1 < E_2$, l'ion devient un **interstitiel** tout en produisant également des phonons, ce qui chauffe le matériau.

III.4.3. Pour les cibles cristallines

Ces codes ne s'intéressent généralement qu'à la cible, par exemple MARLOWE. Les positions de tous les atomes dans le réseau doivent être connues. Le calcul de la prochaine collision se fait à travers une procédure spéciale. Les principales différences avec les codes précédents sont la possibilité d'inclure une dépendance temporelle et de simuler les collisions entre deux atomes en mouvement dans la cascade.

III.5. Remarques :

Ce type de code a l'avantage d'être rapide et une bonne statistique peut-être atteinte rapidement. Un des problèmes provient du fait qu'à basse énergie, l'hypothèse des collisions binaires n'est plus vérifiée. On peut appliquer ces codes pour des énergies supérieures à 1 keV [19]. De tels codes considèrent un potentiel répulsif tandis que l'énergie de liaison est un des paramètres d'entrée du système. D'après Heiland [20], si on fait l'approximation des collisions binaires, on néglige le mouvement thermique des atomes de la cible, les liaisons entre les atomes de la cible, les pertes inélastiques et les effets quantiques. Certains codes tels que MARLOWE prennent en compte les pertes inélastiques et les vibrations thermiques pour des températures élevées, dans certaines de leurs versions, qui est basé sur la méthode de dynamique moléculaire.

References

- [1] D.W. Hermann, 'Computer Simulation Methods in Theoretical Physics', Springer, Berlin, 1990.
- [2] W. Eckstein, Computer simulation of ion-solid interaction (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg and New York, 1991).
- [3] G. Betz, K. Wien, "Energy and angular distributions of sputtered particles", International J. Mass Spectrum and Ion Processes ' 140, 1-110 (1994).
- [4] W. Heiland, "Interaction of low-energy ions, atoms and molecules with surface" ,dans Interaction of charged particles with solids and surfaces, publié par A. Gras-Marti, H.M. Urbassek, N.R. Arista et al. (Plenum Press, New York and London, 1991), Vol. 271, pp. 718.
- [5] M. T. Robinson, phys Rev B9, 12, 1974. [3] W. L. Morgan, "Universal besputtering curve" , Appl. phys. Letts. 55(2), 106-108(1989).
- [6] K. Binder, J. Hogback, W. Kobe, W. Paul, F. Varnik, 'Molecular dynamics simulations', J. Phys. Condens. Matter 16(2004) S429–S453.
- [7] M.A. Karolewski, 'Kalypso: a software package for molecular dynamics simulation of atomic collisions at surfaces', Nuc. Inst. Meth in Phy. B 230 (2005) 402–405.
- [8] J.B. Gibson, A.N. Gland, M. Mailgram, G.H. Vineyard, Phys. Rev. 120 (1960) 1229.
- [9] H. Mdvín, K. Paula, A. Whitlock 'Monte Carlo methods', John Wiley and Sunshine. New York, 1986.
- [10] W. Eckstein, Computer simulation of ion-solid interactions (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg and New York, 1991).
- [11] W.L. Morgan, "Dynamical simulation of liquid- and solid-metal self-sputtering", J. Appl. Phys. 65 (3), 1265-1269 (1989).
- [12] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, « The Stopping and Range of Ions in Solids », vol 1 of The Stopping and Ranges of Ions in Matter, Ed J.F. Ziegler, Pergamon Press (1985).
- [13] J. P. Biersack and L. G. Haggmark, NuclInst Meth 174, 257 1980.
- [14] W. Takeuchi and Y. Yamamura, RadiatEff 71, 51 1983.

[15] M. T. Robinson, Phys Rev B9, 12, 1974. [3] W.L. Morgan, "Universal resputtering curve", Appl. Phys. Lett. 55(2), 106-108 (1989).

[16] J.P. Biersack & W. Eckstein, *Appl. Phys.*, A34, 73, (1984).

[17] W.L. Morgan, "Universal resputtering curve", Appl. Phys. Lett. 55 (2), 106-108 (1989).

[18] W. Heiland, "Interaction of low-energy ions, atoms and molecules with surfaces", dans

Interactions of charged particles with solids and surfaces, publié par A. Gras-Marti, H.M.

Urbassek, N.R. Arista et al. (Plenum Press, New York and London, 1991), Vol. 271,

pp.718.

[19] Robinson M. T., Phys. Rev. B 40 (1989) 10717 ; Nucl. Instr. Methods B 67 (1992) 376; Rad. Effects, sous presses : La version 13a du programme MARLOWE est disponible au Radiation Shielding Information Center, OakRidge National Laboratory, P-O- Box 2008, OakRidge. Tennessee 37831-6732,U-S-A.

[20] J.Lindhart. Scharff and H.E.Schiott, Mat. Fys. Medd. Kgl. Dan. Vid. Selsk. 33, N°14 (1963).

CHAPITRE IV

RESULTATS ET DISCUSSION

IV.1. Introduction :

Nous allons maintenant nous intéresser aux principaux résultats de simulations obtenus dans le domaine de l'implantation ionique, qui abordés le phénomène d'éjection des atomes cible par le bombardement des ions incidents. Ce phénomène joue un rôle important dans développement technologiques notamment à industrie moderne, et dans des techniques pour la modification et l'analyse des surfaces des matériaux [1].

Ces résultats étaient réalisés sur la ligne "Kalypso" dans sa version 2.1. [2] et le code SRIM dans sa version 2008.04.

À cet effet, on Suivant toutes :

1. Les distributions de parcours des ions implantés.
2. Les pertes d'énergies électronique et nucléaire.
3. Les déplacements atomiques dans la cascade de collision.
4. $Y(E)$: l'évolution de Y à incidence normale.
5. $Y(\theta)$: l'évolution de $Y(\theta)$ à une énergie des ions incidents de 5 Kev.
6. Les dégâts créés à travers les couches superficielles de la cible.
7. La concentration des ions implantés dans le matériau cible.
8. Les distributions énergétique, et angulaire des atomes de cuivre pulvérisés.

Aussi, nous avons examiné l'influence des autres paramètres comme: le plan cristallographique de la cible, la masse des ions incidents: Xe, Kr et Ne, la température de la cible, ainsi que le potentiel interatomiques.

IV-2. Paramètres d'initialisation :

Les fichiers des données d'entrée "Spider" gère des bases de données, dans lequel en incluant et stockant les paramètres d'entrés; cette situation est illustrée sur la figure (IV.1).

