

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



Université 20 août 1955 - SKIKDA

Faculté des Sciences

Département des Sciences de la Matière

Thèse de Doctorat

Filière: Physique

Spécialité: Matière Condensée : Surfaces et Interfaces

Présentée par:

KADID Soraya

Thème : Simulation numérique dans le cadre du modèle de la pointe thermique du dommage induit par irradiation aux ions lourds rapides dans les semi-conducteurs.

Soutenue le: 22/06/2015

Devant le jury composé de :

A. OTMANI	Professeur, Université 20 Août 1955 - Skikda	Président
M. S. AIDA	Professeur, Université Mentouri – Constantine 1	Examineur
A. M. DJEKOUNE	Professeur, Université Badji Mokhtar -Annaba	Examineur
M. IZERROUKEN	Directeur de recherche, CRN, Draria	Examineur
D. OMEIRI	Professeur, Université 20 Août 1955 - Skikda	Examineur
A. MEFTAH	Professeur, Université 20 Août 1955 - Skikda	Directeur de thèse

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé, au Laboratoire de Recherche sur la Physico-chimie des Surfaces et Interfaces (LRPCSI) de la Faculté des Sciences de l'Université 20 août 1955-Skikda.

Je remercie mon Directeur de thèse Monsieur Ali MEFTAH Professeur à l'Université 20 août 1955-Skikda pour l'accueil qu'il m'a réservé, son aide, ses conseils et ses encouragements qu'il m'a prodigués tout le long de ce travail.

Mes remerciements s'adressent également au Professeur Amara OTMANI d'avoir accepté de présider le jury de soutenance de cette thèse.

Je tiens également à remercier Messieurs Mohamed Salah AIDA, Professeur à l'Université Mentouri-Constantine-1, Abdelmalik DJEKOUN, Professeur à l'Université Badji Mokhtar-Annaba, Mahmoud Izerrouken, Directeur de Recherche au Centre de Recherche Nucléaire de Draria et Djamel OMEIRI, Professeur à l'Université 20 août 1955-Skikda pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail en acceptant de participer au jury.

Je remercie Monsieur Marcel TOULEMONDE, Directeur de Recherche émérite au CNRS, CIMAP, Caen, France pour avoir mis à notre disposition le Code de Calcul « Inelastic Thermal Spike Model ».

J'exprime ma reconnaissance à mes parents et ma famille pour leurs encouragements et le soutien moral qu'ils m'ont apportés tout le long de mes études.

Table des matières

INTRODUCTION GENERALE	1
------------------------------	----------

CHAPITRE I : INTERACTION ION – MATIERE

1 – Introduction	3
2 - Le pouvoir d'arrêt	4
2.1 - Le pouvoir d'arrêt nucléaire	6
2.2 - Le pouvoir d'arrêt électronique	8
2.2.1 - Régime de hautes vitesses	8
2.2.2 - Régime de vitesses intermédiaires	10
2.2.3 - Régime de basses vitesses	11
2.3 - Comparaison entre le pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire	11
3 - Effets induits dans le matériau cible et les modèles d'endommagement	12
3.1 - Création de défauts par excitation électronique	13
3.1.1 - Effet de la vitesse du projectile sur la création des traces	13
3.2- Les modèles de création de défauts	15
3.2.1- Le modèle de l'explosion coulombienne	16
3.2.2- Le modèle de la pointe thermique	16
Références chapitre I	18

CHAPITRE II : RESULTATS ANTERIEURS SUR L'ENDOMMAGEMENT INDUIT PAR IRRADIATION DANS LES SEMI-CONDUCTEURS

1 - Introduction	19
2- Etat de l'art sur les études d'irradiation des semi-conducteurs étudiés	19
2.1 - Irradiation avec des ions lourds rapides	19
2.1.1 – Le phosphore d'indium (InP)	19
2.1.2 - L'antimoniure d'indium (InSb)	23
2.2 - Irradiation avec des agrégats C ₆₀	24
2.2.1 – Pourquoi utiliser des agrégats C ₆₀	24

2.2.2- Le germanium (Ge) et l'arséniure de gallium -----	25
2.2.2. a- Germanium -----	25
2.2.2. b- Arséniure de gallium -----	28
2.2.2.1- Mécanisme de recristallisation -----	30
2.3- Section efficace de création de dommage -----	32
Références chapitre II -----	36

CHAPITRE III : CALCUL THERMIQUE

1 - Introduction -----	39
2 - Etablissement des équations différentielles de la conduction de chaleur -----	39
3 - Application du modèle de la pointe thermique dans les semi-conducteurs cristallins -----	43
4- La version analytique du modèle de la pointe thermique -----	44
5- Le Comportement du gaz d'électrons à haute température -----	46
5.1 - La chaleur spécifique C_e -----	47
5.2 - La diffusivité thermique D_e -----	48
5.2.1 - Détermination de $\langle v \rangle$ -----	49
5.2.2 - Détermination de la section efficace σ -----	49
6- La répartition spatio-temporelle dépôt d'énergie $A(r, t)$ -----	51
6.1 - La dépendance en temps -----	52
6.1.1 - Détermination de t_0 -----	52
6.2 - Dépendance spatiale -----	53
6.2.1 - Développement analytique de la distribution radiale de la dose -----	53
7 - L'interaction électron- phonon -----	57
7.1- Détermination de l'élément de matrice de l'interaction électron- phonon -----	57
7.1.1- Détermination du vecteur déplacement du réseau -----	58
8 - La résolution numérique des deux équations différentielles -----	62
8.1 - La résolution mathématique -----	63
8.1.1- La méthode explicite -----	63
8.1.2 - La méthode implicite -----	64
Références chapitre III -----	70

CHAPITRE IV : RESULTATS ET INTERPRETATION

1 – Introduction	72
2 – Paramètres utilisés pour la solution numérique	73
3 – Résultats bruts : évolution des températures électronique $T_e(r, t)$ et atomique $T_a(r, t)$	73
4- Calcul des rayons et des seuils de création de traces à partir des résultats du modèle	79
4.1- Comparaison avec les résultats expérimentaux	79
4.1. a- Détermination de la constante de couplage électron-phonon g	79
4.1.1- L'antimoniure d'indium (InSb)	80
4.1.2- Le phosphore d'indium (InP)	81
4.1.3- L'arséniure de gallium (GaAs)	84
4.1.4- Le germanium	86
5- Effets des paramètres du modèle sur les résultats des calculs	88
5.1- Effet de la constante de couplage électron-phonon g	88
5.1.1- Influence de g sur les rayons de traces	88
5.1.2- Influence de g sur le pouvoir seuil de création de traces	90
5.1.3- Influence de g sur la température maximale le long de la trajectoire de l'ion	91
5.2- Effet de la distribution radiale de l'énergie déposée sur la formation des traces latentes	93
6- Effet de vitesse sur les rayons de traces latentes	94
7- Evolution de λ en fonction de l'énergie de la bande interdite E_g	95
Références chapitre IV	98
CONCLUSION GENERALE	100

Introduction générale

Introduction générale

Les semi-conducteurs sont depuis des décennies l'objet de très intenses recherches, en raison de leurs intérêts propres et sont appliqués dans de nombreux domaines (industrie électronique, énergie renouvelables, informatique,...). Dans le domaine de l'interaction ion-matière, l'objectif principal est d'étudier les effets induits par irradiation dans ces matériaux dans le régime du pouvoir d'arrêt électronique et plus particulièrement l'évolution des rayons de traces latentes en fonction du pouvoir d'arrêt électronique et les seuils d'apparition de traces.

Dans cette étude, nous avons appliqué le modèle de la pointe thermique (Inelastic Thermal Spike) aux résultats expérimentaux publiés, par divers équipes de recherches, concernant la création des traces latentes dans le régime du pouvoir d'arrêt électronique, dans les semi-conducteurs III-V, en particulier l'antimoniure d'indium (InSb), le phosphore d'indium (InP), l'arséniure de gallium (GaAs) classés par ordre de sensibilité décroissante, et le germanium (Ge). L'étude de la formation des traces n'est simple ni sur le plan théorique ni sur le plan expérimental, car les temps caractéristiques associés à la relaxation du système électronique et atomique sont très courts. Les arguments favorisant la pointe thermique se basent souvent sur la bonne reproduction de résultats expérimentaux par ce modèle.

La simulation par le modèle de la pointe thermique permet de déterminer l'évolution des rayons de traces en fonction du pouvoir d'arrêt électronique et les seuils d'apparition de traces. Le paramètre principal de ce modèle, la constante de couplage électron-phonon g , étant inconnu pour ces matériaux, nous avons alors testé son impertinence sur l'ensemble de nos calculs.

Cette thèse est structurée en quatre chapitres.

Dans le premier, nous rappelons les principaux aspects de l'interaction-ion matière ainsi que les paramètres importants à prendre en compte lors de cette étude.

Le second chapitre expose les résultats obtenus antérieurement sur la formation des traces latentes dans les semi-conducteurs irradiés par des ions lourds rapides et par des agrégats C₆₀.

Le troisième chapitre est consacré au développement du modèle de la pointe thermique dans les semi-conducteurs. Nous insistons, tout particulièrement, sur l'importance des hypothèses des calculs sur les résultats de la simulation.

Dans le dernier chapitre, nous comparons les résultats des calculs numériques aux résultats expérimentaux tirés de la littérature.

Chapitre I

Interaction ion - matière

1 - Introduction

Lors de l'irradiation d'un matériau par des particules chargées, ces dernières transfèrent progressivement leur énergie au milieu traversé par une succession d'interactions plus ou moins violentes, pouvant conduire à un endommagement de la cible. Une analyse complète de l'irradiation implique alors l'étude de l'ensemble des interactions particule-matière, considérant aussi bien les électrons et le noyau du projectile que ceux de la cible. Le ralentissement d'un ion dans la matière peut être décrit par deux processus quasi-indépendants.

- **Les collisions élastiques :**

L'ion incident transmet de façon élastique de l'énergie cinétique au noyau de l'atome cible. Au cours de ces collisions nucléaires, l'interaction est de type coulombien, plus ou moins écrantée. Ces transferts directs d'énergie conduisent à un endommagement pour tous les types de cible (isolants, métaux, supraconducteurs, semi-conducteurs, etc.....).

- **Les collisions inélastiques :**

L'ion incident peut interagir de façon inélastique avec les électrons de la cible (excitation électronique, ionisation des atomes au voisinage de la trajectoire des ions). Les défauts sont alors produits par conversion indirecte de l'énergie déposée dans les cibles. Ce processus d'endommagement est efficace essentiellement dans les isolants et dans certains semi-conducteurs dans le cas de fortes densités d'ionisation. Bien que ces deux processus de perte d'énergie existent toujours de façon simultanée, leur importance relative dépend de l'ion projectile, de son énergie et de la nature de la cible.

Les paramètres pertinents de l'interaction ion-matière permettant de définir une irradiation sont :

- Le pouvoir d'arrêt (dE/dx) qui dépend des sections efficaces des collisions élastiques et inélastiques.
- Le parcours de l'ion dans la matière (R_p) qui dépend de l'énergie de l'ion.
- La densité d'énergie déposée qui dépend de la vitesse de l'ion.
- Le flux (ϕ) qui représente le nombre de particules incidentes envoyées sur la cible, par unité de surface et par unité de temps (ions / $cm^2.s$).
- La fluence (F) qui correspond au nombre total de particules reçues par la cible par unité de surface (ions/ cm^2).

2 - Le pouvoir d'arrêt

Lors d'une interaction ion-matière, l'ion incident transmet son énergie à la cible tout au long de son passage dans le matériau. La quantité d'énergie perdue par l'ion lors de son ralentissement dans la matière constitue alors un paramètre caractéristique concernant aussi bien les processus d'endommagement de la cible que l'émission de particules de cette dernière induite par irradiation. Ce paramètre, appelé **pouvoir d'arrêt**, est caractéristique du milieu traversé et de la particule incidente (nature et énergie de l'ion projectile). Noté, $-\frac{dE}{dx}$, il peut être exprimé en keV. nm⁻¹ ou en MeV.g⁻¹.cm⁻². Selon le processus collisionnel considéré, interactions inélastiques ou élastiques, **un pouvoir d'arrêt électronique** et **un pouvoir d'arrêt nucléaire** sont définis. D'après J. Lindhard et collaborateurs [LIN 63a, LIN 63b], la perte d'énergie ou pouvoir d'arrêt par unité de longueur dans la cible est obtenue en sommant les pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique :

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{total} = \left. \frac{dE}{dx} \right|_n + \left. \frac{dE}{dx} \right|_e \quad (\text{I} - 1)$$

Le pouvoir d'arrêt total permet d'évaluer le parcours réel de l'ion projectile dans la matière. Au cours de l'interaction, la vitesse de l'ion incident diminue et, à l'arrêt, l'ion se trouve piégé dans la matière. Il est alors possible de déterminer le parcours réel R_r de l'ion le long de sa trajectoire dans la cible, donné par la relation :

$$R_r = \int_0^{E_1} - \left(\frac{dE}{dx} \right)^{-1} dE \quad (\text{I} - 2)$$

où E_1 représente l'énergie cinétique initiale de la particule à son entrée dans le milieu. Le parcours projeté R_p est défini comme étant la longueur du parcours R_r projeté sur la direction de l'ion incident (fig. I-1). Le paramètre, habituellement utilisé est le parcours projeté suivant la direction du faisceau incident : R_p . La figure I – 2 montre l'évolution du parcours projeté de divers ions dans une cible du phosphore d'indium en fonction de l'énergie du projectile.

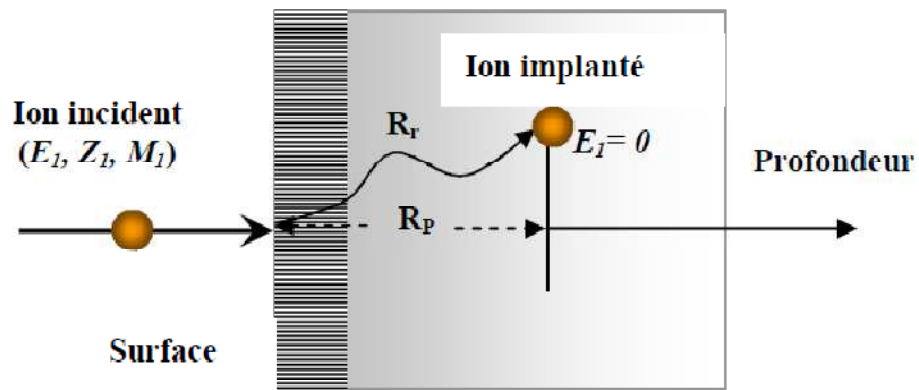


Figure I-1 : Parcours projeté R_p d'un ion dans un solide

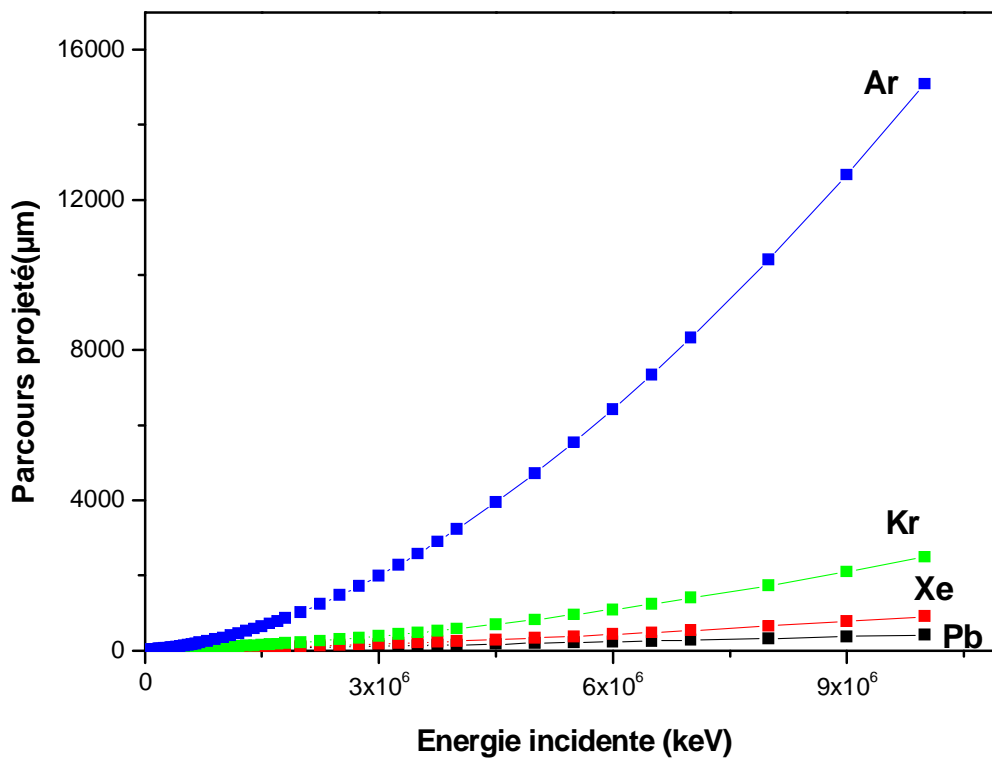


Figure I - 2: Evolution du parcours projeté de divers ions dans une cible de phosphore d'indium en fonction de l'énergie du projectile. Les courbes ont été déduites du code de calcul SRIM 2010 ^[BIE80].

2.1 - Le pouvoir d'arrêt nucléaire

Les interactions entre l'ion incident et les atomes de la cible sont traitées comme des chocs élastiques de deux particules, régis par les lois de la mécanique classique. L'interaction est purement coulombienne et les transferts d'énergie sont matérialisés par des déplacements d'atomes.

La probabilité pour que le projectile cède de l'énergie à la particule cible lors du processus collisionnel est représenté par la section efficace de collision σ . L'ion incident (d'énergie cinétique initiale E_1 , de numéro atomique Z_1 et de masse M_1), en déplaçant de son site l'atome cible (de numéro atomique Z_2 et de masse M_2), lui communique une certaine quantité d'énergie cinétique T . Il y a conservation de l'énergie cinétique totale (E_c) du système. L'ion incident est dévié de sa trajectoire initiale d'un angle φ (fig. I-3) et ralenti par la perte de l'énergie cinétique T . Pour transférer l'énergie T à l'atome de la cible, la section efficace de collision s'écrit dans ce cas ^[LEH 77].

$$\sigma(E_1, T) = \frac{\pi (Z_1 Z_2 e^2)^2 M_1}{T^2 E_1 M_2} \quad (\text{I - 3})$$

où $e^2 = 1.44 \times 10^{-7} \text{ eV.cm}^{-1}$

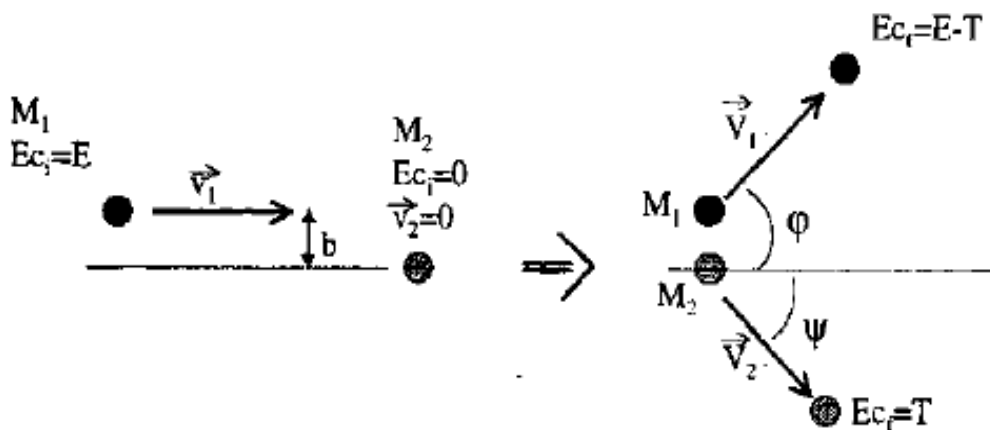


Figure I - 3 : Schéma d'une collision élastique (repère du laboratoire) entre un ion de masse M_1 , de vitesse V_1 et d'énergie cinétique $E_{ci} = E_1$ et un atome cible de masse M_2 et d'énergie cinétique nulle. Les angles φ et ψ sont respectivement les angles de déflexion de l'ion et de l'atome-cible, b le paramètre d'impact (distance d'approche entre les noyaux du projectile et de la cible). Les énergies E_{ci} et E_{cf} sont respectivement les énergies cinétiques initiale et finale des deux partenaires de collision.

L'ion incident perd l'énergie dE le long d'un parcours dx . Le pouvoir d'arrêt nucléaire s'écrit alors :

$$-\left.\frac{dE}{dx}\right|_n = N \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} T \sigma(E_1, T) dT \quad (\text{I - 4})$$

où N est le nombre d'atomes par unité de volume. T_{\min} correspond à une énergie minimale introduite afin d'éviter la divergence de l'intégrale et T_{\max} est l'énergie maximale fournie lors d'un choc frontal :

$$T_{\max} = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2} E_1 \quad (\text{I - 5})$$

L'expression du pouvoir d'arrêt nucléaire devient alors :

$$-\left.\frac{dE}{dx}\right|_n = 2\pi N \frac{M_1}{M_2} \frac{Z_1^2 Z_2^2}{E_1} e^4 \ln \frac{T_{\max}}{T_{\min}} \quad (\text{I - 6})$$

La figure I – 4 montre l'évolution du pouvoir d'arrêt nucléaire dans une cible de phosphore d'indium en fonction de l'énergie de la particule incidente de différents ions.

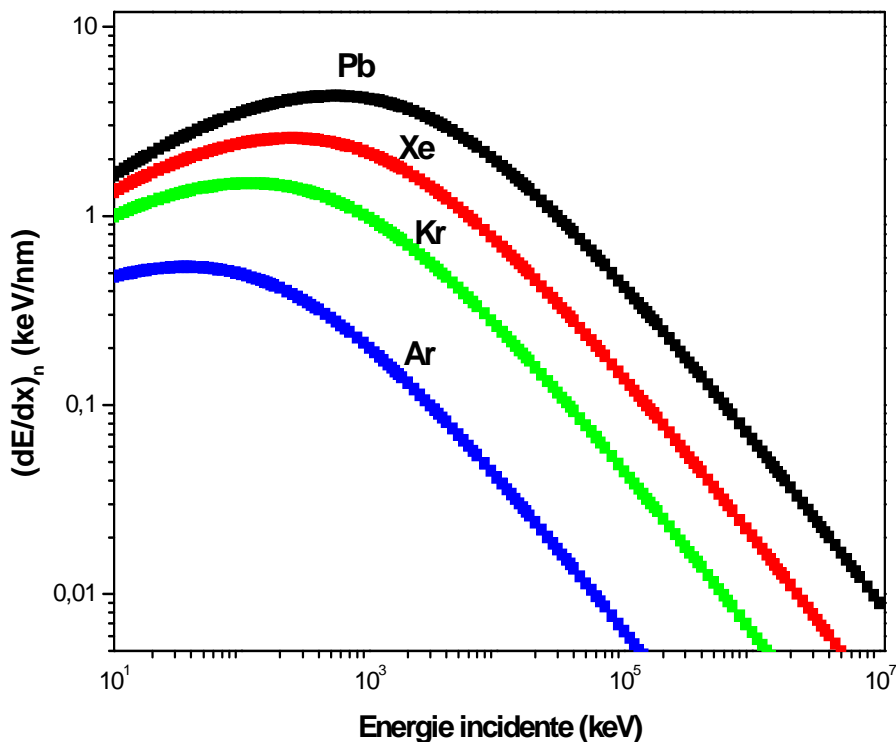


Figure I – 4 : Evolution du pouvoir d'arrêt nucléaire dans une cible du phosphore d'indium en fonction de l'énergie incidente de différents ions. Les courbes ont été déduites du code de calcul SRIM 2010^[BIE80].

2.2 - Le pouvoir d'arrêt électronique

La description des interactions inélastiques est plus complexe car elles ne peuvent plus être décrites comme des interactions individuelles entre deux corps. L'ion projectile interagit avec plusieurs électrons de la cible à la fois, liés aux noyaux. Dans le cas des ions que nous avons utilisés, les ions interagissent dans une première étape avec les électrons auxquels ils vont transférer une partie de leur énergie. Ces électrons (appelés électrons delta) vont transporter, principalement radialement, l'énergie qui leur a été transmise par l'atome incident à des distances d'environ $1 \mu\text{m}$ ^[GER 93]. Les ions qui restent tout au long de la trajectoire d'un ion incident sont excités et ionisés.

Trois domaines de vitesses sont à distinguer pour évaluer la perte d'énergie électronique et sont délimités par rapport à la quantité $Z_1^{2/3}V_0$ où V_0 est la vitesse de Bohr ($V_0 = 2.2 \times 10^6 \text{ m/s}$ et Z_1 le numéro atomique de l'ion incident. En considérant V_1 la vitesse du projectile, on définit :

- (a) Le régime de hautes vitesses lorsque $V_1 \gg Z_1^{2/3}V_0$
- (b) Le régime de vitesses intermédiaires lorsque $V_1 \approx Z_1^{2/3}V_0$
- (c) Le régime de basses vitesses lorsque $V_1 \ll Z_1^{2/3}V_0$

2.2.1 - Régime de hautes vitesses $V_1 \gg Z_1^{2/3}V_0$

Dans ce cas, l'ion est complètement épluché de ses électrons et peut être considéré comme un ion de charge ponctuelle Z_1e . L'expression, utilisée dans ce cas, est la formule de Bethe ^[BET33] :

$$-\frac{dE}{dx}\Big|_e = \frac{4\pi e^4 (Z_1)^2 NZ_2}{m_e v^2_1} \ln\left(\frac{2m_e v^2_1}{I}\right) \quad (\text{I - 7})$$

où NZ_2 est la densité électronique de la cible, m_e la masse de l'électron et I le potentiel d'ionisation moyen ($\frac{I}{Z_2} \approx 10 \text{ eV}$). Mais comme le montre la figure I - 5, la variation de I avec Z_2 n'est pas monotone et de nombreuses irrégularités apparaissent, en particulier au remplissage d'une couche.

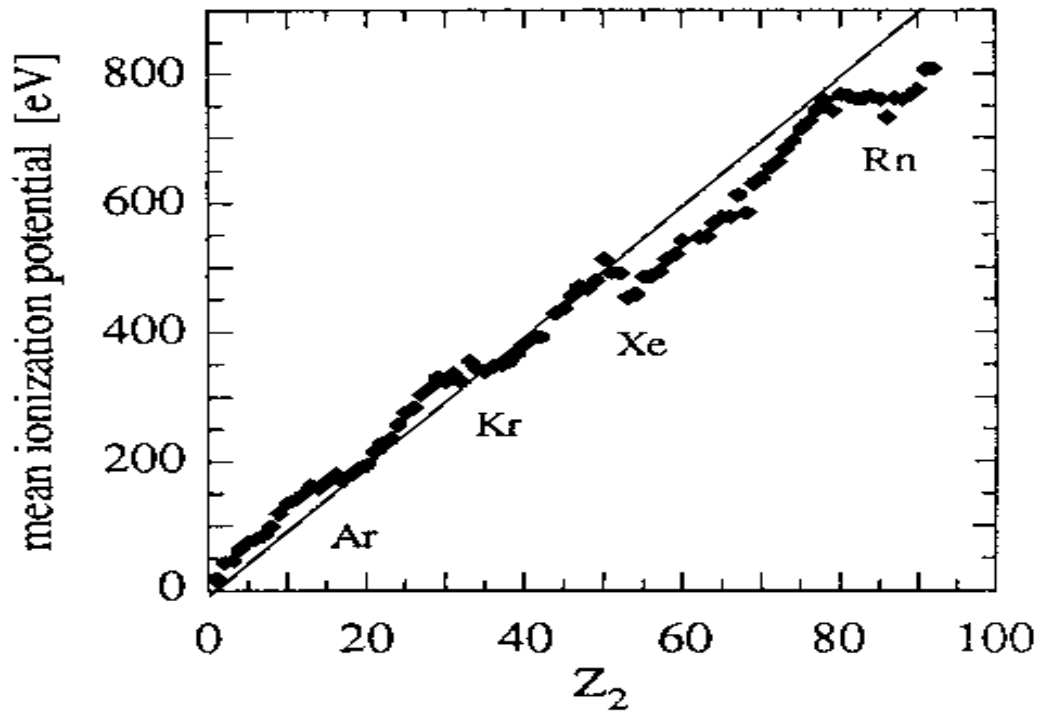


Figure I-5 : Variation du potentiel moyen d'ionisation en fonction du numéro atomique Z_2 de la cible. La ligne continue correspond à $I = 10 \cdot Z_2$ (eV) ^[ZIE80].

Dans ce domaine de vitesse, $\left. \frac{dE}{dx} \right|_e$ est alors proportionnel à $\ln E/E_1$ où E_1 est l'énergie initiale du projectile. Cela signifie que la perte d'énergie diminue lorsque l'énergie de la particule augmente. La figure I-6 montre l'évolution du pouvoir d'arrêt électronique dans une cible du phosphore d'indium en fonction de l'énergie de la particule incidente de différents ions.

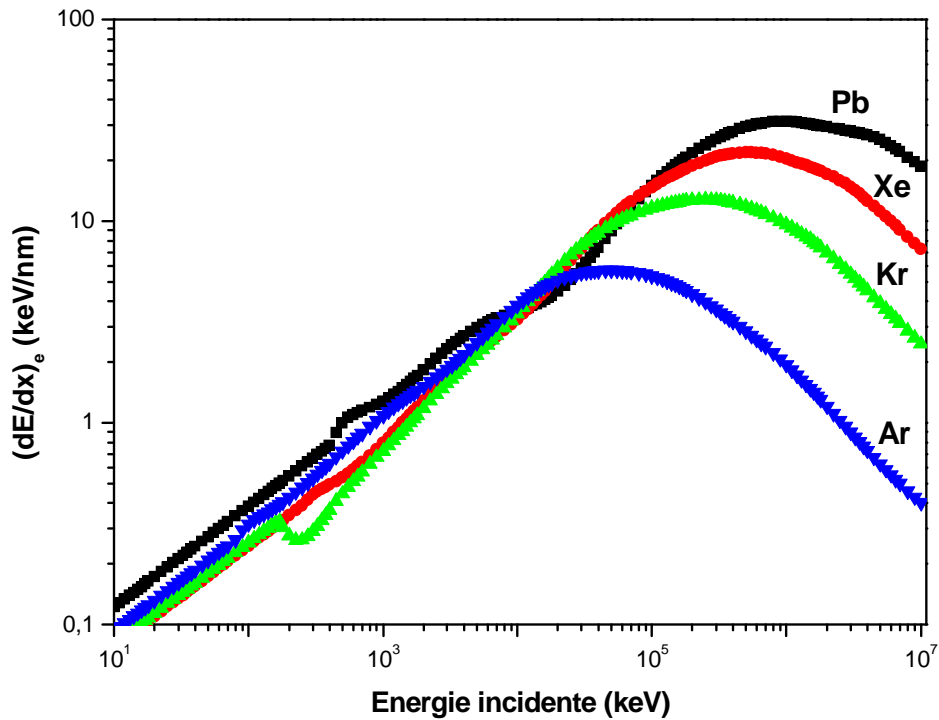


Figure I –6 : Evolution du pouvoir d’arrêt électronique en fonction de l’énergie de quatre ions incidents dans une cible du phosphore d’indium. Les courbes ont été déduites du code de calcul SRIM 2010 ^[BIE80].

2.2.2 - Régime de vitesses intermédiaires $V_1 \approx Z_1^{2/3}V_0$

Quand la vitesse du projectile diminue, le processus de capture entre en concurrence avec celui de l’ionisation. Dans ce domaine, l’ion projectile n’est alors plus totalement épluché : il capture des électrons de la cible et son état de charge diminue. Sa charge électrique moyenne devient inférieure à Z_1e , et le pouvoir d’arrêt électronique devient ainsi plus faible que ne le prévoit la formule de Bethe. Le domaine de validité de cette dernière peut alors être étendu en introduisant une charge effective Z_1^* . Ainsi, aux vitesses intermédiaires, dues aux effets antagonistes entre la variation de la vitesse et de la charge effective, le dépôt d’énergie passe par un maximum, appelé **pic de Bragg**, et finit par décroître lorsque l’énergie des ions diminue.

2.2.3 - Régime de basses vitesses lorsque $V_1 \ll Z_1^{2/3} V_0$

A faible vitesse, l'ion possède la plus grande partie de ses électrons. Au cours de la collision entre l'ion et un atome cible, les nuages électroniques des deux partenaires se recouvrent. Un réarrangement des niveaux électroniques a lieu au cours de l'interaction, engendrant la formation d'une quasi - molécule possédant ses propres états électroniques. Seuls les électrons faiblement liés de la cible contribuent à la perte d'énergie de l'ion. Lindhard et al. [LIN 61] ont montré que le pouvoir d'arrêt électronique est proportionnel à la vitesse de l'ion dans ce domaine de vitesse.

$$-\left. \frac{dE}{dx} \right|_e = N_A \xi_\varepsilon 8\pi e^2 a_0 \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \frac{v_1}{v_0} \quad (\text{I} - 8)$$

où $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-8}$ cm. ξ_ε varie entre 1 et 2 et est approximé par $\xi_\varepsilon = Z_1^{1/6}$.

2.3 – Comparaison entre le pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire

Dans le domaine des vitesses $V_1 \gg V_0$, si nous négligeons la variation logarithmique des relations (I – 6) et (I – 7), le rapport entre la perte d'énergie nucléaire et la perte d'énergie électronique peut s'écrire :

$$\frac{-\left. \frac{dE}{dx} \right|_n}{-\left. \frac{dE}{dx} \right|_e} = \frac{Z_2 m_e}{M_2} \approx \frac{m_e}{2 m_p} \approx \frac{1}{3500} \quad (\text{I} - 9)$$

La perte d'énergie par collision Rutherford avec les noyaux de la cible est donc négligeable devant la perte d'énergie électronique, pour des énergies incidentes supérieures à 0.1 MeV/uma. Compte tenu que notre étude concerne les ions lourds de grande énergie (supérieure à quelques MeV/uma), le transfert d'énergie se fait majoritairement par collisions inélastiques. Dans la suite $-\left. \frac{dE}{dx} \right|_e$ sera noté S_e . La figure I – 7 représente la comparaison entre le pouvoir d'arrêt nucléaire et électronique dans le cas d'une irradiation au xénon de différentes énergies dans une cible de phosphore d'indium.

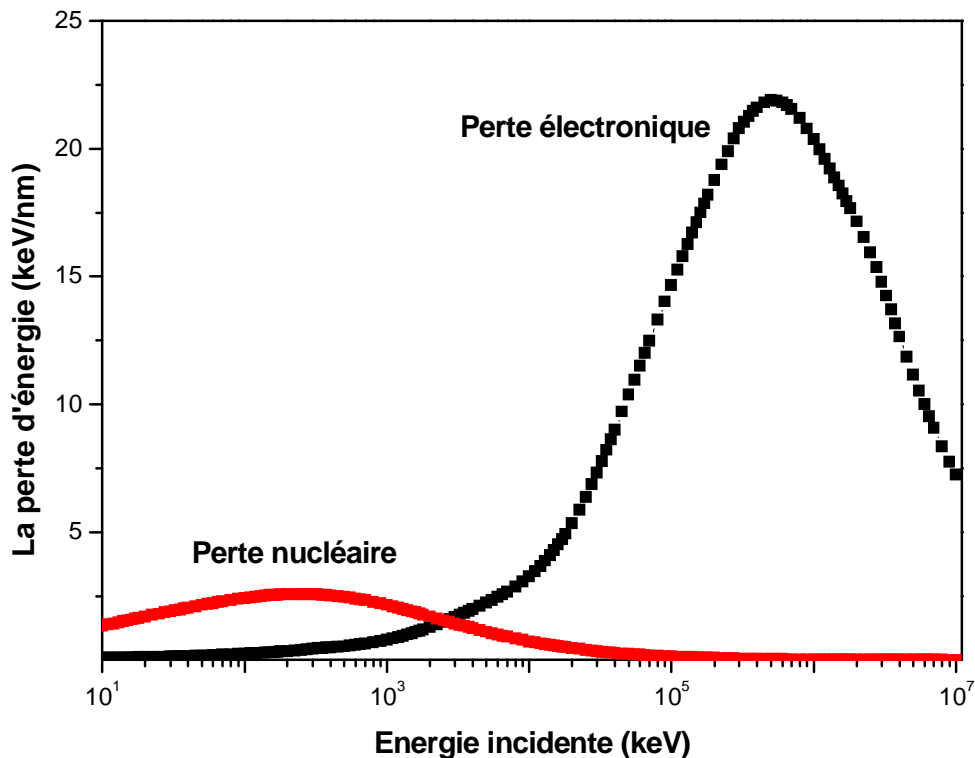


Figure I – 7 : Comparaison entre les pouvoirs d’arrêt nucléaire et électronique dans le cas d’une cible de phosphure d’indium irradiée avec l’ion Xe. Les courbes ont été déduites du code de calcul SRIM 2010 ^[BIE80].

