



Université Blaise Pascal

Master 1 Physique parcours Physique

Rapport de Stage soutenu le 27 juin 2007

**Simulation Monte-Carlo du trajet
des électrons dans un matériau.
Applications à des surfaces
rugueuses et composés binaires.**

Auteur : Nicolas DALLE
Responsable : Christine ROBERT-GOUMET

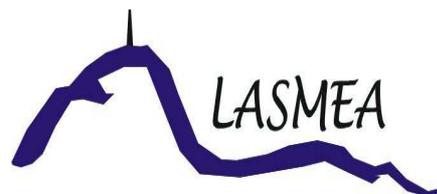


Table des matières

Introduction.....	3
I. Présentation de l'étude.....	4
A. <i>Présentation de la méthode E.P.E.S. (Elastic Peak Electron Spectroscopy).</i>	<i>5</i>
1. Définition de l'E.P.E.S.....	5
2. Théorie de la diffusion d'un électron par un atome.....	5
B. <i>Techniques de simulation.....</i>	<i>7</i>
1. Généralités sur la simulation Monte-Carlo.....	7
C. <i>Présentation de l'expérience.....</i>	<i>9</i>
1. Analyseur R.F.A. (Retarding Field Analyser).....	9
2. Analyseur H.S.A. (Hemispherical Scanning Analyser).....	10
II. Description de la simulation Monte-Carlo.....	11
A. <i>Avant propos</i>	<i>12</i>
B. <i>Schéma général du programme de simulation.....</i>	<i>12</i>
C. <i>Simulation d'un substrat lisse et définition de la fente d'entrée d'un H.S.A. ..</i>	<i>15</i>
D. <i>Simulation d'un substrat rugueux.</i>	<i>18</i>
1. Formalisme géométrique.....	18
2. Réflexion théorique sur les créneaux.....	19
a) Effet d'ombrage.....	19
b) Rotation du repère principal.....	21
c) Incidence non normale sur les créneaux.....	22
E. <i>Couches binaires sur surface lisse.</i>	<i>24</i>
III. Exploitation des résultats de simulations.....	26
A. <i>Mise en place des créneaux.</i>	<i>27</i>
1. Rotation des repères.....	27
2. Effet d'ombrage.....	30
B. <i>Résultats de simulation.....</i>	<i>31</i>
1. Silicium Z=14 à 200, 500 et 1000eV.....	31
2. Carbone Z=12 à 200, 500 et 1000eV.....	33
3. Or Z=79 à 200, 500 et 1000eV.....	35
C. <i>Incidence non normale sur les surfaces rugueuses.</i>	<i>37</i>
IV. Extrapolation des résultats & perspectives de la simulation.....	39
A. <i>Exploitation des résultats.....</i>	<i>40</i>
B. <i>Projet de simulation future.....</i>	<i>40</i>
1. Plan d'incidence des créneaux.....	40
2. Surface en pyramide.....	41
3. Couches ternaires sur surface rugueuse ou lisse.....	42
4. Représentation du parcours de l'électron dans l'échantillon.....	42
Conclusion.....	45
V. Annexes.....	46
A. <i>Probabilité de diffusion des différents éléments étudiés.....</i>	<i>47</i>
B. <i>Représentation normalisée.....</i>	<i>48</i>
VI. Programme de simulation.....	51

Introduction

Mon stage de Master Physique 1^{ère} année s'est déroulé dans l'équipe « Surface & Interface » du L.A.S.M.E.A. Ce groupe de recherche travaille sous ultravide de manière à caractériser des surfaces par spectroscopies électroniques.

Je me suis plus particulièrement intéressé à la spectroscopie du pic élastique (E.P.E.S.). Cette méthode d'analyse est très sensible aux éléments de surface et non destructive. Cependant, afin d'interpréter les résultats expérimentaux, il est indispensable de connaître le parcours des électrons dans le matériau.

L'équipe « Surface & Interface » travaille depuis les années 90 à l'élaboration d'un programme basé sur une simulation Monte-Carlo des électrons réfléchis élastiquement. Ces simulations ont déjà fournies de nombreux résultats en très bon accord avec l'expérience.

L'évolution de la recherche implique une refonte de ce programme pour pouvoir inspecter et simuler de nouveaux horizons comme par exemple les surfaces rugueuses, poreuses, etc...

Le but de mon stage a été de faire évoluer ce programme tout en conservant les parties déjà mises en place. C'est pour cela que nous avons recréé et repensé le programme pour qu'il puisse accueillir de nouveaux modules de simulations. Il a fallu réfléchir à l'ergonomie du programme pour pouvoir toujours le faire évoluer sans perturber les autres types de simulations. Nous avons donc choisi le support C++ qui permet de conserver les anciennes parties rédigées en C et d'avoir la possibilité d'en créer d'autre grâce à la structure orienté objet de ce langage.

Mon rapport se divise en quatre parties.

La première présente et explique la théorie du parcours des électrons élastiques dans le matériau. De plus, celle-ci les différents analyseurs présents dans les bâtis ultravide.

Dans une deuxième partie, j'explique comment le programme marche et les différentes fonctions qui le compose. Pour une meilleure compréhension, j'ai détaillé les différents types de simulations traitées par l'ordinateur grâce à des organigrammes qui permettent d'observer la méthode numérique présente.

Le troisième chapitre présente les résultats de différentes simulations obtenus grâce à ce nouveau programme.

Enfin, le dernier chapitre est une conclusion générale pour les différentes simulations effectuées. De plus, l'informatique étant un outil en constante évolution, j'explique les perspectives de cette simulation pour l'étude E.P.E.S. avec différentes fonctions supplémentaires qui n'ont pu être traitées dans ce stage par manque de temps. Le but final de cette simulation est de pouvoir recréer, grâce à la combinaison des travaux expérimentaux et de simulations, une image 3D des couches de la surface.

I. Présentation de l'étude.

A. Présentation de la méthode E.P.E.S. (Elastic Peak Electron Spectroscopy).

1. Définition de l'E.P.E.S.

L'E.P.E.S. est une méthode d'analyse de surface développée par G. Gergely [1]. Elle est basée sur l'analyse d'électrons réfléchis élastiquement par une surface bombardée par électrons sous ultravide.

Cette méthode a l'avantage d'être non destructive et d'être très sensible à l'état de surface des matériaux.

Nous allons voir par la suite qu'en modifiant l'énergie primaire des électrons incidents :

- Nous modulons la profondeur d'information des électrons réfléchis élastiquement [2].
- En faisant varier l'angle d'incidence des électrons primaires ainsi que l'angle de collection de l'analyseur, nous obtenons différentes informations sur l'état de la surface à analyser [3].

2. Théorie de la diffusion d'un électron par un atome.

L'E.P.E.S. est basée sur la réflexion élastique des électrons sur une surface.

Ce phénomène physique est caractérisé par une onde plane incidente ψ_i , qui diffracte. Les électrons primaires incidents, avec les atomes de la surface jouent le rôle de centres diffuseurs.

L'onde diffusée ψ_d est une onde sphérique associée aux électrons diffractés. Sa longueur d'onde est identique à celle de l'onde incidente correspondant aux électrons réfléchis élastiquement.

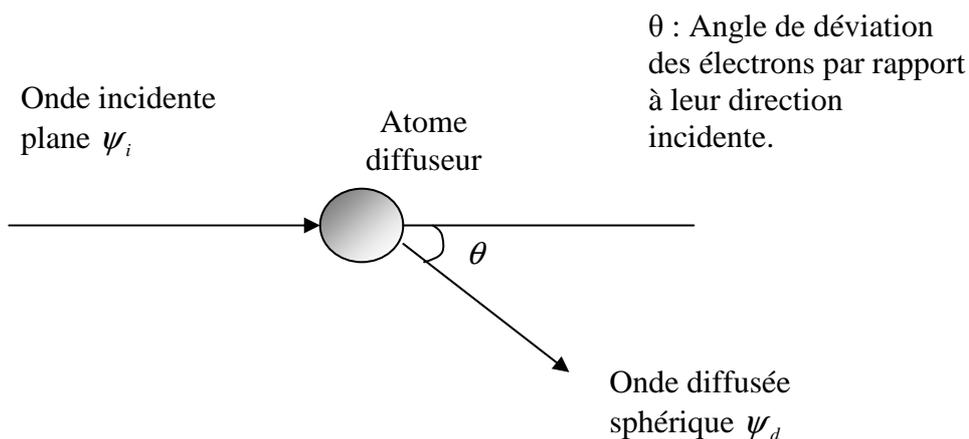


Figure 1 : Schématisation de la diffusion élastique

La longueur d'onde incidente est déterminée à partir de la relation de De Broglie :

$$\rightarrow \lambda = \frac{h}{p_{e^-}} \text{ (avec } h \text{ constante de Planck).}$$

$$\text{Et } p_{e^-} = m_{e^-} \cdot v$$

L'onde incidente plane, correspondant aux électrons incidents, peut s'écrire de la forme :

$$\rightarrow \psi_i = A_i e^{i(kz - \omega t)} \text{ avec } k \text{ vecteur d'onde : } k = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ et } \omega \text{ la pulsation.}$$

L'onde sphérique diffusée a pour forme :

$$\rightarrow \psi_d = \frac{f(\theta)}{r} e^{i(kz - \omega t)}$$

Avec r : distance entre l'atome diffuseur et l'électron réfléchi.