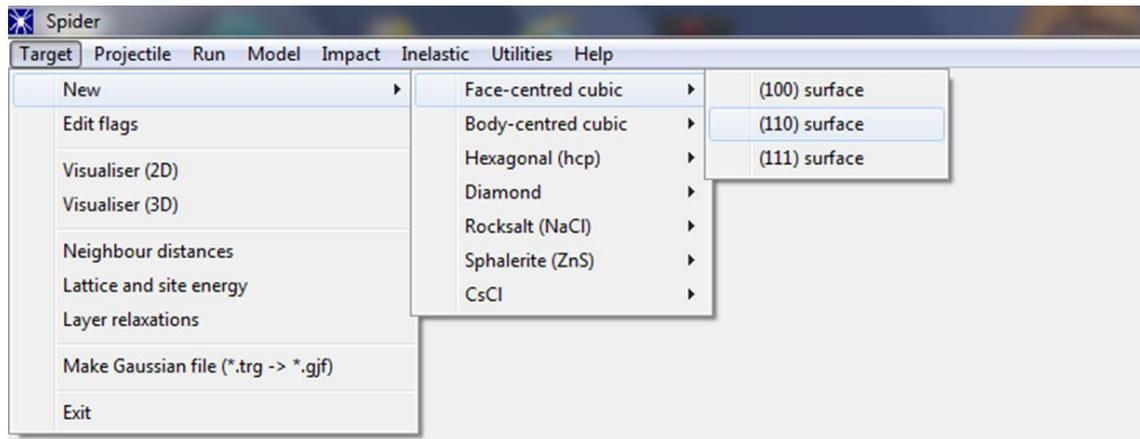


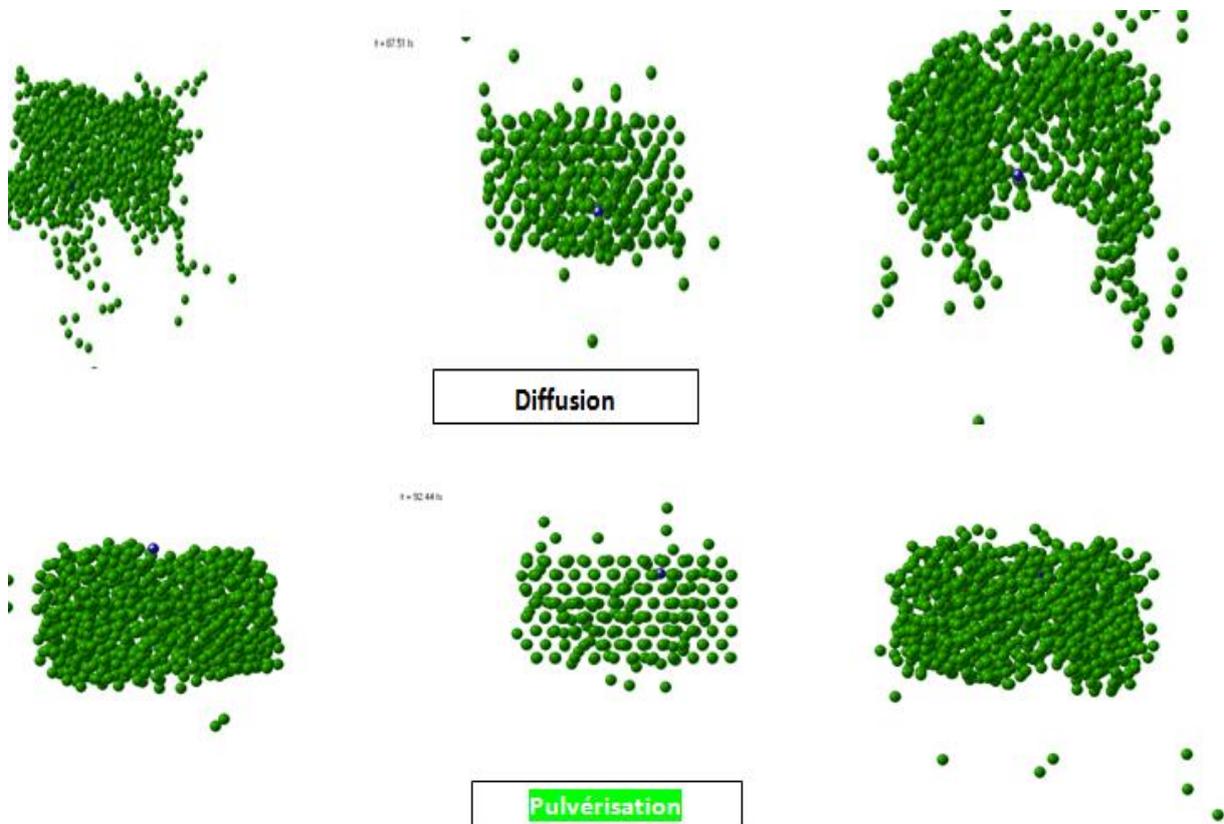
Figure IV.1: Stockage des fichiers.

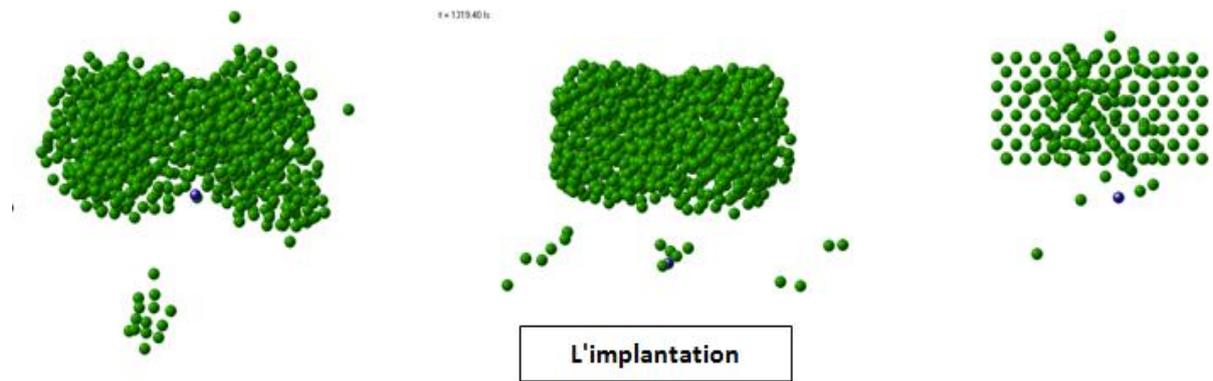
Le "Spider" permet de visualiser et de structurer ces données.

Notre méthode de calcul considère une cible de Cuivre constituée de 968 atomes, à une température ambiante (300 K). Ensuite, nous étudierons la variation de $Y(E=5 \text{ keV}, \theta=0^\circ)$ pour différentes valeurs de T .

Quelques vues de la cascade de collision par Kalypso :

Après la pénétration du projectile dans la cible de Cuivre, on remarque trois phénomènes fondamentaux figure (2) :





IV-3. La correspondance entre le rendement de pulvérisation et les différentes grandeurs :

IV-3-1. Le rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie d'incidence :

Les projectiles d'Ar approchent à impact normale en tenant des énergies rampant de 1 keV à 10keV. les objectif de Cu maintenue à $T=0$ k , est conduite selon le plan (111)

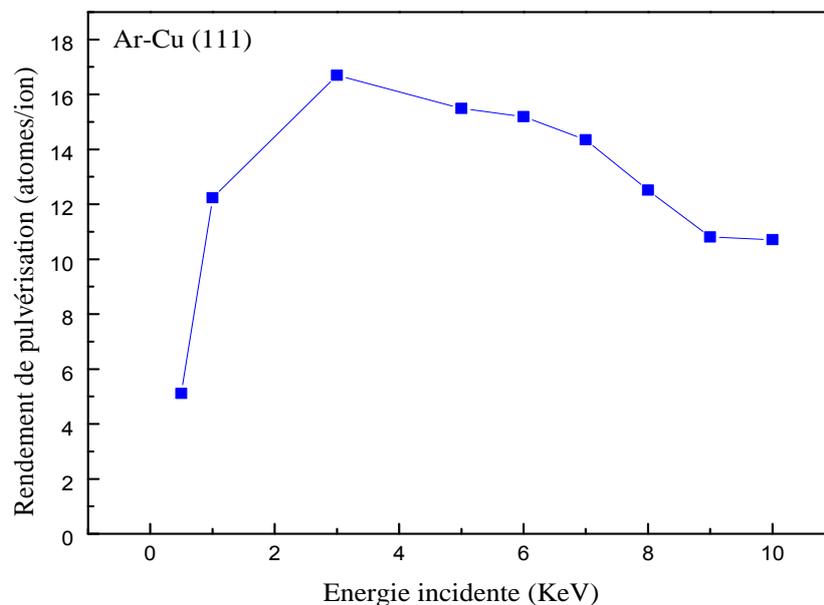


Figure IV-3 : Évolution du coefficient de pulvérisation de (Cu) en fonction de l'énergie incidente.

En fonction de l'énergie des ions impactant la cible, on peut remarquer que le rendement de pulvérisation passe par trois régions principales :

Entre 0 et 0.5 keV , les ions sont simplement rebond et retour à l'état d'atome gazeux, sans délaissement d'influence sur la surface ,parce qu'ils ne possèdent pas l'énergie suffisante pour rompre les liaisons du solide, ainsi que l'énergie qu'est insuffisante pour traversée un barrière de potentiel répulsive de la surface de la cible.

Dans cette région, le coefficient de la pulvérisation de (Cu) est nul, comme le montre dans la figure (IV-2).

Afin d'augmenter encore l'énergie, on remarque une deuxième région très importante où la plage de fonctionnement se situe pratiquement entre 0.5keV et 3keV. Dans cette gamme d'énergie, le phénomène de la pulvérisation devient conséquent et sa variation soit harmonique telle qu'elle croît graduellement avec l'énergie jusqu'à la valeur de 3keV. Toutefois, seuls les atomes situés proches de " la zone d'impact" sont sujet à la pulvérisation, et ça macroscopiquement due à l'expulsion d'un atome de la cible ayant subi de multiples collisions internes. Celle ci résulte de la collision entre l'ion Ar^+ et la cible (Cu). De surcroît, l'ionisation des atomes d'argon dans une zone proche et localisation de la cible de Cuivre. A ces énergies, la concentration d'atomes métalliques sera réduite. [3]

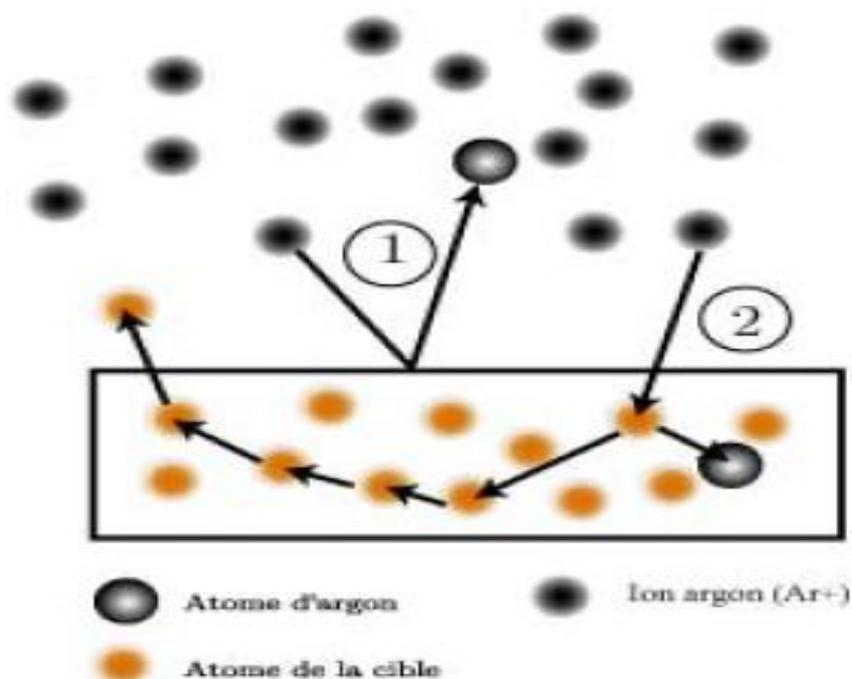


Figure IV-4: Principe de pulvérisation [4].