3 – Effets induits dans le matériau cible et les modèles d’endommagement

Si le dépôt d’énergie et sa répartition spatiale jouent un rôle déterminant dans l’endommagement des matériaux, ce sont les propriétés physico- chimiques de la cible qui gouvernent sa réponse à cette sollicitation. Ainsi, deux types de processus sont considérés être à l’origine de la création de défauts dans les solides : les processus élastiques conduisant à la mise en mouvement d’atomes du solide (atomes de recul) et les processus inélastiques impliquant les niveaux électroniques (ionisation ou excitation).

3.1 - Création de défauts par excitation électronique

Si jusqu'à maintenant, nous avons décrit les changements auxquels sont soumis les ions, il faut aussi décrire ce qui se passe dans la matière après que les ions l'ont traversée. Les types de défauts, qu'un ion peut induire dans un solide, sont déterminés par le type de solide. Le processus de création des défauts dépend de la structure électronique du matériau. Ainsi les collisions électroniques induisent dans les isolants et les semi-conducteurs des défauts structuraux alors que dans le cas des métaux, l'énergie serait plutôt dissipée sous forme d'énergie thermique sans créer des défauts structuraux ^[LEH 77].

Les défauts créés dans le solide peuvent être classés comme suit :

1. Défauts ponctuels qui peuvent être des lacunes, des atomes interstitiels ou une combinaison des deux (une paire de Frenkel).
2. Défauts étendus qui sont des conséquences des collisions électroniques multiples pouvant conduire à la création des traces latentes.

3.1.1- Effet de la vitesse du projectile sur la création des traces

Le paramètre le plus utilisé dans l'interprétation de la création des traces est le pouvoir d'arrêt. Pourtant, des mesures ^[MEF 93] et des simulations ^[GER 93], montrent qu'un autre paramètre joue un rôle important dans la création des traces produites par l'irradiation d'un solide. Ce paramètre est la vitesse du projectile. Ainsi, sur la figure I -8, on observe (dans le cas d'une irradiation de la silice vitreuse aux ions Kr) que d'un côté et de l'autre du pic de Bragg pour deux vitesses différentes de l'ion projectile, il est possible d'avoir la même valeur du pouvoir d'arrêt. Expérimentalement, il a été montré ^[MEF 93] que, plus la vitesse du projectile est petite, plus la section efficace d'endommagement est grande. Cette différence est expliquée par le fait que l'énergie déposée est beaucoup plus localisée dans le cas des basses vitesses. Par exemple, après des irradiations à deux vitesses différentes du grenat $Y_3Fe_5O_{12}$ (avec des ions Cu à 0.8 MeV/uma et Kr à 10.7 MeV/uma) pour le même pouvoir d'arrêt (≈ 13 keV/nm), les sections efficaces d'endommagement, mesurées par RBS ^[MEF 93], sont respectivement $5.3 \times 10^{-13} \text{ cm}^2$ et $1.2 \times 10^{-13} \text{ cm}^2$. Les dimensions des traces latentes diminuent quand le pouvoir d'arrêt augmente. Par exemple, avec des ions Plomb, une perte d'énergie de 40 keV/nm est atteinte pour des énergies de 3.6 MeV/uma et de 12 MeV/uma ; les sections efficaces correspondantes sont $11 \times 10^{-13} \text{ cm}^2$ et $8.2 \times 10^{-13} \text{ cm}^2$ respectivement.

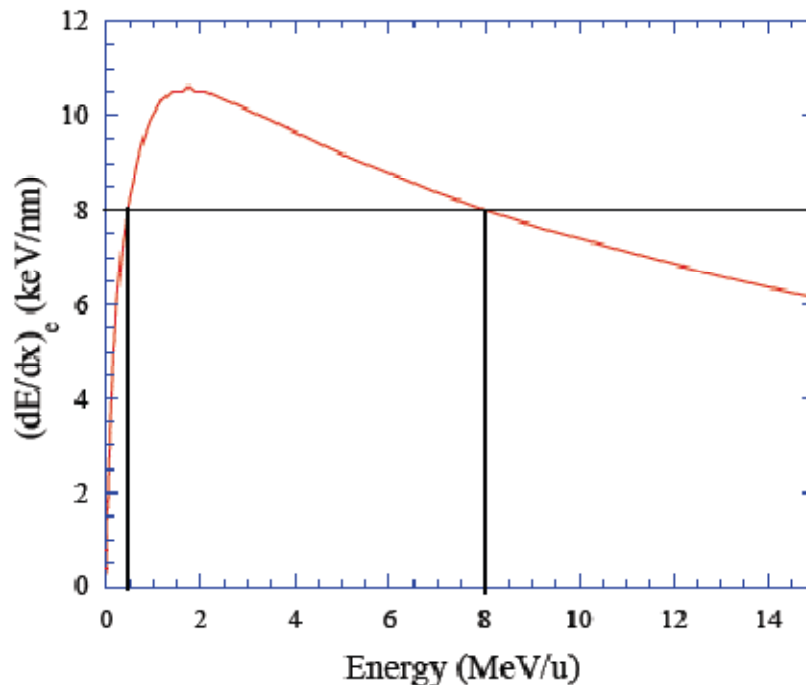


Figure I – 8 : Evolution du pouvoir d’arrêt électronique en fonction de l’énergie pour une irradiation avec des ions Kr dans a-SiO₂. Pour deux énergies différentes (0.5 MeV/uma et 8 MeV/uma), les pertes d’énergie électronique sont identiques correspondent à la même valeur 8 keV/nm)^[CON 04].

Ces résultats montrent clairement que, la perte d’énergie n’est pas l’unique paramètre qui explique l’évolution de l’endommagement, et que la distribution spatiale de la dose autour du passage d’un ion est aussi un paramètre important pour la création et la taille des traces dans le matériau-cible. L’influence de cette distribution spatiale de la dose a été observée dans l’oxyde magnétique, Y₃Fe₅O₁₂, la taille des défauts du régime basse vitesse étant différente de celle du régime haute vitesse. Ainsi, A. Meftah et al.^[MEF 93] ont montré que pour un même pouvoir d’arrêt électronique :

- Le rayon de trace effectif (R_e) déduit des expériences de basse énergie, est supérieur à celui des expériences à haute énergie (figure I – 9).
- Le seuil de création de trace se trouve déplacé vers les faibles pouvoirs d’arrêt lorsque la vitesse du projectile diminue.

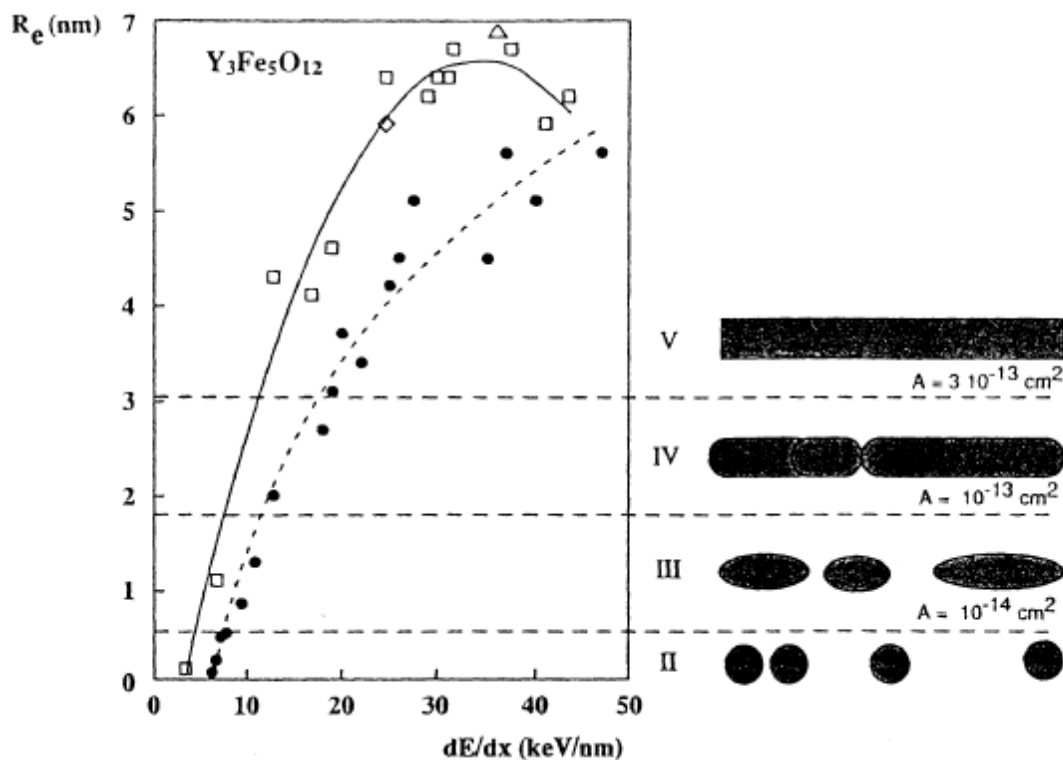


Figure I –9: Evolution des rayons effectifs de trace R_e en fonction du pouvoir d'arrêt électronique ^[MEF 93] pour deux gammes de vitesses différentes (hautes et basses) dans le $Y_3Fe_5O_{12}$ et la morphologie des traces correspondante (A est la section efficace $A = \pi R_e^2$).

3.2 – Les modèles de création de défauts

Plusieurs modèles ont été avancés pour décrire les mécanismes de formation des traces. Ces modèles traitent des mécanismes par lesquels l'énergie emmagasinée dans le système électronique est transformée en mouvement atomique. Les processus d'excitation électronique et d'ionisation conduisent à une très forte densité de charge dans une région localisée autour de la trajectoire des ions. La nature de l'endommagement résultant est directement liée à la durée de vie des états excités qui détermine l'efficacité de la conversion de l'énergie en mouvements atomiques.

3.2.1 - Le modèle de l'explosion coulombienne.

Ce modèle proposé en 1965 par Fleischer, Price et Walker ^[FLE 65] est basé sur le fait que lorsqu'un ion de grande énergie pénètre dans la matière, il éjecte de nombreux électrons et crée ainsi un cylindre d'ions positifs le long de sa trajectoire. Cette accumulation de charge entraîne une forte répulsion coulombienne entre les ions, conduisant à une véritable explosion locale, qui sera écrantée par le retour des électrons. L'explosion devient significative, c'est-à-dire que les atomes sont mis en mouvement, lorsque le temps de retour des électrons est supérieur au temps caractéristique d'une vibration atomique (10^{-13} s) et lorsque la force de répulsion entre ions est supérieure aux constantes élastiques (la grandeur pertinente pour ce modèle est le module de Young du matériau). Il faut, donc que la mobilité des électrons et la densité d'électrons libres soient faibles. Les ions éjectés du centre de la trace laisseront des lacunes pour occuper des positions interstitielles. Après la relaxation de la zone perturbée, il subsiste une zone désordonnée moins dense que le matériau initial.

3.2.2 - Le modèle de la pointe thermique

Les mécanismes de création de défauts peuvent être décrits dans certains cas par un modèle dit de « pointe thermique ». Seitz et al. ^[SEI 56] ont développé ce modèle qui avait été mis au point une trentaine d'années auparavant par F. Desauer ^[DES 23]. Ce modèle est basé sur l'idée suivante : lors du ralentissement électronique, l'énergie déposée par l'ion incident sur les électrons de la cible est convertie en chaleur par interaction électron-phonon. Le transfert d'énergie vers les atomes du réseau se faisant très proche de la trajectoire de l'ion, l'échauffement est très local. Les forts dépôts d'énergie peuvent ainsi provoquer la fusion d'une région cylindrique le long du parcours de l'ion. Cette fusion est suivie d'un phénomène de trempe ultra-rapide pouvant geler le matériau dans une structure amorphe. Reste ensuite à établir une corrélation entre la pointe thermique et les défauts. L'évolution de la trace est donc décrite à l'aide de la thermodynamique à l'équilibre permettant de définir les températures du gaz d'électrons libres, du réseau et leur mise en équilibre par interaction électron-phonon. L'hypothèse majeure réside dans la possibilité de définir une température.

En définissant le rayon de trace comme le rayon fondu du modèle de la pointe thermique, il est possible de comparer les prédictions de ce modèle aux résultats expérimentaux. Jusqu'à présent, seul le modèle de la pointe thermique a été développé de façon qualitative et surtout **quantitative** dans les semi-conducteurs amorphes [TOU 92], les métaux [WAN 94] et les isolants [MEF 93, TOU 96].

Notons que les modèles de l'explosion coulombienne et de la pointe thermique ne sont pas deux modèles contradictoires, seulement ils considèrent des paramètres physiques différents. La figure I – 10 montre les mécanismes de formation des traces dans le solide (les semi-conducteurs dans notre cas) suivant les deux modèles : l'explosion coulombienne et la pointe thermique

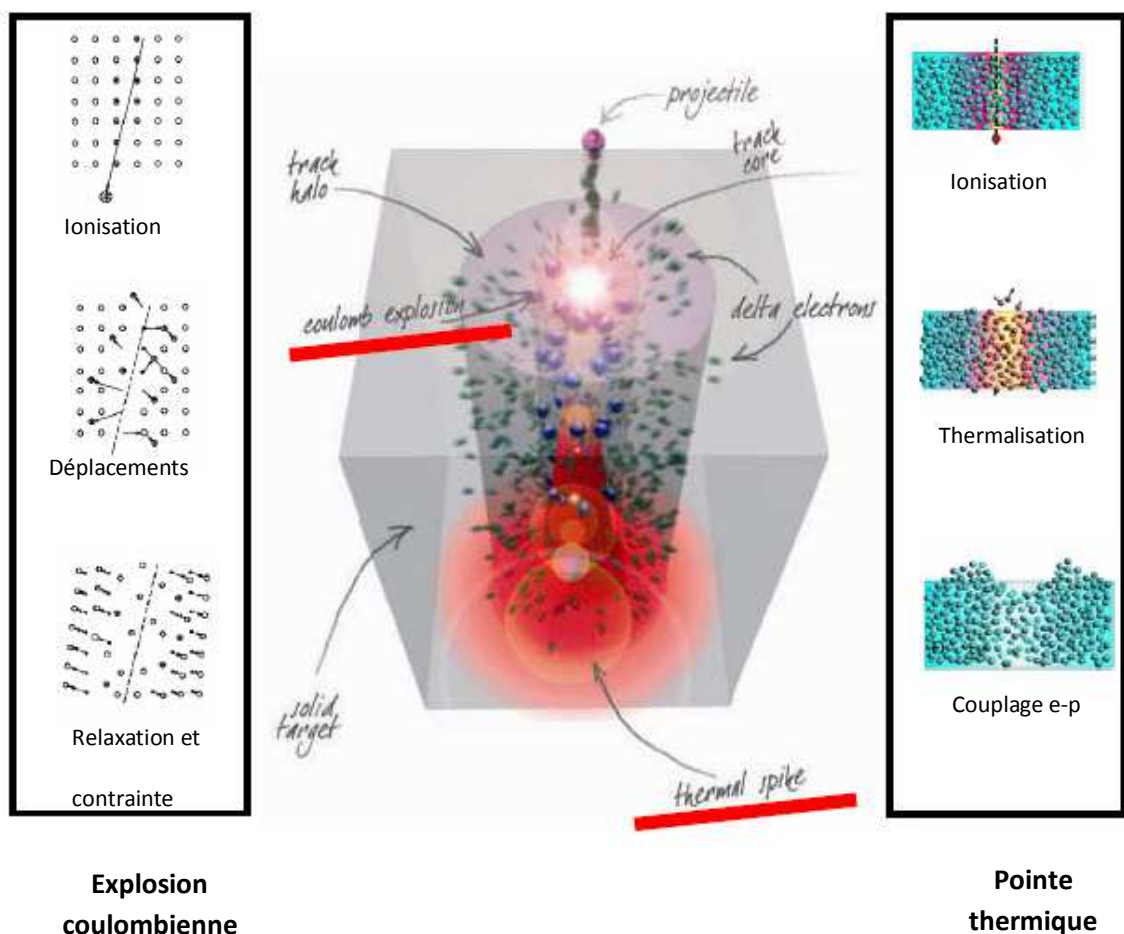


Figure I –10 : Représentation schématique de la formation des traces, lors du passage d'un ion lourd rapide dans un solide (semi-conducteur), suivant le modèle de l'explosion coulombienne et le modèle de la pointe thermique.

Références Chapitre I :

- [BIE 80] J. P. Biersack, L. G. Haggmark, Nucl. Instr. And Meth. B 174, 257 (1980).
- [CON 04] C. Constanta, Thèse de Doctorat de l'Université de Caen (2004).
- [DES 23] F. Desauer, Z. Physik 38, 12 (1923).
- [FLE 65] R. L. Fleischer, P. B. Price and R.M. Walker, Ann. Rev. Sci.15, 1 (1965).
- [GER 93] B. Gervais, Thèse de Doctorat de l'Université de Caen (1993).
- [LAN 14] M. Lang, M. Toulemonde, J. Zhang, F. Zhang, C. L. Tiracy, Nucl. Instr. and Meth. B336, 102 (2014).
- [LEH 77] C. Lehman, Interaction of Radiation with Solids and Elementary Defects Production. Amsterdam : North- Holland (1977).
- [LIN 61] J. Lindhard and M. Scharff, Phys. Rev. 124, 128 (1961).
- [LIN 63a] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff and P.V. Thomsen, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 3, 10 (1963).
- [LIN 63b] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff and P.V. Thomsen, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.3, 14 (1963).
- [MEF 93] A. Meftah, F. Brisard, J. M. Constantini, M. Hage Ali, J. P. Stoquert, F. Studer, M. Toulemonde, Phys. Rev. B48, 920 (1993).
- [SEI 56] F. Seitz and J. S. Koehler, Solid State Physics 2, 305 (1956).
- [TOU 92] M. Toulemonde, C. Dufour, E. Paumier, Phys. Rev. B 46, 14362 (1992).
- [TOU 96] M. Toulemonde, J. M. Constantini, C. Dufour, A. Meftah, E. Paumier, F. Studer, Nucl. Instr. and Meth. B116, 37 (1996).
- [TOU 12] M. Toulemonde, W. Assmann, C. Dufour, A. Meftah, C. Trautmann, Nucl. Instr. and Meth. B277, 28 (2012).
- [WAN 94] Z. G. Wang, C.Dufour, E. Paumier, M. Toulemonde, J. Phys.: Condens. Matter 6, 6733 (1994).
- [ZEI 80] J. F. Zeigler dans «The stopping and ranges of ions in Matter», (ed. J.F.Zeigler, Pergamon press) 5 et 6 (1980).

Chapitre II

Résultats antérieurs sur l'endommagement induit par irradiation dans les semi-conducteurs

1 – Introduction

La perte d'énergie d'un ion incident dans un solide, induit des dommages dans celui-ci. Le type de dégâts laissés dépend de la nature du solide. Comme nous l'avons vu dans le chapitre 1, les défauts initialement induits par une irradiation sont la lacune et l'interstitiel, l'ensemble formant une paire de Frenkel. Ce sont ces défauts que l'on observe à basse température dans les métaux irradiés, tout au moins en dessous du seuil de perte d'énergie électronique au-delà duquel des traces sont observées. La nature des défauts observés dans les semi-conducteurs est un peu plus complexe. Et ce n'est seulement durant ces dernières années que quelques résultats expérimentaux sur l'effet d'irradiation sur les semi-conducteurs ont été publiés.

Le but de ce chapitre est de résumer ce que l'on connaît actuellement sur la formation des traces induites par irradiation dans les semi-conducteurs, et plus particulièrement le phosphore d'indium (InP), l'antimoniure d'indium (InSb), l'arséniure de gallium (GaAs), et le germanium Ge qui font l'objet de cette étude.

2 –Etat de l'art sur les études d'irradiation des semi-conducteurs étudiés

2.1 – Irradiation avec des ions lourds rapides

2.1.1 – Le phosphore d'indium (InP)

L'endommagement des semi-conducteurs induit par irradiation aux ions rapides dans le régime du pouvoir d'arrêt électronique, où $((dE/dx)_e \gg (dE/dx)_n)$, est un domaine de recherche récent, et ce n'est qu'en 1998 que l'équipe de Wesch et al.^[WES98, HER98] ont étudié pour la première fois le comportement du phosphore d'indium irradié avec différents ions lourds et ont montré la formation des traces latentes dans ce matériau. Leurs résultats expérimentaux ont été confirmés en 2002 par Szenes et al.^[SZE02].

Une autre étude a été réalisée par Kamarou et al.^[KAM06] sur le InP irradié à la température ambiante avec des ions Kr, Xe, et Au d'énergie variant entre 0,3 et 3 MeV/uma. Les échantillons ont été caractérisés par la spectrométrie de rétrodiffusion de Rutherford (C-RBS) en canalisation et la microscopie électronique en transmission (TEM) pour quantifier les défauts. Dans le tableau II-1, sont reportés les principaux paramètres et les résultats obtenus pour le phosphore d'indium par Kamarou et al.^[KAM06].

Ions projectiles	Energie E_1 (MeV)	E_1/M_1 (MeV/uma)	$(dE/dx)_e$ (keV/nm)	$(dE/dx)_n$ (keV/nm)	Rayon de trace R_{RBS} (nm)	Rayon de trace R_{TEM} (nm)
Xe	193	1.50	18.6	0.080	1.2 ± 0.1	-
Xe	250	1.94	20.0	0.060	1.3 ± 0.1	2.2 - 4.0
Xe	390	3.02	21.5	0.042	1.4 ± 0.1	-
Au	150	0.76	18.8	0.259	2.3 ± 0.1	1.5 - 3.5
Au	593	3.01	29.1	0.078	3.0 ± 0.1	1.5 - 4.5
Xe	82	0.64	13.5	0.165	1.6 ± 0.1	-
Kr	140	1.63	12.1	0.039	-	-
Au	64	0.32	10.7	0.568	1.2 ± 0.1	-
Au	79	0.40	12.6	0.500	1.1 ± 0.1	-

Tableau II-1 : Récapitulatif des conditions d’irradiation et des valeurs des rayons de traces de l’InP mesurés par Kamarou et al. ^[KAM06].

Les résultats obtenus par la microscopie électronique à transmission (TEM) du phosphore d’indium irradié avec des ions Xe et Au, sont illustrés sur les figures II-1 et II-2. La figure II-1 montre une image d’InP irradié à température ambiante avec des ions Xe de 375 MeV et des ions Au de 593MeV, jusqu’à une fluence de $8,4 \times 10^{11}$ ions/cm². Les taches noires marquées par des cercles représentent les traces latentes formées par des ions individuels, et celles marquées par des flèches visibles sur les images (a) et (b) sont formées par plusieurs ions heurtant la surface cible près l’un de l’autre.

L’accumulation des dommages dans l’InP irradié avec des ions Xe d’énergie 375MeV en fonction de la fluence est illustrée sur la figure II-2. On remarque le nombre de traces et leurs tailles augmentent avec l’augmentation de la fluence de l’ion. L’augmentation de la taille des traces aura lieu, quand un ion pénètre dans une région déjà pré-endommagée par les ions précédents ^[KAM06]. Finalement, l’augmentation de la fluence de l’ion mène à la formation d’une couche amorphe continue ^[WES07].

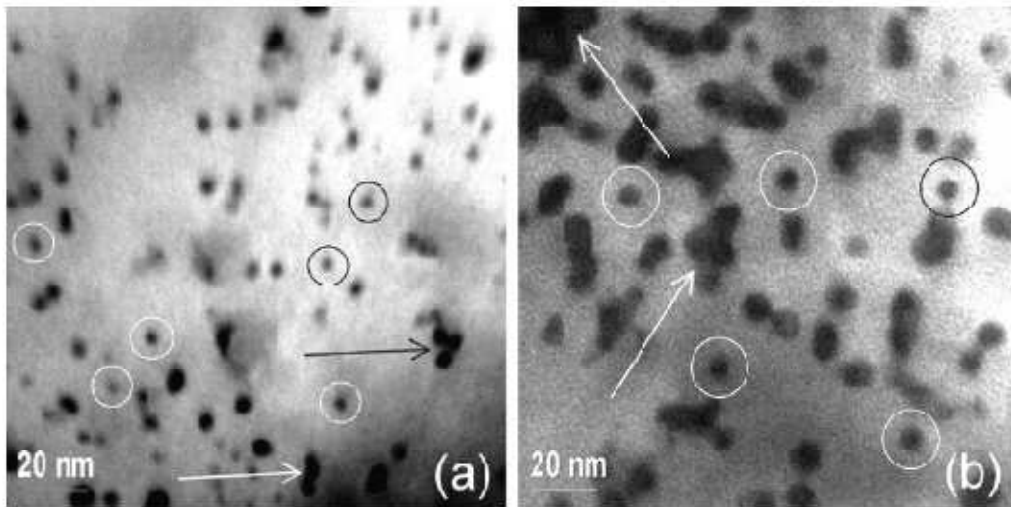


Figure II - 1 : Images de microscopie électronique en transmission (TEM)^[WES 07] de l'InP irradié à température ambiante à une fluence de $8,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ avec des ions Xe de 375 MeV (a) et Au de 593 MeV (b).

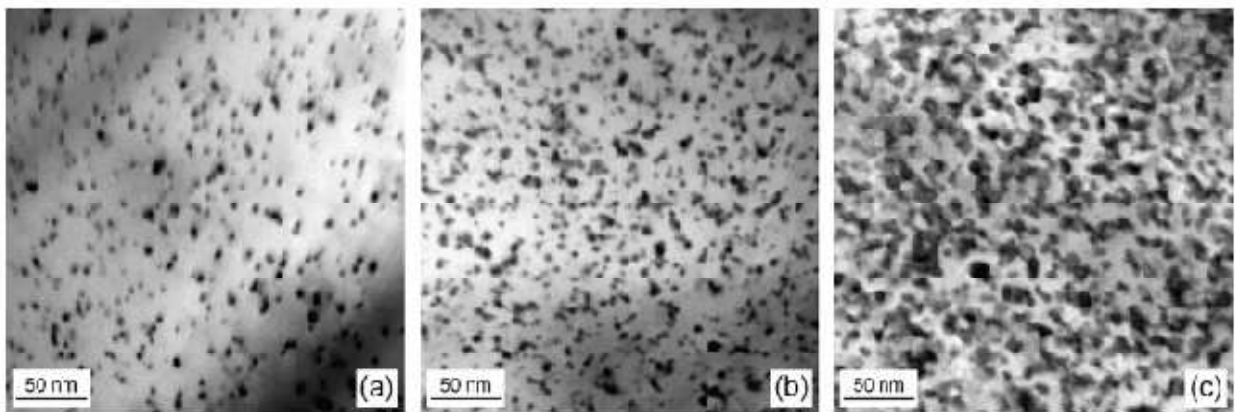


Figure II - 2 : Images de microscopie électronique en transmission (TEM)^[WES 07] de l'InP irradié à température ambiante avec des ions Xe de 375 MeV à une fluence de (a) $8,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (b) $2,8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ et (c) $5,6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Une autre étude expérimentale a été faite par Khalil et al. ^[KHA07] sur les modifications induites en surface du phosphore d'indium par des ions lourds rapides. Cette dernière a été réalisée avec des ions Au d'énergie 200 MeV à différentes fluences. La caractérisation de la surface de l'échantillon irradié a essentiellement été réalisée par Microscopie à Force Atomique (AFM). Cette technique permet de décrire les modifications topographiques de la surface.

Les résultats obtenus par Khalil et al. ^[KHA08] montrent que, dans le cas des basses fluences (5×10^{10} ions/cm²) la surface de l'InP reste plane et aucune trace bien définie n'est observé en surface. Au lieu de cela, ils ont observé des fosses qui apparaissent comme des traits. Inversement, pour les hautes fluences (1×10^{14} ions/cm²) la surface de l'InP irradié est complètement amorphe et devienne très rugueuse en comparaisant à la surface non irradiée et au cas des basses fluences.

L'observation par AFM a permis d'identifier les formes des impacts des ions à la surface sous forme de bosses appelées «hillocks» témoigne de la présence de traces. Les images a, b, c, et d (figure I-3) montrent les modifications en surface de l'InP à différentes fluences. D'après cette figure, une augmentation importante de la rugosité de la surface de l'InP se produit seulement pour les hautes fluences ($\geq 5 \times 10^{13}$ ions/cm²), lorsque la surface devienne complètement amorphe. Des bosses «hillocks» apparaissent sur la surface de l'échantillon pour les deux fluences 5×10^{13} et 1×10^{14} ions/cm².

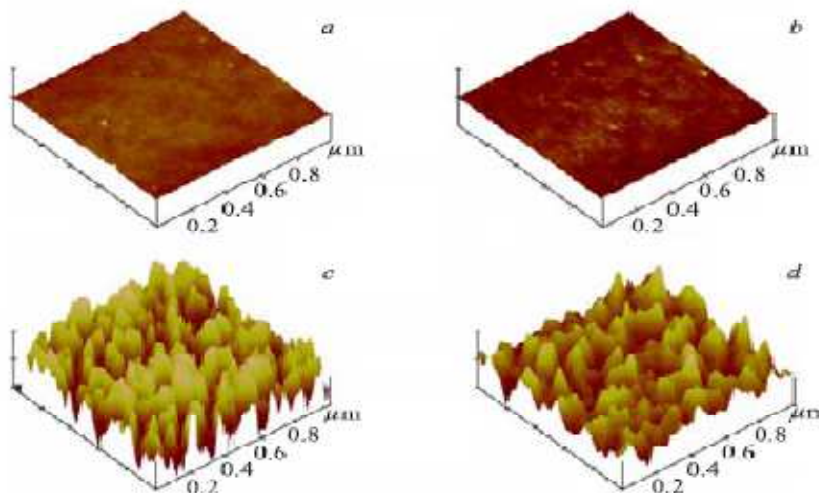


Figure II - 3 : Images AFM tridimensionnelles ^[KHA08] d'un échantillon InP irradié à différentes fluences (a) surface non irradié, (b) 1×10^{11} , (c) 5×10^{13} , et (d) 1×10^{14} ions/cm².

2.1.2 – L'antimoniure d'indium (InSb)

Dans le domaine de l'irradiation avec des ions lourds rapides, la première étude sur l'endommagement du semi-conducteur l'antimoniure d'indium (InSb) dans le régime du pouvoir d'arrêt électronique a été effectuée par Szenes et al. [SZE02]. Cette étude, a été réalisée avec des ions Pb d'énergie comprises entre 1,85 et 10 MeV/uma, et en utilisant la microscopie électronique en transmission et en haute résolution et la rétrodiffusion Rutherford en canalisation (C-RBS). La première technique (TEM) a révélée des traces induites par l'ion Pb d'énergie 1,85 MeV/uma. Le nombre des traces observées était en bon accord avec la fluence (figure II-4-(a)). L'observation en haute résolution a montré que l'InSb recrystallise dans une direction différente du cristal original (figure II – 4-(b)). Dans cette expérience, les diamètres des traces déterminés par (C-RBS) sont compris entre 10 et 19nm.

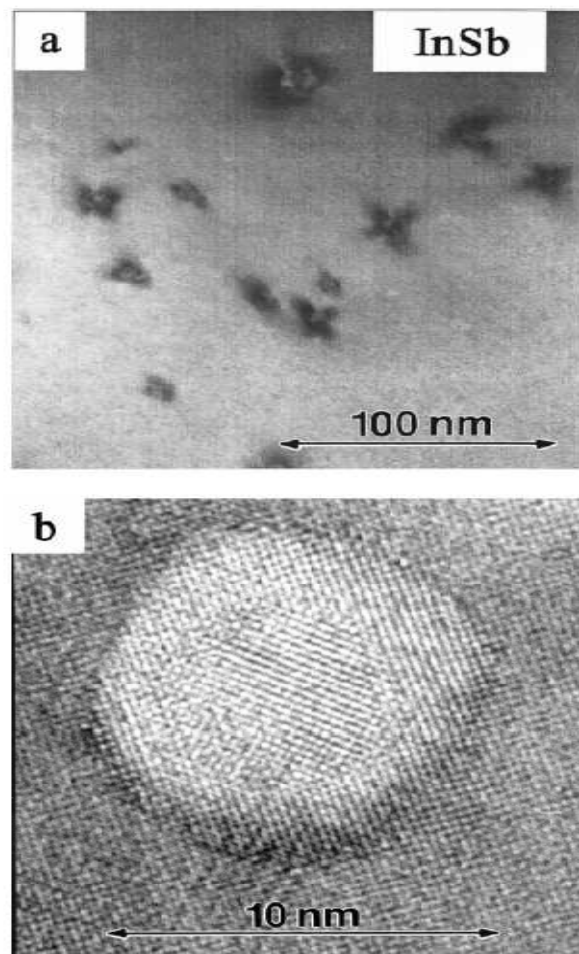


Figure II-4 : Micrographie électronique à transmission [SZE 02] de l'InSb irradié avec des ions Pb d'énergie 1, 85 MeV/uma.

(a) Image de déformation

(b) Micrographie électronique haute résolution d'une seule trace

A. Kamarou et al.^[KAM 08] ont montré de leur part qu'en irradiant l'InSb à température ambiante avec des ions Au de 573 MeV à une fluence de $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, des traces latentes continues ont été observées par microscopie électronique à transmission. Comme il est montré sur la figure II – 5, les traces d'ions sont visibles soit entant que taches blanches en champ sombre (figureII-5-(a)), ou comme des régions sombres (figureII-5-(b)).

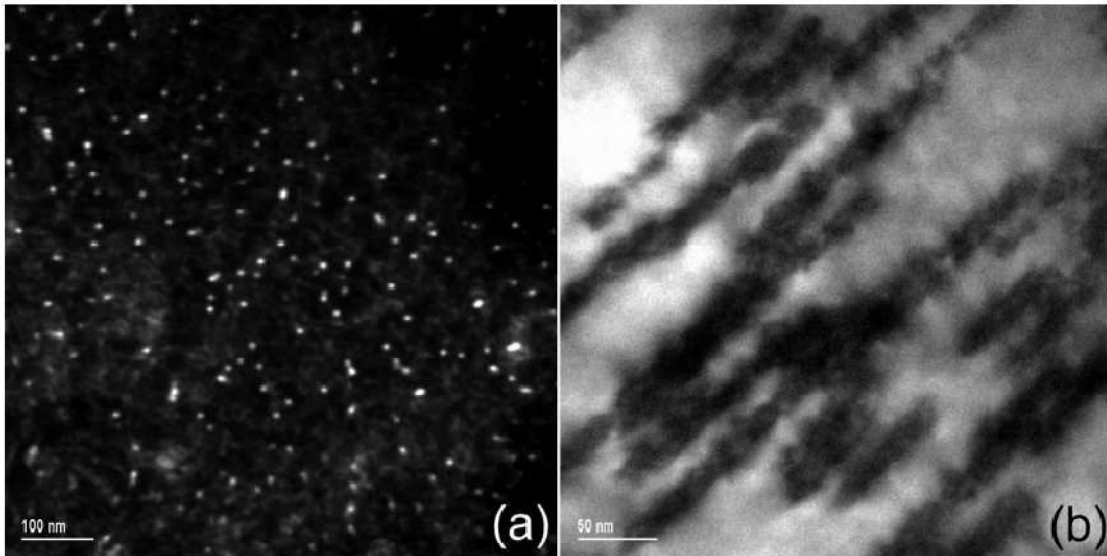


Figure II-5 : Images de microscopie électronique en transmission ^[KAM 08] de l'InSb irradié à température ambiante avec des ions Au de 593 MeV à une fluence de $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$.

(a) Selon la direction $\langle 100 \rangle$

2.2- Irradiation avec des agrégats C_{60}

2.2.1- Pourquoi utiliser des agrégats C_{60} ?

La découverte des fullerènes est très récente et jusqu'en 1985, le diamant et le graphite étaient les seules phases connues du carbone. En 1985, Kroto et Smalley (prix Nobel de chimie en 1996) ont réussi à synthétiser une phase stable, celle des fullerènes. Ce sont des molécules constituées uniquement d'atomes de carbone et qui ont la propriété remarquable de former des cages fermées. Il existe aujourd'hui plusieurs variétés de fullerènes qui diffèrent par le nombre d'atomes de carbone les formant. Les fullerènes utilisés dans cette étude sont formés de 60 atomes de carbone. En raison de la nature exceptionnelle des agrégats C_{60} , nous avons décidé de présenter ce type d'irradiation.

Du fait des grandes valeurs de la perte d'énergie électronique $(dE/dx)_e$ que peuvent atteindre les agrégats, il nous est apparu intéressant d'étudier le comportement des semi-conducteurs tels que le germanium et l'arséniure de gallium lorsqu'ils sont irradiés par de tels projectiles. En effet, cette perte atteint des valeurs (jusqu'à 60 keV.nm^{-1}) que peut être envisagée avec des projectiles « classiques » tels que les ions lourds.