Et $f(\theta)$: fonction de répartition angulaire des électrons réfléchis.

La fonction d'onde totale $\Psi(r, \theta)$ de cette interaction doit vérifier l'équation de Schrödinger de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \rightarrow \Psi(r, \theta) &= \psi_i + \psi_d \\ \rightarrow \nabla^2 \Psi + \left(k^2 - \frac{8\pi^2 m V(r)}{h^2} \right) \Psi &= 0 \end{aligned}$$

Pour obtenir une solution de l'équation de Schrödinger, la fonction d'onde incidente et l'onde diffusée peuvent être formulées de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \rightarrow \psi_i(r, \theta) &= C_i \frac{\sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \cdot g_n(r)}{r} \\ \rightarrow \psi_d(r, \theta) &= C_d \frac{\sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta) \cdot G_n(r)}{r} \end{aligned}$$

Avec $P_n(\cos \theta)$: Polynômes de Legendre correspondant à l'amplitude de l'onde incidente et diffusée et $g_n(r)$ et $G_n(r)$ les n solutions de la série d'équations différentielles :

$$\rightarrow \frac{d^2 g_n}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) g_n = 0 \quad (1)$$

$$\rightarrow \frac{d^2 G_n}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{8\pi^2 m V(r)}{h^2} - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) G_n = 0 \quad (2)$$

Les constantes C_i et C_d seront calculées à l'aide des conditions aux limites du système physique étudié.

Une fois ces calculs effectués, la probabilité de diffusion $f(\theta)$ est déterminée. Elle permet de calculer les sections efficaces.

Le nombre d'électrons diffusés par unité d'angle solide Ω est proportionnel à la section efficace différentielle.

$$\rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = A^2 + B^2$$

Et donc la probabilité de diffusion spatiale :

$$\rightarrow \frac{d\sigma}{d\theta} = 2\pi \sin(\theta) |f(\theta)|^2$$

Les variables A et B sont les coefficients des polynômes de Legendre et ont pour expression :

$$A = (2k)^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \cdot (\cos 2\delta_n - 1) \cdot P_n(\cos \theta)$$

→

$$B = (2k)^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \cdot \sin 2\delta_n \cdot P_n(\cos \theta)$$

Ce calcul mathématique est effectué par une méthode de résolution simultanée de ces équations différentielles, la méthode de Milne.

La procédure consiste à utiliser :

- Une solution développée sous forme de série pour connaître les conditions initiales.
- La méthode de Milne [4] qui prédit et corrige, c'est-à-dire affine les solutions des équations différentielles.

Les résultats obtenus par cette méthode sont en bon accord avec ceux publiés par M. Fink et J. Ingram. [5]

Cette probabilité $f(\theta)$ est très importante pour connaître l'angle de déviation θ des électrons après un choc élastique.

De plus, la nature du centre diffuseur Z ainsi que l'énergie primaire E_p de l'électron entraînent une modifications des $f(\theta)$.

B. Techniques de simulation.

Depuis une dizaine d'année, les techniques de simulation ont pris une place importante dans le milieu de la recherche, due à l'amélioration des techniques. Les simulations informatiques se sont développées, et maintenant il existe un grand nombre de techniques dont la simulation Monte-Carlo, utilisée dans notre étude.

1. Généralités sur la simulation Monte-Carlo.

Cette technique de simulation consiste notamment à générer des nombres aléatoires appartenant à un intervalle de valeur (a, b). La densité de l'intervalle n'est pas, dans le cas le plus général, uniforme. En effet, elle dépend des paramètres de l'étude simulée et donc correspond à une fonction $f(X)$ qu'il faut connaître. Celle-ci traduit la probabilité de tirer le nombre aléatoire X dans l'intervalle (a, b).

Ceci signifie qu'un nombre aléatoire, défini sur l'intervalle (a, b) avec une probabilité $f(x)$, a une chance d'avoir la valeur u ($u \in (a, b)$) égale à $f(u)du$.

Cependant, la variable tirée doit avoir une probabilité égale à l'unité d'être tirée dans l'intervalle de définition. Cela signifie donc :

$$\rightarrow \int_a^b f(u)du = 1$$

On définit alors la fonction de répartition $F(x)$ donnant la probabilité pour la variable x d'avoir une valeur comprise entre a et X :

$$\rightarrow F(X) = \int_a^X f(x)dx$$

Il vient trivialement : $F(a) = 0$ et $F(b) = 1$

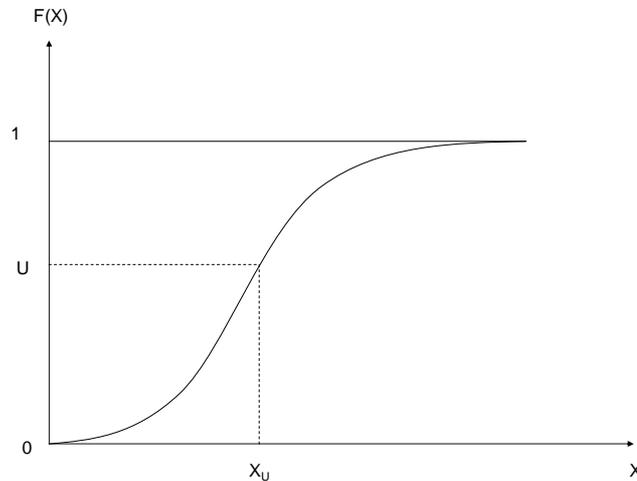


Figure 2 : Détermination d'une variable aléatoire

Deux problèmes apparaissent. En effet, la fonction $f(x)$ doit être intégrable et celle-ci doit converger vers une valeur finie sur l'intervalle (a, b) . Enfin, on doit faire attention à bien normaliser cette intégrale.

$$\rightarrow \int_a^b f(x)dx = K \Rightarrow F(X) = K \cdot U = \int_a^X f(x)dx$$

Ici, U correspond à un nombre aléatoire.

Il suffit donc de deux conditions pour obtenir une bonne fonction de répartition :

→ $f(x)$ intégrable.

→ Retrouver la valeur de K pour normaliser la fonction $f(x)$.

Dans notre programme, ce tirage est très utile pour obtenir les libres parcours élastiques et inélastiques. En effet, ceux-ci obéissent à la loi de Poisson suivante :

$$\rightarrow f(x) = \frac{1}{\lambda_e} \cdot e^{-\frac{x}{\lambda_e}}$$

Avec x : libre parcours élastique et λ_e libre parcours moyen élastique.

La fonction de répartition est alors égale à :

$$\rightarrow F(X) = \int_0^X f(x)dx \Rightarrow F(X) = 1 - e^{-\frac{X}{\lambda_e}}$$

Soit U, nombre aléatoire appartenant à l'intervalle $[0,1]$ définit par : $U = F(X)$.

$$\rightarrow U = 1 - e^{-\frac{X}{\lambda_e}} \Rightarrow X = -\lambda_e \ln(\underbrace{1-U}_{U'})$$

Or U' est statistiquement équivalent à U donc :

$$\rightarrow X = -\lambda_e \ln(U)$$

Comme la loi qui régit les parcours inélastiques est la même que celle-ci, le calcul du libre parcours inélastiques est équivalent et donne :

→ $Y = -\lambda_i \ln(V)$ avec Y libre parcours inélastiques, libre parcours moyen inélastiques et V nombre aléatoire normalisé.

C. Présentation de l'expérience.

L'E.P.E.S. permet de déterminer le nombre d'électrons réfléchis élastiquement $r_e(\%)$. Cependant, il dépend de plusieurs paramètres tels que :

- Les atomes de surfaces Z.
- L'énergie primaire des électrons E_p .
- L'angle d'incidence α par rapport à la normale à l'échantillon N.
- L'angle de collection dépendant du type d'analyseur utilisé lors de l'expérience.

L'expérience se déroule dans un bâti ultra vide ($P=10^{-9}$ Tore = 10^{-11} Pa). L'échantillon est placé au centre de l'enceinte. Les électrons primaires arrivent sur la surface avec un angle α entre 0° (incidence normale) et 90° (incidence rasante) par rapport à la normale à la surface.

1. Analyseur R.F.A. (Retarding Field Analyser).

Dans l'équipe Surfaces & Interfaces, deux analyseurs de type différents sont utilisés :

- L'analyseur R.F.A. (bâti n°1).
- L'analyseur H.S.A. (bâti n°2).

La figure 3 représente le schéma d'un analyseur R.F.A.

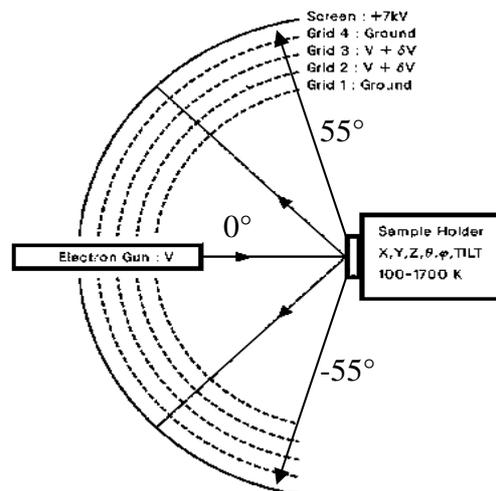


Figure 3 : Schématisation d'un analyseur R.F.A.