Pour des énergies supérieures au 3keV, les ions induisent lors de leur impact des cascades de collisions denses dans le volume de la cible [4]. Toutes les liaisons atomiques environnant l'impact sont défoncées. Cet intervalle qui ne concerne pas notre étude peut être traité de manière statistique.

De plus, à ces énergies, le phénomène d'implantation devient conséquent. Les ions très énergétiques pénètrent profondément sous la surface. Ils peuvent induire des modifications structurales du réseau cristallin mais sont peu efficaces pour l'éjection d'atomes.

Nos résultats de calculs confirment bien les études expérimentales réalisées sur le bombardement avec des ions [5,6]

IV-3-2. Le rendement de pulvérisation en fonction de l'angle d'incidence :

Maintenant si on fait varier l'angle d'incidence des particules chargés à deux valeurs énergétiques 2keV et 5keV, on constate dans la figure (IV-4) que les pénétrations être faibles à incidence rasante et varient respectivement entre 12,4 et 15,1 (atome/ ion) entre 2keV et 5keV jusqu'à 29° tel qu'elle augmente ensuite rapidement jusqu'à où il égale 27,8 (atome/ion) à incidence maximale $\theta_m=50^\circ$.

Au de là, le flux de pulvérisation chute doucement jusqu'à une incidence oblique de 80° où les ions sont réfléchies sans transfert de quantité de mouvement à la cible, où le rendement de pulvérisation s'annule totalement à 90° [7], ce qui implique que la cascade de collision se rapproche de plus en plus de la surface si l'angle d'incidence augmente[8].

De façon générale, on peut voir que 65% des atomes de Cuivre érodés à une angle d'incidence inférieure de 50° . Donc, on comprend aisément que le coefficient de pulvérisation $Y(\theta^\circ)$ dépend fortement de la direction étudiée, et plus l'incidence est rasante plus la déviation minimale pour que le collision acquière un mouvement vers l'extérieur de la cible.

De plus où l'angle d'incidence augmentant, la probabilité d'interaction (chocs) avec la cible s'élève. Ces interactions lui transfèrent toujours une quantité de mouvement vers l'extérieur. Ainsi, la probabilité pour qu'une collision acquière une énergie cinétique normale à la cible supérieure à l'énergie de surface croit avec l'angle d'incidence [9].

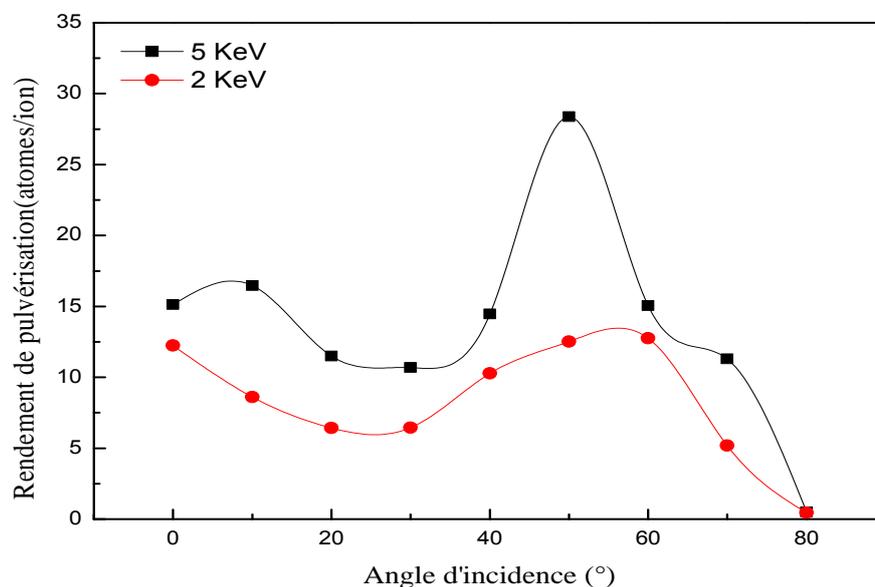


Figure IV-5 : Variation de rendement de pulvérisation en fonction de l'angle incidence pour le plan (111).

IV-3-3. Le rendement de pulvérisation en fonction des plans Cristallographiques :

La figure type de variation du rendement de pulvérisation en fonction des plans cristallographiques accessibles par cette simulation est représentée ci-dessous.

Comme le résultat est similaire, on observe une superposition entre deux courbes correspondant aux orientations (111) et (100) avec laquelle où l'intensité est moins importante quand on augmente l'énergie, la pression totale et la température de dépôt. En générale, dans les matériaux monoatomique, et lorsqu'il s'agit d'un self bombardement, les atomes pulvérisés ont tendance à être éjectés dans des directions de taux de compacité élevés [6].

On observe également une troisième courbe plus intense qui est autour de 3,8 et correspond au plan (110), ce qui suggère le phénomène de canalisation [10].

A vu comparative, on constate que $Y(110) > Y(100) > Y(111)$ due à l'existence de différence entre les chaînes d'atome, tel qu'on a un impact très fort au plan(111) qui conduit a la rétrogradation des atomes cible et donc le $Y(111) \ll$. Le même raisonnement pour le plan (100) où on à une chaîne linéaire .

Par contre, l'atome dans le plan(110) qui reçoit l'énergie la transmet à ses plus proches voisins. Ce seront donc ces plus proches voisins qui seront concernés par les échanges énergétiques, donc on n'a pas le phénomène d'accumulation, mais on a une pulvérisation.

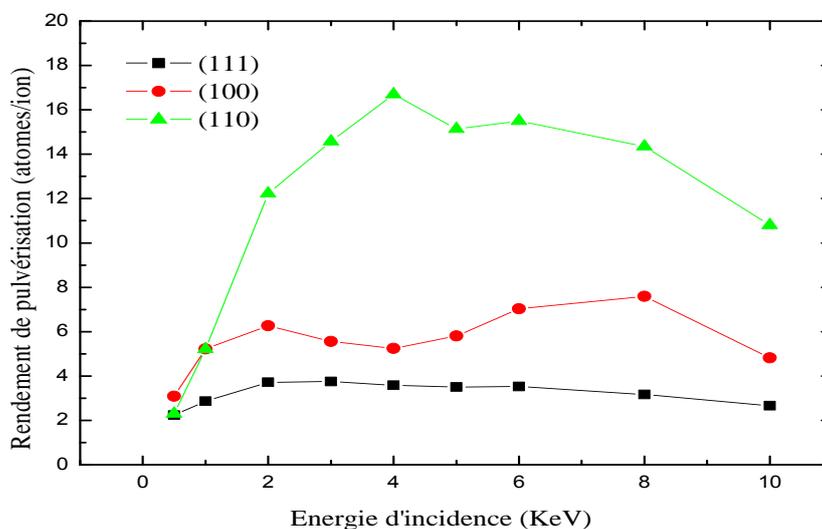


Figure IV-6 : Rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie incidente

Pour les trois plans Cristallographiques du Cuivre.

IV-3-4. Le rendement de pulvérisation en fonction de la température:

La possibilité de dépôt d'un matériau dépend de son aptitude à s'évaporer pour une température donnée. Les plus part des matériaux (Al, Pb, Cr...) peuvent être évaporés.

La contribution de température dans le processus de la pulvérisation ionique est presque négligeable. [11], tel que ce dernier qui est forcément lié à la quantité de mouvement cédée au moment du choc, ainsi que distingué par le mode de création de particules est décrit dans

La figure suit décrit la variation de $Y(E=5 \text{ keV}, \theta=0^\circ)$ pour différentes valeurs de T .

A partir de ce graphe, on remarque clairement une croissance de nos films de Cuivre monocristallins à l'intervalle $[0, 600 \text{ K}]$ tel que lorsque les ions d'argon diffusés créent beaucoup de désordre (contraction, et l'agglomération) de création de défauts et des vibrations cristallines (phonons) aussi, un ensemble de déplacement atomiques (défauts+remplacement) et des échanges thermiques (dilatation), ce qui conduit à l'ionisation et l'accélération de ces atomes ionisés vers l'extérieur. Dans ce cas, la pulvérisation est probable.

Après tous ces effets, les atomes de Cuivre sont ralentis et le réseau sera caractérisé par un phénomène de "relaxation", comme le montre dans la figure où nous observons nettement une stabilité et une constance d' $Y(T)$.