L'agrégat C_{60} se caractérise par un très faible parcours (de l'ordre du micromètre). De plus, au cours de son passage dans le matériau, « l'effet agrégat » ne se manifeste pas sur tout le parcours : le fullerène reste compact pendant environ le quart de son parcours et ensuite, il se dissocie. L'irradiation se résume alors à une irradiation classique avec des atomes de carbone.

2.2.2- Le germanium (Ge) et l'arséniure de gallium (GaAs)

2.2.2. a- Germanium

Les études concernant le comportement du germanium sous irradiation remontent à la fin des années cinquante. Cleland et al. ^[CLE55a, 55b, 59] ont étudié l'effet de l'irradiation avec des neutrons à température ordinaire, puis Gobeli ^[GOB 58] celui avec des particules alpha à 4.2 K. Ils ont réalisé des mesures électriques ainsi que des études de recuits. Des irradiations avec des électrons à différentes températures et énergies ont également été réalisées par Mac Kay et al. ^[MAC 59], Calcott et al. ^[CAL 67], Bourgoïn et al. ^[BOU 71] et Fukuoka et al. ^[FUK 74]. La caractérisation des défauts a été réalisée principalement grâce à des mesures électriques. La caractérisation et l'identification des défauts créés par l'irradiation avec des électrons, neutrons et rayons γ a connu alors un essor important dans les années quatre – vingt. Poulain et al. ^[POU 80], Bourgoïn et al. ^[BOU81], Fukuoka et al. ^[FUK 81,83], Mooney et al. ^[MOO 83, 84], Nagesh et al. ^[NAG 88], puis Fourches et al. ^[FOU91] ont irradié du germanium ultra-pur avec des neutrons de quelques MeV. Enfin, Marie et al. ^[MAR 93a, 93b, 93c] ont irradié du germanium avec des ions lourds rapides allant de l'oxygène au plomb. Ils ont étudié l'endommagement induit par ces projectiles grâce à des mesures électriques d'effet Hall, et en effectuant des études de recuits.

Grâce à toutes ces études, les défauts créés dans le germanium à température ambiante semblent être assez bien connus. Enfin, il est important de noter que toutes ces irradiations ont été réalisées à faibles doses pour lesquelles aucun effet spectaculaire de la perte d'énergie électronique n'avait été détecté.

Qu'en est-il des connaissances sur l'influence de la perte d'énergie électronique $(dE/dx)_e$? Elles restent encore assez fragmentaires et elles ne débouchent pas sur des conclusions définitives. Izui et al. [IZU 86] montrent une recristallisation de films minces de germanium amorphe sous faisceau d'ions lourds lorsque la perte d'énergie électronique dépasse une valeur seuil qui est de l'ordre de 5 keV.nm^{-1} . Récemment, l'irradiation du germanium par des ions lourds, dont les valeurs de $(dE/dx)_e$ sont très élevées, n'a pas permis de mettre en évidence un effet de cette dernière [MAR 96]. Plus récemment encore, et toujours pour tenter de comprendre l'influence de la perte d'énergie électronique, Huber et al. [HUB 97] ont irradié avec des ions lourds du germanium conduisant à de très forts endommagements. Grâce à des observations par microscopie électronique, ils ont pu mettre en évidence la présence d'une zone amorphe contenant des cavités. Cette zone ne se crée pas là où la perte d'énergie électronique $(dE/dx)_e$ est maximale, elle se situe légèrement en amont de la zone d'arrêt de l'ion. De plus, pour observer cette zone, il semblerait qu'il faille irradier le germanium avec des ions plus lourds que le gallium. Par ailleurs, ces mêmes auteurs [HUB 98] ont également mis en évidence un recuit partiel des défauts par des mesures C-RBS suite à de fortes doses lorsque la perte d'énergie électronique dépasse une valeur seuil de l'ordre de 10 keV/nm .

Quelques années après, Colder et al. [COL01] ont repris l'étude du germanium en effectuant des irradiations avec des agrégats C_{60} de 20, 30 et 40 MeV respectivement. Après l'irradiation, les échantillons ont été observés par microscopie électronique en transmission (TEM) et en haute résolution (HRTEM).

Les résultats des observations en mode haute résolution montrent l'existence de traces continues de formes circulaires et présentent une structure amorphe. (figure II-6). Ces résultats ont suscité une étude plus récente avec des ions atomiques Bi et U très énergétiques, au maximum de la perte d'énergie électronique ($\sim 40 \text{ keV.nm}^{-1}$) [KOM03]. Ce qui a montré l'existence de traces discontinues dans les cristaux de germanium, la valeur seuil de perte d'énergie électronique pour la formation de traces continues étant estimée entre 46 et 49 keV/nm .

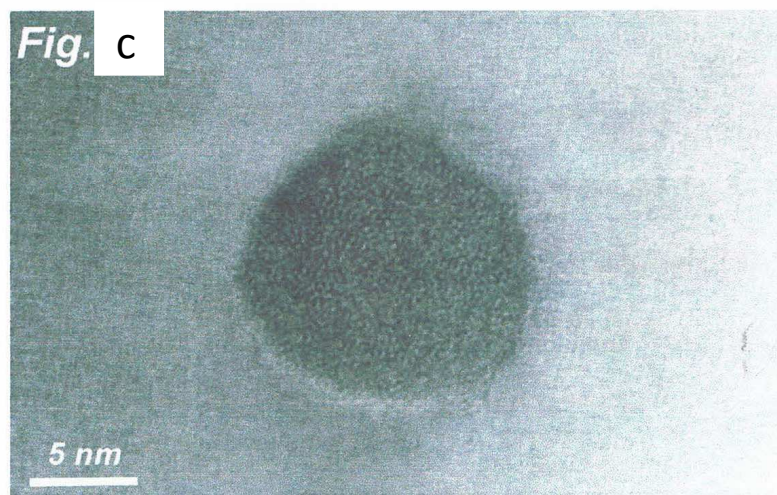
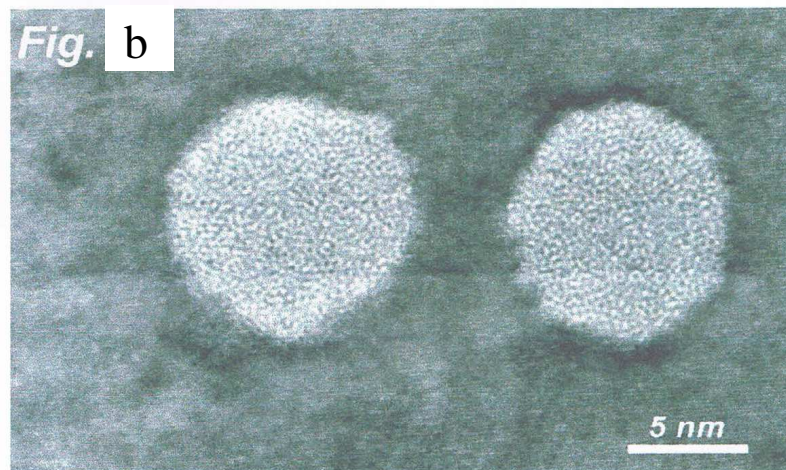
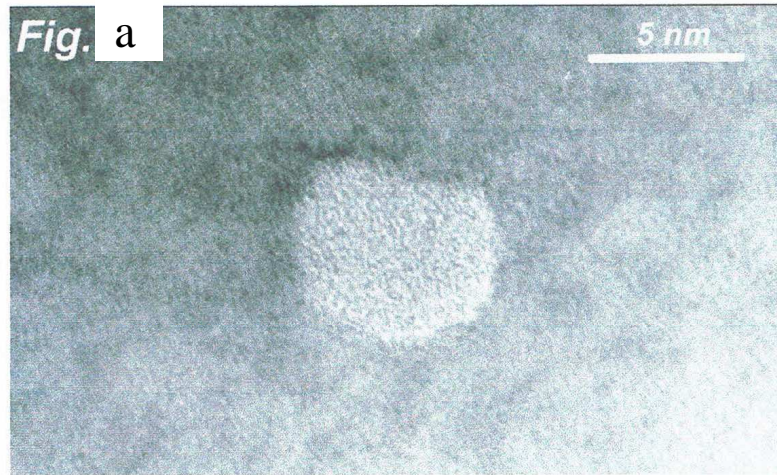


Figure II - 6 : Images HRTEM des traces^[COL01] formées dans le germanium irradié, à température ambiante, avec des agrégats C₆₀ de 20 MeV (a), 30 MeV (b) et 40 MeV (c).

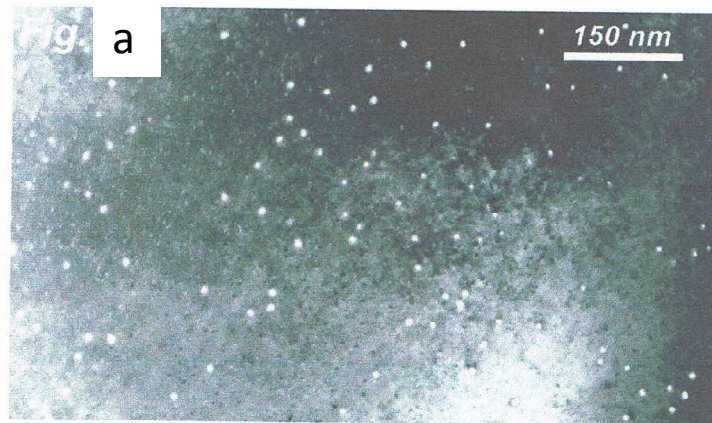
2.2.2. b- L'arséniure de gallium

L'arséniure de gallium est un semi-conducteur III-V et de ce fait, il peut se créer deux types de paires de Frenkel : soit l'ensemble lacune-interstitiel d'arsenic soit l'ensemble lacune-interstitiel de gallium. D'après des études antérieures [Mircea et al. ^[MIR78], Pons et al. ^[PON85], Stievenard et al. ^[STI86]], nous savons que la paire lacune-interstitiel d'arsenic est stable à température ambiante tandis que la paire lacune-interstitiel de gallium est instable même à très basse température. Ainsi, dans l'arséniure de gallium irradié, il n'y a pas de bilacune. Comme pour les autres semi-conducteurs, les irradiations ont débuté avec des électrons ^[DRE 74] et se sont poursuivies avec des ions lourds. Johnson et al. ^[JOH 89] montrent qu'il existe une recristallisation épitaxiale de l'arséniure de gallium amorphe entre 65 °C et 165 °C sous faisceau d'ions néon.

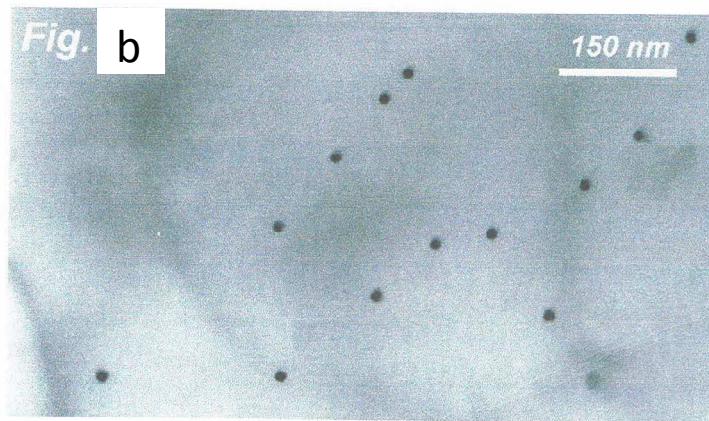
Toujours grâce à des mesures électriques, le comportement de l'arséniure de gallium irradié est assez bien déterminé. Cependant la situation est plus compliquée que dans le germanium. En effet, il existe beaucoup plus de niveaux dans la bande interdite associés aux défauts (notamment à cause de la stabilité de la paire lacune-interstitiel d'arsenic à température ordinaire).

En ce qui concerne la perte d'énergie électronique, les études effectuées sur l'arséniure de gallium dans ce régime en utilisant des ions lourds rapides ont été principalement réalisées à partir de 1990, par les équipes : Mikou et al. ^[MIK 96], Komarov et al. ^[KOM 01, 05], Szenes et al. ^[SZE 02, 11], Hida et al. ^[HID 03], Didyk et al. ^[DID 07, 08], Kamarou et al. ^[KAM 08], Schnohr et al. ^[SCH 10] et Wesch et al. ^[WES 04, 06, 07, 12]. Toutes ces études ont montré qu'aucune trace amorphe continue n'a été observée dans l'arséniure de gallium mais seulement il y a formation de défauts ponctuels et de défauts complexes.

En revanche, des traces cylindriques amorphes ont été révélées dans le cas de l'irradiation du GaAs avec des agrégats C₆₀ ^[COL 01] d'énergies 20, 30 et 40 MeV (figure II-7). D'après les images de cette figure, il est possible de déterminer les diamètres des traces et leurs densités (nombre de traces par unité de surface). Les observations montrent que ces traces sont situées aléatoirement sur toute la surface des échantillons. Colder et al. ^[COL 01] ont vérifié que les densités déterminées correspondaient bien aux fluences reçues par les échantillons. Par conséquent, chaque agrégat C₆₀ incident donne naissance à une trace.



$$\phi t = 4 \times 10^{10} \text{ Ar.cm}^{-2}$$



$$\phi t = 4 \times 10^9 \text{ Ar.cm}^{-2}$$



$$\phi t = 3 \times 10^9 \text{ Ar.cm}^{-2}$$

Figure II-7 : Images TEM des traces^[COL01] formées dans l'arséniure de gallium irradié, à température ambiante, avec des agrégats C₆₀ de 20 MeV (a), 30 MeV (b) et 40 MeV (c). La direction du faisceau d'agrégats est perpendiculaire à la surface des échantillons.

Dans le tableau (II-2), nous avons reporté les principales grandeurs associées à chacune des irradiations faites par Colder et al.^[COL 01] t pour chacun des deux semi-conducteurs Ge et GaAs.

Matériau	Agrégats	Energie (MeV)	Parcours (μm)	$(dE/dx)_e$ (keV/nm)	$(dE/dx)_n$ (keV/nm)	$\beta = v/c$ (%)	Densité d'énergie électronique [E] ($\text{eV} \cdot \text{\AA}^{-3}$)
Ge	C ₂₀	13	0,91	17	0.35	1.09	4.00
	C ₆₀	20	0.53	37.3	1.65	0.77	39.20
	C ₆₀	30	0.73	44.6	1.26	0.94	19.60
	C ₆₀	40	0,91	50.9	1.04	1.09	12.00
GaAs	C ₂₀	13	0.94	17.4	0.35	1.09	4.10
	C ₆₀	20	0.56	38.4	1.66	0.77	40.30
	C ₆₀	30	0.76	46	1.27	0.94	20.10
	C ₆₀	40	0.94	52.3	1.05	1.09	12.30

Tableau II-2 : Grandeurs caractéristiques ^[COL 01] des différentes irradiations, à température ambiante, avec des agrégats.

2.2.2.1- Mécanisme de recristallisation

Comme cela avait déjà été relevée dans le silicium ^[DUN 98], la principale difficulté à laquelle sont confrontés Colder et al. ^[COL 01] pour déterminer les diamètres des traces du germanium et de l'arséniure de gallium a été un phénomène de recristallisation sous le faisceau d'électrons du microscope. En effet, en mode haute résolution, ils ont aperçu que le diamètre des traces diminuait au cours du temps quelque soit le matériau. Cette recristallisation leur apparue assez surprenante en raison de la faible perte en énergie des électrons de 200 keV. Celle-ci est en effet inférieure de 5 ordres de grandeurs à l'énergie électronique perdue par les agrégats. Cependant, les flux des électrons et des agrégats sont aussi radicalement différents. Dans le cas des agrégats, le flux est de l'ordre de 5×10^5 agrégats. $\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ alors que pour les électrons délivrés par la source LaB₆ du microscope, ce flux est de $1 \times 10^{21} \text{e}^- \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ (en HRTEM). Par ailleurs, la température de recristallisation dans

la plupart des semi-conducteurs amorphes est de l'ordre de 500°C [DUN 98] mais, en raison de l'environnement cristallin des traces amorphes présentes après irradiation (la recristallisation s'effectuant du pourtour de la trace vers son centre), cette température doit être plus basse dans notre cas. Par conséquent, bien que l'augmentation en température de l'échantillon sous le faisceau d'électrons (environ 200°C) soit inférieure à 500°C , elle doit être responsable du processus de recristallisation observé.

Une question reste cependant en suspens : pourquoi le processus de recristallisation est-il beaucoup plus rapide dans l'arséniure de gallium que dans le germanium ? Il n'y a pas, a priori, de différences notables entre les valeurs de la diffusivité thermique entre les deux matériaux. D'autre part, l'orientation du cristal ne semble pas intervenir puisque, Colder et al. [COL 01] ont pu remarquer que l'orientation n'influe pas sur la cinétique de recristallisation.

Par contre, une des difficultés majeures pour étudier ce mécanisme de recristallisation est sans aucun doute l'épaisseur de l'échantillon à laquelle la trace est observée. Or, il est très difficile de connaître avec précision la valeur de l'épaisseur dans la zone observée. Nous savons cependant que les observations en microscopie électronique en transmission sont satisfaisantes pour des épaisseurs de la zone observée allant de quelques nanomètres (au centre de l'échantillon) jusqu'à une vingtaine de nanomètres. Les figures II-8 et II-9 présentent un processus de recristallisation à ces deux épaisseurs dans de l'arséniure de gallium irradié avec des agrégats de 40 MeV :

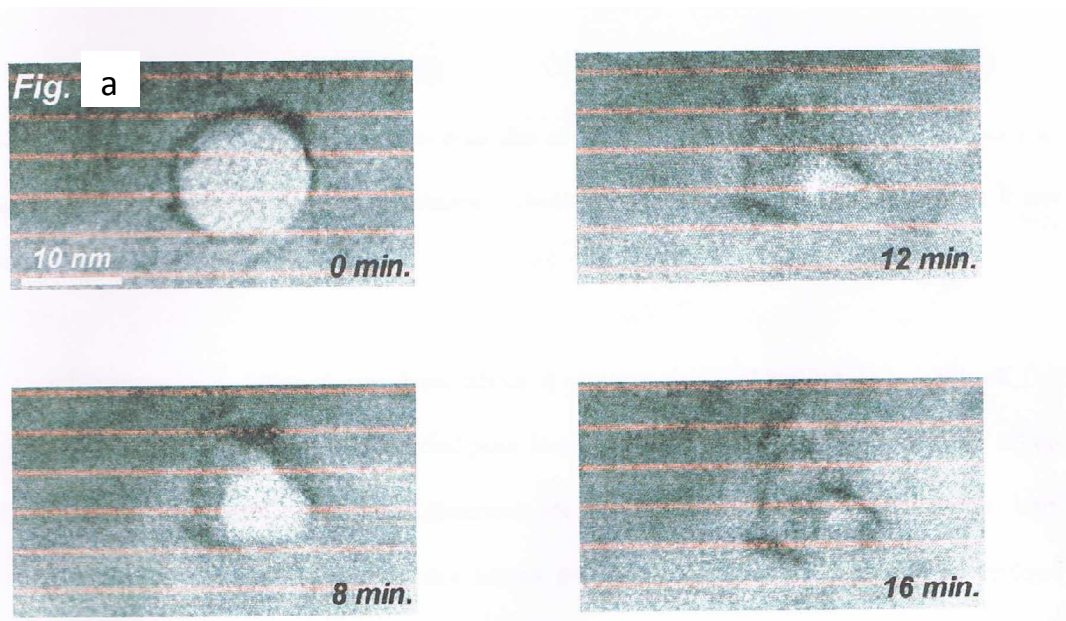


Figure II-8 : Processus de recristallisation d'une trace [COL 01] due au passage d'un agrégat C_{60} de 40 MeV dans de l'arséniure de gallium sous l'action du faisceau d'électrons du microscope (observation réalisée au bord de l'échantillon correspondant à une épaisseur d'environ 7 nanomètres).

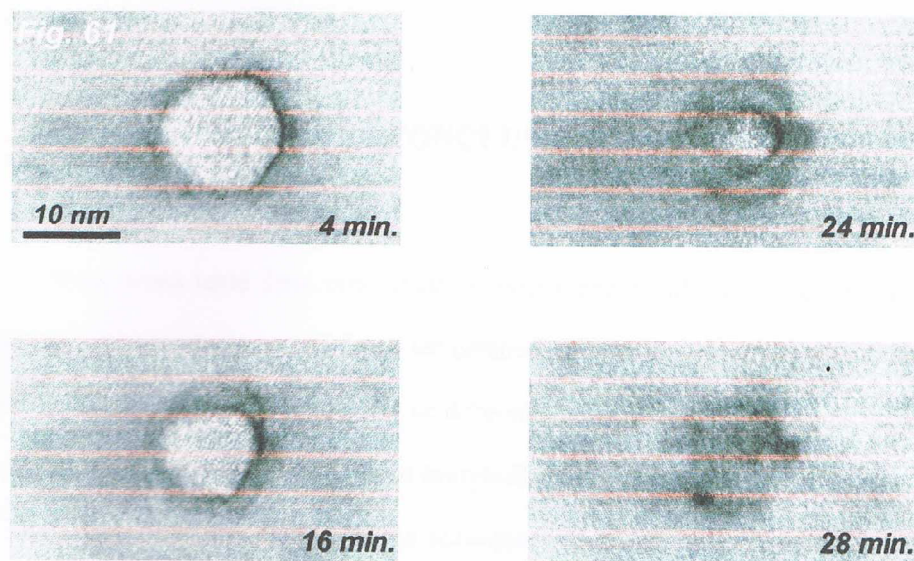


Figure II - 9 : Processus de recristallisation d'une trace ^[COL 01] due au passage d'un agrégat C₆₀ de 40 MeV dans de l'arséniure de gallium sous l'action du faisceau d'électrons du microscope (observation réalisée à une épaisseur d'environ 20 nanomètres).

Nous voyons, grâce à ces deux séries d'images, que l'épaisseur à laquelle se fait l'observation est un paramètre primordial pour la cinétique de recristallisation. Celle-ci est en effet beaucoup plus rapide lorsque l'épaisseur est faible. Nous pouvons alors émettre deux hypothèses. Soit la recristallisation des traces est un phénomène en volume, et lorsque l'épaisseur est faible, le volume amorphisé est moindre et par conséquent, la recristallisation est plus rapide. Soit la recristallisation est un phénomène de surface et lorsque l'épaisseur est faible, l'énergie nécessaire pour amorcer le processus de recristallisation est moindre. Nous n'avons pas d'explication précise sur ce phénomène de recristallisation. Nous savons que, dans le silicium ^[DUN 98], la vitesse de recristallisation se rapproche de celle observée dans l'arséniure de gallium. Cependant, l'étude de la recristallisation des traces sous le faisceau d'électrons du microscope nécessiterait beaucoup plus de travail.

2.3-Section efficace de création de dommage

Des mesures de rétrodiffusion Rutherford en canalisation (C-RBS) ont été effectuées sur des échantillons massifs d'arséniure de gallium irradiés avec des agrégats C₆₀ de 30 MeV. Ces mesures permettent de remonter à une section efficace expérimentale σ_{exp} . Pour l'arséniure de gallium ^[COL 01], elle est 140 nm². La section efficace déterminée par

microscopie ^[COL01] est de 123 nm². Il y a donc un très bon accord entre cette valeur et celle déterminée grâce aux mesures de C-RBS. Ce résultat montre donc que les traces observées en microscopie électronique ne sont pas un artefact expérimental lié à la faible épaisseur de la zone observée mais correspondent à un endommagement bien réel du matériau.

Nous avons reporté dans le tableau II – 3, les valeurs des sections efficaces expérimentales ^[COL 01] σ_{exp} (déterminées à partir du diamètre d des traces par la relation $(\pi d^2)/4$) pour les différentes irradiations réalisées, ainsi que les valeurs des sections efficaces totales de déplacement théoriques $\sigma_{théo}$ et celles des pertes d'énergie électronique $(dE/dx)_e$ déterminées par le code SRIM :

Matériau	Energie du C ₆₀ (MeV)	σ_{exp} (nm ²)	$\sigma_{théo}$ (nm ²)	$(dE/dx)_e$ (keV/nm)
Ge	20	28	0.83	37.3
	30	88	0.64	44.6
	40	123	0.50	50.9
GaAs	20	28	1.27	38.4
	30	123	0.93	46.0
	40	177	0.74	52.3

Tableau II-3 : Sections efficaces expérimentales σ_{exp} déterminées à partir des diamètres des traces et sections efficaces totales de déplacement $\sigma_{théo}$ déterminées par SRIM dans les deux semi-conducteurs et pour les trois énergies d'agrégats C₆₀ ^[COL 01].

On observe que les valeurs de la section efficace expérimentale σ_{exp} sont environ de 2 ordres de grandeurs plus importantes que les sections efficaces totales de déplacement $\sigma_{théo}$. De plus, la section efficace expérimentale σ_{exp} augmente lorsque l'énergie de l'agrégat augmente alors que la section totale de déplacement $\sigma_{théo}$ décroît. Par contre, la section efficace expérimentale augmente lorsque la

perte d'énergie électronique augmente aussi. Toutes ces observations montrent bien que la création des traces amorphes est liée aux fortes valeurs de pertes d'énergie électronique $(dE/dx)_e$ déposées par les agrégats.

Pour illustrer ce résultat, nous avons représenté sur la figure II-10, l'évolution de la section efficace expérimentale σ_{exp} dans les deux semi-conducteurs Ge et GaAs en fonction de la perte d'énergie électronique $(dE/dx)_e$

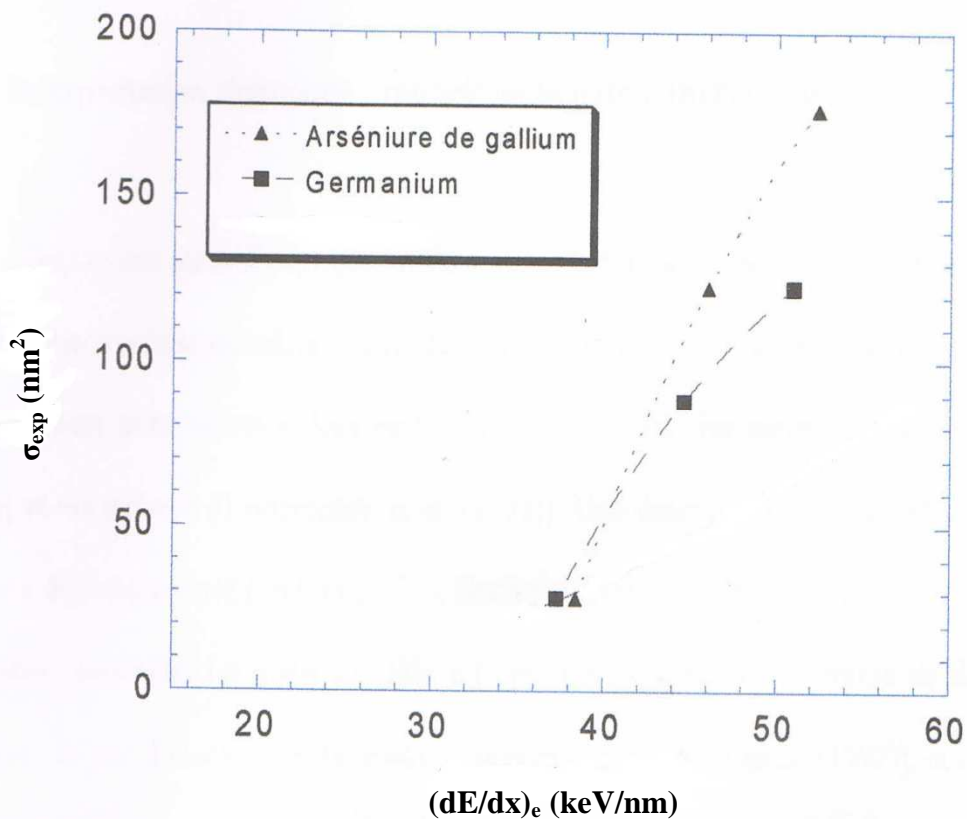


Figure II-10 : Evolution de la section efficace expérimentale σ_{exp} en fonction de la perte d'énergie électronique $(dE/dx)_e$ dans du germanium et de l'arséniure de gallium irradiés, à température ambiante, avec des agrégats C_{60} de 20, 30 et 40 MeV ^[COL.01].

Nous pouvons, en extrapolant ces courbes à une valeur nulle de la section efficace expérimentale, déterminer un seuil en perte d'énergie électronique nécessaire à la création des traces. Ce seuil est d'environ 35 keV.nm^{-1} dans l'arséniure de gallium et dans le germanium.

L'ensemble des résultats expérimentaux obtenus par divers équipes de recherches concernant l'évolution des sections efficaces d'endommagement induites par des agrégats C₂₀ ou C₆₀ dans les semi-conducteurs InP, GaAs et Ge a été illustré dans un travail réalisé par Kamarou et al. [KAM08] (figure II-11).

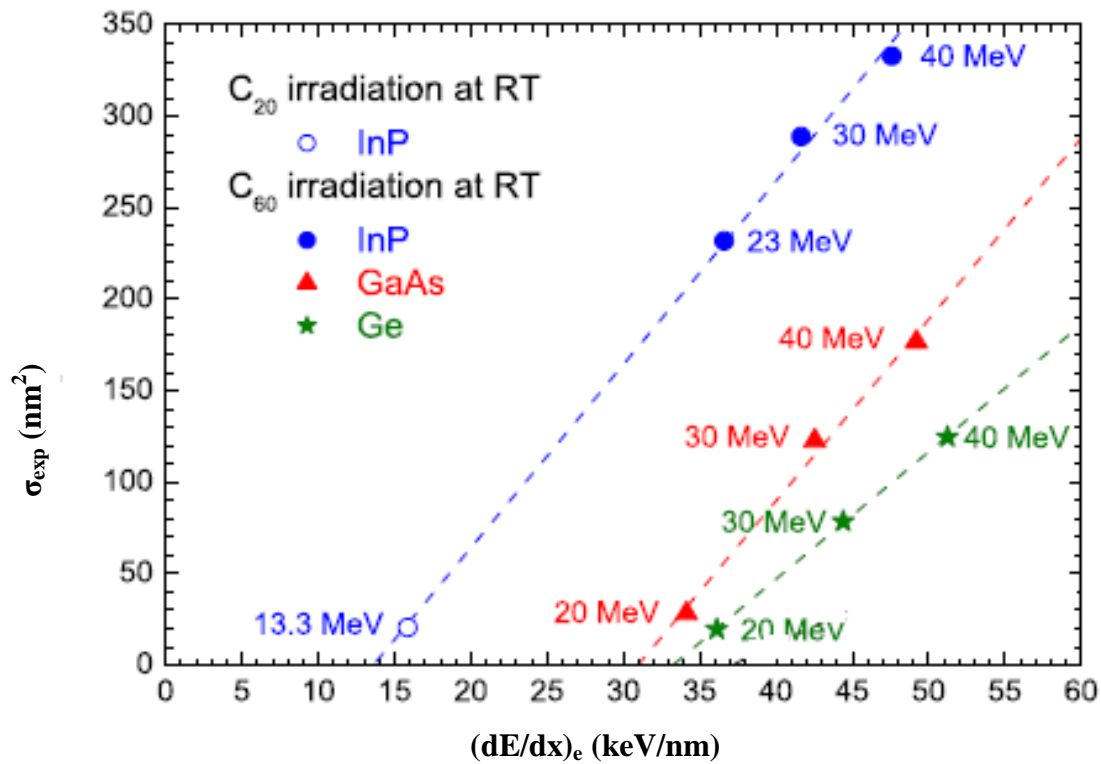


Figure II-11 : Evolution de la section efficace expérimentale σ_{exp} en fonction de la perte d'énergie électronique $(dE/dx)_e$, dans l'InP^[DHA07], GaAs^[COL 02] et Ge^[COL 01] irradiés, avec des agrégats C₂₀ ou C₆₀^[KAM08].

Cependant, comme en témoigne la figure II - 11, l'irradiation avec des agrégats C₂₀ ou C₆₀ mène à l'apparition des traces latentes, et que la section efficace d'endommagement augmente avec la perte d'énergie électronique $(dE/dx)_e$.

Références Chapitre II :

- [BOU 71] J. C. Bourgoin, F. Mollot, Phys. Stat. Sol. 43, 343 (1971).
- [BOU 81] J. C. Bourgoin, P. M. Mooney, F. Poulin, Defects and Radiation Effects in Semiconductors, edition R. R. Hasiguti, The institute of Physics, London (1981).
- [CAL67] T. A. Calcott, J. W. Mac Kay, Phys. Rev. 161, 698 (1967).
- [CLE 55a] J.W. Cleland, J. H. Jr. Crawford, J. C. Pigg, Phys. Rev. 98, 1742 (1955).
- [CLE 55b] J.W. Cleland, J. H. Jr. Crawford, K. Lark-Horowitz, J. C. Pigg, Phys. Rev. 99, 1170 (1955).
- [CLE 59] J. W. Cleland, J. H. Jr. Crawford, J. Appl. Phys. 30, 1204 (1955).
- [COL 01] A. Colder, Thèse de Doctorat de l'Université de Caen (2001).
- [COL 02] A. Colder, B. Canut, M. Levalois, P. Marie, X. Portier, S. M. M. Ramos, J. Appl. Phys. 91, 5853 (2002).
- [DHA 07] S. Dhamodaran, A. P. Pathak, A. Dunlop, G. Jaskierowicz, S. Della-Negra, Nucl. Instr. And Meth. B256, 229 (2007).
- [DID 07] A. Didyk, F. Komarov, L. Vlasukova, V. Yuvchenko, Yu. Bogatyrev, F. Korshunov, E. Gracheva, Vaccum 81, 1175 (2007).
- [DID 08] A. Didyk, F. Komarov, L. Vlasukova, E. Gracheva, A. Hofman V. Yuvchenko, R. Wisniewski, T. Wilczynska, Nukleonika 53, 77 (2008).
- [DRE 74] J. Dresner, J. Appl. Phys. 45, 4118 (1974).
- [DUN 98] A. Dunlop, G. Jaskierowicz, S. Della-Negra, Nucl. Instr. and Meth. B146, 302 (1998).
- [FOU 91] N. Fourches, G. Walter, J. C. Bourgin, J. C. Bourgin, J. Appl. Phys. 69, 2033 (1991).
- [FUK 74] N. Fukuoka, H. Saito, Jap. J. Appl. Phys. 13, 1524 (1974).
- [FUK 81] N. Fukuoka, H. Saito, Jap. J. Appl. Phys. 20, 1519 (1981).

- [FUK 83] N. Fukuoka, H. Saito, Y. Kambe, *Jap. J. Appl. Phys. Part 2.* 22, 1353 (1983).
- [GOB 58] G. W. Gobeli, *Phys. Rev.* 112, 732 (1958).
- [HER 98] O. Herre, W. Wesch, E. Wendler, P. I. Gaiduk, F. F. Komarov, S. Klaumünzer, P. Meier, *Phys. Rev.* B58, 4832 (1998).
- [HUB 97] H. Hubert, W. Assmann, S. A. Karamyan, A. Mücklich, W. Prusseit, E. Gazis, R. Grötzschel, M. Kokkoris, E. Kessionidis, H. D. Mieskes, R. Vlastou, *Nucl. Instr. and Meth.* B122, 542 (1997).
- [HUB 98] H. Hubert, W. Assmann, S. A. Karamyan, H. D. Mieskes, H. Nolte, E. Gazis, M. Kokkoris, S. Kessionides, R. Vlastou, R. Grötzschel, A. Mücklich, W. Prusseit, *Nucl. Instr. and Meth.* B146, 309 (1998).
- [IZU 86] K. Izui, S. Furuno, *Proc XIth Int. Cong. Electr. Micros*, Kyoto (1986).
- [JOH 89] S. T. Johnson, R. G. Elliman, J. S. Williams, *Nucl. Instr. and Meth.* B39, 449 (1989).
- [KAM 06] A. Kamarou, W. Wesch, E. Wendler, A. Undisz, M. Rettenmayr, *Phys. Rev.* B73, 184107 (2006).
- [KAM 08] A. Kamarou, W. Wesch, E. Wendler, A. Undisz, M. Rettenmayr, *Phys. Rev.* B78, 054111 (2008).
- [KHA 08] A. S. Khalil, L. T. Chadderton, A. Yu. Didyk, M. C. Ridgway, A. M. Stewart, *Part. Nucl. Lett.* 5, 481 (2008).
- [KOM 01] F. F. Komarov, P. I. Gaiduk, A. Kamarou, *Vacuum* 63, 657 (2001).
- [KOM 03] F. F. Komarov, P. I. Gaiduk, L. A. Vlasukova, A. Yu. Didyk, V. N. Yuvchenko, *Vacuum* 70, 75 (2003).
- [KOM 05] F. F. Komarov, L. A. Vlasukova, V. N. Yuvchenko, T. V. Petlitzkaya, P. Yukowski, *Vacuum* 78, 353 (2005).
- [MAC 59] J. W. Mac Kay, E. E. Klontz, *J. Appl. Phys.* 30, 1269 (1959).
- [MAR 93a] P. Marie, M. Levalois, J. P. Girard, G. Allais, D. Julienne, E. Paumier, *Radiations Effects and Defects in Solids.* 126, 271 (1993).