Le canon à électrons est situé au centre de l'analyseur. Les électrons incidents ont une direction normale à la surface à analyser ($\alpha = 0^\circ$).

Cet analyseur a une résolution moyenne, mais en revanche, il permet de collecter sur une grande partie de l'espace. En effet, ce détecteur R.F.A. peut collecter les électrons émis entre -55 et 55° de part et d'autre de l'axe du canon à électron sur 360° .

2. Analyseur H.S.A. (Hemispherical Scanning Analyser).

La figure 4 représente le schéma d'un analyseur H.S.A. Dans le bâti n°2, le canon à électrons fait un angle de 90° avec l'analyseur. L'angle d'incidence des électrons peut être choisi entre 0° et 90° par rapport à la normale à la surface en faisant tourner l'échantillon. L'analyseur H.S.A. possède une fente d'entrée d'angle au sommet de collection de 16° . Il est très faible, de ce fait, peu d'électrons sont détectés (en comparaison avec le R.F.A.). Son principe permet d'avoir une très bonne résolution. Nous verrons par la suite que pour avoir une statistique de tirage convenable, 1.000.000 d'électrons doivent être tirés et ceci du au fait des dimensions de la fenêtre de collection du H.S.A.

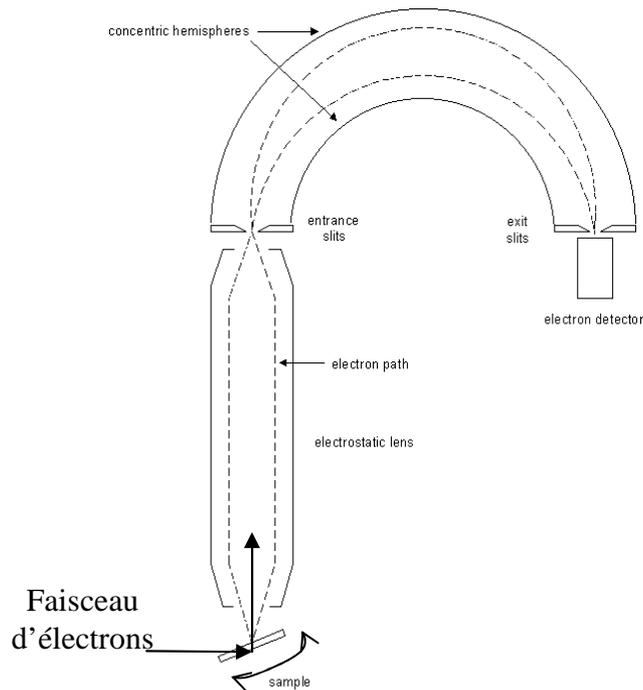


Figure 4 : Schématisation d'un analyseur H.S.A.

II. Description de la simulation Monte-Carlo

A. Avant propos

Avant de présenter le programme informatique réalisé au cours de ce stage, il faut d'abord comprendre et analyser le programme existant [9] [10].

A partir du programme « phaja4.exe » écrit en Fortran, les libres parcours moyens élastiques et inélastiques sont calculés (λ_e et λ_i).

Le libre parcours moyen inélastique est déterminé à partir de la formule TPP-2M de Penn, Powell et Tanuma [6].

$$\rightarrow \lambda_i = \left[\frac{E}{E_p^2 \left(\beta \ln(\gamma E) - C/E - D/E^2 \right)} \right]$$

Avec E_g : énergie de la bande interdite

M : poids atomique ou moléculaire

$$\beta = -0.16 + 0.944(E_p^2 + E_g^2)^{-1/2} + 0.069\rho^{0.1}$$

$$\gamma = 0.191\rho^{-0.5}$$

$$C = 1.97 - 0.91 \cdot U$$

$$D = 53.4 - 20.8 \cdot U$$

$$U = \frac{N_v \rho}{M} = \frac{E_p^2}{829.40}$$

La simulation du parcours des électrons dans le matériau est obtenue à partir d'un programme « rfa.c » écrit en C. Ce programme permet de calculer le nombre d'électrons réfléchis élastiquement par une surface « plane » et de collecter ceux-ci à l'aide d'un R.F.A. ou d'un H.S.A. fixe. Le programme faisait appel à plusieurs sous programmes en codage Fortran, Shell Unix et C.

De manière à faire évoluer ce programme, nous nous sommes aperçu qu'une transcription entière du programme en C++ n'était pas envisageable. Il était préférable d'en créer un nouveau

Nous avons donc eu plusieurs étapes dans l'avancement de notre étude.

Tout d'abord, il a fallu créer un schéma pour le programme qui soit à la fois compréhensible de tous, performant et ergonomique c'est-à-dire un programme qui puisse être modifié, pour différentes géométries de surfaces et différents analyseurs par exemple.

De plus, pour une meilleure précision des simulations, nous avons développé une fenêtre de collection sensée représenter un détecteur H.S.A. mobile au dessus de la surface.

Ensuite, nous avons du retranscrire la partie existante du programme de simulation dans la nouvelle architecture du programme.

Enfin, nous avons aménagé un programme pouvant simuler des surfaces en créneaux.

B. Schéma général du programme de simulation.

A l'aide du langage C++, nous avons développé un programme simple d'utilisation se servant des données d'autres programmes dont l'algorithme n'a pu être modifié. En effet, le nouveau programme n'inclut pas le calcul de la fonction de probabilité $f(\theta)$. Il a donc fallu

développer un code capable de lire le fichier noté « SYMBref.d » provenant de « phaja4.exe » dans sa mise en forme de sortie. Ici, SYMB correspond à l'élément composant la surface qui a été concaténé avec « ref.d » pour créer un fichier de sauvegarde.

Le programme s'articule ensuite en différents sous programmes composés eux même de différentes fonctions.

Pour commencer, nous avons créé trois classes d'orienter objet. Celles-ci sont composées de deux fichiers :

- la bibliothèque, servant à définir les fonctions et les données membres de la classe,
- l'implémentation, correspondant à la véritable programmation des fonctions.

Les extensions de ces deux types de fichiers sont différents : « .h » pour la bibliothèque et « .cpp » pour l'implémentation.

La première de ces classes sert à décrire la composition de la surface c'est-à-dire le libre parcours moyen élastique, le diamètre des atomes, le symbole... Le nom de cette classe est « element ». Elle comprend les deux fichiers « element.cpp » et « element.h ».

La deuxième correspond à toutes fonctions liées à l'électron. Cela signifie que les calculs des parcours, les paramètres et les données de sortie appartiennent à cette classe. Elle est composée des fichiers « electron.h » et « elecimpl.cpp ».

Enfin, la dernière aborde la définition des créneaux. Elle sera décrite plus tard. Elle est divisée en deux fichiers « creneaux.h » et « creneaux.cpp ».

Ensuite, le fichier principal, c'est-à-dire le squelette du programme, ne contient, dans notre cas, pas d'informations majeures. Il ne sert qu'à rediriger les attentes de l'utilisateur sous forme de menu. Ce fichier se nomme « sim.cpp ».

Dans son ensemble, le programme est structuré pour permettre d'étudier différentes géométries et différents types de couches. De plus, le programme n'est pas altéré même si certaines parties ne sont pas encore développées. Le schéma général, représenté ci-dessous, résume rapidement le cheminement du programme.

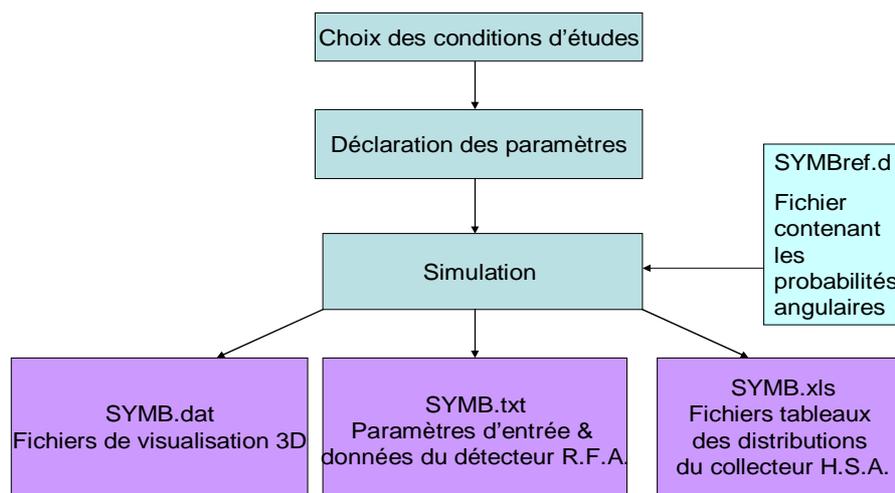


Figure 5 : Organigramme général du programme

Dans le choix des conditions, nous informons le programme de la structure intrinsèque de la surface. Le programme demande, en fait, la géométrie de surface et la composition des couches de l'échantillon.