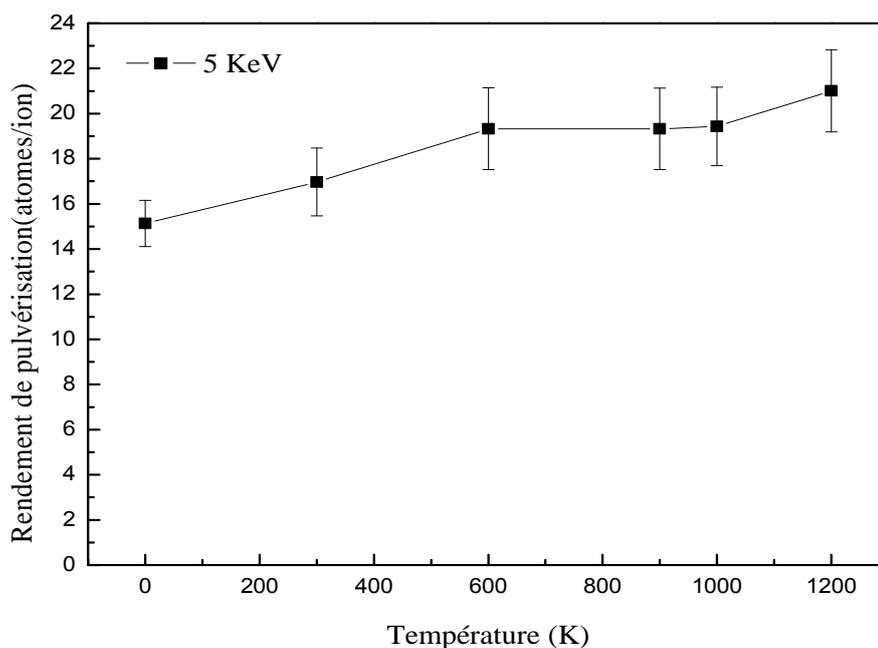


Figure IV-7 : Variation du rendement de pulvérisation en fonction de température.

IV-3-5. Le rendement de pulvérisation en fonction de la masse:

Comme nous l'avons cité dans le deuxième chapitre, les ions énergétiques pénétrant dans la matière perdent leurs énergies essentiellement par des chocs inélastiques qui conduisent à l'excitation ou l'ionisation du milieu traversé, et par les chocs élastiques avec les noyaux qui produisent des déplacements atomiques (création des défauts) et des phonons (vibrations cristallins) [8]. c'est l'effet de l'énergie; mais si on fait une étude caractéristique sur la masse de ces ions, quel est l'influence donc de cette paramètre à l'intensité d'ionisation $Y(M$

ion)?. L'allure qui suit donne une analyse quantitative des différents types des ions incidents (Ar : argon, Ne: néon, Xe: xéon et Kr: krypton) sur le monocristal(Cu) variant à deux valeurs d'énergie 2keV et 5keV.

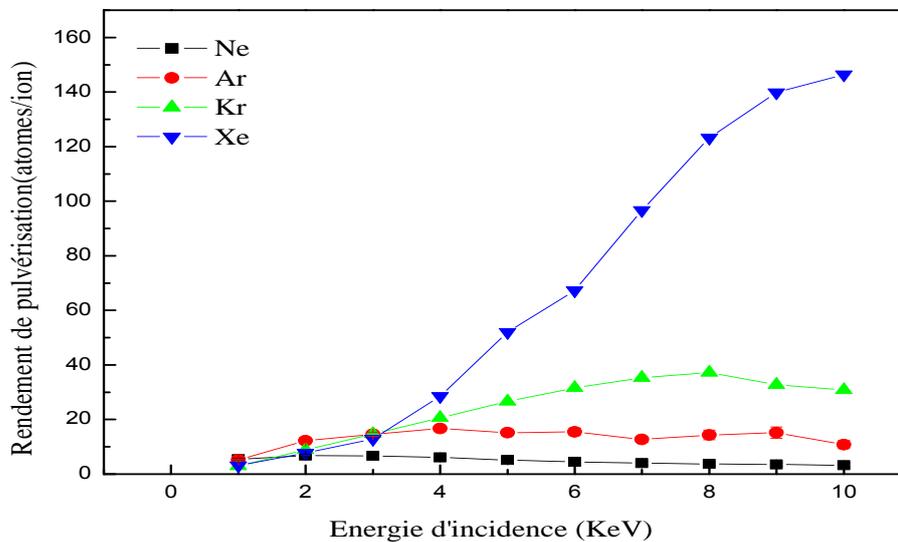


Figure IV-8: Variation du rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie incidente pour les différentes masses.

Les pénétrations dans(Cu) Sont relativement faibles et croient avec l'énergie incidente. Ainsi lors de la pulvérisation, les atomes sont éjectés de manière physique périodique sous l'action de diverses grandeurs (masse atomique, densité volumique (rayon) et le numéro atomique Z). Si on fait le bilan des différents phénomènes :

- Dans la cascade de collision, l'atome cible crée d'avantages de phonons et de défauts que les ions incidents. [12, 13, 14]
- La probabilité d'interaction de Kr et Xe est grand que les deux autres éléments Ar et Ne parce que la section efficace de Kr et Xe est plus grand.

Donc concernant les éléments de Xe et Kr qui on peut considérer comme des éléments "lourd" de masses respectivement (131,34 amu) et (83,80 amu), on remarque que les atomes pulvérisés présentent une distribution plus large que ceux produit par les autres éléments (Ar (39,948 amu), Ne (20,379 amu) qui sont également légers.

Alors, on conclus que le rendement de pulvérisation augmente lorsque la masse de projectile augmente.[15]

IV-3-6. Le rendement de pulvérisation en fonction de potentiel d'interaction :

Pour avoir l'influence du potentiel d'interaction sur le taux de pulvérisation, nous avons repris le même travail de la section IV.3.2, mais en changeant le potentiel V_{ZBL} par le potentiel $V_{MOLIERE}$, nous obtenons les résultats ci-dessous :

Pour un angle d'incidence inférieur à 30° le calcul du rendement donne à peu près le même résultat pourtant, au delà de 30° le potentiel ZBL attribue un rendement plus important que MOLIER. [16, 17, 18]

Donc avec l'allure globale qui reste semblable, $V_{MOLIERE}$ sous-estime le rendement de pulvérisation par rapport à V_{ZBL} .

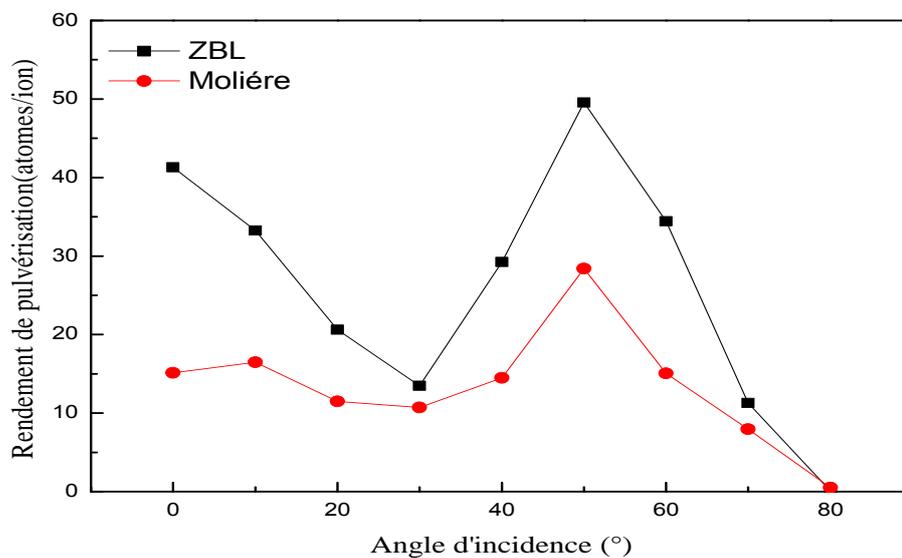


Figure IV-9 : Influence du potentiel d'interaction sur le rendement de pulvérisation.

IV-3-7. Le rendement de pulvérisation en fonction de nombre d'impact :

La variation du nombre de projectile sur le rendement de pulvérisation est apparait une courbe légèrement linéaire (ions d'argon, accélérées avec une énergie de 5keV). On remarque que lorsque ce nombre s'élève, le rendement de pulvérisation diminue légèrement [19], mais reste assez stable dans les limites des barres d'erreurs.

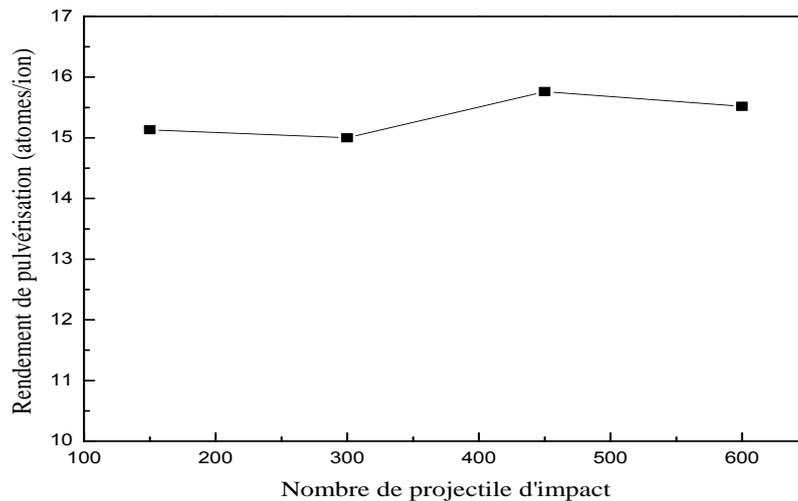


Figure IV-10 : Variation de taux de pulvérisation en fonction du nombre d'impact.

IV-4. La distribution énergétique et angulaire :

Après avoir les résultats de l'étude de l'influence de ces différentes grandeurs sur le phénomène de pulvérisation ionique, on a aussi étudié également l'énergie cinétique et la direction de flux des atomes pulvérisés d'une cible de Cu, sous l'effet d'un bombardement ionique d'argon à incidence normale. Ces atomes pulvérisés sont émis spontanément par l'argon, avec une énergie de l'ordre de quelques 10 eV. Cette approche de calcul nous permet de calculer les distributions énergétiques et les distributions angulaires voir figure (4.10 et 11).