- [MAR 93b] P. Marie, M. Levalois, P. Bogdanski, J. Appl. Phys. 74, 868 (1993).
- [MAR 93c] P. Marie, M. Levalois, J. Appl. Phys. 75, 1852 (1993).
- [MIK 96] M. Mikou, R. Carin, P. Bogdanski, R. Madelon, Nucl. Instr. and Meth. B 107, 246 (1996).
- [MIR 78] A. Mircea, D. Bois, International Conference on Radiation Effects in Semiconductors, IOP Conf. proc n° 46, Ed. J. H. Albany. 82 (1978).
- [MOO 83] P. M. Mooney, F. Poulin, J. C. Bourgin, Phys. Rev. B 28, 3372 (1983).
- [MOO 84] P. M. Mooney, J. C. Bourgin, Phys. Rev. B 29, 1962 (1984).
- [NAG 88] V. Nagesh, J. W. Farner, J. Appl. Phys. 63, 1549 (1988).
- [PON 85] D. Pons, J. C. Bourgoïn, J. Phys. C 18, 3839 (1985).
- [POU 80] F. Poulin, J. C. Bourgin, Revue Phys. Appl. 15, 15 (1980).
- [SCH 10] C. S. Schnohr, P. Kluth, R. Giulian, D. J. Llewellyn, A. P. Byrne, D. J. Cookson, M. C. Ridgway, Phys. Rev. B 81, 075201 (2010).
- [SZE 02] G. Szenes, Z. E. Horvath, B. Pecs, F. Paszti, L. Toth, Phys. Rev. B 65, 045316 (2002).
- [SZE 11] G. Szenes, Nucl. Instr. and Meth. B 269, 2075 (2011).
- [WEL 52] H. Welker, Z. Naturf. 7a, 744 (1952).
- [WES 04] W. Wesch, A. Kamarou, E. Wendler, Nucl. Instr. and Meth. B 225, 111 (2004).
- [WES 06] W. Wesch, A. Kamarou, E. Wendler, S. Klaumünzer, Nucl. Instr. and Meth. B 242, 363 (2006).
- [WES 07] Wesch, A. Kamarou, E. Wendler, A. Undisz, M. Rettenmayr Nucl. Instr. and Meth. B 257, 283 (2007)
- [WES 12] W. Wesch, E. Wendler, C. S. Schnohr, Nucl. Instr. and Meth. B 277, 58. (2012).

Chapitre III

Calcul thermique

1 – Introduction

Dans la formulation du modèle de la pointe thermique [TOU 92, DUF 93a], le matériau-cible est considéré comme un ensemble de deux systèmes physiques continus en interaction : le système des électrons excités et le réseau atomique. Pour ces deux systèmes, il est supposé que les températures peuvent être définies.

- Le système électronique est décrit par la distribution de Fermi- Dirac :

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T_e}\right) + 1} \quad (\text{III-1})$$

ε est l'énergie d'un électron, μ le potentiel chimique dont la valeur à 0 K est égale à l'énergie de Fermi et T_e la température des électrons.

- Le système du réseau atomique considéré comme un ensemble de phonons est décrit par la distribution de Bose-Einstein :

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{h\omega}{k_B T_a}\right) - 1} \quad (\text{III-2})$$

$h\omega$ est l'énergie d'un phonon dont la valeur maximale est l'énergie de Debye $h\omega_D$, T_a la température du réseau atomique.

A la suite du dépôt d'énergie sur les électrons, ces derniers se thermalisent à travers l'interaction électron – électron. L'énergie est ensuite transmise au réseau via l'interaction électron – phonon. Dans ce cas, la température du réseau peut atteindre une valeur importante pour permettre un endommagement. L'élévation de température du réseau va dépendre des coefficients de diffusion de la chaleur sur les électrons et du temps d'interaction électron – phonon.

2- Etablissement des équations différentielles de la conduction de chaleur

On découpe la phase amorphe sous forme de couches cylindriques d'épaisseur dr . Chaque couche cylindrique des deux systèmes (électronique et réseau) à la distance r de la trajectoire du projectile est caractérisée par sa chaleur spécifique C_v et sa conductivité

thermique K à la température T . L'équation générale définissant la répartition des températures en chaque point de la couche cylindrique s'obtient en écrivant le principe de la conservation de l'énergie pour l'élément considéré.

La quantité de chaleur dQ échangée est donnée par l'expression:

$$dQ = C_v dT + l dV = C_p dT + h dP \quad (\text{III-3})$$

à volume constant : $dQ = C_v dT \quad (\text{III-4})$

Suite à l'augmentation de la chaleur, l'énergie d'une tranche cylindrique i varie de dQ pendant l'intervalle de temps dt .

Soient l'axe (Ox) porté par la trajectoire de l'ion incident et r la distance par rapport à cette trajectoire. Suite à l'échauffement, la variation d'énergie s'écrit alors:

$$dQ_i = C_i dT 2\pi r dr dx \quad C_i \text{ est définie par unité de volume} \quad (\text{III-5})$$

$$\frac{dQ_i}{dt} = C_i \frac{dT}{dt} 2\pi r dr dx \quad (\text{III-6})$$

Cette variation d'énergie est due à la variation du flux de chaleur, pour la tranche cylindrique i , donnée par la première loi de Fourier.

$$j = -K \text{ grad}T = \frac{dQ}{dS dt} \quad (\text{III-7})$$

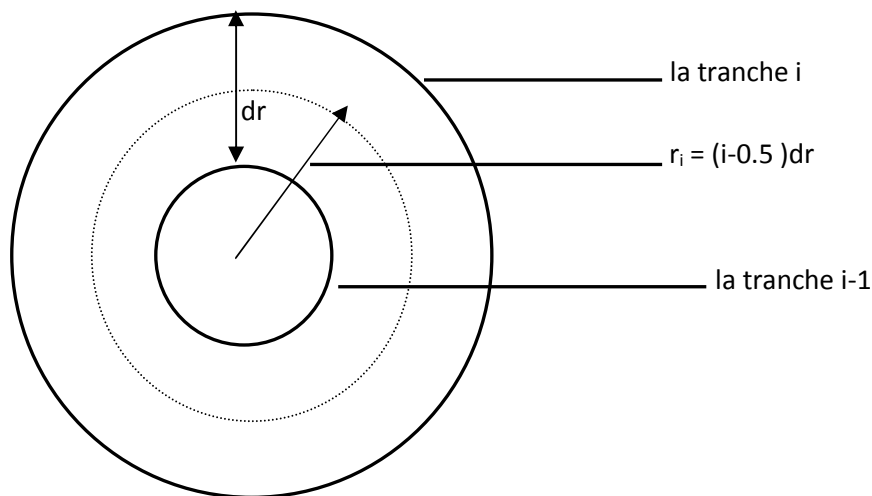


Figure III –1 : représentation des tranches cylindriques

Pour déterminer la variation d'énergie au point r_i défini par $r_i = (i-0.5) dr$, nous calculons la variation du flux aux points $r_i + \frac{dr}{2}$ et $r_i - \frac{dr}{2}$. La quantité de chaleur qui entre par unité de temps à travers la surface dS_1 dans la direction Ox est égale à $-K_i \text{ grad } T_i dS_1 =$

$$- K_i \left(\frac{\partial T_i}{\partial r} \right)_{r_i + \frac{dr}{2}} 2 \pi \left(r_i + \frac{dr}{2} \right) dx \quad (\text{III-8})$$

La quantité de chaleur qui sort de la surface dS_2 est

$$- K_i \left(\frac{\partial T_i}{\partial r} \right)_{r_i - \frac{dr}{2}} 2 \pi \left(r_i - \frac{dr}{2} \right) dx \quad (\text{III-9})$$

En utilisant le théorème de la moyenne :

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \frac{\partial f}{\partial x} \Delta x \quad (\text{III-10})$$

$$f(x - \Delta x) = f(x) - \frac{\partial f}{\partial x} \Delta x \quad (\text{III-11})$$

Nous obtenons :

$$\frac{\partial T_i}{\partial r} \left(r_i + \frac{dr}{2} \right) = \left(\frac{\partial T_i}{\partial r} \right)_{r_i} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} \frac{dr}{2} \quad (\text{III-12})$$

$$\frac{\partial T_i}{\partial r} \left(r_i - \frac{dr}{2} \right) = \left(\frac{\partial T_i}{\partial r} \right)_{r_i} - \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} \frac{dr}{2} \quad (\text{III-13})$$

Donc les relations (III-8) et (III-9) s'écrivent :

$$- K_i \left(\frac{\partial T_i}{\partial r} \right)_{r_i + \frac{dr}{2}} 2 \pi \left(r_i + \frac{dr}{2} \right) dx = - K_i 2 \pi dx \left[\left(\frac{\partial T_i}{\partial r} \right)_{r_i} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} \frac{dr}{2} \right] \left(r_i + \frac{dr}{2} \right) \quad (\text{III-14})$$

$$- K_i \left(\frac{\partial T_i}{\partial r} \right)_{r_i - \frac{dr}{2}} 2 \pi \left(r_i - \frac{dr}{2} \right) dx = - K_i 2 \pi dx \left[\left(\frac{\partial T_i}{\partial r} \right)_{r_i} - \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} \frac{dr}{2} \right] \left(r_i - \frac{dr}{2} \right) \quad (\text{III-15})$$

En soustrayant l'équation (III – 14) de (III – 15), nous obtenons :

$$K_i 2\pi r dx \left\{ \left[\left(-\frac{\partial T_i}{\partial r} \right)_{r_i} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} \frac{dr}{2} \right] \left(r_i - \frac{dr}{2} \right) + \left[\left(\frac{\partial T_i}{\partial r} \right)_{r_i} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} \frac{dr}{2} \right] \left(r_i + \frac{dr}{2} \right) \right\} = 2\pi r dr dx \frac{1}{r} K_i \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_i}{\partial r} \right)_{r=r_i} \quad (\text{III} - 16)$$

Soit A(r, t) l'énergie déposée sur le système électronique par le projectile, le bilan d'énergie s'écrira pour les deux systèmes comme :

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r K_e (T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r}) - g (T_e - T_a) + A(r, t) \quad (\text{III} - 17)$$

$$C_a \frac{\partial T_a}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r K_a (T_a) \frac{\partial T_a}{\partial r}) + g (T_e - T_a) \quad (\text{III} - 18)$$

$g (T_e - T_a)$ représente l'énergie d'interaction électron- phonon. L'élévation de la température des deux systèmes est régie par le système d'équations différentielles couplées et non linéaires du fait de la dépendance en température de tous les coefficients.

Du point de vue de la pointe thermique, le transfert d'énergie des ions incidents vers le matériau se fait en deux temps :

- 1) l'énergie des ions incidents est déposée sur les électrons en un temps de l'ordre de 10^{-15} s.
- 2) l'énergie est ensuite transférée des électrons vers les atomes en un temps variant de 10^{-13} s à 10^{-10} s. Ce transfert est gouverné par le couplage électron- phonon.

Au cours de ce processus, l'énergie diffuse radialement dans les deux sous-systèmes. Le bilan de transfert d'énergie se traduit par l'écriture des deux équations (III - 17) et (III - 18). Ce bilan s'établit dans une géométrie cylindrique dont l'axe (Ox) est l'axe de passage des ions ; r la distance à cet axe et t le temps (figure III –2).

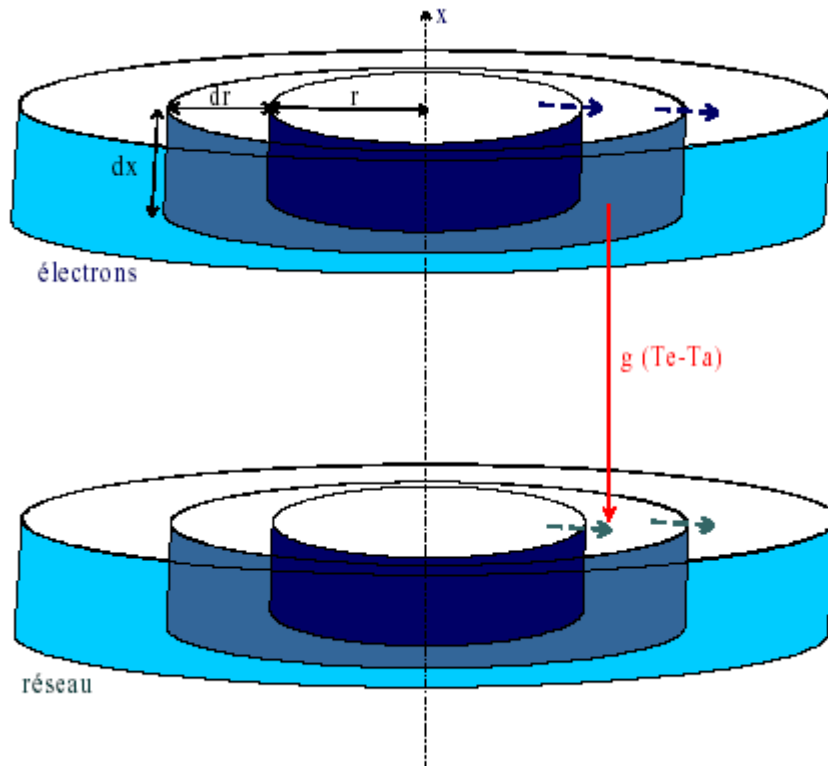


Figure III- 2 : Transfert d'énergie entre le gaz d'électrons et le réseau, en géométrie cylindrique. Les flèches en pointillés représentent la diffusion d'énergie dans les deux sous-systèmes

3 – Application du modèle de la pointe thermique aux semi-conducteurs cristallins

Les mécanismes de transfert de chaleur entre les électrons, et entre les électrons et le réseau, dépendent de la structure du matériau. Plusieurs questions se posent quant aux valeurs à prendre pour certaines caractéristiques thermiques, notamment le système d'électrons. Cependant, comme il est connu des expériences laser sur l'évolution temporelle des propriétés optiques des différents semi-conducteurs ^[RAF94, HUA98, SCH04], le gap d'énergie diminue et on observe un comportement métallique si environ 10% des électrons de valence sont excités à la bande de conduction. Cette condition est vérifiée près de la trajectoire de l'ion lourd rapide. En outre, comme il a été suggéré par d'autres auteurs, les électrons chauds dans la bande de conduction des matériaux non métalliques se comporteront comme des électrons chauds dans un métal ^[BAR88, MEF97]. En admettant cette description, nous pouvons dire que les paramètres décrivant la relaxation de l'énergie des électrons dans la bande de conduction et le transfert d'énergie aux atomes dans les semi-conducteurs peuvent être déterminés comme dans les métaux.

4- La version analytique du modèle de la pointe thermique

Une version analytique du modèle de la pointe thermique pour les semi-conducteurs a été élaborée par Szenes^[SZE11]. Dans cette version, l'aspect microscopique du phénomène de la pointe thermique n'est pas pris en compte.

Le passage de l'ion incident énergétique induit une élévation de la température du réseau, durant un temps inférieur à 10^{-12} s, donnée par :

$$T(r, t) = T_{ig} + \Delta T(r, t) \quad (\text{III} - 19)$$

où $T(r, t)$ est la température du matériau à la distance r de la trajectoire de l'ion incident et à l'instant t . T_{ig} est la température de la cible et $\Delta T(r, t)$ l'augmentation de la température dans la pointe thermique. A l'instant $t = 0$, $\Delta T(r, t)$ peut être approximée par une distribution gaussienne donnée par :

$$\Delta T(r, 0) = \frac{g \langle S_e \rangle}{3\pi k a^2(0)} \exp[-r^2 / a^2(0)] A \quad (\text{III} - 20)$$

$a(0)$ est la largeur initiale de la distribution gaussienne.

$\langle S_e \rangle = S_e / N$, où N est la densité atomique et S_e le pouvoir d'arrêt électronique.

k est la constante de Boltzmann.

$g S_e$ est la fraction de l'énergie déposée dans la pointe thermique. En supposant que le rayon de la trace est le rayon maximal de la zone fondue, les équations suivantes représentent la variation du rayon de trace effectif R_e en fonction du pouvoir d'arrêt électronique S_e :

$$R_e^2 = a^2(0) \ln \frac{S_e}{S_{et}} \quad R_e < a(0) \quad (\text{III} - 21)$$

$$R_e^2 = \frac{a^2(0) S_e}{2.7 S_{et}} \quad R_e > a(0) \quad (\text{III} - 22)$$

S_{et} est le seuil de création de traces.

$$S_{et} = \frac{3\pi N k T_0 a^2(0)}{g} \quad (\text{III} - 23)$$

Dans l'équation (III-23), $T_0 = T_f - T_{ir}$ où T_f et T_{ir} sont la température de fusion et de l'irradiation respectivement.

Szenes a utilisé son modèle ^[SZE11] pour l'analyse des traces latentes observées dans les semi-conducteurs cristallins InP, GaAs et GeS irradiés par des ions lourds rapides et par des clusters (figure III-3)

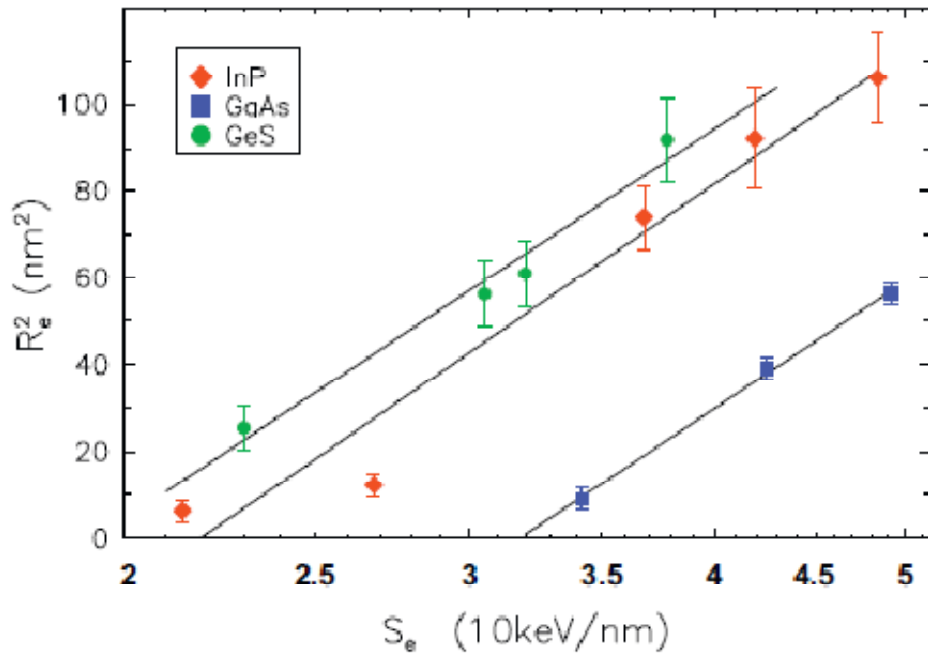


Figure III- 3 : Variation du carré du rayon de trace effectif R_e^2 en fonction du pouvoir d'arrêt électronique S_e dans le cas du GeS ^[VET94-SZE06], InP ^[SZE02, KHA05, DHA07] et GaAs ^[COL02]

De la figure III - 3, SZENES a déduit les paramètres de formation de traces suivants :

$$a(0) = 11.6 \pm 0.7 \text{ nm}, g = 0.205 \pm 0.014 \quad \text{pour l'InP} \quad (\text{III} - 24)$$

$$a(0) = 11.4 \pm 0.3 \text{ nm}, g = 0.18 \pm 0.007 \quad \text{pour le GaAs} \quad (\text{III} - 25)$$

Les paramètres pour le GeS ont été mesurés à hautes vitesses et sont :

$$a(0) = 11.4 \pm 0.7 \text{ nm}, g = 0.17 \pm 0.014. \quad (\text{III} - 26)$$

Dans cette étude, il a démontré aussi qu'il existe une relation entre l'énergie de gap E_g et la largeur initiale de la distribution de température $a(0)$ (figure III-4)

La figure III – 4 montre que la valeur minimale de $a(0)$ des semi-conducteurs est égale à celle des isolants.

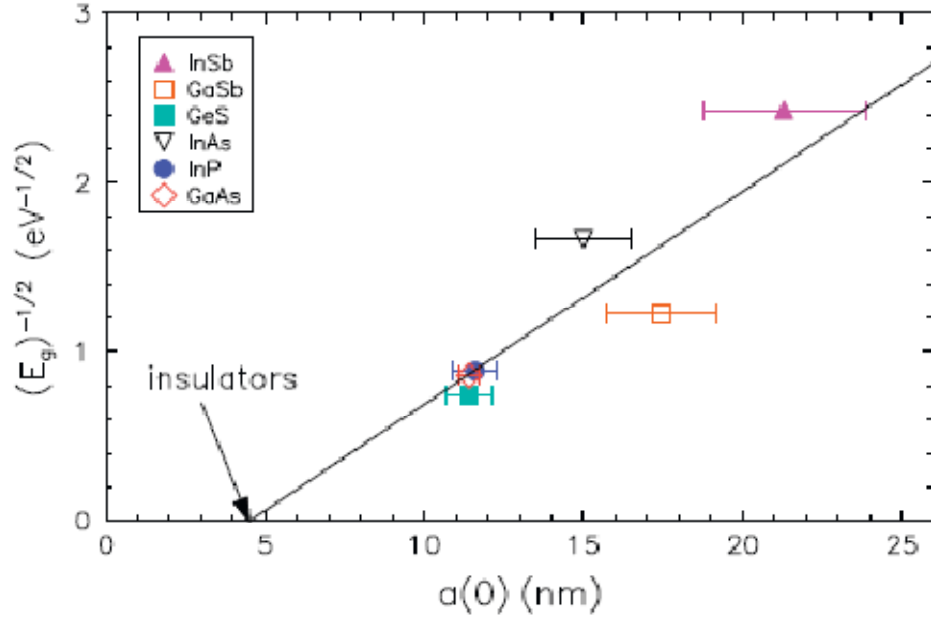


Figure III- 4 : Variation de la largeur initiale de la distribution de température $a(0)$ en fonction de l'énergie de la bande interdite E_g .

5 – Le comportement du gaz d'électrons à haute température

Martinenko et Yavlinskii^[MAR 83] ont proposé une description théorique, dans le cadre d'un gaz d'électrons libres pour déterminer les paramètres thermodynamiques du système électronique. Après le dépôt d'énergie par les ions lourds dans le matériau, il en résulte un rapide échauffement du système électronique à une température T_e comparable à l'énergie de Fermi E_F , entraînant une région hors équilibre. Le refroidissement du système électronique se fait par le transfert de chaleur au réseau. Le temps nécessaire pour la transmission de chaleur des électrons au réseau est beaucoup plus grand que le temps d'établissement de l'équilibre à l'intérieur du système électronique. Les électrons chauds ont donc une distribution de Fermi avec leur propre température T_e . Les quantités physiques caractérisant les propriétés du gaz d'électrons sont exprimées sous formes d'intégrales de Fermi.

$$F_{k+1/2} = \int_0^{\infty} \frac{x^{k+1/2}}{e^{x-\eta}} dx \quad \text{où } \eta = \frac{E_F}{k_B T_e} \quad (\text{III-27})$$

Pour le calcul de l'intégrale, nous pouvons utiliser la formule approximative suivante :

$$F_{k+1/2} \approx A \zeta^{-3/2} [1 + (B/\zeta)^2]^{k/2} \quad (\text{III-28})$$

$$\text{Avec } A = \frac{2}{3} \frac{\Gamma(k_B + \frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{3}{2})} \quad B = \left[A(k + \frac{3}{2}) \right]^{-1/k}$$

$$\zeta = \frac{k_B T_e}{\mathcal{E}_F} ; \mathcal{E}_F \text{ est l'énergie de Fermi}$$

Dans les semi-conducteurs, l'énergie de Fermi est située dans la bande interdite, dont la largeur varie selon le matériau de 0 eV à quelques eV. Les expressions analytiques simples des caractéristiques thermodynamiques du gaz d'électrons à chaque température peuvent être obtenues à l'aide de cette approximation.

5.1 – La chaleur spécifique C_e

La chaleur spécifique C_e est définie à partir de l'augmentation d'énergie dU nécessaire pour porter le gaz d'une température T_e à la température $T_e + dT_e$.

$$C_e = \frac{dU}{dT_e} = \frac{d}{dT_e} \int_0^{\infty} \varepsilon \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\infty} \varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial T_e} d\varepsilon \quad (\text{III-29})$$

où $\rho(\varepsilon)$ est la densité d'états.

Dans le domaine des basses températures ($T \ll T_{\text{Fermi}}$), C_e est proportionnelle à T_e :

$$C_e = \gamma T_e, \text{ avec : } \gamma = \frac{\pi^2 k_B^2}{2 \mathcal{E}_F} n_e \text{ A haute température, } C_e \text{ devient indépendante de } T_e : C_e = \frac{3}{2} n_e k_B$$

Pour tenir compte de ce comportement, nous avons choisi de définir deux domaines de variation de C_e qui se raccordent à la température limite T_0 (figure III-5).

$$T_e < T_0 : \quad C_e = \gamma T_e \quad (\text{III-30})$$

$$T_e > T_0 : \quad C_e = \frac{3}{2} n_e k_B \quad (\text{III-31})$$

$$T_0 \text{ est tel que } \quad \gamma T_0 = \frac{3}{2} n_e k_B \quad (\text{III-32})$$

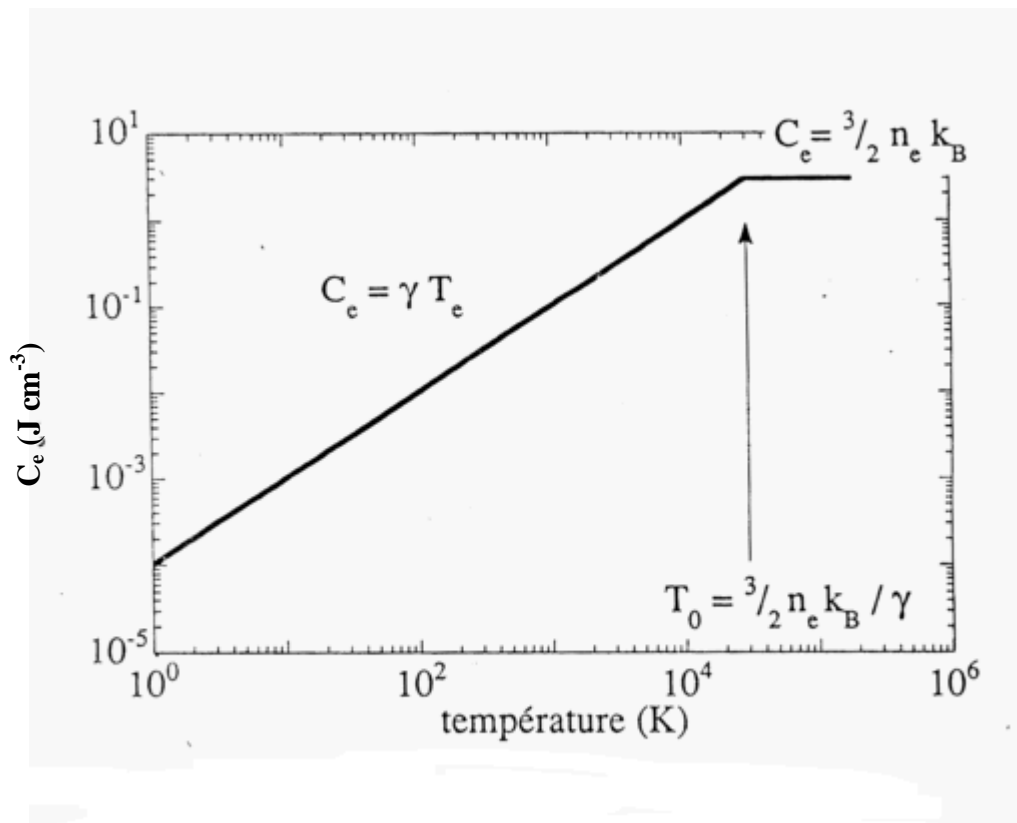


Figure III-5 : Loi d'évolution de la chaleur spécifique électronique C_e en fonction de la température ^[DUF 93a].

5.2 – La diffusivité thermique $D_e = \frac{K_e}{C_e}$

La diffusivité thermique électronique, due aux collisions électroniques, caractérise l'aptitude du gaz d'électron à propager l'énergie reçue. Elle est donnée par :

$$D_e = \frac{1 \langle v \rangle}{3 n \sigma}$$

$\langle v \rangle$ et n sont respectivement la vitesse moyenne et la densité des électrons. σ est la section efficace d'interaction électron-électron.

5.2.1 – Détermination de $\langle v \rangle$

$\langle v \rangle = \sqrt{2m_e \langle E \rangle}$ où m_e et $\langle E \rangle$ sont respectivement la masse et l'énergie moyenne des électrons. L'énergie moyenne du gaz d'électrons est définie par :

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \varepsilon \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^{\infty} \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon} \quad (\text{III-33})$$

La densité d'états $\rho(\varepsilon)$ du gaz d'électrons libres est donnée par :

$$\rho(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III-34})$$

V est le volume du matériau. $f(\varepsilon)$ est la fonction de distribution de Fermi-Dirac définie plus haut. Le changement de variable $\zeta^{-1} = \frac{\varepsilon_F}{k_B T_e}$ et l'utilisation de la formule approximative précédente conduisent à l'expression suivante :

$$\langle E \rangle = k_B T_e \frac{F_{3/2}}{F_{1/2}} \approx \varepsilon_F (\zeta^2 + 0.16)^{1/2} \quad (\text{III-35})$$

5.2.2 – Détermination de la section efficace σ :

La section efficace σ pour qu'un électron d'énergie ε_1 transmette une énergie $\Delta\varepsilon$ à un électron d'énergie ε_2 au cours d'une collision en tenant compte du principe de Pauli et pour des faibles transferts d'énergie $\Delta\varepsilon \ll \varepsilon_1, \varepsilon_2$ est donnée par l'expression suivante :

$$\sigma = 2\sigma_{tr} \left(\frac{F_{1/2}}{2F_{-1/2}} \right)^2 \approx \frac{2\sigma_{tr}}{1 + \left(\frac{2k_B T}{3\varepsilon_F} \right)^2} \quad (\text{III-36})$$

La section efficace différentielle de transport σ_{tr} pour la collision de deux électrons est déterminée par l'utilisation du potentiel coulombien écranté $V(r) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \exp\left(-\frac{r}{d}\right)$

où d est le rayon de Debye donné par :

$$d^2 = \frac{\varepsilon_F}{4\pi n_e e^2} \sqrt{\left(\frac{k_B T_e}{\varepsilon_F} \right)^2 + \frac{4}{9}} \quad (\text{III-37})$$

L'expression de la diffusivité thermique peut se mettre sous la forme :

$$D_e = D_{e0} \Phi(\zeta)$$

où ζ est la température réduite définie par $k_B T_e / \varepsilon_F$ et Φ est la fonction définie comme :

$$\Phi(\zeta) = \frac{Z^2}{\zeta^2} (\zeta^2 + 0.16)^{1/4} \left[\ln(1+Z) - \frac{Z}{1+Z} \right]^{-1} \quad (\text{III-38})$$

$$\text{Avec } Z = \frac{2}{3} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{4/3} \frac{1}{r_s} \sqrt{(\zeta^2 + 0.16)(\zeta^2 + \frac{4}{9})} \quad \text{et } D_{e0} = (8/9\pi) (h/m) = 0.402 \text{ cm}^2/\text{s}$$

r_s est le rayon de la sphère équivalente au volume libre autour d'un électron :

$$\frac{1}{n_e} = \frac{4}{3} \pi (a_B r_s)^3 \quad (a_B \text{ est le rayon de Bohr } (0.529 \text{ \AA}))$$

La figure III- 6 donne la variation de D_e en fonction de ζ . On constate qu'à basse température, D_e décroît en $1/T_e^2$ jusqu'à $\zeta = 0.1$, puis varie en $1/T_e$ et passe par un minimum ($\zeta = 1$) pour recroître à partir de $\zeta = 2$

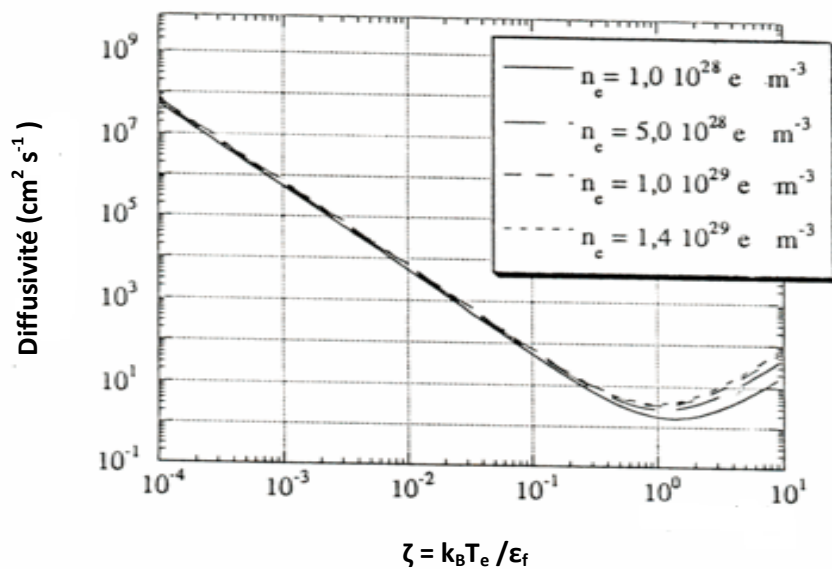
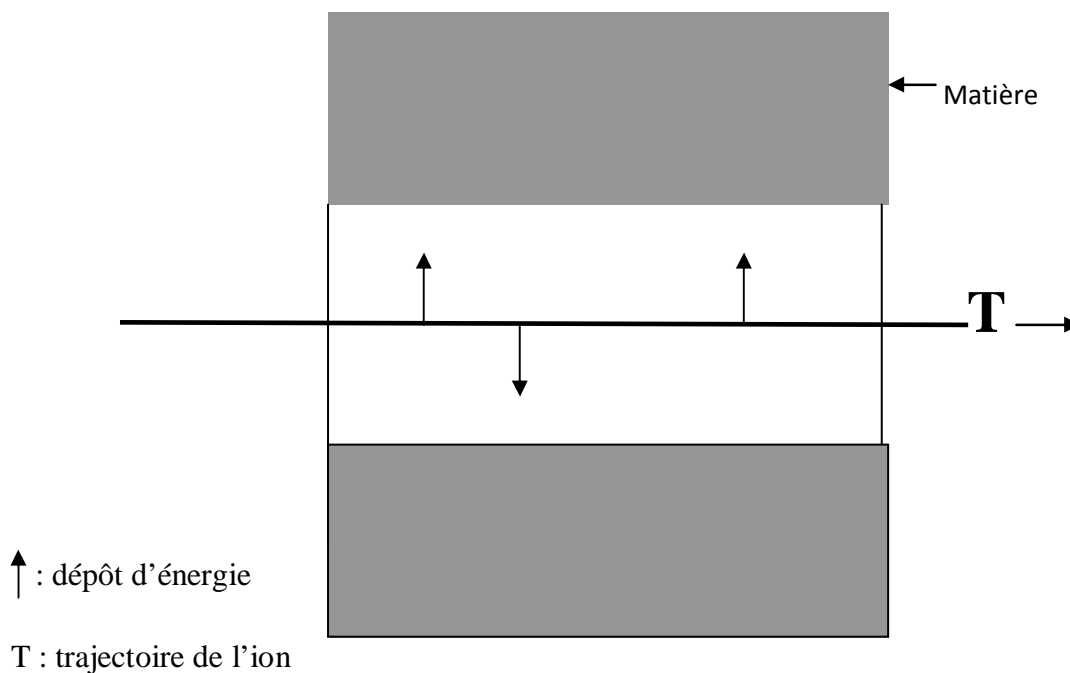


Figure III-6 : Loi théorique de la diffusivité thermique électronique en fonction de la température réduite ζ pour différentes densités électroniques n_e [MAR83].

6 - La répartition spatio-temporelle du dépôt d'énergie $A(r, t)$

Le dépôt d'énergie de l'ion sur le système électronique s'étend radialement à partir de l'impact de l'ion par l'éjection d'électrons primaires et secondaires.