Ensuite, il suffit de déclarer les différents paramètres décrivant le système c'est-à-dire le nombre d'électrons, le ou les composants de la surface, l'énergie etc...

```
Blanc@pret ~/cr
$ ./MC
Simulation Monte-Carlo sur la rétrodiffusion d'électrons sur une surface
Que voulez vous faire?
1. Couche simple :
2. Couche binaire :
3. Couche ternaire :
0. Quitter :
Votre choix?
1
Quelle type de surface?
1. Surface plane :
2. Surface en créneaux :
3. Surface avec des trous périodiques :
Votre choix?
1
Quel élément ?
Si
Energie primaire ?
1000
Angle d'incidence ?
0
Nombre d'électrons ?
10000000
Parcours inélastique ?
23.86
```

Figure 6 : Menu et paramètre d'entrée du programme

Grâce à la reconnaissance par chaîne de caractère, le programme effectue la simulation s'il possède les paramètres et les fichiers qui lui sont indispensables. Sinon, un message d'erreur s'affiche et le programme s'interrompt.

```
Blanc@pret ~/cr
$ ./MC
Simulation Monte-Carlo sur la rétrodiffusion d'électrons sur une surface
Que voulez vous faire?
1. Couche simple :
2. Couche binaire :
3. Couche ternaire :
0. Quitter :
Votre choix?
1
Quelle type de surface?
1. Surface plane :
2. Surface en créneaux :
3. Surface avec des trous périodiques :
Votre choix?
1
Quel élément ?
Si
Energie primaire ?
200
Angle d'incidence ?
0
Nombre d'électrons ?
36000000
Parcours inélastique ?
7.65
Le fichier Siref.d n'existe pas.
Calculer d'abord la section efficace différentielle avec phaja4.exe
Blanc@pret ~/cr
$
```

Figure 7 : Erreur lors de l'initialisation du programme (données manquantes)

A chaque fin de simulation, il crée trois fichiers servant à l'étude 2D ou 3D des données et à la conservation des paramètres (SYMB.dat, SYMB.xls, SYMB.txt).

Comme un grand nombre de simulations peuvent être effectuées avec le même élément, il m'a fallu tout d'abord élaborer une autre reconnaissance de chaîne pour ne pas écraser les données antérieures lors de la sauvegarde. Le programme effectue une recherche dans le dossier de résultats et vérifie l'existence des fichiers de la manière suivante. On ajoute

un entier après le symbole de l'élément, au départ *Si0.txt*, et on vérifie s'il existe. Si oui, on ajoute 1 à l'entier, *Si1.txt*, et on revérifie. On opère comme cela jusqu'à ce que le nom de fichier n'existe pas. Puis, une sauvegarde est effectuée.

C. Simulation d'un substrat lisse et définition de la fente d'entrée d'un H.S.A.

1. Simulation d'une surface lisse.

Le programme récupère d'abord les données de la fonction de probabilité dans le fichier « SYMBref.d », où SYMB correspond à l'élément considéré pour la surface.

Au départ de la simulation, l'ordinateur calcule, à partir du tirage de deux nombres aléatoires, les libres parcours élastiques et inélastiques. Cette opération correspond en fait à la simulation du premier choc de l'électron sur la surface. En les comparant, le programme détermine ensuite s'il y a eu choc élastique ou inélastique. Si l'impact est inélastique, l'électron est définitivement perdu. Sinon, un tirage des angles après le choc a lieu. Pour l'angle θ , c'est-à-dire l'angle par rapport à la normale à la surface, un nombre aléatoire est tiré en tenant compte de la fonction de répartition $f(\theta)$. Cet angle est défini par rapport à la normale entrante de l'échantillon. L'angle φ , quant à lui, est choisi dans un intervalle uniforme $[0, 2\pi]$ (voir figure 9).

Ensuite, la profondeur de pénétration est calculée grâce au calcul suivant.

$$\rightarrow prof = l_e \cos \theta$$

Si la profondeur est positive, l'électron peut subir un autre choc (élastique ou inélastique) dans le matériau. Cette partie est répétée du temps que l'électron n'est pas sorti de l'échantillon ou perdu par choc inélastique. Sinon l'électron ressort de la surface et peut être détecté par l'analyseur.

L'organigramme suivant (figure 8) reprend le déroulement de la simulation.

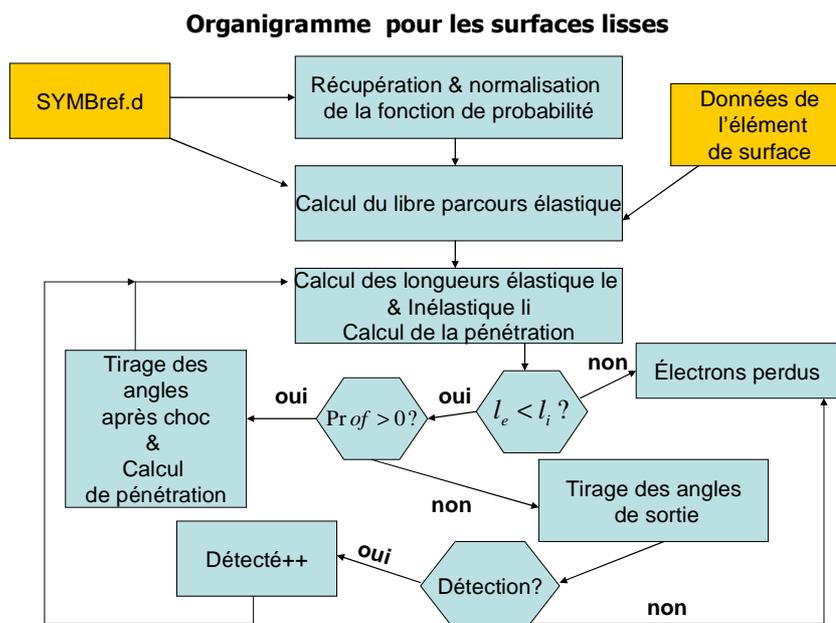


Figure 8 : Organigramme des surfaces lisses

Il faut remarquer que les angles de sortie sont calculés avec la normale entrante dans l'échantillon. Il faut donc prendre l'angle supplémentaire pour pouvoir effectuer le produit scalaire de détection.

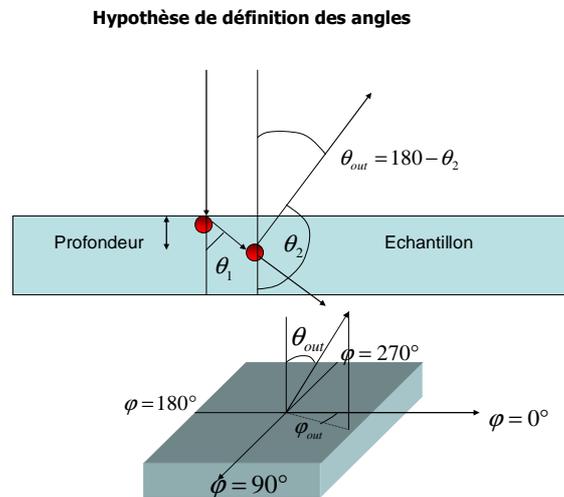


Figure 9 : Définition des angles

2. Hypothèses de détection

Comme décrit dans la partie théorique, le détecteur H.S.A. est plus performant que le R.F.A. Malheureusement, il faut tenir compte de l'ouverture de l'analyseur qui ne couvre qu'une partie réduite de l'espace.

Problème majeur pour les conditions de collection, l'ouverture est circulaire ce qui écarte les méthodes par comparaison d'angles.

Pour résoudre ce problème, le produit scalaire entre le vecteur du centre de l'analyseur \vec{v} et celui de la direction de l'électron \vec{e} s'avère très utile.

Le vecteur du centre de l'analyseur est situé dans un cône de collection d'angle sommital de 16° (paramètre technique de l'analyseur).

On définit un plan $\varphi = 0$ déterminé à l'aide de la position du centre de l'analyseur et la direction des électrons incidents.

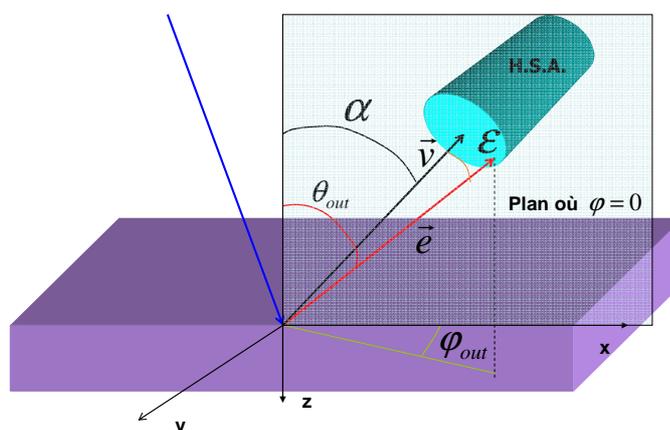


Figure 10 : Modélisation d'un H.S.A. tournant

Les coordonnées de la fente circulaire de l'analyseur H.S.A. sont :

$$\begin{aligned}x_v &= \sin \alpha \\ \rightarrow y_v &= 0 \\ z_v &= \cos \alpha\end{aligned}$$

Connaissant les angles de sortie de l'électron réfléchi θ_{out} et φ_{out} , on peut déduire l'angle entre les deux vecteurs à condition de prendre les normes de ceux-ci égales à l'unité.