IV-4-1. Distribution énergétique :

La simulation se fait pour les trois plans cristallographiques(100), (110) et (111), ainsi que pour différentes valeurs de l'énergie cinétique d'Ar choisie arbitrairement.

On constate clairement que les trois courbes ont une même structure où on a une distribution conique dans l'intervalle [0,10] eV.

Typiquement, des atomes de cuivre pulvérisés sous 0.5 keV d'Ar⁺ présentent une énergie moyenne lors de leurs éjection de l'ordre de 10eV,[20],avec un maximum de l'énergie d'impact des particules de Cuivre pulvérisées situe dans la gamme de 2 à 3eV [21];une décroissance a partir de 10eV jusqu'à 30eV et se réalise finalement par une droite infinitésimal tel que l'histoire de la particule se termine lorsque son énergie est inférieure à une valeur spécifiée au préalable ou bien lorsque sa position située hors de la cible. [22]

On note ici que le maximum de ces courbes est lié globalement à la cible, tel que sa potentialité (l'énergie de liaison surfacique) joue un rôle de filtrer les conséquences d'un cascade de collision Donc, tous les atomes qui ont une énergie supérieur à l'énergie de surface

de Cuivre qui égal à 2,4eV [22] avaient la chance de ressortir hors la cible sous forme un "adotome" et selon le phénomène de " l'adsorption".

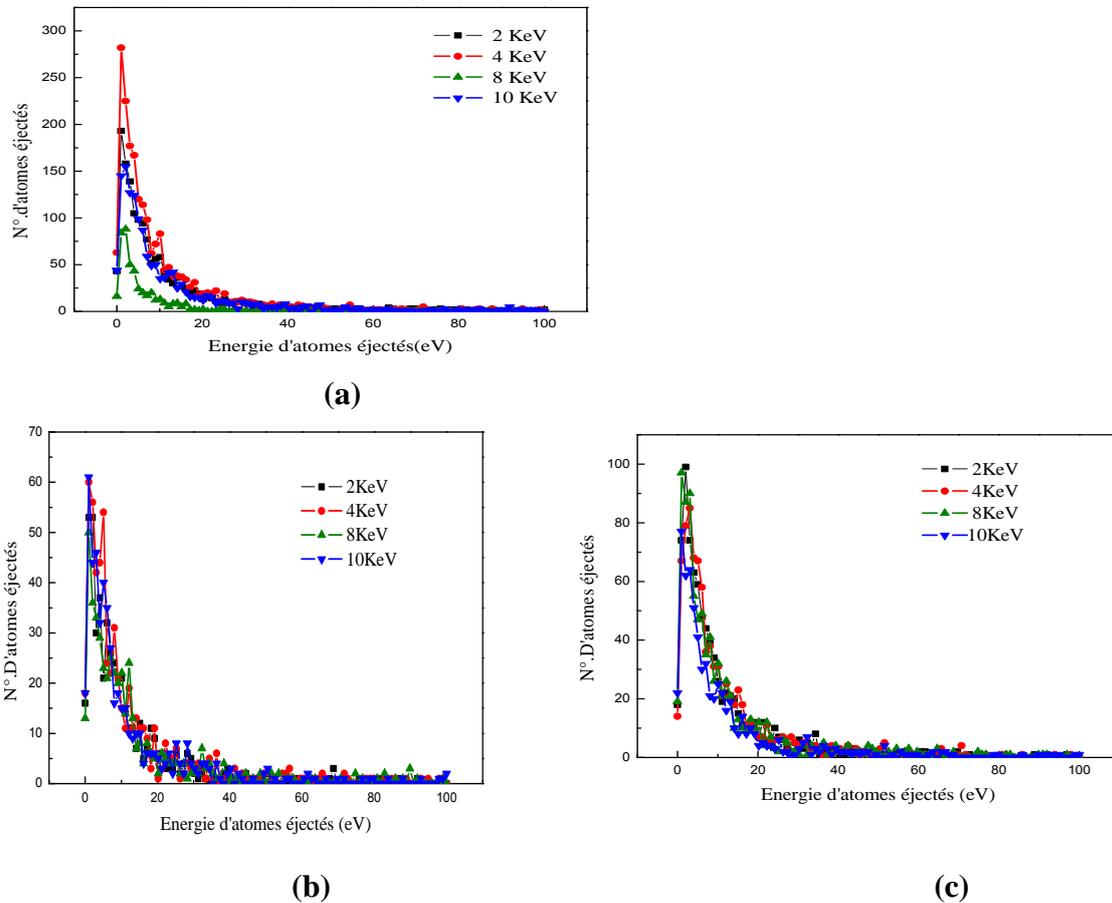


Figure IV-11 : Distribution énergétique des atomes pulvérisés de Cuivre à différents plans
(a) Plan (111), (b) Plan (110), (c) Plan (100).

IV-4-2. Distribution angulaire :

Lors de la pulvérisation d'une cible, les atomes sont éjectés de manière physique sous l'impact d'ions dans toutes les directions. La figure (IV.12) est représentée le nombre d'atomes pulvérisés en fonction de l'angle d'émission pour quatre valeurs énergétiques.

Les résultats de ces simulations indiquent que la probabilité de trouver des atomes pulvérisés est moins importante lorsque la déviation hors la cible est minimal, et la distribution angulaire sera augmentée de façon linéaire avec la pression d'argon [23], la nature structural de la cible et les liaisons chimiques.

Le maximum de ces atomes pulvérisés est atteint pour des angles polaires d'émission compris entre 40° et 50° , l'allure de la distribution angulaire reste quasiment identique pour les deux plans(100) et (111) et plus perturbé pour n'importe quelle valeur d'énergie incident.

Pour le plan(110), l'allure que montre figure IV.12. (C) est différente, l'anisotropie du matériau (de la cible) en est peut être responsable.

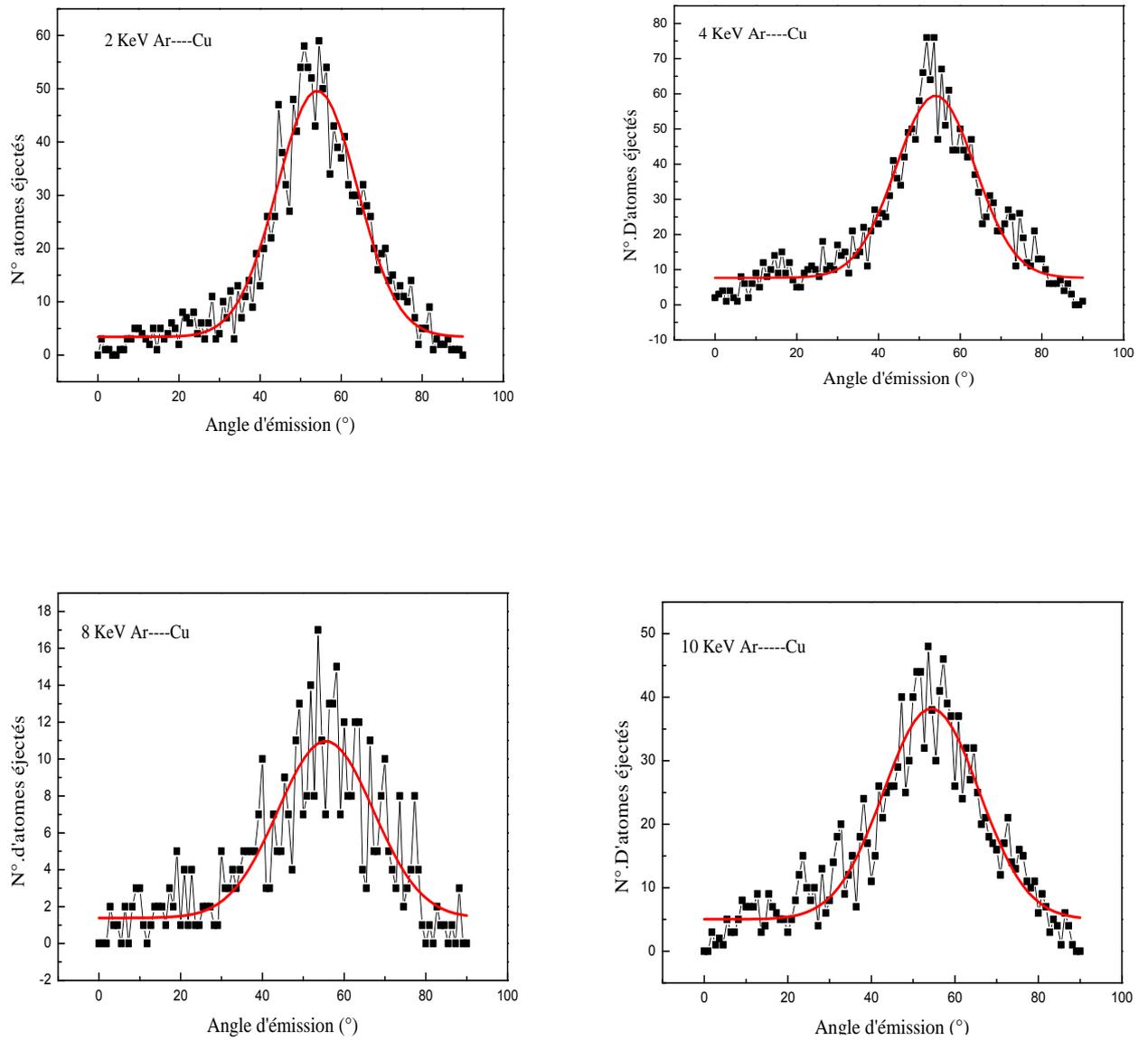


Figure IV-12 : Distribution angulaire des atomes pulvérisée de Cuivre sur le plan (111).