Le dépôt d'énergie S_e (en keV/Å) sur cette tranche est une donnée du faisceau. Or ce dépôt n'est ni instantané, ni ponctuel. Il convient donc de modéliser sa répartition sur la surface et dans le temps. Nous supposons que la répartition surfacique ne dépend que de r et que les variables r et t sont indépendants. Au rayon r et à l'instant t , $A(r, t)$ peut s'écrire sous la forme :

$$A(r, t) = B S_e D_2(r) X(t) \quad (\text{III-39})$$

B est déterminé à partir de la condition de normalisation : $\int_0^{r_m} \int_0^{\infty} A(r, t) dS dt = S_e$

où r_m est le parcours projeté maximum des électrons, dont l'expression sera donnée par la suite.

6.1 - La dépendance en temps

D'un point de vue physique, il semble réaliste de modéliser $X(t)$ sous la forme d'une gaussienne centrée à l'instant t_0 .

$$X(t) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[\frac{-(t-t_0)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (\text{III-40})$$

6.1.1 - Détermination de t_0

Dans le cas des ions lourds, l'énergie moyenne des électrons est de l'ordre de 500 eV, Gervais ^[GER 93] a montré qu'un électron de 500 eV peut être ralenti par interaction avec les électrons pour atteindre l'énergie de Fermi en un temps de l'ordre de 10^{-15} s. Nous supposons que ce temps correspond au temps de dépôt d'énergie sur l'ensemble des électrons. Les expériences lasers femtosecondes ^[MOU 90, MIL 88] montrent que ces électrons interagissent entre eux en un temps de l'ordre de 10^{-16} s beaucoup plus court que le temps du dépôt. On peut penser que l'énergie déposée sur les électrons s'est thermalisée en 10^{-15} secondes. Pour ces raisons, nous prenons la gaussienne centrée sur $t_0 = 10^{-15}$ s. Afin d'éviter que le calcul d'une exponentielle ne rallonge le temps de calcul final à chaque itération, la gaussienne est tronquée à $2la$ (la est la largeur à mi-hauteur) définie par :

$$la = 2\sigma\sqrt{\ln 2}$$

$$X(t) = \frac{1}{0.982\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad \text{pour } t < 2\ell a \quad (\text{III-41})$$

$$X(t) = 0 \quad \text{ailleurs} \quad (\text{III-42})$$

6.2 – Dépendance spatiale

Comme mentionné précédemment, les ions lourds, génèrent des électrons secondaires qu'on appelle rayonnement delta (δ). L'importance du rôle des électrons secondaires (rayonnement δ) dans la détermination de la structure des traces d'ions a été soulignée par Katz et al. ^[KAT 69] qui ont utilisé la distribution de la dose du rayonnement δ pour analyser l'endommagement. En se basant sur des calculs de monte Carlo de la distribution de dose dans l'eau liquide qui traite les interactions des particules primaires et tous les électrons secondaires qui accompagnent le passage de l'ion incident et en combinant des formules semi-empiriques, utilisées dans les calculs de la théorie de traces, Zhang et al. ^[ZHA 85] ont développé une formulation analytique, de la distribution radiale de l'énergie déposée.

6.2.1- Développement analytique de la distribution radiale de la dose

Elle est développée en comparant deux calculs. Dans le premier, les électrons du milieu sont supposés liés avec un potentiel d'ionisation I. La relation qui lie leurs parcours à leur énergie est linéaire. Dans le second, les électrons sont supposés libres. La relation qui lie leurs parcours à l'énergie est une loi en puissance. Dans les deux cas, les électrons secondaires (rayonnement δ) sont supposés éjectés suivant la normale et se déplacent en ligne droite. Le nombre de rayonnement δ émis par unité de parcours avec des énergies comprises entre ω et $\omega + d\omega$ est donné par la formule de Rutherford pour un milieu contenant N électrons par unité de volume.

$$dn = \frac{2Ne^4 Z^{*2}}{m_e c^2 \beta^2} \left(\frac{d\omega}{(\omega + I)^2} \right) \quad (\text{III-43})$$

Z^* : la charge effective de l'ion incident.

β : la vitesse relative de l'ion incident

c : la vitesse de la lumière

m_e : la masse de l'électron

I : le potentiel d'ionisation pris arbitrairement égal à 10 eV

6.2.1.1 – Cas 1

Comme mentionné plus haut, la relation qui lie le parcours des électrons à leurs énergies est linéaire dans ce cas.

$$p = k\omega \iff \frac{d\omega}{dp} = k^{-1} \quad (\text{III-44})$$

Le parcours d'un électron après avoir pénétré une épaisseur r du matériau est :

$$\omega_r = k^{-1}(p - r) \iff \frac{d\omega_r}{dr} = -k^{-1} \quad (\text{III-45})$$

ω_r est l'énergie de l'électron après avoir pénétré l'épaisseur r . Pour une couche cylindrique de rayon r d'épaisseur dr dont l'axe est le parcours de l'ion, la dose déposée est donc :

$$D_0(r) = \frac{1}{2\pi r dr} \int_{\omega_r}^w \left(-\frac{d\omega_r}{dr}\right) dr \frac{dn}{d\omega} d\omega \quad (\text{III -46})$$

$w = 2m_e c^2 \beta^2 (1 - \beta^2)$ est l'énergie maximale que peut avoir un électron. L'intégration de (III - 46) donne :

$$D_0(r) = \frac{Ne^4 Z^{*2}}{m_e c^2 \beta^2 r} \left(\frac{1}{r + \theta} - \frac{1}{R - \theta} \right) \quad (\text{III -47})$$

Avec $r = k\omega$; $kI = \theta$; $kW = R$

Si on compare cette expression à la dose calculée précédemment par Butts et Katz^[BUT 67] où $I = 0$, on constate que l'effet du potentiel d'ionisation réside dans le fait de remplacer r et R par $r + \theta$ et $R + \theta$ respectivement.

6.2.1.2 – Cas 2

Dans ce cas, la relation qui lie le parcours des électrons à l'énergie est de la forme :

$$p = k\omega^\alpha$$

d'où :

$$\frac{dp}{p} = \alpha \frac{d\omega}{\omega} \quad \text{et} \quad k\omega_r^\alpha = (p - r)$$

$$\omega_r = \left(\frac{p - r}{k}\right)^{\alpha^{-1}} = \omega \left(1 - \frac{r}{p}\right)^{\alpha^{-1}} ; \text{ d'où } -\frac{d\omega_r}{dr} = \frac{\omega}{\alpha p} \left(1 - \frac{r}{p}\right)^{(\alpha^{-1}-1)}$$

En prenant $I = 0$ dans l'équation (III -43), nous tirons :

$$D(r) = \frac{Ne^4 Z^{*2}}{\alpha m_e c^2 \beta^2} \int_{\omega_r}^{\omega} \frac{1}{p} \left(1 - \frac{r}{p}\right)^{(\alpha^{-1}-1)} \frac{d\omega}{\omega} \quad (\text{III -48})$$

En substituant (III -47), $D(r)$ devient :

$$D(r) = \frac{Ne^4 Z^{*2}}{\alpha^2 m_e c^2 \beta^2 r} \int_r^p \left(1 - \frac{r}{p}\right)^{\alpha^{-1}-1} \frac{dp}{p^2} \quad (\text{III -49})$$

L'équation (III - 49) est facilement intégrable en posant $y = \frac{1}{p}$

$$D(r) = \frac{Ne^4 Z^{*2}}{\alpha m_e c^2 \beta^2 r} \left[\frac{\left(1 - \frac{r}{R}\right)^{\alpha^{-1}}}{r} \right] \quad (\text{III - 50})$$

Du cas 1, nous notons que la transition des électrons libres aux électrons liés se fait en remplaçant r et R à l'intérieur des parenthèses par $r + \theta$ et $R + \theta$ respectivement. Nous faisons la même substitution dans $D(r)$ pour obtenir l'équation (III -51) bien que cette dernière ne se déduit pas directement de l'intégration de l'équation (III -49)

$$D_1(r) = \frac{Ne^4 Z^{*2}}{\alpha m_e c^2 \beta^2 r} \left[\frac{\left(1 - \frac{r + \theta}{R + \theta}\right)^{1/\alpha}}{r + \theta} \right] \quad (\text{III -51})$$

Il est à noter que la relation qui lie p (la distance parcourue par les électrons) à leur énergie est déterminée par la simulation des données expérimentales effectuée par Kobetich et Katz ^[KOB 68], et Iskel et al. ^[ISK 83] sous la forme $p = k \omega^\alpha$, où $k = 6.10^{-6} \text{ g cm}^2 \text{keV}^{-\alpha}$

$$\alpha = 1.079 \quad \text{pour } w < 1 \text{ keV}$$

$$\alpha = 1.667 \quad \text{pour } w > 1 \text{ keV}$$

Cette distribution de dose radiale reproduit la moitié du pouvoir d'arrêt des protons. Pour ces raisons, Waligorski ^[WAL 86] a déterminé une correction de l'équation (III-22) sous la forme $D_2(r) = D_1(r) (1+k(r))$ en posant :

$$k(r) = A \left(\frac{r-B}{c} \right) \exp - \left(\frac{r-B}{c} \right)$$

après des ajustements semi- empiriques, il aboutit à l'expression :

$$\text{Pour } r > B = 0.1 \text{ nm} \quad k(r) = A \left(\frac{r-\beta}{c} \right) \exp - \left(\frac{r-\beta}{c} \right) \quad \text{(III-52)}$$

$c = 1.5 \text{ nm} + 5 \text{ nm} \times \beta$; β est la vitesse relative.

$$A = 8 \beta^{1/3} \text{ pour } \beta < 0.03 ; A = 19 \beta^{1/3} \text{ pour } \beta > 0.03$$

$$\text{Pour } r < B = 0.1 \text{ nm} \quad k(r) = 0$$

La formule $D_2(r)$ se réduit à l'expression de Zhang et al. ^[ZHA 85] pour r grand. $D_1(r)$ est interprétée comme la dose déposée par le rayonnement delta. La quantité $D_1(r) k(r)$ caractérise la contribution à la dose radiale des excitations et ionisations primaires. Ces deux quantités sommées donnent la dose radiale totale.

$$D_2(r) = D_1 (1+ k(r)) \quad \text{(III-53)}$$

$A(r, t)$ peut s'écrire sous la forme :

$$A(r, t) = B S_e D_2(r) \frac{1}{0.982 \sigma \sqrt{2\pi}} \exp \frac{-(t-t_0)^2}{2\sigma^2} \quad \text{pour } t < 2 \ell a \quad \text{(III-54)}$$

$$A(r, t) = 0 \quad \text{ailleurs}$$

$$B = \frac{1}{\int_0^{r_m} D_2(r) 2\pi r dr} ;$$

L'intégrale est déterminée par la sommation de toutes les énergies déposées sur les rayons $r_i =$

$$(i-0.5) dr \leq r_m \int_0^{r_m} D_2(r) 2\pi r dr = \sum_{i=1}^{i=r_m/dr} D_2(r_i) 2\pi r_i dr$$

$$r_m = \frac{k}{\rho} [w]^\alpha ; w = 2m_e c^2 \beta^2 (1 - \beta^2)$$

ρ est la densité du matériau considéré α et k sont définis par : $k = 6 \cdot 10^{-6} \text{ g cm}^2 \text{ keV}^{-\alpha}$

$$\alpha = 1.079 \quad \text{pour } w < 1 \text{ keV}$$

$$\alpha = 1.667 \quad \text{pour } w > 1 \text{ keV}$$

7 – L'interaction électron – phonon

Le mécanisme fondamental, à la base de l'interaction électron – phonon, est décrit par le phénomène de polarisation locale. Le phonon est un mode de vibration du réseau atomique. Si on se place à un endroit donné du réseau, les atomes ne sont pas à leur position d'équilibre. Il apparaît donc une polarisation locale \vec{P} , d'où un champ électrique local \vec{E} induit, qui agit sur l'électron par la force classique $\vec{F} = -e\vec{E}$. Le traitement complet de cette interaction nécessite la prise en compte de la population F_k d'électrons d'énergie $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ et de la population N_q de phonons d'énergie $\hbar\omega_q$ (\vec{q} vecteur d'onde du phonon). Un électron de vecteur d'onde \vec{k} , interagit avec un phonon pour arriver dans un état final \vec{k}' .

Les vecteurs vérifient les relations de conservation de l'impulsion :

$$\vec{k} + \vec{q} = \vec{k}' : \quad \text{absorption d'un phonon}$$

$$\vec{k} = \vec{k}' + \vec{q} : \quad \text{émission d'un phonon.}$$

7.1- Détermination de l'élément de matrice de l'interaction électron- phonon

Nous déterminons la forme $M_{kk'}$: l'élément de matrice de l'interaction électron-phonon dans le cas de l'émission d'un phonon $\vec{k} = \vec{k}' + \vec{q}$

Comme constaté plus haut, l'interaction électron- phonon est gouvernée par le phénomène de polarisation définie par :

$$\vec{P} = n_a e \vec{u}(r)$$

où n_a est la densité atomique du réseau

e : la charge électronique

$\vec{u}(r)$: le vecteur déplacement du réseau

7.1.1- Détermination du vecteur déplacement du réseau

Le mouvement du réseau est décrit selon l'approximation harmonique par un système de vibrations normales non couplées. La forme générale du déplacement u_n du $n^{\text{ième}}$ atome peut être écrit comme une superposition des déplacements élémentaires correspondant à toutes les branches de vibrations et toutes les valeurs possibles du vecteur \vec{q} :

$$\vec{u}_n = \sum_{q_j} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_a \omega_{q_j} N}} \vec{e}_{q_j} [a_{q_j} \exp iqn + a_{q_j}^* \exp -iqn] \quad (\text{III-55})$$

m_a est la masse d'un atome

N : le nombre d'atomes vibrants

\vec{e}_{q_j} : le vecteur unitaire dans la direction j

La dépendance temporelle du déplacement est incluse dans les coefficients a_{q_j}

$$\frac{da_{q_j}}{dt} = -\omega_j(q) a_{q_j} \quad (\text{III-56})$$

L'obtention de l'opérateur déplacement u_n s'obtient, en remplaçant les amplitudes a_{q_j} et $a_{q_j}^*$ par les opérateurs de création et d'annihilation de phonon [DAV 65]. Dans ce cas l'opérateur de déplacement peut être mis sous la forme :

$$\vec{u}_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_a N}} \sum_{q_j} \vec{e}_{q_j} \sqrt{\frac{1}{\omega_j(q)}} (a_{q_j} \exp iqn + a_{q_j}^+ \exp -iqn) \quad (\text{III-57})$$

Le changement de l'opérateur de déplacement du n^{ième} atome dans le réseau à un opérateur de variable continue s'obtient en écrivant :

$$\vec{u}(r) = \sum_n \vec{u}_n \delta(r-n) \quad (\text{III-58})$$

L'écriture finale du vecteur déplacement du réseau est :

$$\vec{u}(r) = V^{-1/2} \sum_{qj} \vec{e}_{qj} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_a n_a \omega_j(q)}} (a_{qj} \exp iqr + a_{qj}^+ \exp -iqr) \quad (\text{III-59})$$

Du fait de la présence des ondes optiques longitudinales, nous n'aurons pas de sommation sur j.

$$\vec{u}(r) = V^{-1/2} \sum_q \vec{e}_q \sqrt{\frac{\hbar}{2m_a n_a \omega(q)}} (a_q \exp iqr + a_q^+ \exp -iqr) \quad (\text{III-60})$$

Le vecteur de polarisation s'écrit alors :

$$\vec{P}(r) = n_a e V^{-1/2} \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2m_a n_a \omega(q)}} \vec{e}_q (a_q \exp iqr + a_q^+ \exp -iqr) \quad (\text{III-61})$$

La polarisation conduit à une charge de polarisation égale à $\text{div } \vec{P}$, L'énergie d'interaction d'un électron avec cette charge est donnée par :

$$E_{\text{int}} = -e \int Q(r-r') \text{div } \vec{P}(r') dr' \quad (\text{III-62})$$

Les électrons forment un écran à l'interaction entre deux d'entre eux. Cela signifie que ces électrons peuvent effectivement interagir s'ils sont suffisamment proches l'un de l'autre. Nous pouvons décrire cette interaction par le potentiel approché ^[DUF 93b] : $Q(r-r') = a^{-2} \delta(r-r')$ où a est de l'ordre de quelques distances interatomiques.

$$H_{\text{int}} = E_{\text{int}} = i n_a e^2 a^2 \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2m_a n_a \omega(q)}} \int \delta(r-r') q (a_q \exp iqr' - a_q^+ \exp -iqr') dr' \quad (\text{III-63})$$

L'élément de matrice $M_{kk'}$ est donné par :

$$M_{kk'} = \langle \psi_{k'} | H_{\text{int}} | \psi_k \rangle \quad (\text{III-64})$$

$|\psi_k\rangle = u_k(r) \exp(ikr)$ qui est la fonction de Bloch décrivant le mouvement de l'électron, $u_k(r)$: une fonction périodique qui a la périodicité du réseau.

$|n_q\rangle$: le ket propre de l'hamiltonien harmonique.

$$M_{kk'} = ie^2 a^2 \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2n_a m_a \omega(q)}} \left[\int \exp i(q+k-k')r \langle n_q | a_q | n_{k-1} \rangle u_k^*(r) u_{k'}(r) dV - \int \langle n_q | a_q^\dagger | n_{q-1} \rangle u_k^*(r) u_{k'}(r) dV \right] \quad (\text{III-65})$$

Le produit $u_k^*(r) u_{k'}(r)$ se compose des parties périodiques des fonctions de Bloch. Il a donc la même périodicité du réseau. Ainsi les intégrales figurant dans (III-65) sont nulles, à moins que :

$$\left. \begin{array}{l} \vec{0} \\ \vec{k} - \vec{k}' \pm \vec{q} \end{array} \right\} = \vec{G}$$

Si $\vec{k} - \vec{k}' \pm \vec{q} = \vec{0}$: on dit qu'il s'agit d'un processus normal appelé encore N.

Si $\vec{k} - \vec{k}' \pm \vec{q} = \vec{G}$

\vec{G} : désigne un vecteur du réseau réciproque. On dit que l'on a affaire à un processus Umklapp ou processus U. La classification en processus normal ou umklapp dépend du choix de la zone de Brillouin. Par vecteur du réseau réciproque, nous entendons un vecteur dont l'origine et l'extrémité sont situées en deux points du réseau réciproque. Dans notre cas, nous nous limitons au processus N. Pour simplifier, nous assimilons $\int dV u_k^*(r) u_{k'}(r)$ à l'unité. Dans le cas de l'émission d'un phonon ; en considérant le deuxième terme de l'intégrale (III-65) avec $\langle n_q | a_q^\dagger = \sqrt{n_q} \langle n_{q-1} |$ et en utilisant l'approximation de Debye $\omega_q = sq$ (s est la vitesse du son dans le matériau considéré), nous obtenons :

$$M_{kk'} = -iV^{-1/2} e^2 a^2 n_a \frac{\omega_q}{s} n_q^{1/2} \left(\frac{\hbar}{2n_a m_a \omega_q} \right)^{1/2} \quad (\text{III-66})$$

L'interaction électron-phonon est l'échange d'énergie entre les électrons et les phonons, exprimée par :

$$U_{e-ph} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{\omega_{\max}} \rho(\omega_q) \frac{\partial N_q}{\partial t} \hbar \omega_q d\omega_q \quad (\text{III-67})$$

$\rho(\omega_q)$ est la densité d'états. Elle est proportionnelle à ω_q^2 .

Kaganov et al ^[KAG 57] ont montré à partir de l'évolution de la population N_q de phonons, que $\frac{\partial N_q}{\partial t}$ s'exprimait en fonction des températures du gaz d'électron et du réseau.

$$\frac{\partial N_q}{\partial t} = |M_{kk'}|^2 \left[\frac{1}{(\exp(\frac{h\omega_q}{kT_e}) - 1)} - \frac{1}{(\exp(\frac{h\omega_q}{kT_a}) - 1)} \right] \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'} - h\omega_q) \quad (\text{III-68})$$

En observant l'expression à intégrer, nous constatons qu'elle est proportionnelle à $\frac{\omega_q^4}{(\exp(\frac{h\omega_q}{kT}) - 1)}$. L'expression définitive de U_{e-ph} en fonction de la température de Debye T_D est :

$$U_{e-ph} = \frac{3}{16} \frac{e^4 n_q h^2}{s^2 a^4 m_a \pi^3} \left[\left(\frac{T_e}{T_D}\right)^5 \int_0^{T_D/T_e} \frac{x^4 dx}{(e^x - 1)} - \left(\frac{T_a}{T_D}\right)^5 \int_0^{T_D/T_a} \frac{x^4 dx}{(e^x - 1)} \right] \quad (\text{III-69})$$

Avec $x = h\omega/kT$; T_D est la température de Debye

Kaganov et al ^[KAG 57] ont montré que cette expression peut se mettre sous la forme:

$$U_{e-ph} = g (T_e - T_a) \quad g \text{ est la constante de couplage.}$$

Pour les semi-conducteurs, la valeur de g peut être déterminée en utilisant la formule pour les métaux, dont on peut donner l'expression dans le cas pratiquement rencontré. La température T_a du réseau est très inférieure à celle du gaz électronique T_e :

$$g = \frac{\pi^2 m_e s^2 n_e}{6 \tau(T_e) T_e} \quad (\text{III-70})$$

$\tau(T_e)$ est le temps d'interaction électron-électron à la température T_e . Pour les semi-conducteurs, on peut considérer $\tau(T_e)$ constant, est égale à $10^{-16} - 10^{-15}$ s ^[KOM03].

En utilisant l'expression de la conductivité $\sigma_e = \frac{n_e^2 \tau_e^2}{m_e}$, g peut être réécrit sous la forme :

$$g = \frac{\pi^2 n_e^2 e^2 s^2}{6 \sigma_e T_e} \quad (\text{III-71})$$

Les mesures de conductivités électriques font apparaître que σ_e suit une loi en $1/T_e$. En conséquence g est quasiment indépendant de la température. La constante de couplage g est liée au temps moyen d'interaction électron-phonon τ_a par la relation $\tau_a = C_e/g$. Toulemonde et al. [TOU 92] ont lié la constante de couplage électron-phonon à la longueur de diffusion λ par la relation $\lambda = \sqrt{D_e \frac{C_e}{g}}$. Le paramètre λ définit le rayon du cylindre dans lequel l'énergie déposée sur les électrons va être transmise aux atomes de la cible. Plus D_e ou τ_a sont grands, plus l'énergie sera déposée sur un grand rayon. La température atteinte par le réseau sera donc moins élevée. λ englobe donc l'effet des deux interactions (électron-électron) et (électron-phonon).

8 - La résolution numérique des deux équations différentielles

La résolution numérique de ces deux équations :

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r K_e (T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r}) - g (T_e - T_a) + A(r, t)$$

$$C_a \frac{\partial T_a}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r K_a (T_a) \frac{\partial T_a}{\partial r}) + g (T_e - T_a)$$

est rendue difficile par l'évolution avec la température de l'ensemble des paramètres et la présence de changement de phase. La transformation solide-liquide se fait à température constante. Dans un premier temps, nous supposons que tous les paramètres de l'équation de diffusion de l'énergie sur les électrons ne dépendent pas de la température. Cette première équation peut être résolue analytiquement, ce qui est impossible si nous voulons tenir compte de la distribution spatiale et temporelle de la densité d'énergie des électrons d'où l'utilité de la résoudre numériquement. L'équation de diffusion de l'énergie sur le réseau est résolue numériquement pour prendre en compte l'évolution des constantes physiques en fonction de la température et les changements de phase. Le calcul simplifié [Toulemonde à paraître] a été développé pour les matériaux amorphes dans lesquels il est généralement accepté que

l'interaction électron- phonon est supérieure à celle du même matériau dans sa phase cristalline. Ce calcul s'est inspiré du développement analytique détaillée ^[LIF 60] conduisant à la détermination de la différence de température ($T_e - T_a$) en fonction du couplage g et des paramètres du gaz d'électrons (diffusivité thermique D_e et chaleur spécifique C_e) :

$$g(T_e - T_a) = S_e \frac{g}{C_e} \exp\left(-\frac{g}{C_e} t\right) \frac{\exp\left(-\frac{r^2}{4\sigma^2}\right)}{4\sigma^2} \text{ avec } \sigma^2 = D_e t + \frac{L^2}{(2 \ln 2)^2} \quad (\text{III-72})$$

L est la largeur de la distribution spatiale du dépôt d'énergie sur les électrons. Elle est tirée d'un calcul Monte Carlo ^[WAL 86] : L varie entre 2 nm et 5 nm.

8.1- La résolution mathématique

Deux méthodes sont généralement utilisées pour résoudre numériquement ces équations : la méthode explicite et la méthode implicite ^[NOU 87]. Nous allons donner brièvement le principe de discrétisation de la méthode explicite. Nous détaillerons ensuite la méthode implicite. Pour résoudre ces équations, nous divisons l'intervalle $[\alpha, \beta]$ en $n+1$ intervalles de pas Δr et nous choisissons un pas Δt pour le temps. Les conditions aux limites sont :

$$T(r=\alpha, t) = T_\alpha(t)$$

$$T(r=\beta, t) = T_\beta(t)$$

$$T(r, t=0) = T_0(r)$$

8.1.1- La méthode explicite

Si l'indice i repère la variable r et l'indice j la variable t , on obtient les températures T_i à l'instant $j+1$ (c'est-à-dire $t+\Delta t$) comme une combinaison des T_{i-1} , T_i et T_{i+1} à l'instant j (c'est-à-dire t). L'inconvénient principal de cette méthode est qu'elle impose une condition de stabilité basée sur des considérations mathématiques de convergence. Le choix du pas d'espace Δr et de temps Δt doit obéir à l'équation suivante :

$$\frac{\Delta r^2}{2\Delta t} > D \quad \text{où } D = K/\rho C_s$$

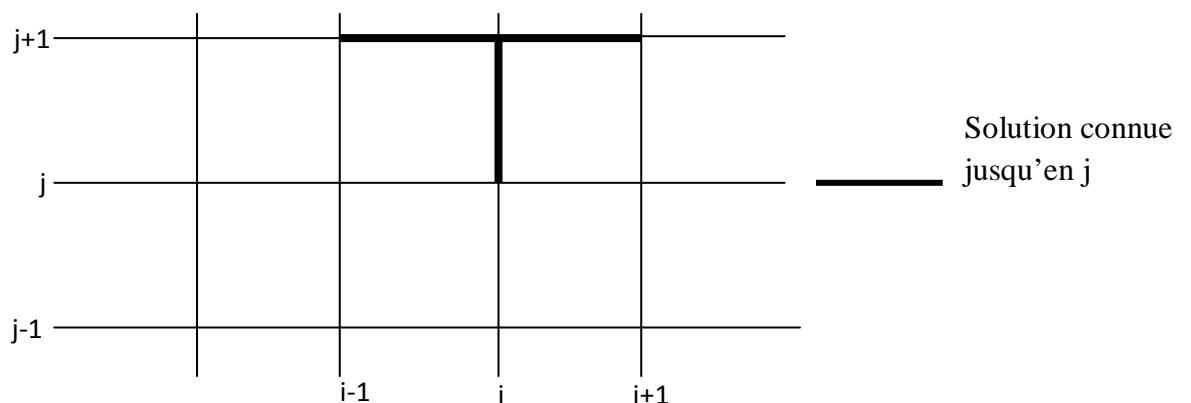
Cependant, il ne suffit pas de satisfaire à la condition de convergence pour obtenir un couple $(\Delta r, \Delta t)$ judicieux. Dans la pratique, nous constatons un mauvais choix du couple $(\Delta r, \Delta t)$ lorsque nous observons :

- des oscillations de $T(r, t)$ en fonction de r
- que l'énergie totale apportée par l'ion et celle absorbée par le réseau diffèrent

A cause de ces contraintes, nous avons opté pour la méthode implicite.

8.1.2 – La méthode implicite

Cette méthode consiste à faire apparaître les températures connues à l'instant j (c'est-à-dire t) comme combinaison linéaires des températures inconnues T_{i-1}, T_i, T_{i+1} à l'instant $j+1$ (c'est-à-dire $t+\Delta t$). Cette méthode très efficace pour ce type de système, aboutit à une écriture matricielle simple. La progression du calcul peut alors être schématisée de la façon suivante :



Le système peut donc s'écrire sous la forme d'un produit de matrices que l'on résout par la méthode du double balayage de Choleski. Dans ce qui suit, T_e et T_a seront remplacées par T dans les équations (III-10), (III-11) qui se discrétisent de la façon suivante :

En utilisant les différences à droite pour t , $\frac{\partial T}{\partial t}$ devient :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{(T_{i,j+1} - T_{i,j})}{\Delta t} \quad \text{(III-73)}$$

et en utilisant les différences centrées sur r , on obtient :

$$\frac{\partial T}{\partial r} = \frac{(T_{i+1,j+1} - T_{i-1,j+1})}{2\Delta r} \quad (\text{III-74})$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(K_i \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \frac{\partial}{\partial r} \left(K_i \frac{T_{i+1,j+1} - T_{i-1,j+1}}{2\Delta r} \right) \quad (\text{III-75})$$

En remplaçant le symbole de dérivée par le symbole des différences finies à droite, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \left(K_i \frac{\partial T}{\partial r} \right) &= \frac{\nabla K_i}{\Delta r} \left(\frac{T_{i+1,j+1} - T_{i-1,j+1}}{2\Delta r} \right) + K_i \nabla \left(\frac{T_{i+1,j+1} - T_{i-1,j+1}}{2\Delta r^2} \right) \\ &= \frac{K_{i+1,j}}{2\Delta r^2} (T_{i+1,j+1} - T_{i,j+1}) - \frac{K_{i-1,j}}{2\Delta r^2} \left(\frac{T_{i,j+1} - T_{i-1,j+1}}{\Delta r^2} \right) + \frac{K_i}{2\Delta r^2} (T_{i+1,j+1} - 2T_{i,j+1} + T_{i-1,j+1}) \end{aligned} \quad (\text{III-76})$$

Ces relations appliquées au système d'équations différentielles permettent d'écrire les deux équations sous la forme :

$$a_i T_{i-1,j+1} + b_i T_{i,j+1} + c_i T_{i+1,j+1} = d_i \quad (\text{III-77})$$

où les coefficients a_i , b_i , c_i et d_i sont définis en fonction des résultats du calcul à l'instant j .

$$a_i = -\frac{1}{2C_{i,j}\Delta r^2} \left(K_{i,j} + K_{i-1,j} - \frac{K_{i,j}}{(i-0.5)} \right) \quad (\text{III-78})$$

$$b_i = -\left(\frac{C_{i,j}}{\Delta t} + \frac{1}{2\Delta r^2} (K_{i+1,j} + 2K_{i,j} + K_{i-1,j}) \right) \quad (\text{III-79})$$

$$c_i = \frac{1}{2C_{i,j}\Delta r^2} \left(K_{i+1,j} + K_{i,j} + \frac{K_{i,j}}{(i-0.5)} \right) \quad (\text{III-80})$$

Ces expressions sont valables aussi bien pour les phonons que pour les électrons, en remplaçant $K_{i,j}$ par K_e ($T_{e,i,j}$) ou K_a ($T_{a,i,j}$) et $C_{i,j}$ par C_e ($T_{e,i,j}$) ou C_a ($T_{a,i,j}$)

$$d_i = -\frac{T_{ai,j}}{\Delta t} - \frac{g(T_{ei,j} - T_{ai,j})}{C_{ai,j}} \quad \text{pour les phonons} \quad (\text{III-81})$$

$$d_i = -\frac{T_{ei,j}}{\Delta t} + \frac{g(T_{ei,j} - T_{ai,j})}{C_{ei,j}} - A_{i,j} \quad \text{pour les électrons} \quad (\text{III-82})$$

Les pas d'espace Δr et du temps Δt définissent les rayons et les instants considérés :

$$r_i = (i - 0.5) \Delta r$$

$$t_j = j\Delta t$$

L'indice i varie de 1 à N_r , valeur maximale qui définit le rayon du cylindre exploré par le calcul et l'indice j varie de 1 à N_t . Pour simplifier les écritures, posons $y_i = T_{i, j+1}$. Nous obtenons l'expression suivante :

$$a_i y_{i-1} + b_i y_i + c_i y_{i+1} = d_i \quad (\text{III-83})$$

Par conséquent, il s'agit d'un système d'équations donnant la valeur de y_i qui est connue à l'instant j , comme combinaison des y_{i-1} , y_i , y_{i+1} inconnues à l'instant $j+1$. Le système peut donc s'écrire sous la forme d'un produit de matrice du type :

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & \cdot & \cdot \\ a_2 & b_2 & c_2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdot \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \cdot \\ d_n \end{bmatrix} \quad (\text{III-84})$$

que nous résolvons par la méthode du double balayage de Choleski qui permet de tirer les températures inconnues à l'instant $j+1$ en fonction des températures connues à l'instant j . On se rend compte que les termes $a_1 y_0$ et $c_n y_{n+1}$ n'apparaissent plus dans le calcul car l'équation (III-20) n'est pas valable pour le cas $i = 1$ et $i = N_r$. Ces deux cas seront traités ultérieurement.

La première équation du système permet d'écrire :

$$b_1 y_1 + c_1 y_2 = d_1 \quad \Leftrightarrow \quad y_1 = \frac{(d_1 - c_1 y_2)}{b_1} \quad (\text{III-85})$$

La seconde équation du système permet d'écrire $a_2 y_1 + b_2 y_2 + c_2 y_3 = d_2$

$$\Leftrightarrow \quad y_2 = \frac{(d_2 - a_2 y_1 - c_2 y_3)}{b_2} \quad (\text{III-86})$$

En injectant (III-85) dans la deuxième équation du système, après simplification, nous obtenons y_2 en fonction d' y_3 :

$$y_2 = -\frac{c_2 b_1}{b_1 b_2 - c_1 a_2} y_3 + \frac{b_1 d_2 - d_1 a_2}{b_1 b_2 - c_1 a_2} \quad (\text{III-87})$$

Et ainsi de suite, nous exprimons chaque inconnue en fonction de la suivante. D'une manière générale, il est facile de montrer par récurrence que pour tout i supérieur ou égal à 1, il existe A_i et B_i tel que :

$$y_i = A_i y_{i+1} + B_i \quad (\text{III-88})$$

En partant de cette équation au rang $i-1$ et en la remplaçant dans l'équation (III-83), nous obtenons :

$$a_i (A_{i-1} y_i + B_{i-1}) + b_i y_i + c_i y_{i+1} = d_i \quad (\text{III-89})$$

$$\text{soit : } y_i = -\frac{c_i}{a_i A_{i-1} + b_i} y_{i+1} + \frac{d_i - a_i B_{i-1}}{a_i A_{i-1} + b_i} \quad (\text{III-90})$$

or, nous savons que $y_i = A_i y_{i+1} + B_i$ donc :

$$A_i = -\frac{c_i}{a_i A_{i-1} + b_i} \quad (\text{III-91})$$

$$B_i = \frac{d_i - a_i B_{i-1}}{a_i A_{i-1} + b_i} \quad (\text{III-92})$$

Le but du premier balayage consiste à déterminer tous les éléments des suites A_i et B_i . Reste à traiter les conditions aux limites ($i=1$ et $i=N_r$) qui vont déterminer l'ensemble des températures y_i par un " balayage " effectué dans le sens des indices i décroissants.

$i = N_r$ correspond à la limite extérieure du cylindre exploré par le calcul. Pour que le calcul puisse s'arrêter, il faut éviter l'utilisation d'un indice supérieur à N_r pour les y_i d'où :

$$A_{N_r} = 0 \quad \text{soit } c_{N_r} = 0$$

B_{N_r} est connue par la relation de récurrence et dépend de B_1 . Pour $i = 1$, l'équation de diffusion provenant du bilan énergétique vu plus haut n'est plus valable. En effet pour le cœur du cylindre (figure III-7), il n'y a diffusion de chaleur qu'à travers une seule paroi. Ce qui n'était pas le cas pour une tranche cylindrique. Il n'apparaît donc pas de dérivée seconde par rapport à r (coordonnées radiales). Le bilan est le suivant :

$$\text{- Variation d'énergie du cœur de rayon } \Delta r : C \frac{\partial T}{\partial t} \pi \Delta r^2 \Delta x$$

- Transfert d'énergie par conduction thermique à travers la paroi de surface dS :

$$K \frac{\partial T}{\partial r} 2\pi \Delta r \Delta x$$

Le transfert d'énergie par couplage électron phonon et l'apport d'énergie par l'ion incident gardent la même forme que celle des autres tranches cylindriques.