Pour trouver le vecteur de direction de l'électron, il faut transcrire les angles de sortie en coordonnées cartésiennes.

$$\begin{aligned}x_e &= \sin \theta_{out} \cos \varphi_{out} \\ \rightarrow y_e &= \sin \theta_{out} \sin \varphi_{out} \\ z_e &= \cos \theta_{out}\end{aligned}$$

$$\rightarrow \vec{e} \cdot \vec{v} = \underbrace{\|\vec{e}\| \cdot \|\vec{v}\|}_1 \cdot \cos \varepsilon$$

Or,

$$\rightarrow \vec{e} \cdot \vec{v} = x_e \cdot x_v + y_e \cdot y_v + z_e \cdot z_v$$

$$\rightarrow \varepsilon = \text{Ar cos}(x_e \cdot x_v + y_e \cdot y_v + z_e \cdot z_v)$$

ε sera donc l'angle entre le centre de l'analyseur et la direction de sortie de l'électron. Pour notre H.S.A., ε doit être compris entre 0° et 8°

Deux solutions sont possibles lors du calcul de l'arcosinus, ε et $360 - \varepsilon$. L'ordinateur ne retient que la solution la plus petite c'est-à-dire ε .

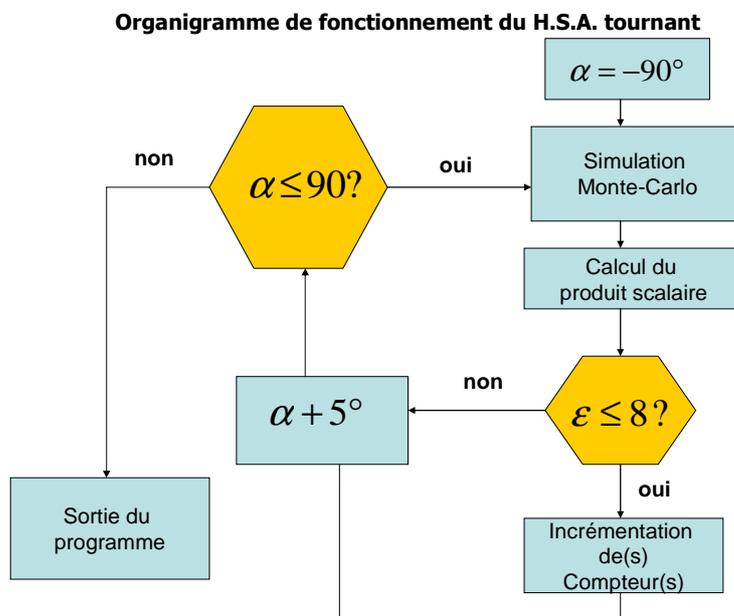


Figure 11 : Organigramme du H.S.A. tournant

L'analyseur H.S.A. défini dans le programme peut effectuer une rotation dans le plan $\varphi = 0$ qui permet d'étudier précisément la répartition des électrons réfléchis dans celui-ci (voir figure 12).

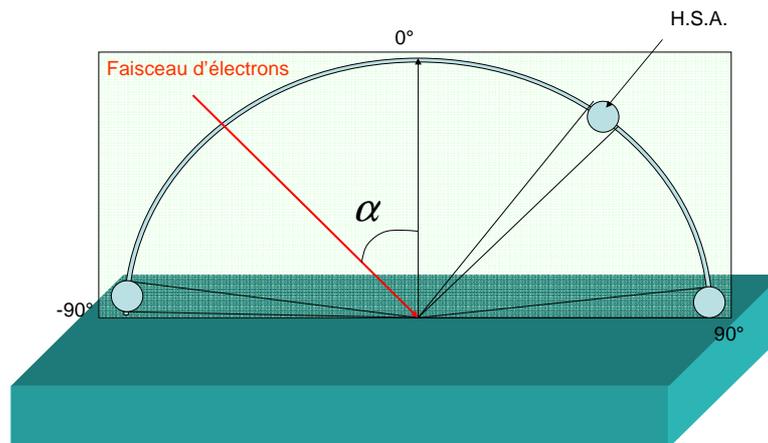


Figure 12 : Surface lisse avec les positions du H.S.A. tournant

D. Simulation d'un substrat rugueux.

1. Formalisme géométrique.

Pour commencer, la surface rugueuse, définie ici, forme des sillons triangulaires sur la surface. Pour l'instant nous avons défini cette géométrie par deux paramètres (θ_1 et h) plus accessibles géométriquement qu'expérimentalement. En effet, bien que la hauteur h des créneaux soit facilement lisible sur une image A.F.M. de la surface, l'angle θ_1 entre une surface lisse imaginaire de référence et la surface réelle ne l'est pas du tout. Heureusement, en connaissant la distance entre deux sommets et en admettant que les pentes ont la même inclinaison de part et d'autre, on peut retrouver cet angle. La figure suivante explique ce formalisme.

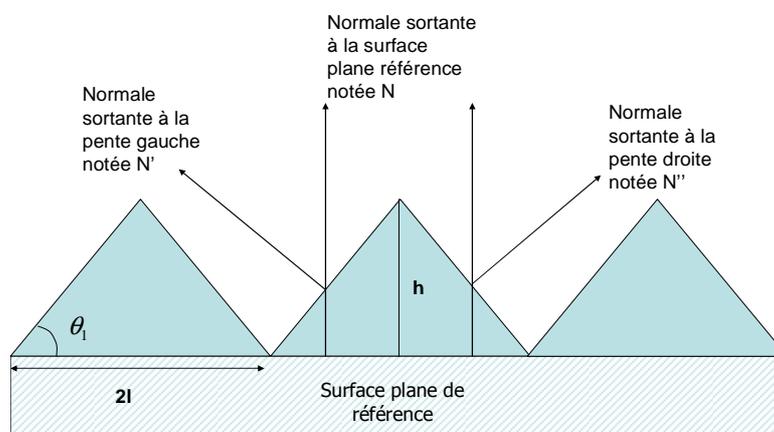


Figure 13 : Définition des normales et paramètres des créneaux

Pour simplifier la compréhension et les calculs, le plan d'incidence sera pris perpendiculaire au sens des sillons comme sur le schéma suivant.

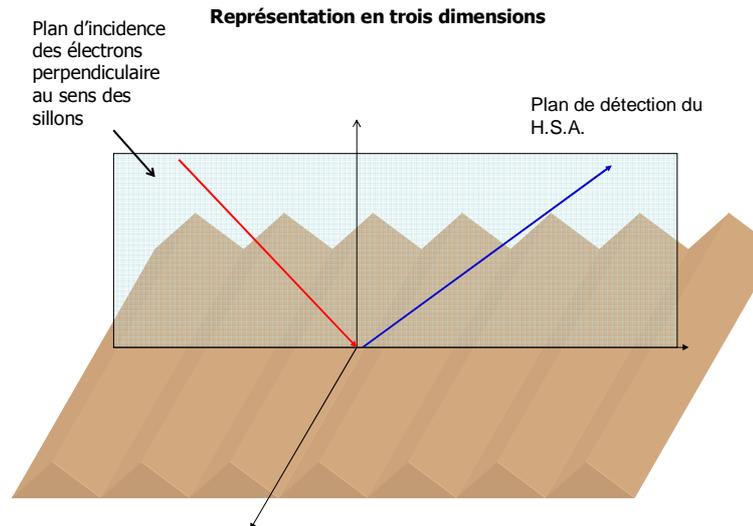


Figure 14 : Schéma 3D des créneaux

Mise à part la forme, la convention sur les angles ne change pas par rapport à la surface lisse. Cela permettra de garder une bonne partie de la simulation intacte. Par ailleurs, le problème n'est plus isotrope et des paramètres apparaissent et rendent l'étude plus complexe.

2. Réflexion théorique sur les créneaux.

La mise en place de la surface crénelée a mis à jour trois nouveaux problèmes de conception. Même si la surface reste simple en apparence, des phénomènes d'ombrage apparaissent. De plus, la position du premier impact sur la pente du créneau joue un rôle majeur dans le cas des créneaux. Enfin, ils se découpent en deux surfaces de pentes opposées qui indique la nécessité de deux rotations inverses des repères pour les superposer avec le repère du détecteur.

a) Effet d'ombrage.

L'ombrage est présent à n'importe quel endroit de la surface en créneaux (voir figure 15). Il est plus ou moins atténué en fonction de la position d'impact de l'électron qui est aussi considéré comme sa position de sortie. Pour considérer cet effet, plusieurs hypothèses ont été avancées pour simplifier l'effet.

- le parcours de l'électron dans le créneau est supposé négligeable vis-à-vis de ces dimensions et donc il ne pouvait le traverser.
- L'électron sortant du créneau et arrivant sur le créneau voisin est supposé perdu.