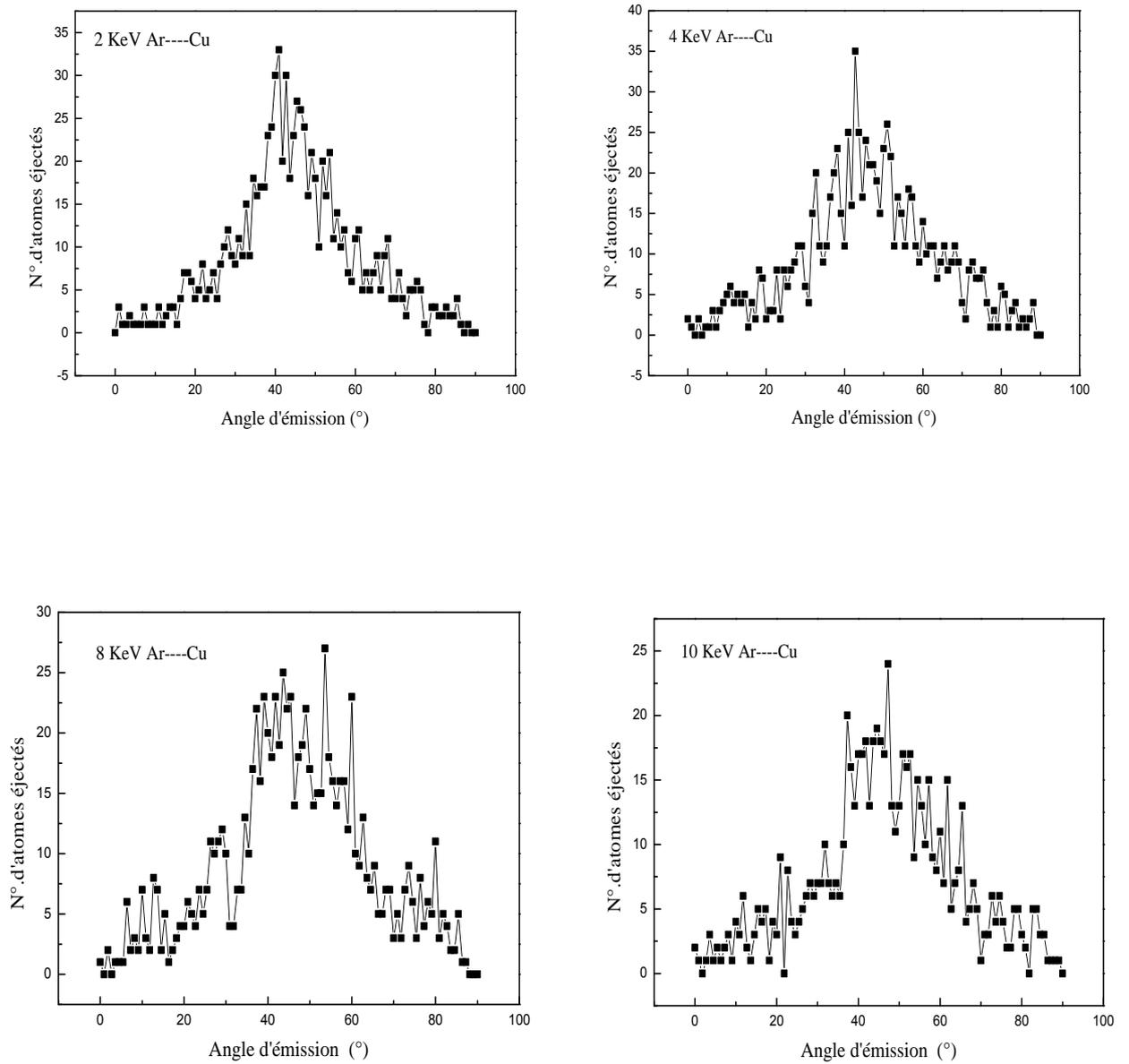


Figure IV-13 : Distribution angulaire des atomes pulvérisée de Cuivre sue le Plan (100).

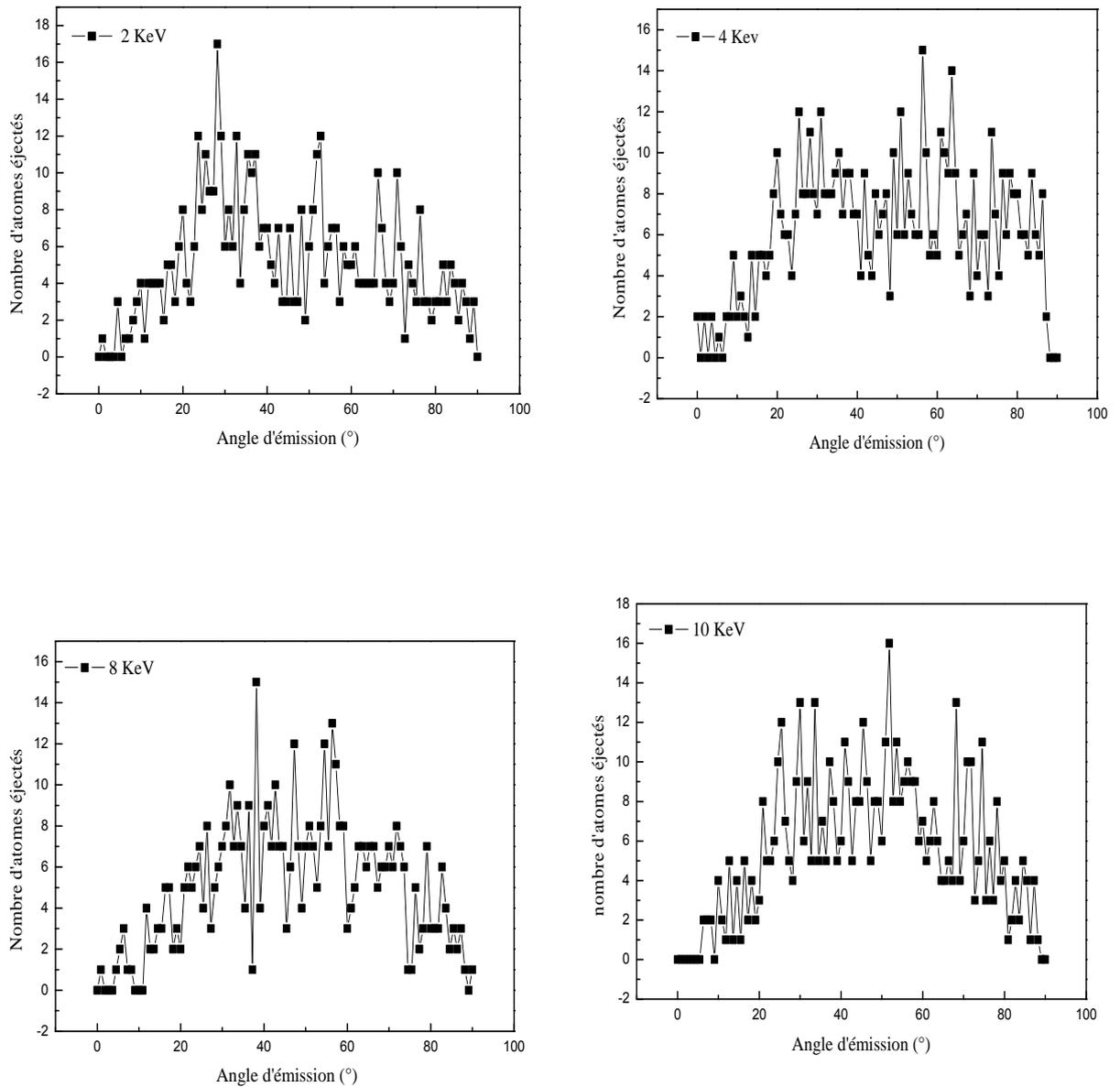


Figure IV-14 : Distribution angulaire des atomes pulvérisée de Cuivre sur le Plan (110).

IV.5.Résultats et discussions par le code SRIM:

Cette deuxième partie regroupe tous les résultats concernant le bombardement par les noyaux d'Argon. Dans notre étude nous avons variés l'énergie du l'Argon de 1 Kev à 10 Kev pour mettre en évidence la variation des différents mécanismes engendrés par la cascade de collision, où nous avons choisi l'implantation des projectiles avec une énergie de l'ordre de 3 keV et au nombre égal à 10^4 ions pour comparait notre résultats de Kalypso . Par la suite on va étudier :

- Les distributions des parcours.
- Le bilan des pertes d'énergie.

IV.5.1.Distribution des parcours :

Lorsque les noyaux de l'Argon pénètrent dans la cible à des énergies de 03 keV, ils se distribuent sous un profil qui ressemble à une gaussienne, mais avec quatre moments au lieu de deux moments de distribution pour la gaussienne voir figures IV-14. On constate que les pénétrations des ions de l'Argon se distribuent dans la zone superficielle de l'ordre de $2R_p = 54 \text{ \AA}$. La dispersion des parcours est légèrement faible que le parcours moyenne qui est égale a 16 \AA .