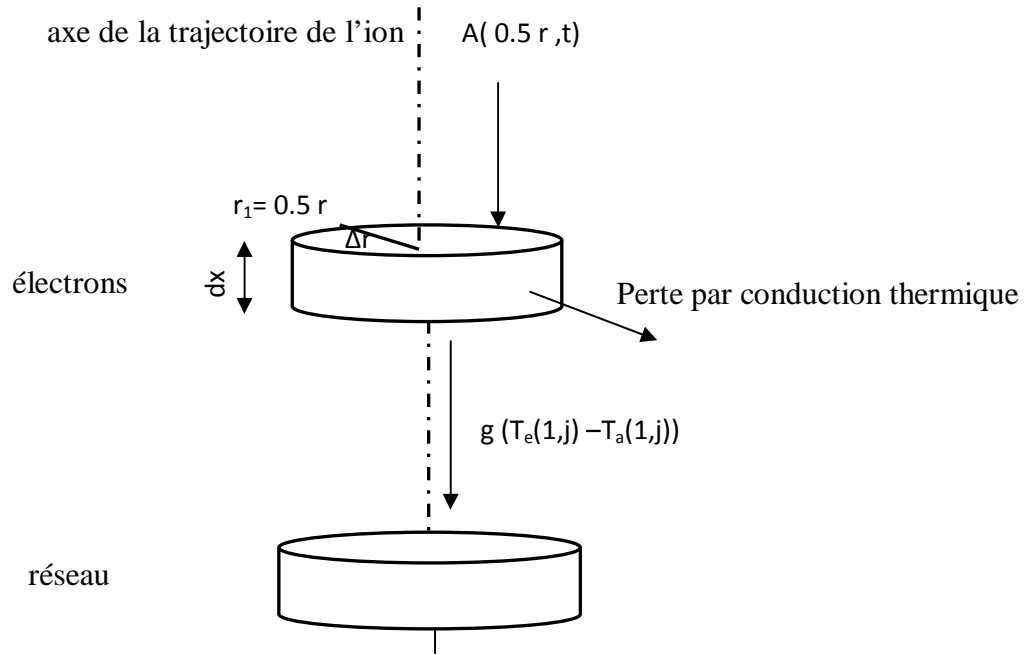


Figure III- 7 : Bilan d'énergie pour le cœur de la trace

Le système s'écrit maintenant, en raisonnant par unité de volume :

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{2K_e}{\Delta r} \frac{\partial T_e}{\partial r} - g(T_e - T_a) + A(r, t) \quad (\text{III-93})$$

$$C_a \frac{\partial T_a}{\partial t} = \frac{2K_a}{\Delta r} \frac{\partial T_a}{\partial r} + g(T_e - T_a) \quad (\text{III-94})$$

En remplaçant les dérivées spatiales et temporelles par les expressions ci-dessous :

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T_{1,j+1} - T_{1,j}}{\Delta t} \quad (\text{III-95})$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} \approx \frac{T_{2,j+1} - T_{1,j+1}}{\Delta r} \quad (\text{III-96})$$

nous déduisons :

$$a_1 = 0, \quad b_1 = -\frac{2K_{1,j}}{C\Delta r^2} - \frac{1}{\Delta t}, \quad c_1 = \frac{2K_{1,j}}{C\Delta r^2}$$

d_1 est définie de la même manière que pour les autres tranches d'où :

$$A_1 = -c_1/b_1 ; B_1 = d_1/b_1$$

Les équations (III-26) et (III-27) nous permettent de calculer aisément de proche en proche les couples (A_2, B_2) , (A_i, B_i) , etc....Le calcul des coefficients A_i, B_i est donc rendu possible, en un premier balayage de $i = 2$ à N_r .

Le second balayage s'effectue de N_r à 1. Ce qui va nous permettre de calculer les inconnues y_i . Il suffit de constater que :

$$a_{N_r} y_{N_r-1} + b_{N_r} y_{N_r} = d_{N_r} \quad \text{et} \quad y_{N_r-1} = A_{N_r-1} y_{N_r} + B_{N_r-1}$$

$$\text{soit après calcul : } y_{N_r} = \frac{d_{N_r} - a_{N_r} B_{N_r-1}}{a_{N_r} A_{N_r-1} + b_{N_r}} = B_{N_r} \quad (\text{III-97})$$

B_{N_r} ayant été déterminé lors du premier balayage, nous avons ainsi la valeur de y_n cherchée. Nous déduisons $y_{N_r-1} = A_{N_r-1} y_{N_r} + B_{N_r-1}$ puis y_{N_r-2} jusqu'à y_1 de proche en proche.

Après ce double balayage, les températures sont connues à l'instant $j+1$.

En procédant ainsi, l'évolution des températures du gaz d'électrons et du réseau, dans le temps et dans l'espace est réalisée. Notons que lorsque la température de fusion est atteinte et que le calcul de l'instant ultérieur donne une température supérieure à la température de fusion, nous transformons le ΔT observé en quantité de chaleur $C \Delta T$ que l'on stocke dans une variable test. Tant que cette variable n'atteint pas la chaleur latente de fusion, la température reste égale à la température de fusion. Le palier de température étant franchi, le calcul continu de manière analogue à la première étape en utilisant les coefficients thermodynamiques du liquide. Signalons aussi que la méthode implicite n'est pas adaptée au changement de phase. Pour cela, nous utilisons un calcul par la méthode explicite pour déterminer la chaleur reçue et perdue lors des changements de phase. Comme nous l'avons vu, la méthode implicite discrétise l'équation considérée à l'instant $t + \Delta t$. Le terme de couplage $g[T_e(r, t+\Delta t) - T_a(r, t+\Delta t)]$ est ici inexploitable car $T_e(r, t+\Delta t)$ et $T_a(r, t+\Delta t)$ sont encore inconnues. Pour cela, nous l'avons pris égal à $g [T_e(r, t) - T_a(r, t)]$. Ce qui revient à faire le même raisonnement que pour la méthode explicite

Références Chapitre III :

- [BAR 88] Yu. V. Martinenko, S. O. Tsepelevitch, Yu. N Yavlinskii, Sov.Phys. Usp. 31, 1015 (1988).
- [BUT 67] J. J. Butts and R. Katz Theory of RBE for heavy ion bombardment of dry enzymes and viruses. Radiat. Res. 30, 855 (1967).
- [COL 02] A.Colder, B. Canut, M. Levalois, P. Marie, X. Portier, S. M. M.Ramos, J.Appl. Phys. 91, 5853 (2002).
- [DAV 65] A. S. Davydov Quantum Mechanics E D pergamon press (1965).
- [DHA 07] S.Dhamodaran, A. P. Pathak, A. Dunlop, G. Jaskierowicz, S. Della-Negra, Nucl. Instr. And Meth. B256, 229 (2007).
- [DUF 93a] Ch. Dufour, Thèse de Doctorat de l'Université de Caen (1993).
- [DUF 93b] Ch. Dufour, A. Audouard, F. Beneu, J. Dural, J. P. Girard, A.Hairie, M. Levalois, E. Paumier, M. Toulemonde, J. Phys. : Condens. Matter 5, 4573 (1993).
- [GER 93] B. Gervais, Thèse de Doctorat de l'Université de Caen (1993).
- [HUA 98] L.Huang, J. P. Callan, E. N. Glezer, E. Mazur, Phys. Rev. Lett. 80, 185 (1998).
- [ISK 83] H. Iskef, J. W. Cunningham and D.E.Watt «Projected ranges and Effective stopping powers of electrons with energy between 20 and 10 keV», Phys. Med. Biol. 28, 535 (1983).
- [KAG 57] M. I. Kaganov, I. M. Lifshits and L.V. Tanatarov, Sov. PhysJETP4 173, (1957).
- [KAT 69] R. Katz and E. J. Kobetich, Phys. Rev.186, 344 (1969).
- [KHA 05] A. S. Khalil, L. T. Chadderton, A. M. Stewart, M. C. Ridgway, D. J.Llewellyn, A. P. Byrne Rad, Measurement. 40, 770 (2005).
- [KOB 68] E. J. Kobetich and R.Katz « Energy deposition by electron beams and δ rays », Phys. Rev. 170, 391 (1968).

- [KOM 03] F. F. Komarov, P. I. Gaiduk, L. A. Vlasukova, A. Yu. Didyk, V. N. Yuvchenko, *Vacuum* 70, 75 (2003).
- [LIF 60] I. M. Lifshits, M. I. Kaganov, L. V. Tanatarov, *J. Nucl. Energ. A12*, 69 (1960).
- [MAR 83] Yu. V Martynenko and Yu. N Yavlinskii, *Sov. Phys. Dokl.* 28, 391 (1983).
- [MEF 97] A. Meftah, J. M. Constantini, M. Djebara, N. Khalfaoui, J. P. Stoquert, F. Studer, M. Toulemonde, *Nucl. Instr. And Meth. B122*, 470 (1997).
- [MIL 88] H. M. Milhberg, R. R. Freeman, S. C. More, R. M. More, *Phys. Rev. Lett.* 61, 2364 (1988).
- [MOU 90] A. Mourchid, Thèse de Doctorat de l'Université Paris Sud- Centre Orsay (1990).
- [NOU 87] J. P. Nougier, *Méthode de calcul numérique*, ed. Masson, p237 à 241 (1987).
- [RAF 94] M. Raff, M. Schütze, C. Trappe, R. Hannot, H. Kurz, *Phys. Rev. B* 50, 11031 (1994).
- [SCH 04] G. Schiwietz, K. Czerski, M. Roth, F. Staufenkiel, P. L. Grande, *Nucl. Instr. And Meth. B* 226, 683 (2004).
- [SZE 02] G. Szenes, Z. E. Horvath, B. Pecs, F. Paszti, L. Toth, *Phys. Rev. B* 65, 045316 (2002).
- [SZE 06] G. Szenes, *Radiat. Eff. Defects Solids.* 161, 401 (2006).
- [SZE 11] G. Szenes, *Nucl. Instr. and Meth. B* 269, 2075 (2011).
- [TOU 92] M. Toulemonde, C. Dufour, E. Paumier, *Phys. Rev. B* 46, 14362 (1992).
- [VET 94] J. Vetter, R. Scholz, N. Angert, *Nucl. Instr. And Meth. B* 91, 129 (1994).
- [VET 98] J. Vetter, R. Scholz, D. Dobrev, L. Nistor, *Nucl. Instr. And Meth. B* 141, 747 (1998). *Meas.* 11, 309 (1986).
- [ZHA 85] Zhang Chunxiang, D.E. Dunn and R.Katz, «Radial distribution of dose and cross section for inactivation of dry enzymes and Viruses», *Radiat. Protect. Doc* 13, 215 (1985).

Chapitre IV

Résultats et interprétation

1 – Introduction

Deux grandes familles de semi-conducteurs ont fait l'objet de cette étude. D'une part, les composés III-V, représentés par l'antimoniure d'indium (InSb), le phosphore d'indium (InP) et l'arséniure de gallium (GaAs). Tous ces matériaux possèdent comme la plupart des semi-conducteurs III-V une structure de type « zinc blende », c'est-à-dire deux mailles cubiques faces centrées (cfc). L'atout majeur des semi-conducteurs III-V et leur gap direct qui en fait des composants de choix pour les dispositifs optoélectroniques ; ensuite le germanium (Ge) au titre des composés IV, qui cristallise dans la structure diamant. Le germanium est principalement utilisé dans les fibres optiques, qui ont révolutionné le secteur des télécommunications (l'ajout de Ge au verre augmente son indice de réfraction). Cette application représente 30 à 50% de la demande mondiale.

Ces matériaux semblent être des très bons candidats pour la description de la pointe thermique et ce pour les raisons suivantes :

- i) Le choix des composés à étudier s'est porté sur les composés binaires, (InSb, InP, GaAs) et sur le germanium cristallin en tant qu'élémentaire en regard de certaines études antérieures. Ce qui nous permet de faire la comparaison entre notre modèle et les résultats expérimentaux publiés par de nombreux auteurs.
- ii) L'évolution des paramètres du réseau en fonction de la température, la température de fusion et la chaleur latente de fusion, de ces matériaux sont disponibles dans la littérature
- iii) La densité de ces matériaux liquide est supérieure à celle du solide. L'apparition d'une éventuelle phase fondue au sein d'un volume solide est rendue possible dans la mesure où elle se fait avec une diminution de volume.
- iv) Il n'y a pas, à notre connaissance, des travaux qui ont déterminé les valeurs de la constante de couplage électron – phonon des matériaux étudiés. Dans ce travail, on va les déterminer pour la première fois.

Les paramètres thermodynamiques du réseau des matériaux étudiés sont donnés, dans le tableau IV-1.

Propriété /matériau		InSb	InP	GaAs	Ge
Conductivité thermique (W/cm K)		0.18	0.72	0.55	0.58
Chaleur spécifique (J /g K)		0.20	0.31	0.33	0.31
Température de fusion (K)		800	1335	1513	1210
Chaleur latente de fusion (J/g)		230	573	668.55	465
Température de vaporisation (K)				2873	3103
Chaleur latente de vaporisation (K)		2244	4559	3748	4516
Masse volumique (g/cm ³)	Solide	5.77	4.79	5.32	5.32
	Liquide	6.46	5.1	5.71	5.6

Tableau IV-1 : Paramètres thermodynamiques des matériaux étudiés ^[BIM 82, KAM 08]

2- Paramètres utilisés pour la solution numérique

Plusieurs questions se posent quant aux valeurs à prendre pour certaines caractéristiques thermiques, notamment celles du système d'électrons. Par analogie avec des travaux antérieurs ^[ASC 76, YAV 83] et ne disposant que de très peu de données sur les semi-conducteurs, nous avons supposé que la diffusivité thermique électronique D_e ($D_e = K_e/C_e$) et la chaleur spécifique C_e sont constantes et égales respectivement à $D_e = 2 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ et $C_e = 1 \text{ J cm}^{-3}\text{K}^{-1}$. Ainsi, en connaissant C_e et D_e , la conductivité thermique K_e est égale à $2 \text{ J cm}^{-1}\text{K}^{-1}\text{s}^{-1}$.

La constante de couplage électron-phonon g est inconnue dans les semi-conducteurs. Elle est liée au libre parcours moyen de diffusion de l'énergie sur les électrons λ , du à l'interaction électrons-atomes, par la relation $g = D_e C_e / \lambda^2$.

3- Résultats bruts : Evolution des températures électronique $T_e(\mathbf{r}, t)$ et atomique $T_a(\mathbf{r}, t)$

En tenant compte, d'une part de la dépendance en température de la chaleur spécifique C_a et de la conductivité thermique K_a du réseau et d'autre part des transitions de phases «solide-liquide» et «liquide - vapeur». Le calcul numérique nous donne l'évolution des

températures électronique et atomique en fonction du temps t et de la distance r à l'axe de la trajectoire de l'ion incident. Les figures (IV-1), (IV-2), (IV-3), et (IV-4), illustrent les réponses des distributions en température en fonction du temps pour différentes valeurs de r pour les matériaux InSb, InP, GaAs, et Ge. Pour des valeurs de constante de couplage g de 0.25×10^{12} , 3.16×10^{12} , 3.20×10^{12} et $1.8 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3}\text{K}^{-1}$ respectivement et pour des ions incidents d'énergie 4, 1.01 et 3.39 MeV/uma.

Nous remarquons que les différentes distributions électroniques en températures calculées (figures IV-1a, 2a, 3a, 4a) ont la même allure. Ceci résulte du fait que nous avons utilisé les mêmes paramètres thermodynamiques électroniques pour les quatre matériaux ($C_e = 1 \text{ J.cm}^{-3}\text{K}^{-1}$, $D_e = 2 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$).

La réponse en température du système électronique est très rapide. Cette dernière augmente durant un temps équivalent au temps de déposition de l'énergie par l'ion incident (10^{-15} s). La température du réseau augmente, alors, principalement à cause de l'interaction électron-phonon (figures IV-1b, 2b, 3b, 4b). Nous constatons que, la montée de la température du réseau est interrompue au point de fusion T_f (T_f : température de fusion) où nous avons l'apparition d'un palier qui correspond à la transformation de phase solide-liquide. Dans ce cas, les électrons apportent toujours de l'énergie, mais celle-ci est absorbée par le réseau pour permettre le passage solide-liquide. Une fois le changement de phase effectué, le réseau continue à recevoir de l'énergie et sa température augmente jusqu'à atteindre la température de vaporisation T_v . A ce moment, nous avons un autre palier lié à la transition liquide-vapeur. Quand l'équilibre entre le système électronique et le réseau est atteint, le terme de couplage $g(T_e - T_a)$ devient nul. Les températures des deux systèmes diminuent.

En comparant les résultats présentés dans les figures (IV-1b, 2b, 3b, 4b), nous remarquons d'une part, que les paliers de changements de phase liquide-vapeur sont absents pour l'InSb et l'InP (figures IV-1b, 2b). Ceci est dû à l'indisponibilité de la température de vaporisation pour ces deux matériaux dans la littérature. Pour faire nos calculs, on a donc indiqué une température de vaporisation au delà de la température susceptible d'être atteinte. D'autre part, nous observons que, la température maximale du réseau atteinte dans le cas de l'InP et du GaAs est plus grande que celles de l'InSb et du Ge. Ceci résulte du fait que la constante de couplage électron-phonon g de l'InP et du GaAs est plus grande que celle des deux autres matériaux.

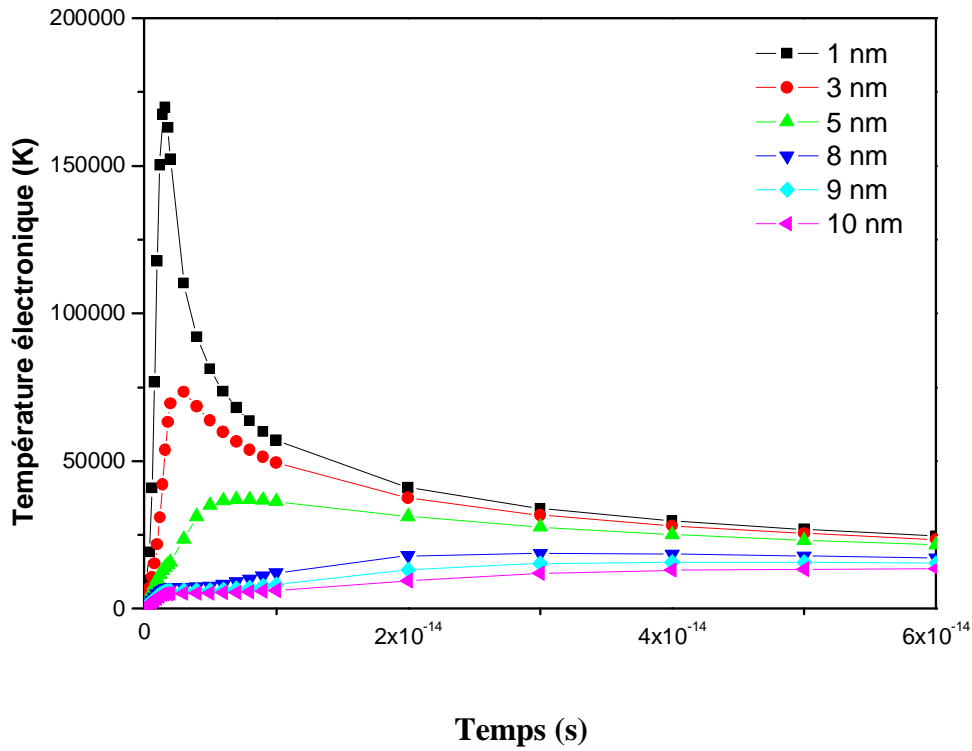
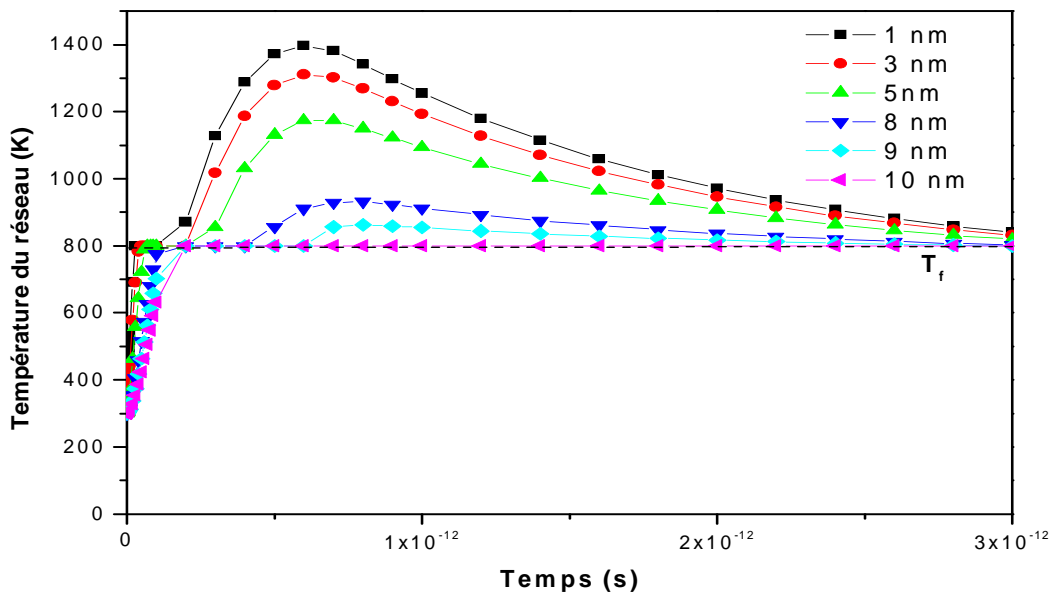


Figure (IV-1a) : Variation de la température électronique en fonction du temps dans l'InSb, pour différentes distances r à l'axe de l'ion incident, irradié avec un ion Pb d'énergie 4MeV/uma et pour $g=0.25 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$



1

Figure (IV-1b) : Variation de la température du réseau en fonction du temps dans l'InSb, pour différentes distances r à l'axe de l'ion incident, irradié avec un ion Pb d'énergie 4MeV/uma et pour $g=0.25 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$.

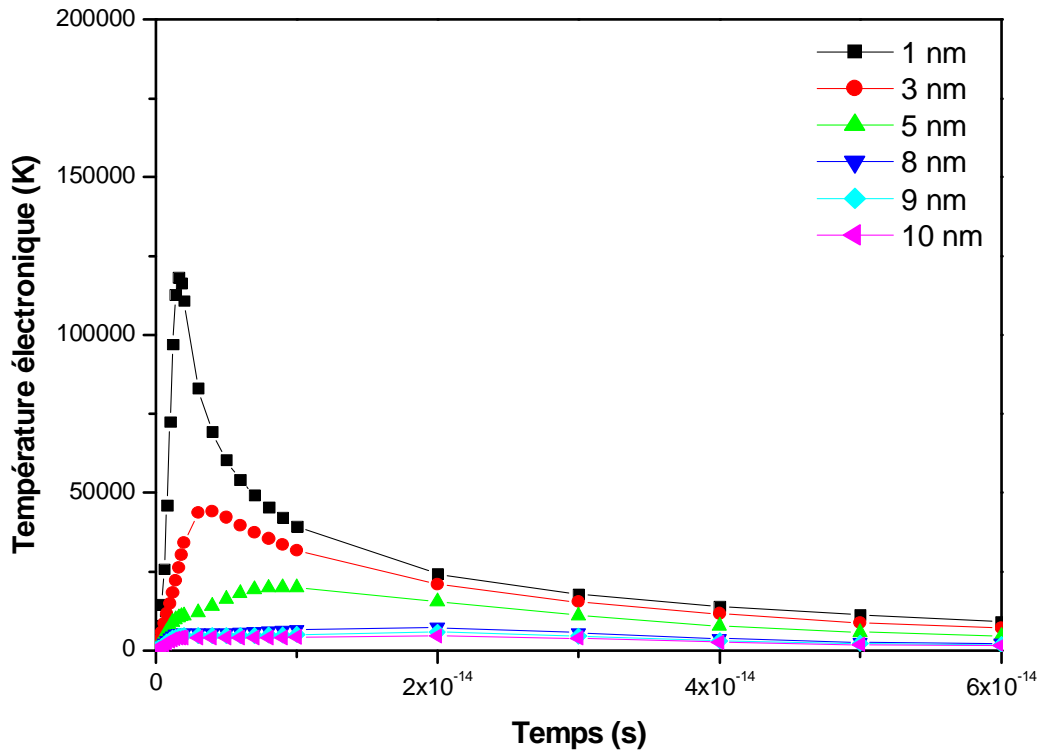


Figure (IV-2a) : Variation de la température électronique en fonction du temps dans l’InP, pour différentes distances r à l’axe de l’ion incident, irradié avec un ion Au d’énergie 1.01 MeV/uma et pour $g= 3.16 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$.

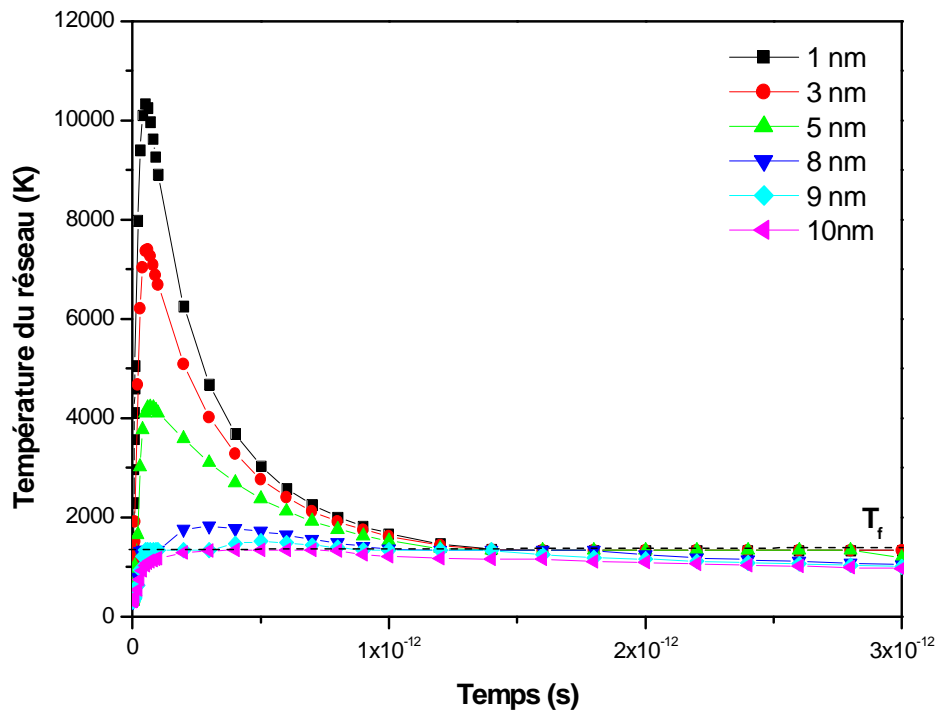


Figure (IV-2b) : Variation de la température du réseau en fonction du temps dans l’InP, pour différentes distances r à l’axe de l’ion incident, irradié avec un ion Au d’énergie 1.01 MeV/uma et pour $g= 3.16 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$.

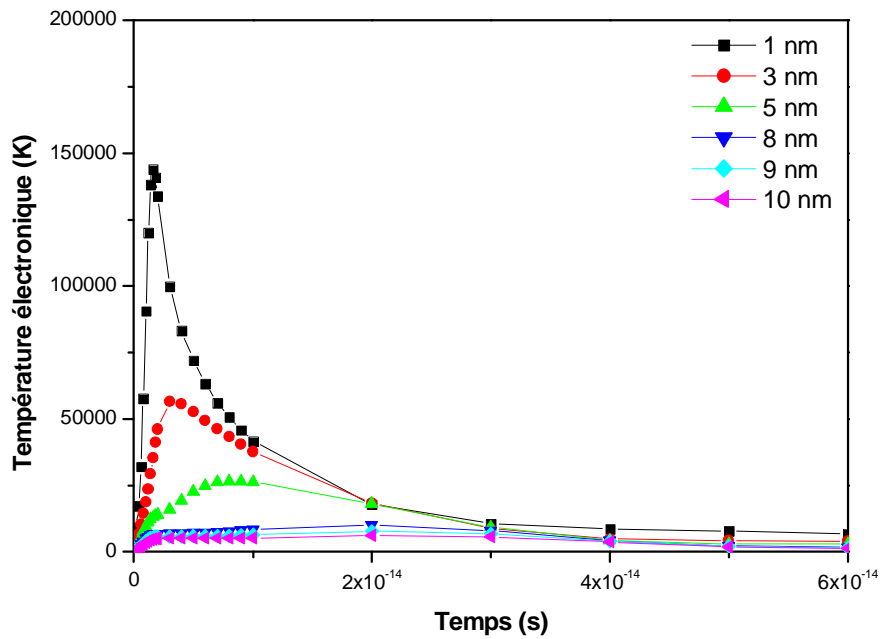


Figure (IV-3a) : Variation de la température électronique en fonction du temps dans le GaAs, pour différentes distances r à l'axe de l'ion incident, irradié avec un ion Bi d'énergie 3.39 MeV/uma et pour $g = 3.20 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$

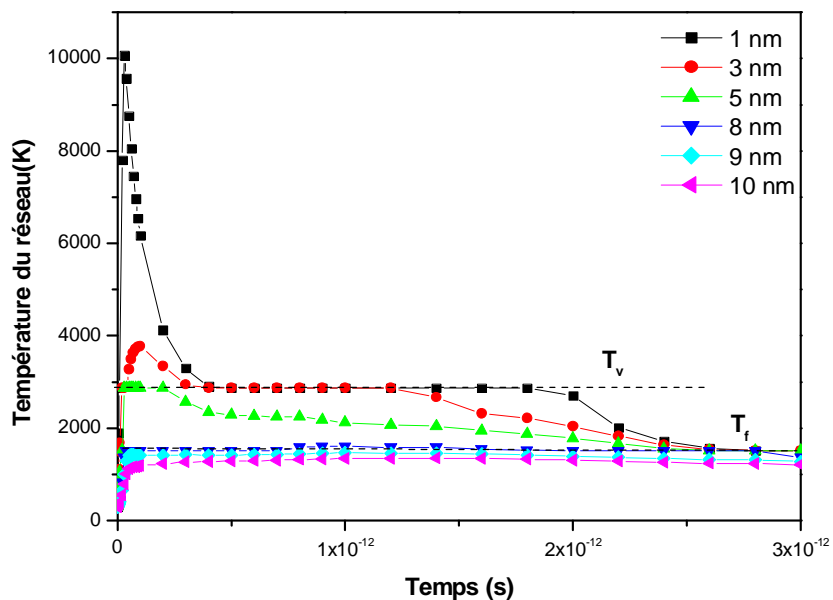


Figure (IV-3b) : Variation de la température du réseau en fonction du temps dans le GaAs, pour différentes distances r à l'axe de l'ion incident, irradié avec un ion Bi d'énergie 3.39 MeV/uma et pour $g = 3.20 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$

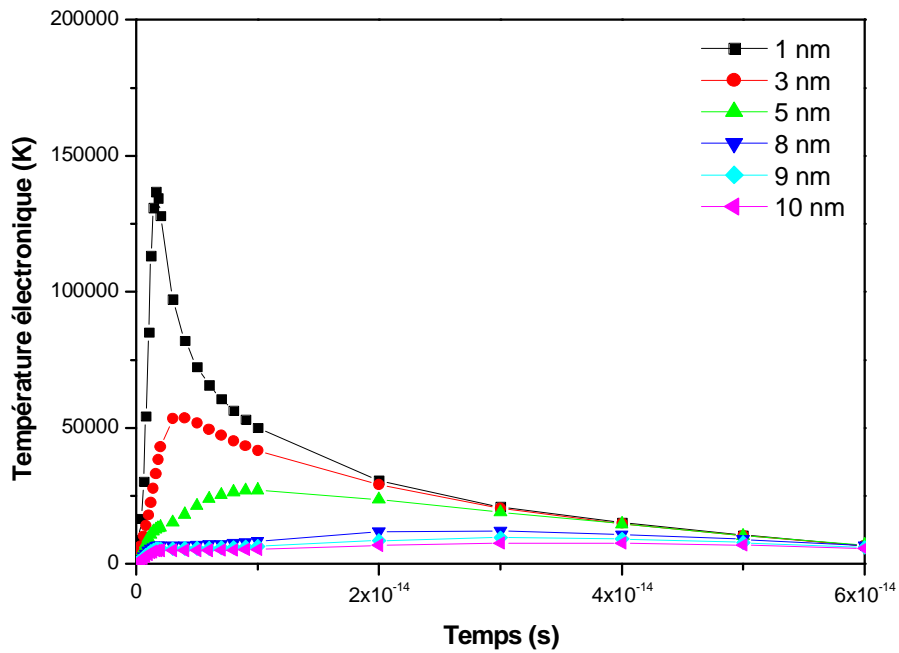


Figure (IV-4a) : Variation de la température électronique en fonction du temps dans le Ge, pour différentes distances r à l'axe de l'ion incident, irradié avec un ion Au d'énergie 3.39 MeV/uma et pour $g= 1.8 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$.

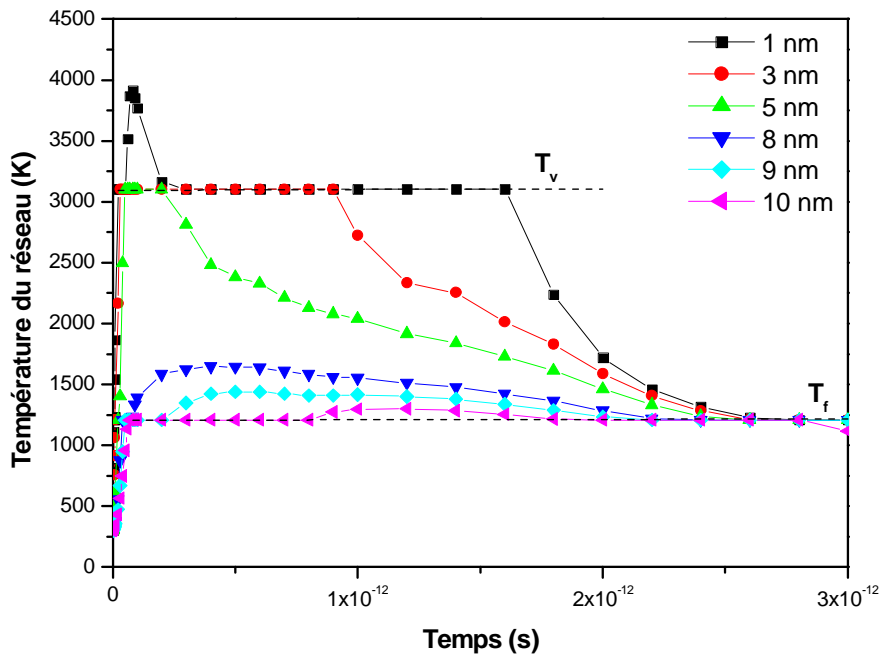


Figure (IV-4b) : Variation de la température du réseau en fonction du temps dans le Ge, pour différentes distances r à l'axe de l'ion incident, irradié avec un ion Au d'énergie 3.39 MeV/uma et pour $g= 1.8 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$.

4- Calcul des rayons et des seuils de création de traces à partir des résultats du modèle

Dans le modèle de la pointe thermique, l'énergie apportée aux électrons est d'abord dispersée par thermalisation avec les électrons voisins dans un temps caractéristique d'environ 10^{-15} - 10^{-14} s puis transmise aux atomes du réseau par couplage électron-phonon en quelques 10^{-13} - 10^{-12} s [TOU 96].

L'élévation locale de la température du réseau peut entraîner l'apparition d'une phase liquide, voire même vaporisée dans certains cas, qui sera ensuite gelée par la trempe qui suit. La région cylindrique de matière amorphe ainsi créée est connue sous le nom de trace.

Les calculs de pointe thermique nous permettent, en observant les températures atteintes par le réseau atomique, de déterminer un rayon de trace. Le rayon maximal pour lequel la température du réseau a dépassé la température de fusion du matériau et/ ou la température de vaporisation [TOU 00] au cours du temps est appelé rayon de trace.

4.1- Comparaison avec les résultats expérimentaux

Les résultats expérimentaux aujourd'hui à notre disposition concernant les semi-conducteurs cristallins InSb, InP, GaAs et Ge, nous permettent une comparaison directe avec les résultats du calcul de la pointe thermique.

Dans nos calculs, pour retrouver les rayons de traces déduits des expériences et pour déterminer la valeur du constante de couplage électron – phonon g des matériaux étudiés, ainsi que le pouvoir seuil de création de trace au dessous duquel il n'ya pas de trace, c'est à dire pas de fusion ou de vaporisation du matériau, il nous fallait établir un critère pour la formation des traces.

Dans cette étude, nous allons exposer les résultats de calculs en fonction de deux critères : critère de fusion ou critère de vaporisation.