Effet d'ombrage

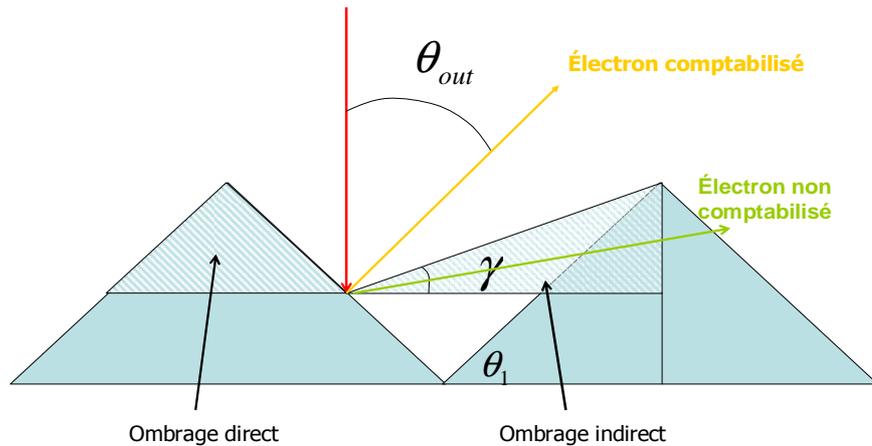


Figure 15 : Schématisation de l'ombrage

Nous allons définir, figure 16, deux sortes d'ombrage.

Le premier, que l'on appellera direct correspond à la partie du crêteau se trouvant au dessus du point de sortie de l'électron. Celui-ci l'empêche de « voir » l'analyseur s'il se trouve derrière le crêteau. Cet ombrage est facile à calculer puisque son angle correspond à celui de la pente du crêteau (ici θ_1).

Le deuxième ombrage, appelé indirect, correspond au crêteau voisin. Lui aussi gêne la perception du détecteur. Cet angle, appelé γ sur la figure, nous a obligé à rajouter un paramètre d'entrée pour définir les crêteaux. En effet, nous avons du prendre en compte la hauteur du crêteau au point d'impact. Cela implique d'ajouter un nouveau nombre aléatoire. Cette méthode nous permet de tirer à quel endroit de la surface l'électron va ressortir. Nous avons calculé cet angle de la façon suivante.

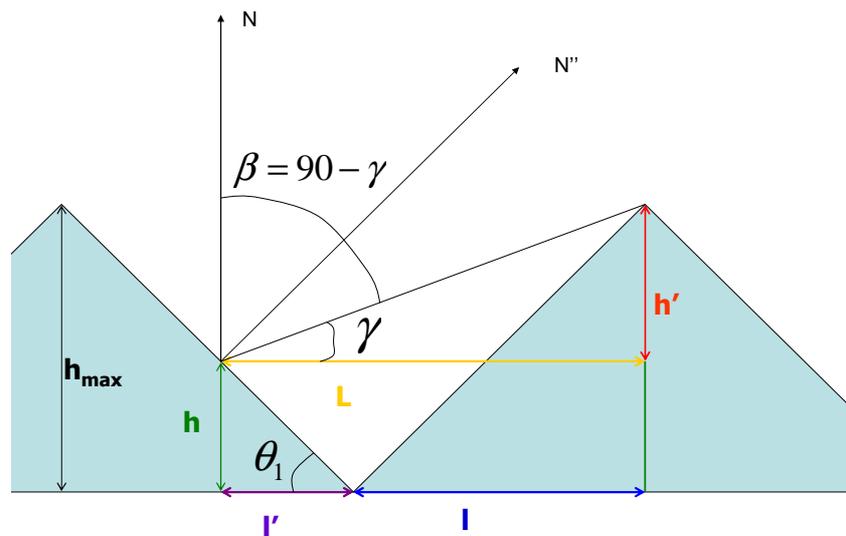


Figure 16 : Paramètres importants de l'ombrage indirect

$$\rightarrow \tan \theta_1 = \frac{h_{\max}}{l} \rightarrow l = \frac{h_{\max}}{\tan \theta_1}$$

A l'aide du théorème de Thalès :

$$\rightarrow \frac{h}{h_{\max}} = \frac{l'}{l} \rightarrow l' = \frac{h \cdot l}{h_{\max}} = \frac{h}{\tan \theta_1}$$

La distance entre le centre du créneau voisin et la sortie de l'électron L est égale à :

$$\rightarrow L = l' + l = \frac{h}{\tan \theta_1} + \frac{h_{\max}}{\tan \theta_1} = \cot \theta_1 \cdot (h + h_{\max})$$

Il faut ensuite calculer la hauteur h' entre le point de sortie de l'électron et le sommet du créneau.

$$\rightarrow h' = h_{\max} - h$$

Pour trouver l'angle d'ombrage :

$$\rightarrow \tan \gamma = \frac{h'}{L} \rightarrow \gamma = \text{Arc tan} \left(\frac{h'}{L} \right) \Rightarrow \beta = 90 - \gamma = 90 - \text{Arc tan} \left(\frac{h'}{L} \right)$$

Ici, nous avons raisonné dans le repère du détecteur, c'est-à-dire par rapport à la normale N à la surface plane de référence. Malheureusement, pour la simulation nous sommes obligés d'utiliser le repère normal à la surface réelle.

b) Rotation du repère principal.

Les angles d'incidence et de collection sont repérés par rapport à la normale d'une surface de référence tandis que la simulation se fera par rapport à la normale au créneau.

Un changement de repère sera réalisé à la fin de la simulation du parcours des électrons pour déterminer si l'électron sera détecté ou non.

L'orientation des faces du créneau oblige deux rotations du repère de référence. Cela signifie que la simulation va se séparer en deux parties correspondantes à chaque pente du créneau (voir figure 17). Tout d'abord, nous devons déterminer sur quelle partie du créneau l'électron va interagir. Pour cela, un nouveau nombre aléatoire doit être mis en place. En incidence normale par rapport à la surface de référence N, ce nombre aléatoire n'a que peu d'intérêt car il a autant de chance de retomber sur une pente que sur l'autre. Par contre, il est très utile dès que cette symétrie est brisée c'est-à-dire en dehors de l'incidence normale.

Il faut, ensuite, déterminer l'angle d'incidence des électrons par rapport à la normale de la surface du créneau N' ou N''. Ce changement permet d'utiliser la même simulation que pour les surfaces lisses. En effet, cette simulation marche avec la normale à la surface. Cela signifie que l'étude des créneaux correspond à deux simulations de surface lisse avec des angles d'incidence et de collection différents.

Afin de déterminer si les électrons sortant de la surface vont pouvoir être collectés par l'analyseur, il est préférable de faire un changement de repère et de passer du repère I (celui de l'électron) au repère II (celui de l'analyseur).

En effet, l'électron sortant de la surface est repéré par rapport à la normale N' ou N'' selon la pente du créneau tandis que la fente d'entrée de l'analyseur est repérée par rapport à la normale N d'une surface plane de référence.

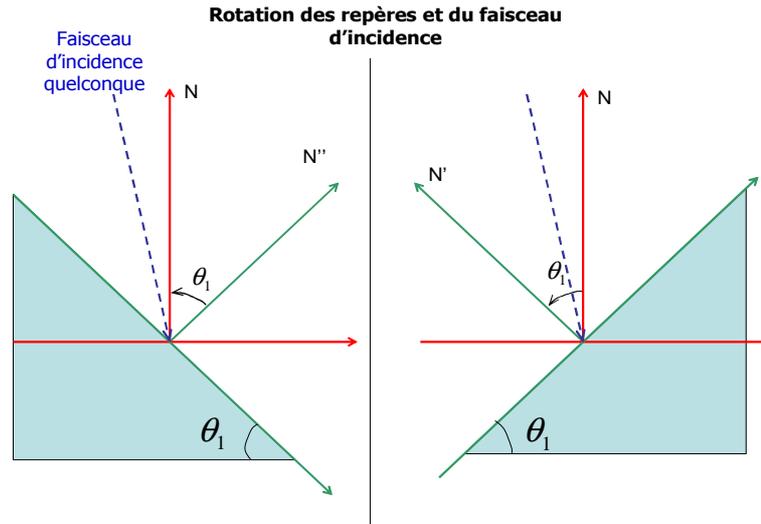


Figure 17 : Changements de repère pour les surfaces rugueuses

$$\rightarrow \begin{pmatrix} x_{II} \\ y_{II} \\ z_{II} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_1 & 0 & \mp \sin \theta_1 \\ 0 & 1 & 0 \\ \pm \sin \theta_1 & 0 & \cos \theta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_I \\ y_I \\ z_I \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \begin{aligned} x_I &= \cos \varphi_{out} \sin \theta_{out} \\ y_I &= \sin \varphi_{out} \sin \theta_{out} \\ z_I &= \cos \theta_{out} \end{aligned}$$

Il en découle les coordonnées suivantes :

$$\begin{aligned} x_{II} &= \cos \varphi_{out} \sin \theta_{out} \cos \theta_1 \mp \cos \theta_{out} \sin \theta_1 \\ \rightarrow y_{II} &= \sin \varphi_{out} \sin \theta_{out} \\ z_{II} &= \cos \theta_{out} \cos \theta_1 \pm \cos \varphi_{out} \sin \theta_{out} \sin \theta_1 \end{aligned}$$

On remarque que pour ce calcul les angles orientés sont obligatoires pour différencier les deux rotations d'angles opposés. Ces coordonnées servent ensuite à effectuer le même produit scalaire qu'auparavant.

Il faut faire attention et prendre le temps de bien élaborer ce système de changement de repère. De manière à vérifier ces calculs, nous avons comparé à basse énergie (200eV) les résultats de la simulation et les $f(\theta)$. En effet, les résultats de la simulation Monte-Carlo doivent être une représentation directe de la fonction de répartition $f(\theta)$. Jusqu'à cette énergie, les électrons réfléchis élastiquement n'auront subi qu'un choc élastique.