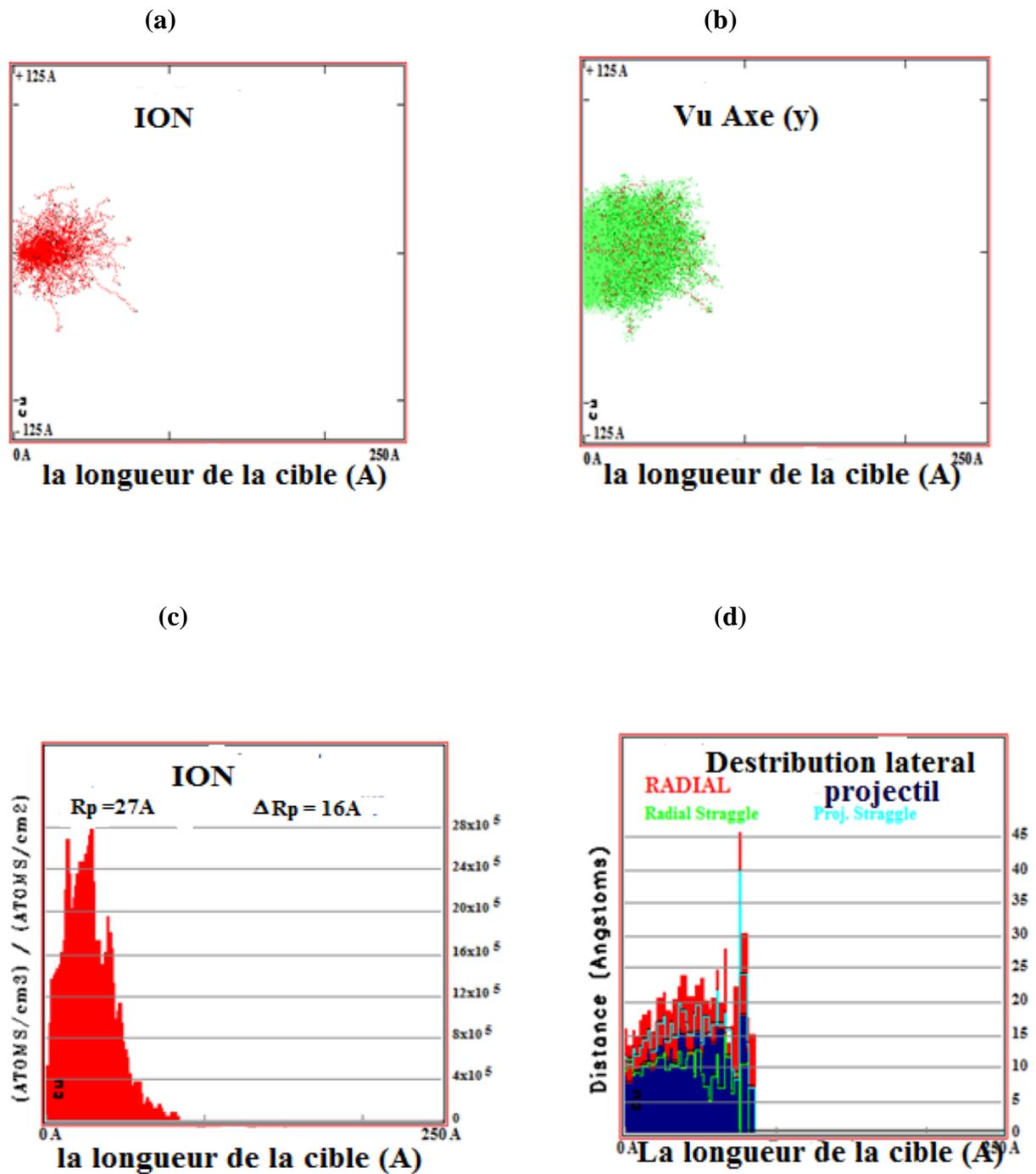


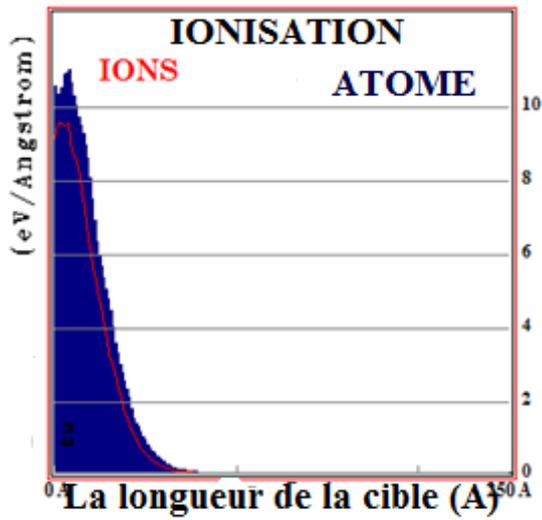
Figure IV-15 : Distribution en profondeur des ions d'argon pour une énergie de 3MeV (a : parcours des ions, b : cascade de collision, c : distribution des parcours, d : distribution latéral)

IV.5.2. Perte d'énergie et création de désordre

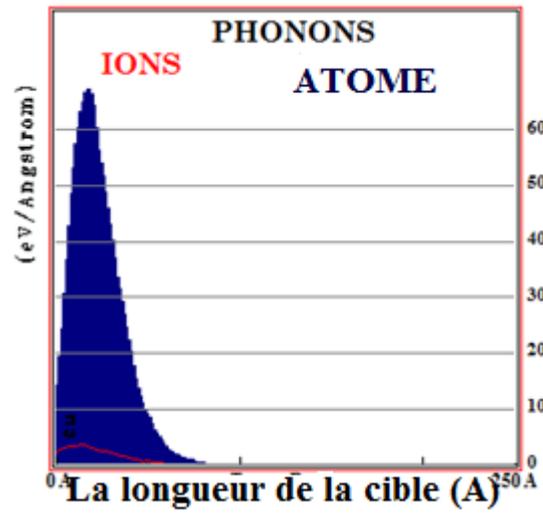
Les énergies d'implantation des ions utilisées dans notre étude est 3 KeV, nous situe dans le domaine des pertes d'énergies L.S.S (Lindhard, Scharff et Schiott) [24], ou presque la totalité des pertes d'énergie est nucléaire tableau 1. Ce qui donne beaucoup de création de défauts et de phonons, donc beaucoup de déplacement atomique. Si on fait le bilan des pertes d'énergies (tableau 1), on constate que l'énergie dissipée sous forme d'ionisation inférieur à l'énergie dissipée par collision nucléaire (sous forme de défauts et de phonons) voir figure IV-15. maintenant si on fait le bilan de pertes d'énergies électroniques créés par l'ensemble des ions dans la cascade, la figure IV-16 nous montre que les atomes de reculs (atomes cibles) contribuent beaucoup plus à la perte d'énergie électronique et nucléaire que les ions d'argon.

L'énergie dissipée (KeV) sous forme :					
d'ionisation		des Défauts		des Phonons	
Ar	Cu	Ar	Cu	Ar	Cu
9.24	10.51	1.11	6.76	3.99	68.39

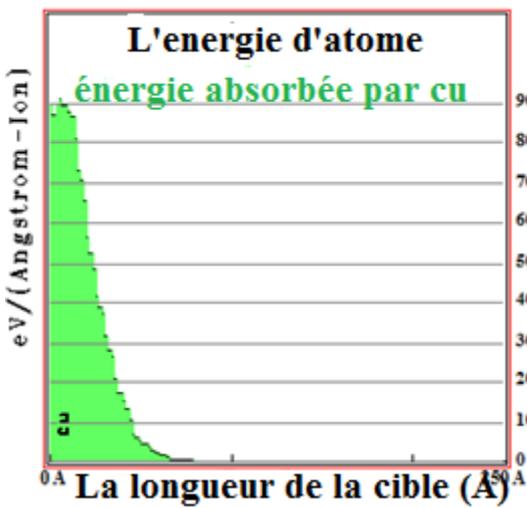
Tableau VI-1 : perte d'énergie en fonction l'énergie d'ionisation, les défauts, les phonons.