4.1. a- Détermination de la constante de couplage électron-phonon g

La constante de couplage g est un paramètre clé du modèle de la pointe thermique. Pour le déterminer, nous avons appliqué deux méthodes différentes. La première méthode consiste à utiliser une constante g originalement dérivée pour les métaux, donnée par la

formule de Kaganov $g = \frac{\pi^4 (k_B n_e v)^2}{18 K_a (T_a)}$, où $K_a (T_a)$ et v représentent, respectivement, la conductivité thermique et la vitesse du son dans le matériau.

Notons que, cette méthode a été utilisée par Kamarou et al. [KAM 08] dans une étude sur l'InP, invoquant l'argument voulant que les semi-conducteurs se comportent comme les métaux lorsque leurs électrons sont suffisamment excités.

La deuxième procédure a été d'utiliser la relation qui lie la valeur du libre parcours moyen et l'énergie du gap $\lambda(E_g)$, qu'on va l'expliciter dans le cas de l'InP.

4.1.1- L'antimoniure d'indium (InSb)

Szenes et al. [SZE 02] ont étudié par la technique de rétrodiffusion Rutherford en canalisation (C-RBS) le dommage produit dans l'InSb irradié avec des ions Pb d'énergie comprise entre 1.85 et 10 MeV/uma. Ils ont observé des traces latentes d'un diamètre de 17,2 à 10,4 nm.

En utilisant le modèle de la pointe thermique nous avons fait des calculs pour retrouver les rayons de trace de l'InSb cristallin déduits des expériences réalisés par Szenes et al. [SZE 02], en prenant en compte seulement le critère de fusion et ce pour les raisons suivantes :

- a) La température de fusion de l'InSb est relativement faible, ainsi que sa chaleur latente de transformation solide-liquide, il faut donc peu d'énergie pour fondre ce matériau.
- b) La densité de l'InSb liquide est supérieure à celle du solide. L'apparition d'une phase fondue au sein d'un volume solide est rendue possible.

Pour l'InSb tous les paramètres étaient donnés sauf la constante de couplage g , que nous faisons varier entre g_{\min} et g_{\max} de telle sorte que la valeur calculée par la formule de Kaganov se situe au milieu de cette plage. En adaptant cette méthode utilisée par Dufour [DUF 93]. Nous avons trouvé pour l'InSb une plage de valeurs possibles pour g : entre $(0.25 \times 10^{12}$ et $5 \times 10^{12} \text{W cm}^{-3} \text{K}^{-1})$.

Pour un ion incident de 10 MeV/uma, et en utilisant plusieurs valeurs de couplage (entre 0.25×10^{12} et $5 \times 10^{12} \text{W cm}^{-3} \text{K}^{-1}$), pour déterminer celle qui donne les résultats les plus proches des rayons expérimentaux, contenue dans la référence [SZE 02]. La figure (IV-5), montre l'évolution du rayon des traces en fonction du pouvoir d'arrêt électronique $(dE/dx)_e$. Les valeurs du pouvoir d'arrêt électronique ont été calculées par le code de calcul SRIM.

D'après la figure (IV-5), nous remarquons que, le rayon de trace augmente en fonction du pouvoir d'arrêt électronique, et que l'accord entre le calcul et l'expérience est satisfaisant pour une valeur de couplage g de $0.25 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$. De plus, la courbe correspondant à $g = 0.25 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$, obtenue par calculs, permet de déterminer un seuil de création de trace dans l'antimoniure d'indium égale à $17 \pm 1,4 \text{ keV/nm}$.

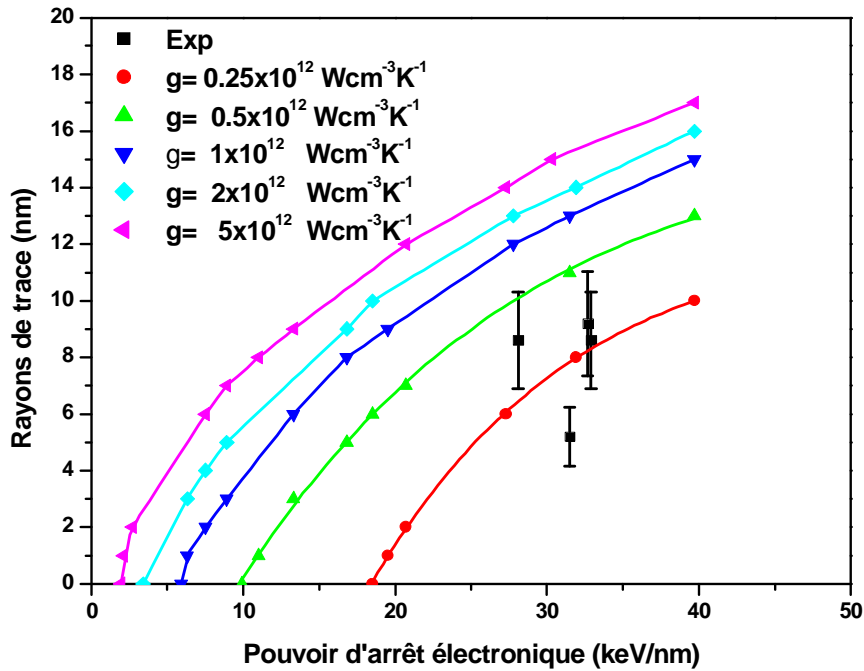


Figure (IV-5) : Evolution des rayons de trace calculés déduits du critère de fusion de l'InSb en fonction du pouvoir d'arrêt électronique pour différentes valeurs de g , et pour une irradiation avec des ions d'énergie 10 MeV/uma. Les points expérimentaux sont tirés de la référence [SZE 02].

4.1.2- Le phosphore d'indium (InP)

Le phosphore d'indium, InP, est l'un des semi-conducteurs III-V qui a été le plus étudié à la suite d'une excitation électronique par irradiation aux ions lourds rapides ^[SZE 02, WES 04, WES 07, KHA 08, WES 12]. Le principal intérêt de ce matériau est qui s'est révélé facilement caractérisable par les différentes techniques d'analyse et les informations à son égard sont

donc les plus nombreux. Récemment, Dhamodaran et al. ^[DHA07] ont montré que l'irradiation de l'InP avec des clusters de C_{60} , ont permis d'observer à l'aide de la microscopie

électronique à transmission des traces cylindriques amorphes le long de la trajectoire de l'ion. Le tableau (IV-2), résume les valeurs des rayons de trace expérimentales déterminés par la Rétrodiffusion Rutherford en canalisation (C-RBS) et par la microscopie électronique en transmission (TEM) utilisées dans cette étude.

Projectile	Energie (MeV)	$(dE/dx)_e$ (keV/nm)	Rayon (nm)	Techniques	Référence
Kr	150	12.5	0	C-RBS	[WES 04]
Au	79	13.5	1	C-RBS	[WES 04]
Au	200	21.4	4	TEM	[KHA 08]
Pb	385	27.2	3.5	C-RBS	[SZE 02]
Au	599	28.6	3	C-RBS	[WES 04]
Pb	2080	29.1	3.05	C-RBS	[SZE 02]
Au	593	29.2	1.7	TEM	[WES 07]
Pb	1185	30.87	3.4	C-RBS	[SZE 02]
Pb	832	31.1	3.9	C-RBS	[SZE 02]
C ₆₀	23	36.8	8.6	TEM	[DHA 07]
C ₆₀	30	41.9	9.6	TEM	[DHA 07]
C ₆₀	40	48.4	10.3	TEM	[DHA 07]

Pour estimer ces rayons et déterminer la valeur seuil de création de traces, nous avons appliqué le modèle de la pointe thermique à l'InP^[KAD 12].

Vu que le choix du critère de formation de traces et aussi important que la constante de couplage g lorsqu'on détermine le seuil de création de traces. Nous allons dans le cas de l'InP exposer les résultats de calculs en fonction de ces deux critères : température de fusion ou température de vaporisation, cette dernière est inconnue pour l'InP. Pour faire cette étude on peut l'appréhender comme un paramètre libre dans les calculs.

Dans une première étape la température de vaporisation est estimée à 100000K, au-delà de la température susceptible d'être atteinte. L'ensemble des résultats des calculs obtenus pour l'InP à $T_v = 100000K$ est résumé dans la figure (IV-6), qui représente l'évolution du rayon des traces en fonction du pouvoir d'arrêt électronique $(dE/dx)_e$ pour une énergie incidente de 5.7 MeV/uma et pour une valeur de g égale à $3.16 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$. Cette valeur a été déterminée de manière empirique. En effet, la constante de couplage g est liée au libre parcours moyen des électrons par la relation : $\lambda^2 = \frac{K_e}{g}$ avec $K_e = 2 \text{ cm}^{-1} \text{ W K}^{-1}$. Meftah et al. [MEF 05] ont montré qu'il existait une relation empirique entre l'énergie du gap d'un matériau et la valeur du libre parcours moyen, $\lambda(E_g)$, d'après cette relation une valeur de λ égale à 7.95 nm a été extraite pour l'InP, à partir de cette valeur il est possible de déterminer la valeur de g donnée précédemment. Notons que lorsque nous faisons varier g pour ajuster l'évolution des points expérimentaux en fonction du pouvoir d'arrêt électronique comme dans le cas de l'InSb nous trouvons la même valeur de g trouvée précédemment pour l'InP. Ceci montre clairement la validité de nos résultats

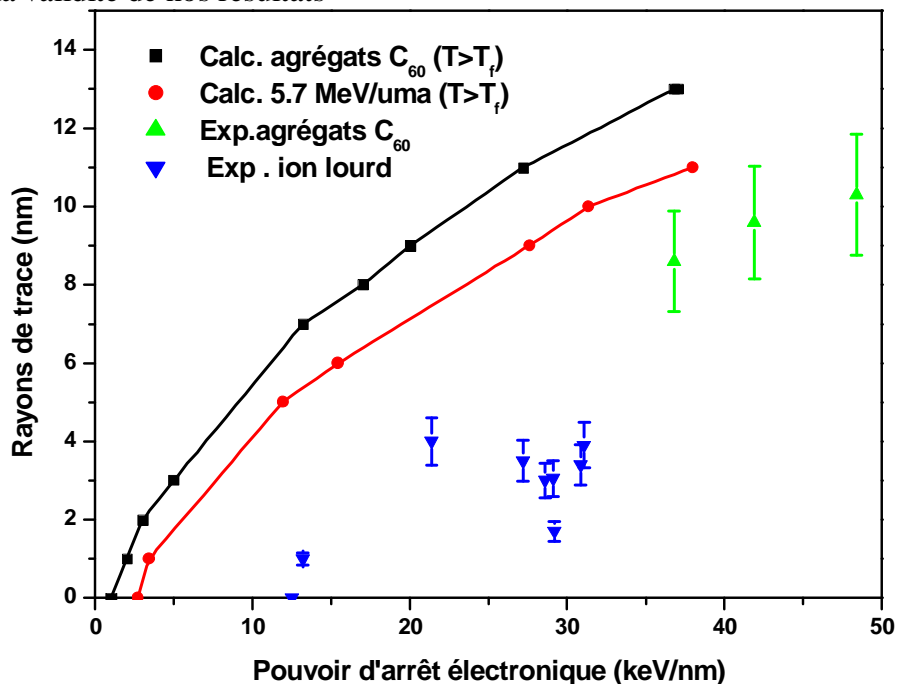


Figure (IV-6) : Evolution des rayons de trace calculés déduits du critère de fusion de l'InP en fonction du pouvoir d'arrêt électronique pour $g = 3.16 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$, $T_v = 100000 \text{ K}$ et pour une irradiation avec des ions d'énergie 5.7 MeV/uma et des agrégats C₆₀. Les points expérimentaux sont tirés des références [SZE 02, DHA07].

La divergence apparue dans la figure (IV-6) entre nos résultats de calculs en prenant le critère de fusion comme critère de formation de trace, et les résultats expérimentaux, nous a mené à pensé au critère de vaporisation, on a donc effectué des calculs avec différentes valeur de température de vaporisation jusqu'à obtenir un rayon de zone vaporisé similaire a celui obtenu

expérimentalement. On arrive en fin de compte à une valeur de température de vaporisation égale à 2600K. Cette méthode ne nous donne pas la valeur exacte de la température de vaporisation, mais une valeur de même ordre de grandeur. Un bon accord a été trouvé entre nos résultats de simulation et les résultats expérimentaux comme l'illustre la figure (IV-7). Les seuils d'endommagement théoriques estimés à partir du critère de vaporisation de l'InP irradié par des agrégats C_{60} et des ions lourds rapides sont respectivement $16,5 \pm 0,5$ keV/nm et $24,5 \pm 3,1$ keV/nm. Pas loin de ceux déterminés expérimentalement par Kamarou et al.^[KAM 08] dans le cas de l'irradiation de l'InP par des agrégats C_{60} (14keV/nm), et par Gaiduk et al.^[GAI 00] dans le cas de l'irradiation par des ions lourds rapides (20keV/nm).

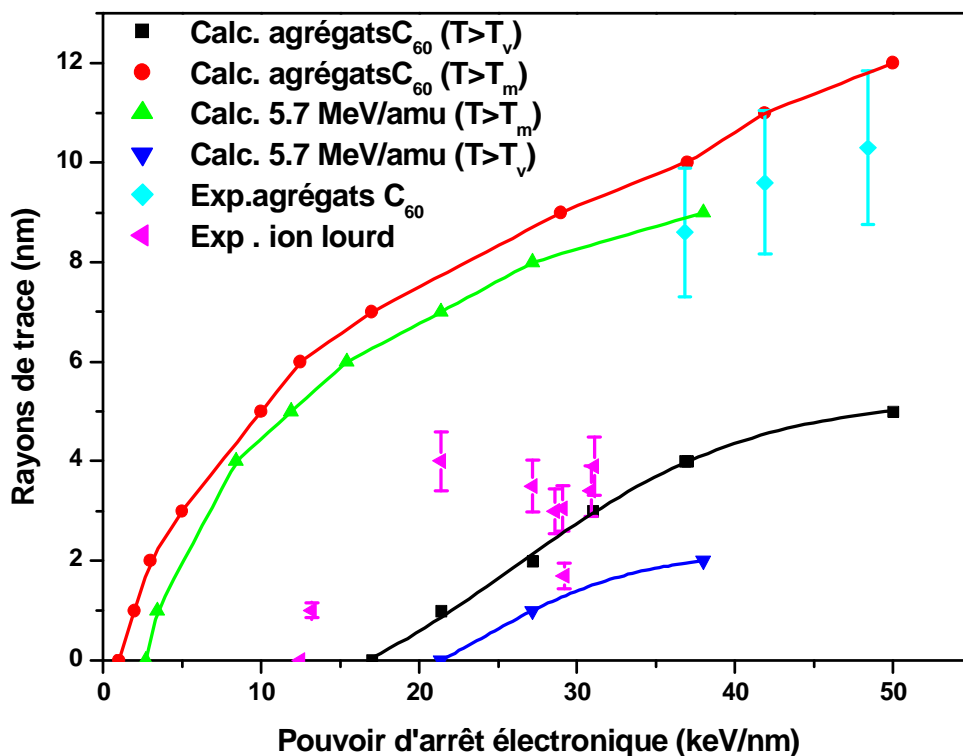


Figure (IV-7) : Evolution des rayons de trace calculés déduits du critère de fusion et de vaporisation de l'InP en fonction du pouvoir d'arrêt électronique pour $g = 3.16 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$, $T_v = 2600 \text{ K}$, et pour une irradiation avec des ions d'énergie 5.7 MeV/uma et des agrégats C_{60} . Les points expérimentaux sont tirés des références ^[SZE 02, DHA07]

4.1.3- L'arséniure de gallium (GaAs)

L'arséniure de gallium est l'un des semi-conducteurs III-V les plus résistants au bombardement d'ions lourds. Récemment, les irradiations avec des agrégats ont permis d'observer la création des traces amorphes dans le GaAs ^[COL 02]. Afin de pouvoir confronter

les résultats expérimentaux avec ceux issus de la modélisation, nous avons pris en considération les deux critères de formation de traces. Ceci permet d'estimer leur influence sur les résultats du calcul. La figure (IV-8), montre les variations du rayon de traces en fonction de $(dE/dx)_e$ pour le GaAs irradié avec des ions d'énergie 3.39 MeV/uma et des agrégats C_{60} , et pour une valeur du constante de couplage $g = 3.20 \times 10^{12} \text{ Wcm}^{-3} \text{ K}^{-1}$, cette valeur a été estimée par la même méthode que celle employé pour déterminer la valeur g de l'InP. D'après cette figure, nous remarquons que le meilleur ajustement entre les rayons de traces expérimentales et théoriques est obtenu en tenant compte du critère de vaporisation et dans le cas de l'irradiation du GaAs avec des agrégats C_{60} . En effet avec ces, la densité d'énergie déposée sur les électrons est beaucoup plus localisée que celle induite par les ions lourds rapides. Avec les agrégats, cette grande densité d'énergie favorise le transfert rapide de l'énergie entre les électrons et le réseau donnant lieu à des traces amorphes. Ainsi, le seuil de création de traces déterminé théoriquement en termes de pouvoir d'arrêt autour de $13,5 \pm 2,5 \text{ keV/nm}$ correspond à l'apparition de la vaporisation dans l'arséniure de gallium. Le dommage peut alors être interprété comme un dépassement de l'énergie de vaporisation du matériau, suivi d'une trempe ultrarapide de la phase vaporisé ainsi générée.

Notons que pour le GaAs irradié par des agrégats C_{60} , la divergence observée entre la valeur seuil de pouvoir d'arrêt électronique calculée selon le modèle de la pointe thermique et la valeur déterminé expérimentalement (31 keV/nm) par Kamarou et al.^[KAM 08] peut être expliquée de diverses façons :

- a) L'absence de détermination expérimentale pour certaines données concernant notamment les paramètres thermodynamiques tels que la chaleur latente de vaporisation et la conductivité thermique au point de vaporisation nous a mené à effectuer plusieurs approximations. Ceci peut avoir une influence sur le calcul numérique avec le modèle de la pointe thermique.
- b) Le calcul du seuil d'endommagement induit par la perte d'énergie électronique dépend de la valeur du couplage électron-phonon. Ce terme n'est pas connu expérimentalement pour le GaAs.
- c) L'interaction d'un projectile rapide avec les atomes de GaAs peut produire des électrons balistiques non-thermalisés, très rapides pour chauffer le cristal. La perte d'énergie électronique effective pour chauffer le cristal n'est alors plus $(dE/dx)_e$. Il existe un certain pourcentage entre la perte d'énergie effective du réchauffement et la perte d'énergie totale^[MED 10].

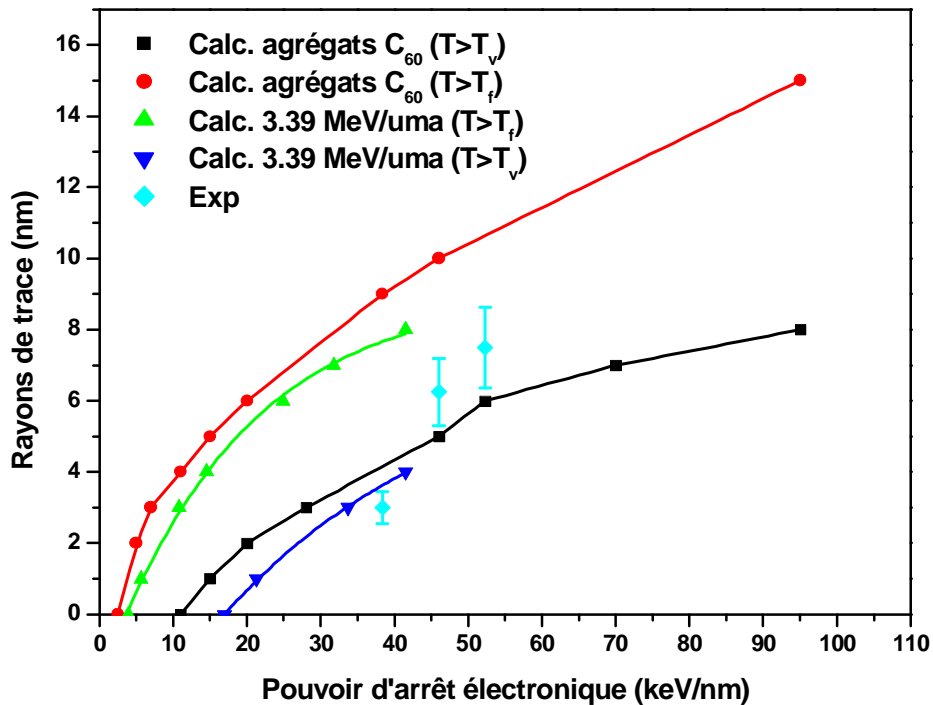


Figure (IV-8) : Evolution des rayons de trace calculés déduits du critère de fusion et de vaporisation du GaAs en fonction du pouvoir d'arrêt électronique pour $g = 3.20 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$, et pour une irradiation avec des ions d'énergie 3.39 MeV/uma et des agrégats C_{60} . Les points expérimentaux sont tirés de la référence [COL02].

4.1.4- Le germanium

Tous les semi-conducteurs ne sont pas sensibles de manière identique au dépôt d'énergie électronique. Parmi les semi-conducteurs, le silicium et le germanium semblent insensibles à toute déformation résultant du passage d'un ion isolé, laissant croire qu'ils échappent au phénomène. Cependant, la découverte de traces dans le silicium suivant le passage d'agrégats de 30 MeV [DUN 98] remet en question leur exclusion.

Contrairement aux irradiations avec des ions, les agrégats qui ont une énergie de l'ordre de 0.05 MeV/uma et des $(dE/dx)_e > 30 \text{ keV/nm}$, créent des traces latentes dans le germanium cristallin [COL 01]. Les agrégats ont l'avantage qu'on peut atteindre des pertes d'énergie électronique, bien supérieures à celles obtenus avec les ions. Pour confirmer les résultats expérimentaux obtenus par Colder et al. [COL 01] des calculs ont été réalisés dans le cas du germanium. Sa température de fusion est de 1210 K et sa température de vaporisation

est de 3103 K. Pour une constante de couplage g égale à $1.8 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$, la figure (IV-9) dévoile les meilleurs accords que nous avons obtenu entre les valeurs des rayons expérimentaux et ceux calculés par le modèle de la pointe thermique en prenant les deux critères de formation de trace. Nous constatons qu'en prenant le critère de vaporisation, les valeurs des rayons calculés sont plus proches de celles déterminées expérimentalement. Donc, le critère de vaporisation est mieux adapté pour expliquer la formation des traces dans le germanium. Le seuil de création de trace dans ce cas est $25,5 \pm 6,5 \text{ keV/nm}$. Toutefois, en tenant compte des incertitudes sur le modèle et des incertitudes expérimentales cette valeur peut être considéré proche de la valeur expérimentale (33 keV/nm) déterminée par Colder et al.^[COL02].

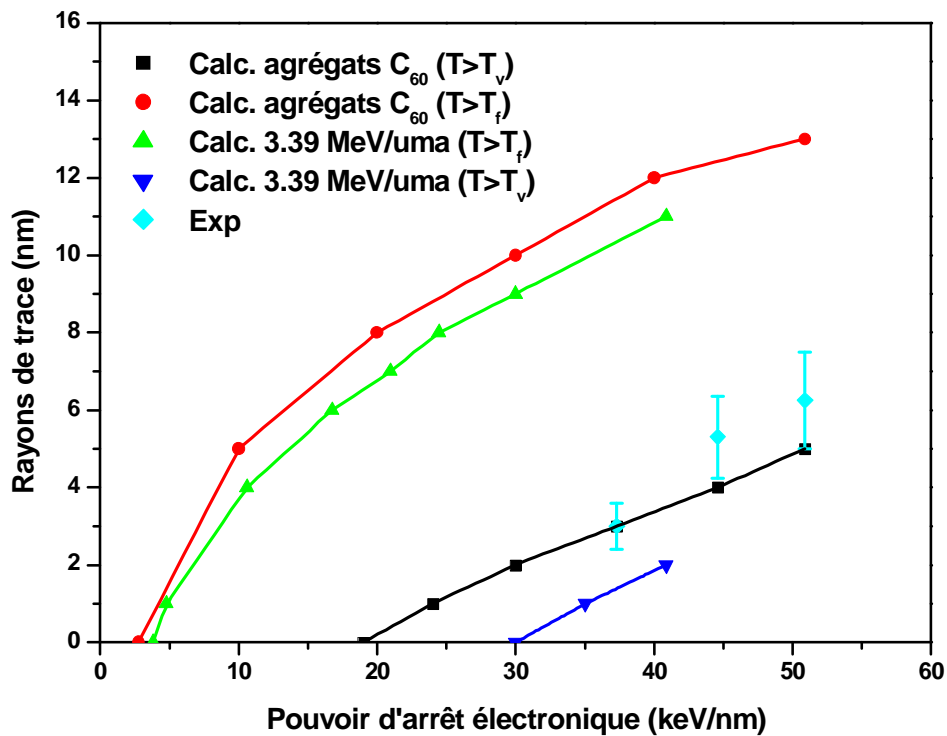


Figure (IV-9) : Evolution des rayons de trace calculés déduits du critère de fusion et de vaporisation du Ge en fonction du pouvoir d'arrêt électronique pour $g = 1.8 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$, et pour une irradiation avec des ions d'énergie 3.39 MeV/uma et des agrégats C_{60} . Les points expérimentaux sont tirés de la référence [COL01].

5- Effets des paramètres du modèle sur les résultats des calculs

Afin d'approfondir notre étude, nous analysons l'impact sur nos résultats de certains paramètres. Aussi, ces variations permettent d'obtenir des informations supplémentaires notamment concernant la formation des traces latentes dans les semi-conducteurs.

5.1- Effet de la constante de couplage électron-phonon g

La constante de couplage électron – phonon g , responsable du transfert d'énergie thermique des électrons vers le réseau, donne une indication sur la sensibilité ou non d'un matériau aux excitations électronique. Pour identifier l'impact de ce paramètre, nous avons effectué des simulations avec différentes valeurs de g .

5.1.1- Influence de g sur les rayons de traces

Dans le but de connaître l'influence du paramètre g sur les rayons de traces. Nous avons fait une série de calculs sur les matériaux InSb, GaAs et Ge irradiés avec des ions lourds rapides et des agrégats C_{60} .

En faisant varier le paramètre g de 0.25 à $5 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$ pour l'InSb, de 0.8 à $9.6 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$ pour le GaAs et de 1 à $9 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$ pour le Ge, autour de la valeur obtenu par la formule de Kaganov pour chacun des matériaux étudiés, la figure (IV-10a, 10b, 10c), résume l'ensemble des résultats obtenus. Comme nous pouvons le voir sur cette figure, à mesure que le paramètre g augmente, le rayon de trace augmente d'abord rapidement, puis devient graduellement de plus en plus stabilisé, et atteint finalement la saturation. Cela signifie, qu' à partir d'une certaine valeur du constante de couplage électron- phonon g , le rayon maximal pour lequel la température a dépassé la température de fusion ou de vaporisation (rayon de trace) cesse d'augmenter. Ceci s'explique par le fait qu'une température supérieure à la température nécessaire à la fusion ou à la vaporisation du matériau sur le passage d'un ion n'entraîne pas plus de modifications de la structure

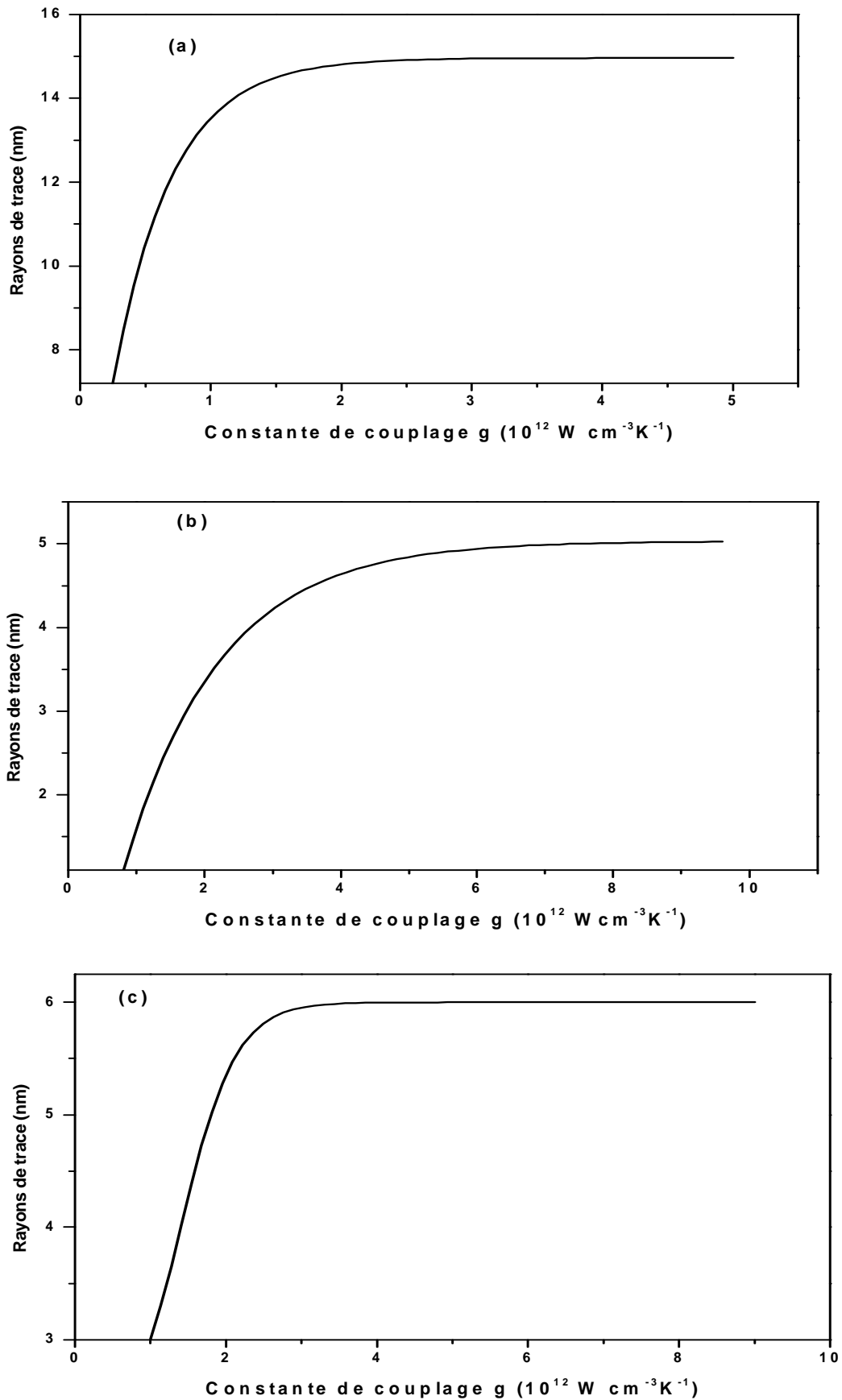


Figure (IV-10) : Evolution des rayons de trace calculés (a) déduits du critère de fusion de l'InSb irradié avec des ions Pb d'énergie 10 MeV/uma, (b) et (c) déduits du critère de vaporisation du GaAs et du Ge respectivement irradié avec des agrégats C_{60} , en fonction de la constante de couplage électron-phonon g .

5.1.2- Influence de g sur le pouvoir seuil de création de traces

L'influence du paramètre g sur le pouvoir seuil de création de traces est illustrée dans les figures (IV-11a, 11b) et les figures (IV-12a, 12b). Chaque point représente le pouvoir seuil déduit des calculs en prenant en compte le critère de vaporisation pour le GaAs et le Ge irradiés avec des agrégats C₆₀ (figures (IV-11a, 11b)) et le critère de fusion pour l'InSb et l'InP irradiés par des ions Pb d'énergie 10 et 5.7 MeV/uma respectivement (figures (IV-12a, 12b)). Les résultats de simulation montrent que les matériaux étudiés ont un comportement semblable, c'est à dire : lorsque la constante de couplage g croît le pouvoir seuil décroît. Ce qui est en accord avec le résultat obtenu par Osmani et al. ^[OSM 11] dans le cas du silicium cristallin. Ceci résulte du fait que si la constante de couplage g est grande, l'énergie initiale déposée sur les électrons du matériau est très rapidement transférée au réseau, menant ainsi, à une grande densité d'énergie déposée sur le réseau. C'est la raison pour lequel même à une faible valeur du pouvoir d'arrêt électronique, une phase fondue ou vaporisée peut être créée dans le matériau.

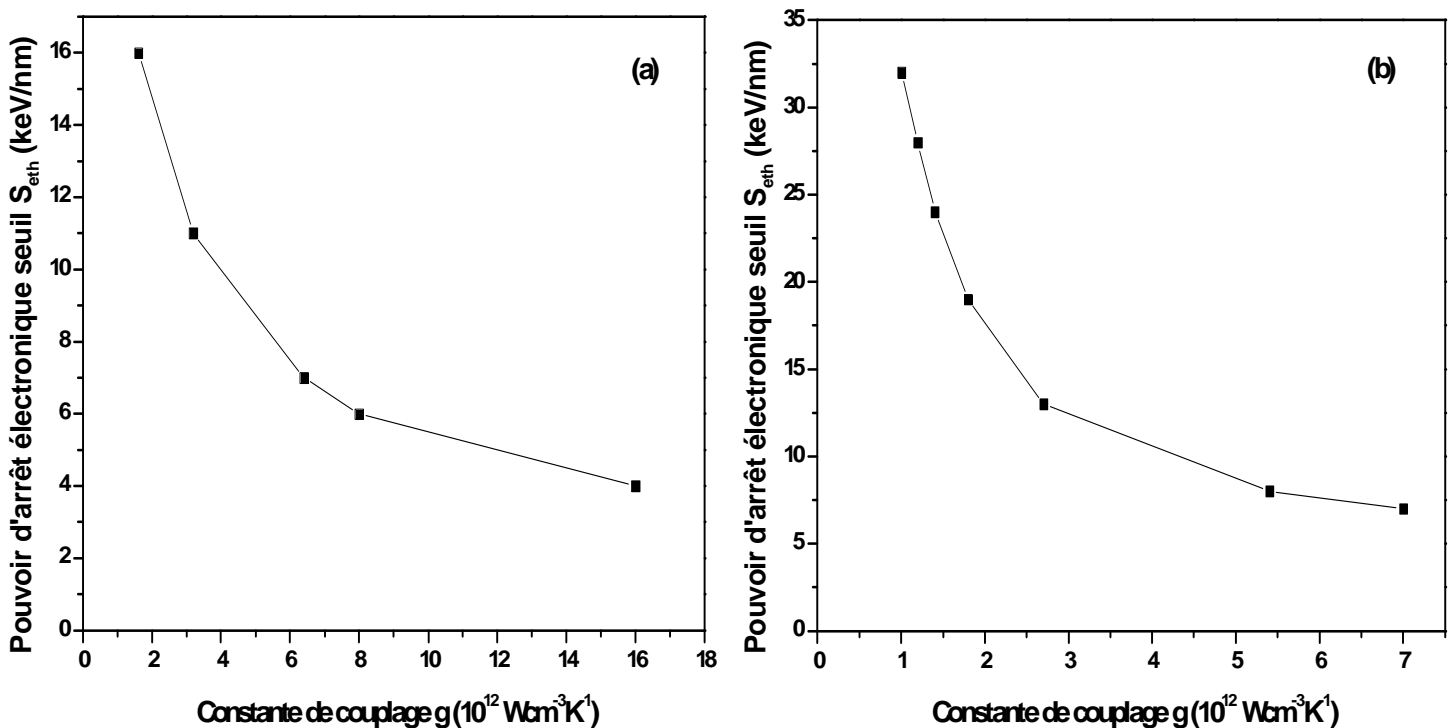


Figure (IV-11) : Evolution du pouvoir d'arrêt électronique seuil S_{eth} déduit du critère de vaporisation (a) du GaAs et (b) du Ge irradiés avec des agrégats C₆₀, en fonction de la constante de couplage électron-phonon g.