Les différentes probabilités de diffusion $f(\theta)$ du Si, C, Ag et Au à 200eV sont données en annexe page 46.

c) Incidence non normale sur les créneaux.

Il faut faire aussi attention à ce point car, contrairement à l'incidence normale, les deux pentes composant le créneau n'ont pas la même probabilité d'être « vu » par les électrons incidents. Nous avons dû calculer cette différence de probabilité grâce à la géométrie du problème.

Pour le résoudre, on considère le faisceau incident venant taper la surface entre les deux pentes c'est-à-dire au creux de deux créneaux voisins. On trace les normales à cette droite partant des sommets de ceux-ci. De là, il faut calculer leurs longueurs pour obtenir la probabilité adéquate. On peut calculer le côté des créneaux facilement de la manière suivante.

$$\rightarrow a = \frac{h}{\sin \theta_1}$$

Il faut maintenant trouver les valeurs respectives de ξ et η représentés sur le schéma ci-dessous.

Calcul des projections des pentes

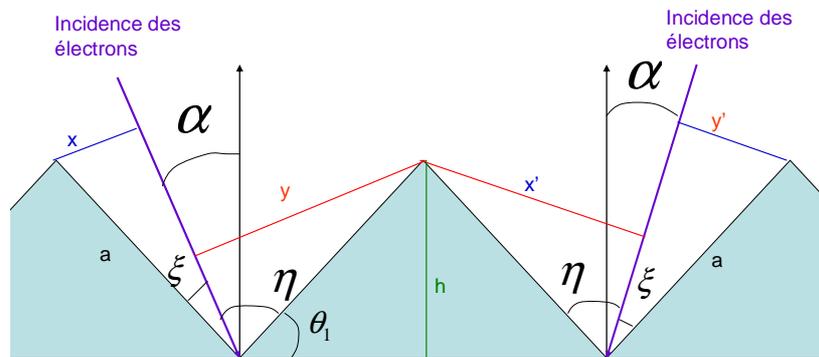


Figure 18 : Paramètres pour le calcul de l'incidence non normale

Le problème se découpe en deux parties car l'utilisateur doit pouvoir rentrer n'importe quel angle d'incidence positif ou négatif. On se rend compte que le calcul est inversé quand on passe d'une incidence positive à négative.

Le calcul des angles importants donne :

$$\begin{aligned} \rightarrow \xi &= 90 - \theta_1 - \alpha \\ \eta &= 90 - \theta_1 + \alpha \end{aligned}$$

Or on sait que :

$$\begin{aligned} \rightarrow \sin \xi &= \frac{x}{a} \text{ ou } \frac{y'}{a} & x &= \frac{h}{\sin \theta_1} \sin \xi \\ \sin \eta &= \frac{y}{a} \text{ ou } \frac{x'}{a} & y &= \frac{h}{\sin \theta_1} \sin \eta \end{aligned} \quad \text{d'où} \rightarrow$$

Pour calculer la probabilité d'avoir une surface à pente gauche, on effectue le rapport :

$$\rightarrow P = \frac{y}{x + y}$$

Grâce à celle-ci et en faisant attention de bien séparer les incidences positives et négatives, on obtient la valeur limite du nombre aléatoire pour que l'électron atteigne une pente gauche. Dans le programme, nous avons donc suivi l'algorithme figure 19.

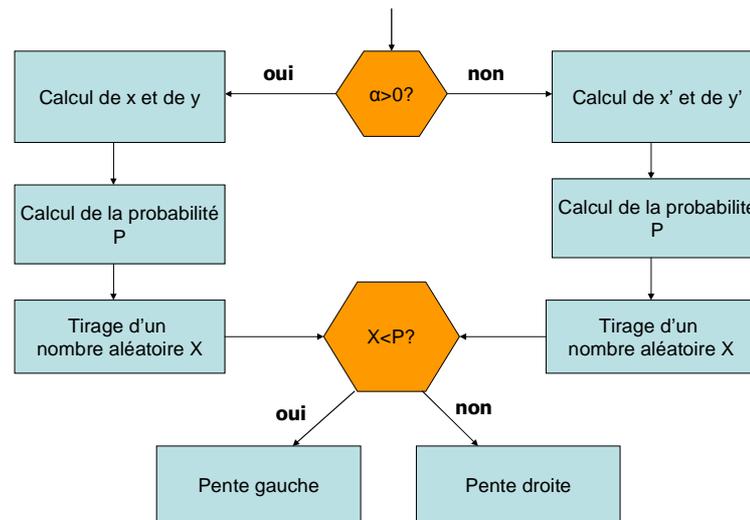


Figure 19 : Organigramme de l'incidence non normale

E. Couches binaires sur surface lisse.

Cette partie est encore en fin de développement. Il subsiste des problèmes lors des tests effectués. Cette simulation comporte deux hypothèses pour décrire efficacement le problème.

La première consiste à choisir par tirage d'un nombre aléatoire sur quel type d'atomes, A ou B, l'électron va effectuer son choc. Cela implique que, dans la couche les atomes sont disposés de façon aléatoire. Cette approximation peut être judicieuse lorsque l'on tient compte de la proportion entre les deux éléments. Cette proportion est rentrée dans le programme en nombre d'atome d'un même élément dans une molécule, par exemple SiO₂. Il faut, par la suite, revenir à une proportion normalisée, grâce au calcul suivant, équivalent à celui de l'incidence non normale.

$$\rightarrow P = \frac{\text{Prob}(A)}{\text{Prob}(A) + \text{Prob}(B)}$$

Avec Prob(A) : proportion de l'élément A et Prob(B) celle de l'élément B.

Cette hypothèse ne suffit pas pour simuler correctement les couches binaires. Il faut aussi tenir compte des différents parcours moyens élastiques et inélastiques. En effet, on considère qu'il y a peu d'interaction entre les atomes et donc, on doit tenir compte des deux couples de parcours moyens. Grâce au nombre aléatoire précédent, on peut choisir l'élément de contact et en même temps son libre parcours moyen élastique et inélastique.

Le schéma suivant montre rapidement l'algorithme utilisé dans cette fonction.

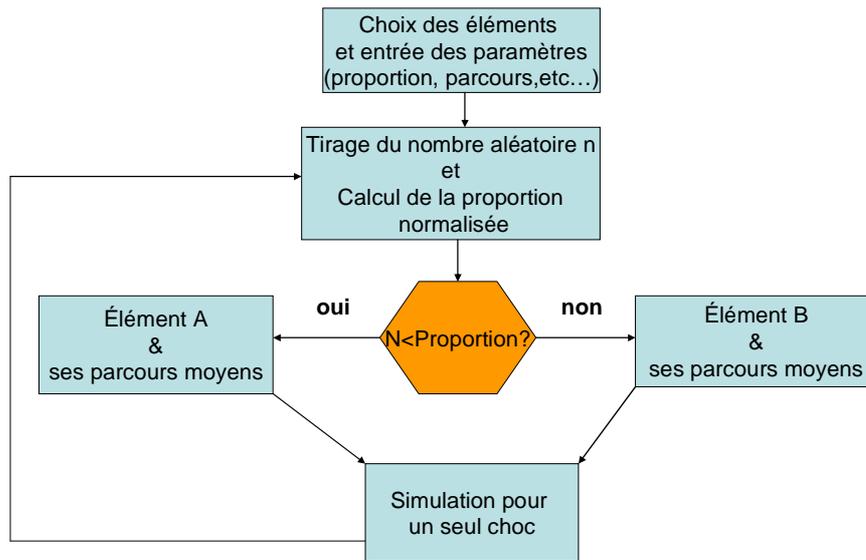


Figure 20 : Organigramme des couches binaires à surface lisse

III. Exploitation des résultats de simulations.

Cette partie développe chronologiquement les différents résultats obtenus. Elle montre bien évidemment des simulations erronées, mais ces fautes sont utiles pour déterminer le point du programme ne fonctionnant pas correctement. Certaines simulations ont paru justes au départ mais dès que certains paramètres d'entrée ont été changés, les résultats sont devenus aberrants.

Chaque résultat a été mûrement réfléchi de manière à éviter toutes erreurs informatiques.

A. Mise en place des créneaux.

Cette partie a été conçue pour déterminer l'influence de la rugosité de surface sur le coefficient élastique. Nous avons réalisé une comparaison entre les résultats expérimentaux publiés par Zemek [7] et nos différents résultats théoriques.

1. Rotation des repères.

Après les premiers résultats, nous nous sommes aperçus qu'il existait une différence dans le programme entre des créneaux d'inclinaison 0° et une surface lisse. Cet écart de valeur ne devait pas exister. De plus, les courbes n'étaient pas symétriques. Cela signifiait que l'une des pentes du créneaux n'avait pas une inclinaison souhaitée pour le modèle et donc faussait les résultats (voir figure 21).