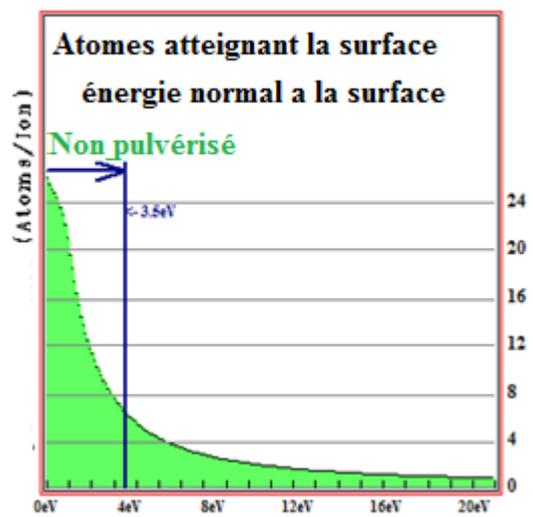
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure IV-16 : Perte d'énergie et création de désordre (a : ionisation, b : phonon, c : l'énergie des défauts, d : pulvérisation)

(c)

(d)

Reference:

- [1] R. Behrisch (Ed.), *Sputtering by Particle Bombardment*, Vol. I, Springer, Heidelberg, 1981.
- [2]. M.A. Karolewski, *Nucl. Instr. and Meth. B* 230 (2005) 402.
- [3] Depla, D., J. Haemers, and R. De Gryse, Discharge voltage measurements during reactive sputtering of oxides. *Thin Solid Films*, 2006. 515(2): p. 468-471.
- [4] A. O. Florio, R. A. Baragiola, M. M. Jakas, E. V. Alonso, and J. Ferron. 'Noble-gas ion sputtering yield of gold and copper: dependence on the energy and angle of incidence of the projectiles'. *Phys. Review B*. Vol 35, N5, (1987).
- [5] I. GUESMI Thèse doctorat Dépôt de couches minces de cuivre sur substrats polymère de formes complexes par pulvérisation cathodique magnétron avec ionisation de la vapeur 2012 L'Université PARIS SUD – XI.
- [6] M. Rabah Mémoire magister Simulation numérique des observables de sputtering dans les collisions ion surface 2009 L'Université des Sciences et de la Technologie Mohamed Boudiaf –Oran.
- [7] Balanzat E., Bouffard., *Solid State Phenomena*, 31-32 (1993) 7.
- [8] H. LADJEL Mémoire magistère Modélisation de l'implantation ionique dans les matériaux Pérovskites (SrTiO_3 , CaTiO_3) par la Théorie de Transport 2005. Université des sciences et de la technologie d'Oran 'Mohamed Boudiaf'.
- [9] T. TONDU Thèse doctorat Étude de la pulvérisation ionique Applications aux effets de jet de la propulsion plasmique 2005 École Doctorale : Matériaux -Structures- Mécanique de l'ONERA -centre de Toulouse, page(101).
- [10] J.D. Kress, D.E. Hanson, A.F. Voter, C.L. Liu, D.G. Coronell 'Molecular dynamics simulation of Cu and Ar ion sputtering of Cu (111) surfaces' *J. Vac. Sci. techno* 17(5) sep/oct 1999.
- [11] C.E. Cariston, G.D. Magnuson, A. Comeaux, P. Mahadevan, *Phys. Rev* (138), 3A, 1965.
- [12] F. Z. Benkenfoud, S. Hiadsi, A. Zanoun, A. Belaidi. Study of Evolution the Thermal Phasat at Low Energy un Stainless Steel. *Phy. Chim. New* 17(2004) 85-92.
- [13] S. Hiadsi, L. Halles, A. Mokedem, A. Allali. Les mécanismes lies aux cascades de collisions dans le fer. *SIPE7 CUBechar* Oct 2004.
- [14] S. Hiadsi, G. Mar est, J. Tous set, p. Guiraldenq, Nguyen Du. Implantation ionique d'azote en surface dans des rubans métalliques amorphe types Fe-CR-P-C en vue

- d'améliorer leurs résistances à l'usure. 12eme Congrès Mondial des traitements de surface octobre 1988.
- [15] D. Rosenberg, G. K. Wehner, J. Appl. Phy. Vol 33.N°5 (1961).
- [16] M.H. Shapiro, Ping Lu 'the influence of the ion-atom potential on molecular dynamics simulations of sputtering', Nucl. Instr .Meth, B 215 (2004) 326–336.
- [17] M.A. Karolewski. 'Repulsive interatomic potentials for noble gas bombardment of Cu and Ni' Nucl. Instr .Meth, B 243 (2006) 43–50
- [18] M.A. Karolewski, 'Repulsive potentials for low energy projectiles incident on copper surfaces' Nucl. Instr .Meth, B 256(2007) 354–358.
- [19] M.A. Karolewski, 'Classical dynamics simulation of the fluence dependence of sputtering properties for the 2 keV Cu-Cu (1 00) system', Nucl. Instr. .Meth, B 225 (2004) 217–230.
- [20]Ball, L.T., et al., AN INTERFEROMETRIC INVESTIGATION OF THE THERMALIZATION OF COPPER ATOMS IN A MAGNETRON SPUTTERING DISCHARGE. Journal of Applied Physics, 1986. 59(3): p. 720-724.
- [21] T. Ono, Y. Aoki, T. Kawamura, T. Kenmotsu, Y. Yamamura, 'An extended formula for the energy spectrum of sputtered atoms from a material irradiated by light ions', Jour. Nucl. Mater. 337–339 (2005) 975–979.
- [22]R.BAGHDAD Thèse doctorat Optimisation des propriétés structurales et optoélectroniques du silicium nanocristallin déposé par pulvérisation cathodique radiofréquence assistée d'un magnétron en vue de son utilisation pour la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire 2007 L'Université d'Oran ES-SENIA.
- [23]V.I. Shulga, 'Angular distribution of atoms sputtered from amorphous and polycrystalline targets', Nucl. Instr and Meth B 164±165 (2000) 733-747.
- [24] Lind hard J., Scharff M. and Shiott H. E., Range concepts and heavy ion ranges., Mat. Phys. Medd, 33 (1963), 14

CONCLUSION

CONCLUSION GÉNÉRALE

Le travail effectué dans le cadre de ce mémoire de master, consiste à mettre au point un procédé d'élaboration par voie physique largement utilisé pour les applications du dépôt des couches minces (LE SPUTTERING) présentant un intérêt certain pour de nombreux secteurs industriels qui demandent une qualité élevée des couches. Ce travail concrétisé par le présent manuscrit à été rendu possible grâce aux études du processus d'interactions ION-CIBLE et à l'aide des deux méthodes de simulations numériques connue, la dynamique moléculaire DM et les collisions binaire BCA.

Dans un première temps, l'interaction entre un ion incident et une cible à été détaillé par une présentation des différentes caractéristiques de la DM, afin de pouvoir décrire les cascades de collisions par la BCA.

Nous avons étudié les effets de l'implantation ionique dans les matériaux FCC par les ions d'Argon (3Kev).

En particulier, nous intéressons sur le cas du modèle kalypso et sur ces paramètres d'entrés .le développement de la technique de la pulvérisation ionique , nous à permis d'évaluer le rendement de pulvérisation , tel qu'on a constaté que ces les paramètres : énergie , l'angle d'incidence , le potentiel d'interaction , les plans cristallographique et la masse des projectiles sont luis responsable a la qualité et le rendement , ainsi suivre le flux des espèces pulvérisés.

On a constaté que le projectile se distribuent en surface et causent beaucoup d'événements sur la structure du matériau dans une zone superficielle d'épaisseur 54 Å. Nous avons mis en évidence que les défauts « paires de Frenkel » et phonons « vibrations du réseau » sont prépondérant sous l'effet du bombardement de l'Argon, les remplacements ou les substitutions sont aussi considérables ce qui justifie leur intérêt par leur arrangement dans la surface du cuivre.

Les résultats obtenus sont probants du fait qu'ils soient en bon accord avec les données théoriques et ceux de la littérature, cependant plusieurs voies restent a explorer dans ce domaine.

L'implantation ionique c'est une méthode, efficace peu coûteuse et relativement simple par rapport aux autres méthodes utilisées pour l'élaboration des couches minces et surtout pour le traitement de la surface.

Il nous reste à confronter nos résultats aux données expérimentales ainsi que ceux déduits par d'autres codes essentiellement basés sur une approche de type dynamique moléculaire.

Résumé

L'implantation ionique est une des techniques les plus utilisées dans l'industrie pour le dépôt des couches minces, ce procédé consiste à arracher les atomes et implantés des ions à une surface métallique suite au bombardement de cette surface des ions à faible énergétiques, généralement créés par un plasma dans un gaz inerte.

La distribution des ions au cours de l'implantation est considéré comme un traitement de surface, dont nous parlerons tout le long de manuscrit permet d'obtenir des couches minces avec une bonne adhérence et des propriétés qui sont techniquement contrôlables par des paramètres des systèmes Ion-Cible, l'objectif de cette mémoire est la caractérisation fine du processus de pulvérisation et de déplacement des atomes dans une cible monocristalline.

Abstract

Ion implantation is one of the techniques most used in the industry for the deposition of thin layers, this process consists in tearing the atoms and implanting ions on a metal surface following the bombardment of this surface with low energy ions, generally created by a plasma in an inert gas.

The development of ions during implantation is considered as a surf-treatment, which we will talk about throughout the manuscript allows to obtain thin films with good adhesion and properties that are technically controllable by parameters of the systems ion -Target, the objective of this thesis is the fine characterization of the process of sputtering and displacement of atoms in a monocrystalline target.

ملخص

يعتبر زرع الأيونات من أكثر التقنيات المستخدمة في الصناعة لترسيب الطبقات الرقيقة و الملساء، وتتكون هذه العملية بنزع الذرات و تثبيت الأيونات على سطح معدني بعد قصف هذا السطح بالأيونات منخفضة الطاقة، الذي يتشكل عامة بواسطة بلازما في غاز خامل.

يعتبر توزيع الأيونات أثناء الزرع لمعالجة سطحية، والتي سنتحدث عنها في جميع محاور هذه المذكرة، حيث يسمح لنا بالحصول على أغشية رقيقة و ملساء ذات التصاق جيد وخصائص يمكن التحكم فيها تقنياً بواسطة الإعدادات الفيزيائية للثنائي ايون- سطح معدني .

لهدف من هذه الأطروحة هو الوصف الدقيق لعملية الإزاحة و التنقل للذرات سطح أحادي البلورية.