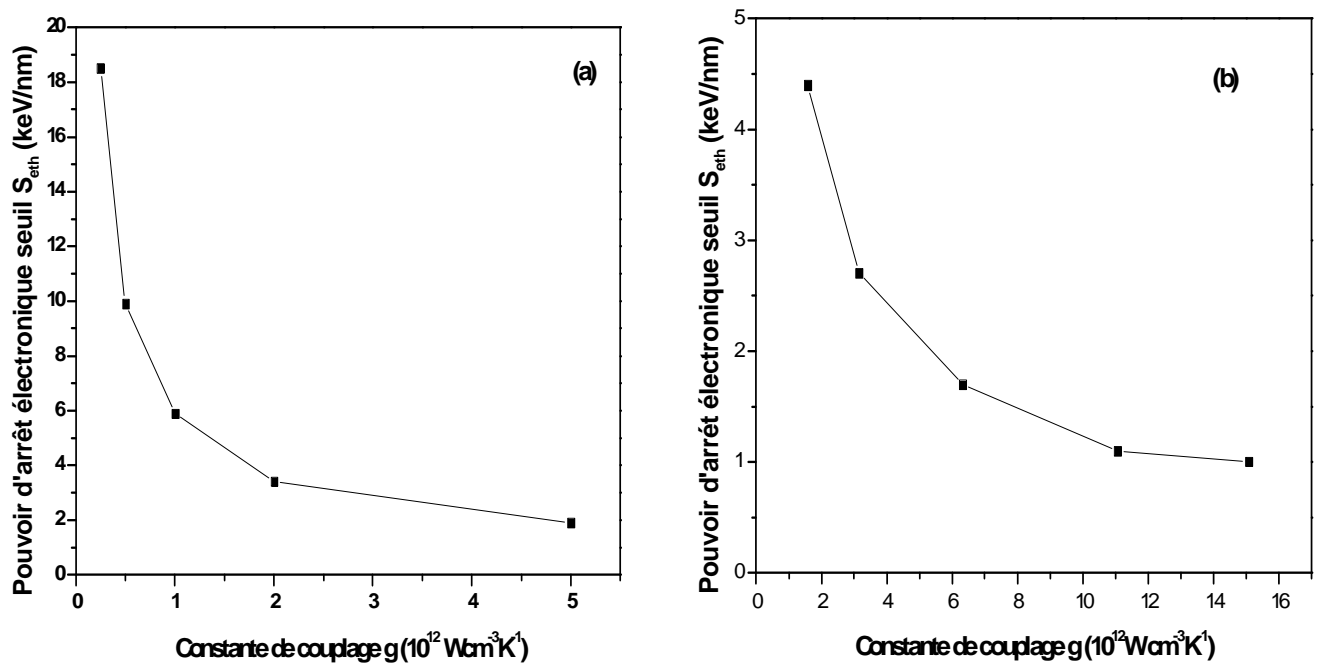


Figure (IV-12) : Evolution du pouvoir d'arrêt électronique seuil S_{eth} déduit du critère de fusion (a) de l'InSb et (b) de l'InP irradiés avec des ions Pb d'énergie 10 et 5.7 MeV/uma respectivement, en fonction de la constante de couplage électron-phonon g .

5.1.3- Influence de g sur la température maximale le long de la trajectoire de l'ion

Pour un rayon r donné, la température maximale du réseau est atteinte quand le système électronique et le système réseau sont en équilibre.

Nous avons testé l'influence du paramètre g sur la température maximale le long de la trajectoire de l'ion des semi-conducteurs : InSb, InP, GaAs et Ge, en utilisant une plage de variation de g que l'on ajuste dans une plage autour de la valeur théorique calculée par la formule de Kaganov et al.^[KAG 57]. Les figures (IV-13a, 13b) montrent l'évolution de la température maximale du réseau le long de la trajectoire de l'ion en fonction de la constante de couplage g pour l'InSb et l'InP irradiés par des ions Pb d'énergie 10 MeV/uma. Comme attendu, plus la constante de couplage est grande, plus la température maximale est importante. Ceci est dû au fait que plus la constante g est grande, plus l'énergie sera déposée sur un volume étroit ; la température maximale atteinte par le réseau sera donc plus élevée. Ce résultat est valable pour le GaAs et le Ge irradiés avec des agrégats C_{60} (figures (IV-13c, 13d)). Ceci prouve que la température du réseau dépend de g , et par conséquent la formation de trace latente.

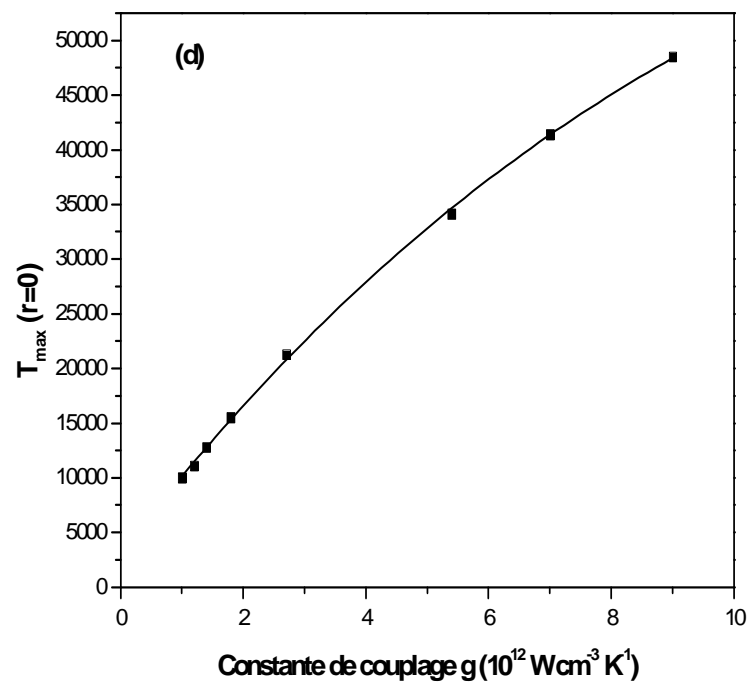
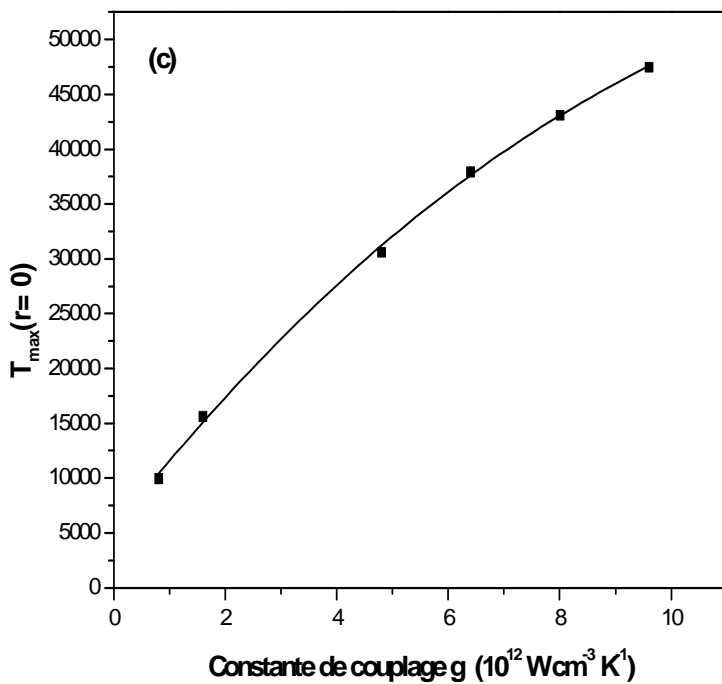
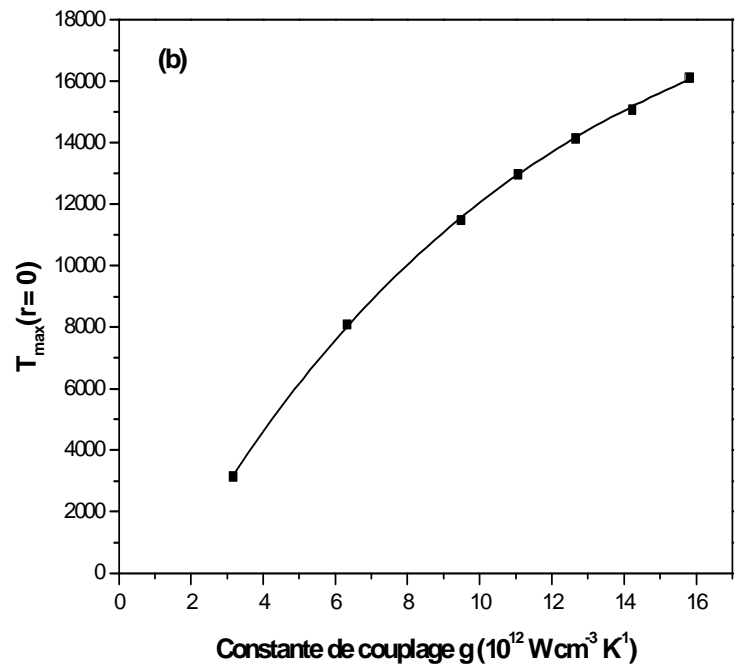
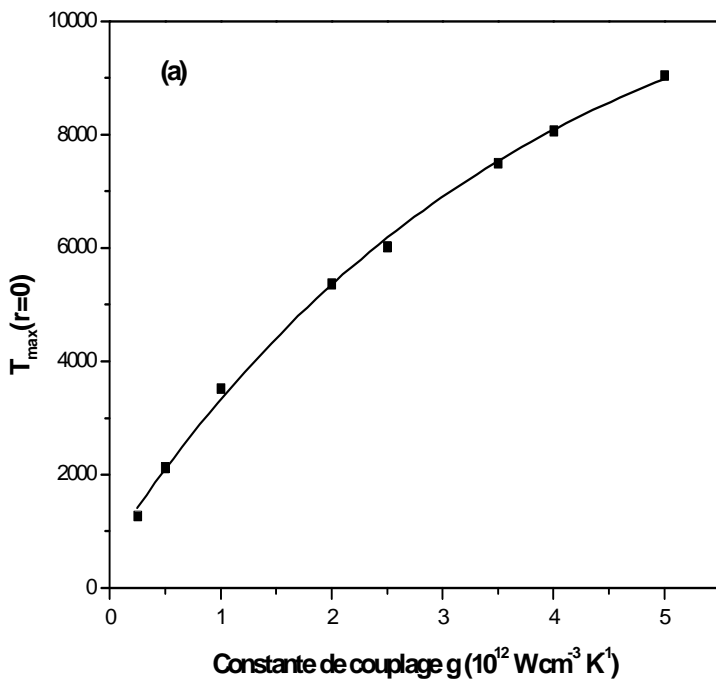


Figure (IV-13) : Evolution de la température maximale du réseau le long de la trajectoire de l'ion ($r=0$) en fonction de la constante de couplage électron-phonon g , (a) de l'InSb et (b) de l'InP irradiés avec des ions Pb d'énergie 10 MeV/uma, (c) du GaAs et (d) du Ge irradiés avec des agrégats C_{60} .

5.2- Effet de la distribution radiale de l'énergie déposée sur la formation des traces latentes

Jusqu'à présent, l'endommagement induit dans les semi-conducteurs irradiés par les ions lourds rapides a toujours été corrélé à la valeur du pouvoir d'arrêt électronique [KOM 03, WES07, ION 10] sans se préoccuper de la distribution radiale de l'énergie déposée [7,8] autour du trajet de l'ion. L'influence de cette distribution a été observée dans $Y_3Fe_5O_{12}$ par Meftah et al. [MEF 93]. Il existe des calculs numériques de type Monte Carlo et des simulations semi empiriques qui ont estimé la distribution radiale de l'énergie $D(r)$ déposée dans le réseau de l'échantillon soumis à l'irradiation [WAL86]. Waligorski et al. ont proposé une formule analytique du $D(r)$ qui décrit les simulations Monte Carlo. Si on intègre $D(r)$ dans une géométrie cylindrique, la fraction d'énergie déposée dans un cylindre de rayon R est calculée. La figure (IV-14a, 14b) présente la fraction de l'énergie déposée dans un cylindre en fonction de son rayon dans le cas d'une irradiation de l'InSb et de l'InP avec un ion Pb d'énergie 1.85 et 10 MeV/uma. D'après cette figure, nous constatons que le volume dans lequel l'énergie de l'ion incident est déposée augmente avec la vitesse initiale. C'est-à-dire que l'énergie est déposée sur un rayon d'autant plus grand que la vitesse de l'ion est grande. Dans le cas de l'InSb irradié par un ion Pb d'énergie 1.85 MeV/uma la figure (IV-14a) indique que 40% de l'énergie est déposée dans un cylindre de rayon 1.5nm et 60% pour 3nm.

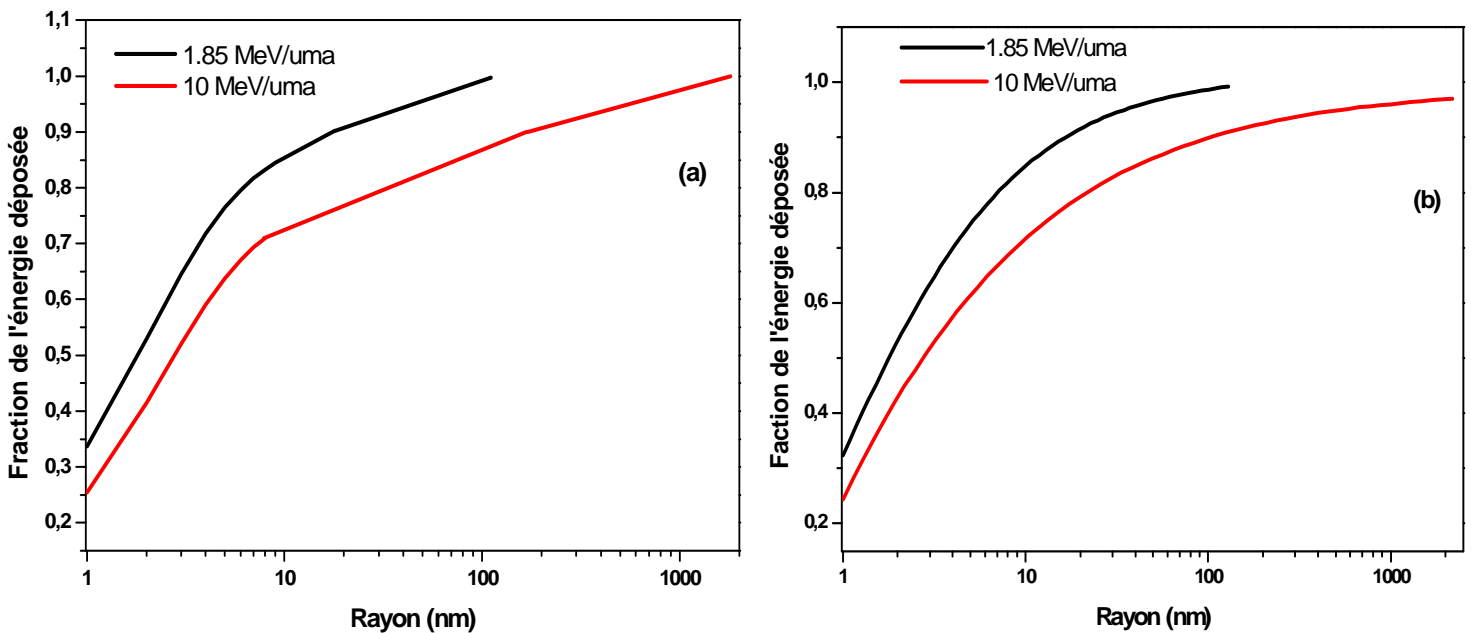


Figure (IV-14) : Fraction de l'énergie déposée en fonction de la distance radiale de l'axe de trajectoire de l'ion incident dans le cas d'une irradiation (a) de l'InSb et (b) de l'InP avec un ion Pb d'énergie 1.85 et 10 MeV/uma respectivement.

6- Effet de vitesse sur les rayons de traces latentes

A notre connaissance, jusqu'à présent, aucune étude expérimentale n'avait été réalisée sur l'effet de vitesse dans les semi-conducteurs. Par ce travail, nous sommes les premiers à faire une étude théorique sur l'effet de vitesse dans les semi-conducteurs cristallins. Cet effet a été observé expérimentalement par Meftah et al. ^[MEF 93] dans le $Y_3Fe_5O_{12}$. Ainsi, Meftah et al. ^[MEF 93] ont montré que pour un même pouvoir d'arrêt électronique le rayon de trace déduit des expériences à faible énergie, est supérieure à celui des expériences à haute énergie.

Afin d'étudier l'effet de vitesse dans nos semi-conducteurs, nous avons pris comme exemple, l'antimoniure d'indium, vue que les études expérimentales sur ce matériau ont montré une large dispersion des rayons de traces pour une même valeur du pouvoir d'arrêt électronique, obtenue par deux valeurs d'énergie incidentes différentes.

Pour faire cette étude, en utilisant le modèle de la pointe thermique nous avons fait une série des calculs pour déterminer les rayons de traces créés dans l'InSb en prenant en compte le critère de fusion. La figure (IV-15) montre l'évolution du rayon de traces en fonction des vitesses de l'ion pour $(dE/dx)_e = 28, 33$ keV/nm. Nous remarquons que le rayon correspond à la même valeur du pouvoir d'arrêt électronique décroît quand l'énergie de l'ion croît, c'est-à-dire que le rayon de trace déduit à faible énergie, est supérieur à celui à haute énergie. Ceci est dû au fait que plus l'énergie incidente sera faible, plus la densité d'énergie déposée sera importante et ainsi plus le rayon de la trace sera important. Donc pour la même perte d'énergie, le dommage est plus important avec des ions de faible vitesse qu'avec des ions de grande vitesse. Ce phénomène appelé effet de vitesse est lié à la densité d'énergie déposée.

En tenant compte des erreurs expérimentales nous observons un bon accord entre les résultats théoriques et les résultats expérimentaux concernant l'InSb (figure(IV-15)), ce qui mit en évidence l'effet de vitesse dans ce matériau.

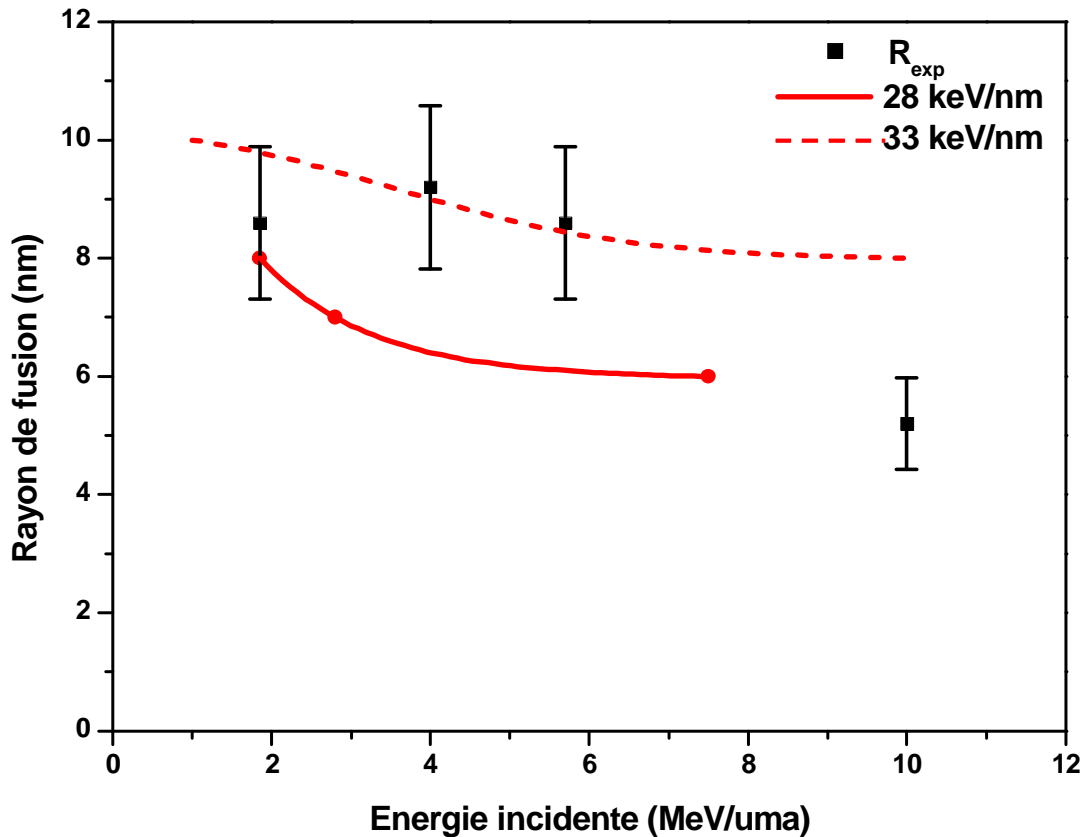


Figure (IV-15) : Evolution des rayons de trace en fonction des vitesses de l'ion dans l'InSb pour $(dE/dx)_e = 28$ et 33 keV/nm . Les points expérimentaux sont tirés de la référence ^[SZE 02].

7- Evolution de λ en fonction de l'énergie de la bande interdite E_g

Le paramètre λ représente le libre parcours moyen d'interaction électron-réseau, c'est-à-dire la distance radiale par rapport au parcours de l'ion à laquelle les électrons vont communiquer leur énergie aux atomes du réseau.

Dans ce travail, l'étude d'un certain nombre de semi-conducteurs a permis d'obtenir une représentation unifiée de ce paramètre, à condition de faire les hypothèses suivantes :

- La création de traces dans l'InSb correspond à une fusion.
- La création de traces dans l'InP, GaAs et Ge correspond à une vaporisation.

Des travaux antérieurs ^[TOU 02, MEF 05] sur d'autres matériaux ont permis de relier la valeur du paramètre λ à celle de l'énergie de la bande interdite E_g . En utilisant cette relation des valeurs de λ ont été extraites pour l'InP, GaAs et Ge. Pour l'InSb la valeur de λ est déterminée à partir de la valeur de g suivant la relation $\lambda = \sqrt{D_e C_e / g}$.

Le tableau (IV-3), donne pour les différents matériaux étudiés l'énergie de la bande interdite E_g et les λ calculées correspondant.

Matériau	E_g (eV)	λ (nm)	Référence
InSb	0,17	24,1±4,1	Présent travail, déduit du modèle de la pointe thermique
Ge	0,66	10,5±0,5	Présent travail [KAD 14]
InP	1,34	7,95±0,05	Présent travail
GaAs	1.42	7,9±0,1	Présent travail [KAD 14]

Tableau (IV-3) : L'énergie de la bande interdite E_g et les valeurs de libres parcours moyen λ calculées pour les semi-conducteurs étudiés.

Il est clair que λ diminue rapidement dans le cas de faibles valeurs de l'énergie de gap, et une diminution lente dans le cas des hautes valeurs. Cette évolution apparaît en accord avec les prédictions de Haglung et Kelly ^[HAG 93], qui ont suggéré que tous les semi-conducteurs sont relativement des bons matériaux résistants contre l'excitation électronique élevée.

L'évolution de λ pour ces matériaux en fonction de l'énergie de la bande interdite E_g est représentée sur la figure (IV-16). Nous constatons une décroissance monotone de λ en fonction de E_g c'est-à-dire que λ est d'autant plus grand que la largeur de la bande interdite est faible. Cette figure met ainsi en évidence une corrélation entre la largeur de la bande interdite et le paramètre λ .

La connaissance de λ nous permet d'accéder au temps d'interaction électron-phonon en utilisant la relation $\lambda^2 = D_e \tau_a$ avec la valeur de $D_e = 2 \text{cm}^2/\text{s}$ pour les électrons chauds. Les

valeurs de τ_a sont de l'ordre de 3×10^{-12} s pour l'InSb, de 0.6×10^{-12} s pour le Ge, et de 0.3×10^{-12} s pour l'InP et le GaAs.

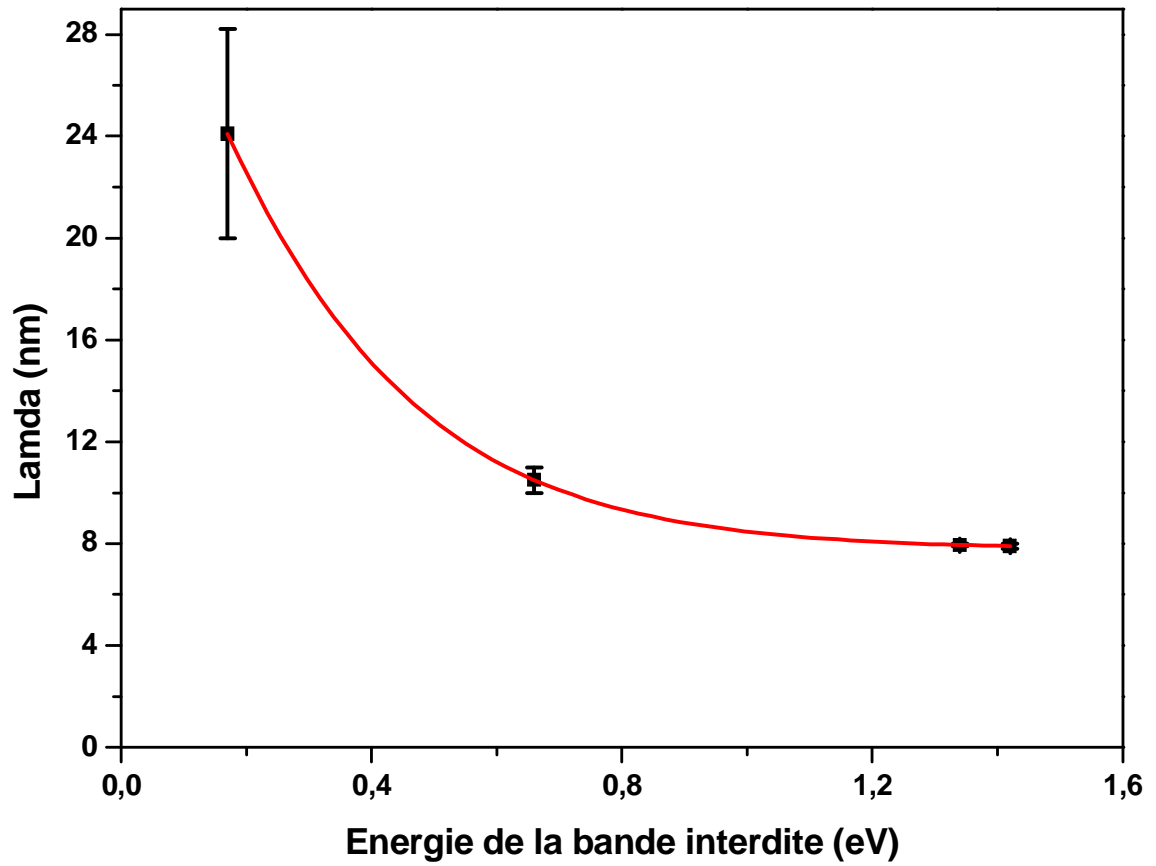


Figure (IV-13) : Evolution de λ en fonction de l'énergie de la bande interdite E_g pour les matériaux étudiés

Références Chapitre IV :

- [ASC 76] N. Aschcroft, N. Mermin, Solid State Physics, New York: Holt, Reinhart and Winston (1976).
- [BIM 82] D.Bimberg, R.Blachnik, M. Cardona, P. J. Dean, Th. Grave, G. Harbeke, K. Hübner, U. Kaufmann, W. Kress, O. Madelung, W. V. Münch, U. Rössler, J. Schneider, M. Schulz, M. S. Skolnick: Physics of Group IV Elements and III-V Compounds, Landolt-Börnstein, New Series, Group III, Vol.17a. Berlin: Springer- Verlag (1982).
- [COL 01] A. Colder, Thèse de Doctorat de l'Université de Caen (2001).
- [COL 02] A. Colder, B. Canut, M. Levalois, P. Marie, X. Portier, S. M. M. Ramos, J. Appl. Phys. 91, 5853 (2002).
- [DHA 07] S. Dhamodaran, A. P. Pathak, A. Dunlop, G. Jaskierowicz, S. Della- Negra, Nucl. Instr. And Meth. B256, 229 (2007).
- [DUF 93] Ch. Dufour, Thèse de Doctorat de l'Université de Caen (1993).
- [DUN 98] A. Dunlop, G. Jaskierowicz, S. Della-Negra, Nucl. Instr. and Meth. B146, 302 (1998).
- [GAI 00] P. I. Gaiduk, F. F. Komarov, W. Wesch, Nucl. Instr. and Meth. B 164/165,377 (2000).
- [KAD 12] S. Kadid, A. Meftah, Journal of Physical Science and Application. 2 (8),269 (2012).
- [KAD 14] S. Kadid, A. Meftah, Can. J. Phys. 92, 1637 (2014).
- [KAG 57] M. I. Kaganov, I. M. Lifshits and L.V. Tanatarov, Sov. Phys JETP4 173, (1957).
- [KAM 08] A. Kamarou, W. Wesch, E. Wendler, A. Undisz, M. Rettenmayr, Phys. Rev. B78, 054111 (2008).

- [KHA 08] A. S. Khalil, L. T. Chadderton, A. Yu. Didyk, M. C. Ridgway, A. M. Stewart, Part. Nucl. Lett. 5, 481 (2008).
- [KOM 03] F. F. Komarov, P. I. Gaiduk, L. A. Vlasukova, A. Yu. Didyk, V. N. Yuvchenko, Vacuum 70, 75 (2003).
- [MEF 93] A. Meftah, F. Brisard, J. M. Constantini, M. Hage Ali, J. P. Stoquert, F. Studer, M. Toulemonde, Phys. Rev. B48, 920 (1993).
- [MEF 05] A. Meftah, J. M. Constantini, N.Khalifaoui, S.Boudjadar, J. P. Stoquert, F. Studer, M. Toulemonde, Nucl. Instr. And Meth. B237, 563 (2005).
- [OSM 12] O. Osmani, I. Alzaher, T. Peters, B. Ban d'Etat, A. Cassimi, H. Lebius, I. N. Medvedev, B. Rethfeld, M. Schleberger, Nucl. Instr. And Meth. B 282, 43 (2012).
- [SZE 02] G. Szenes, Z. E. Horvath, B. Pecs, F. Paszti, L. Toth, Phys. Rev. B 65, 045316 (2002).
- [TOU 96] M.Toulemonde, J. M. Constantini, C. Dufour, A. Meftah, E. Paumier, and F. Studer, Nucl. Instr. And Meth. B116, 37 (1996).
- [TOU 00] M. Toulemonde, C. Dufour, A. Meftah, E. Paumier, Nucl. Instr. Meth. B 166-167, 903 (2000).
- [TOU 02] M. Toulemonde, W. Assmann, F. Grüner, C. Trautmann, Phys. Rev. Lett. 88, 057602 (2002).
- [WAL 86] M. P. R. Waligorski, R. N. Hamm and R.Katz, Nucl. Track. Rad. Meas. 11, 309 (1986).
- [WES 04] W. Wesch, A. Kamarou, E. Wendler, Nucl. Instr. and Meth. B 225, 111 (2004).
- [WES 07] W. Wesch, A. Kamarou, E. Wendler, A. Undisz, M. Rettenmayr Nucl. Instr. and Meth. B 257, 283 (2007)
- [WES 12] W. Wesch, E. Wendler, C. S. Schnohr, Nucl. Instr. and Meth. B 277, 58. (2012).
- [YAV 83] Y. M. Y. Yavlinskii, Sov. Phys. Dokl. 28, 391 (1983).

Conclusion générale

Conclusion Générale

Ce travail nous a permis de faire un état des connaissances sur la formation des traces latentes dans les semi-conducteurs l'antimoniure d'indium (InSb), le phosphore d'indium (InP), l'arséniure de gallium (GaAs) et le Ge irradiés par des ions lourds rapides et des agrégats C_{60} . Pour retrouver les rayons et les seuils de création de traces déduits expérimentalement dans ces semi-conducteurs, nous avons appliqué le modèle de la pointe à ces matériaux. Nous avons étudié l'évolution des rayons de traces en fonction du pouvoir d'arrêt électronique $(dE/dx)_e$, pour différentes valeurs d'énergie. Des effets non linéaires ont été observés.

En tenant compte des incertitudes expérimentales et des incertitudes sur le modèle, les résultats obtenus avec l'antimoniure d'indium irradié par des ions lourds rapides montrent que pour une valeur de la constante de couplage électron-phonon g égale à $0.25 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$ un bon accord a été trouvé entre les rayons de trace mesurés expérimentalement et ceux déduits de la simulation. Ce qui a permis de déduire graphiquement une valeur seuil de création de trace égale à $17 \pm 2 \text{ keV/nm}$.

Pour l'InP, le GaAs et le Ge irradiés par des ions lourds rapides et des agrégats C_{60} , les rayons calculés à partir du critère de vaporisation ont été déterminés en prenant une constante de couplage g égale à $3.16 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$, $3.20 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$ et $1.8 \times 10^{12} \text{ W cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$ respectivement. Nous avons constaté qu'avec ce critère, les valeurs des rayons calculés sont plus proches de celles déterminés expérimentalement et que les valeurs seuils d'apparition de traces dans l'InP, GaAs et Ge irradiés par des agrégats C_{60} sont $16,5 \pm 0,5$, $13,5 \pm 2,5$ et $25,5 \pm 6,5 \text{ keV/nm}$ respectivement. D'après ces résultats, le modèle de la pointe thermique semble bien décrire la formation des traces dans l'InP, le GaAs et le Ge irradiés par des agrégats C_{60} , en utilisant le critère de vaporisation.

Comme la constante du couplage électron-phonon g est un paramètre clé du modèle. Nous avons étudié l'influence de ce dernier sur les résultats des calculs, en le faisant varier dans une plage de valeurs extrêmes. Nous avons notamment montré la dépendance des rayons

de traces, le seuil du pouvoir d'arrêt électronique et de la température maximale le long de la trajectoire de l'ion avec la constante de couplage électron-phonon g .

Nous avons également mis en évidence, pour la première fois un effet de vitesse dans l'InSb irradié par des ions lourds rapides et une corrélation entre la largeur de la bande interdite des matériaux étudiés et le paramètre λ .

Ce travail, montre l'importance des effets thermiques et du couplage électron-phonon ainsi que le choix de critère de formation de traces dans l'amorphisation des semi-conducteurs induite par des ions lourds rapides et des agrégats C_{60} . Et confirme que le processus conduisant à la formation de traces est attribué à l'effet de pointe thermique qui provient de la dissipation de l'énergie des électrons secondaires sous forme de chaleur.

Enfin, l'application du modèle de la pointe thermique aux semi-conducteurs étudiés dans cette thèse, se doit d'être approfondie et étendue à d'autres semi-conducteurs afin de comprendre encore mieux le comportement de ces matériaux soumis à des irradiations.

Résumé :

Les ions lourds rapides et les agrégats C_{60} , en pénétrant dans les semi-conducteurs, déposent leur énergie essentiellement par interaction avec les électrons de la cible. Ce dépôt conduit au dessus d'une valeur seuil du pouvoir d'arrêt électronique à la formation de traces latentes. Dans ce travail, nous avons déterminé les rayons de traces et les seuils d'endommagements en appliquant le modèle de la pointe thermique à deux grandes familles de semi-conducteurs pour lesquelles des résultats expérimentaux sont disponibles dans la littérature, les composés III-V représentés par l'antimoniure d'indium, le phosphure d'indium et l'arséniure de gallium, et le germanium au titre des composés IV. Les résultats de la simulation ont été confrontés aux mesures expérimentales. L'effet de vitesse sur la création de traces mis en évidence dans ces matériaux montre une nouvelle fois que le pouvoir d'arrêt n'est pas l'unique paramètre à prendre en considération.

Mots clefs : Irradiation, Ions lourds rapides, Agrégats, Traces latentes, Semi-conducteurs, Pointe thermique.

Abstract:

Swift heavy ions and C_{60} clusters, penetrating into matter, deposit their energy mainly by interaction with the target electrons. This deposit leads above a threshold value of the electronic stopping power to the formation of latent tracks. In this work, we determined the tracks radius and the thresholds of damage by applying the model of the thermal spike to two families of semiconductors for which experimental results are available in the literature, compounds III-V represented by the indium antimonide, the indium phosphide and gallium arsenide, and germanium for the compounds IV. The results of simulation were confronted with experimental measurements. The effect speed on creation of tracks highlighted in these materials shows once again that the stopping power is not the single parameter to be taken into account.

Key words: Irradiation, Swift heavy ions, Clusters, Latent tracks, Semi-conductors, Thermal spike

ملخص:

الأيونات الثقيلة و السريعة و المجاميع C_{60} عند دخولها المادة, تضع طاقتها أسا سا عن طريق التفاعل مع إلكترونات العينة. عند تجاوز القيمة الدنيا للفقدان الإلكتروني للطاقة, هذه الطاقة المودعة تؤدي إلى تشكل الأثار الكمونية . في هذا العمل , بتطبيق نموذج الرأس الحرارية قمنا بتعين أنصاف أقطار الأثار وعتبات الضرر لفئتين مهمتين من أنصاف النواقل , من ناحية الفئة III-V الممثلة ب $InSb, InP, GaAs$ و شبه الموصل Ge ممثلا للفئة IV , أربعة مواد لدينا نتائجها التجريبية. نتائج المحاكاة فورنت بالنتائج التجريبية . تسليط الضوء على تأثير السرعة على تشكل الأثار الكمونية يبين مرة جديدة أن الفقدان الإلكتروني للطاقة ليس هو العامل الوحيد الذي يجب أخده بعين الاعتبار .

الكلمات المفتاحية : إشعاع, أيونات ثقيلة وسريعة, مجاميع, أنصاف النواقل, أثار كمونية, رأس حرارية