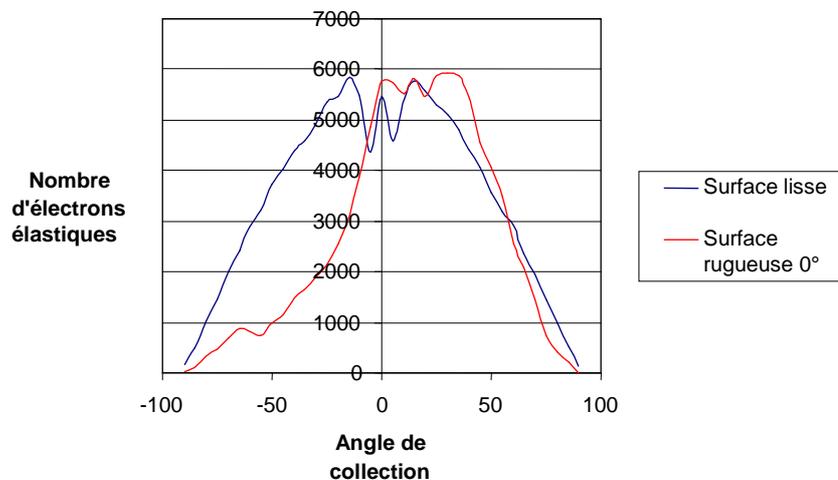


Figure 21 : Représentation lors d'un dysfonctionnement de la simulation des créneaux sur du Si à 500eV

Pour résoudre tous ces problèmes en incidence normale, nous avons établi la théorie des rotations décrites dans le chapitre précédent. Ainsi, les résultats des tests sont devenus identiques pour les deux surfaces.

Les observations suivantes nous ont permis d'apporter les corrections nécessaires :

- A 200eV ou 500eV, l'analyseur collecte à 0° un nombre d'électron important pour une surface très rugueuse que pour une surface lisse.
- Les créneaux ne doivent pas modifier la forme du spectre de sortie [7] c'est-à-dire qu'à un angle de collection 0° , le nombre d'électrons collectés doit être maximal quelque soit l'énergie des électrons incidents et quelque soit la rugosité de surface.

La figure 22 et 23 montrent qu'à partir d'une certaine rugosité, les résultats possèdent deux maxima.

Nous avons donc travaillé à une énergie de 200eV ce qui nous a permis de comparer ces résultats à la fonction de probabilité $f(\theta)$. En effet, à basse énergie, les électrons subissent un seul choc élastique avant de ressortir de la surface.

Nous nous sommes alors rendu compte que le changement de repère avait été inversé.

Dans le cas ci-dessous, la rotation a été effectuée dans le sens opposé. Elle est bien visible lorsque l'on observe des substrats rugueux de 30 à 45°.

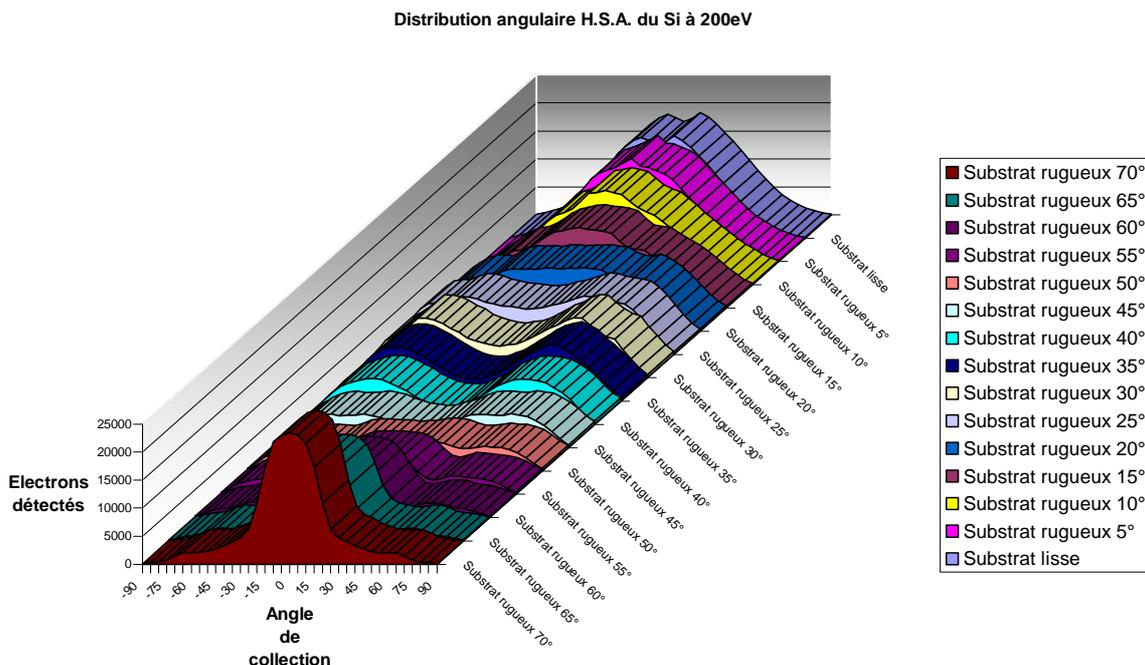


Figure 22 : Mauvais changement de repère sur le Si à 200eV

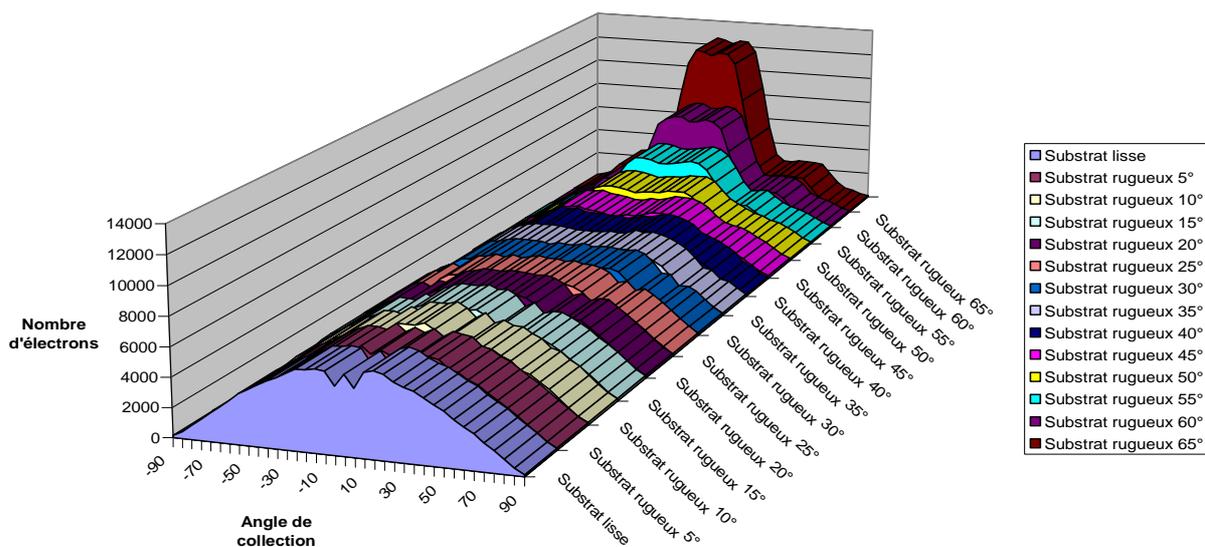


Figure 23 : Mauvais changement de repère sur le Si à 500eV

Cette erreur est moins marquée à 500eV. Il était donc judicieux pour la validité de notre programme de simulation de réaliser deux simulations à base énergie (200eV) et à plus haute énergie (500eV). Cette étape de vérification est très importante pour la validité du programme.

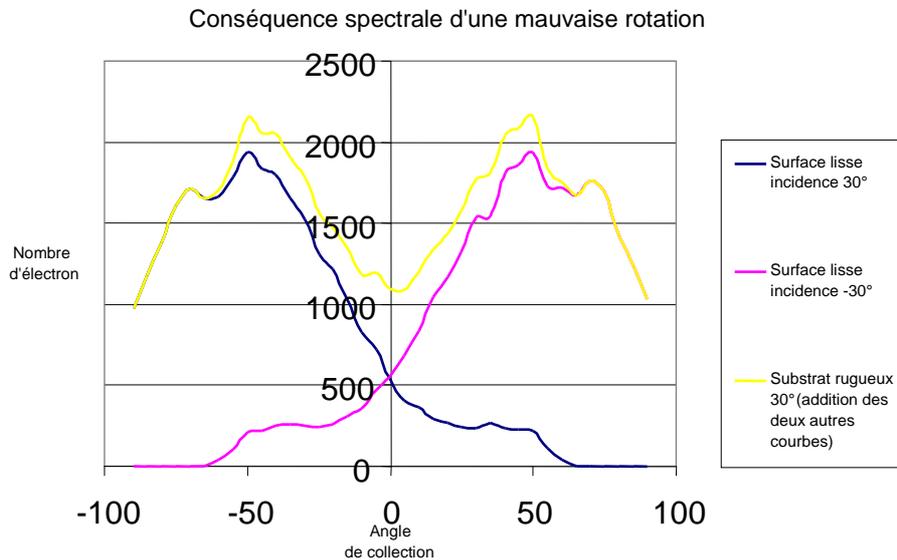


Figure 24 : Schéma de la rotation inversée pour les créneaux

En échangeant les angles de rotation de nos repères, nous avons pu corriger notre erreur (voir figure 24). Nous avons modifié le programme pour permettre de sortir dans deux tableaux supplémentaires les électrons collectés de chaque partie du créneau. Grâce à cela, nous avons pu vérifier si notre changement de repère était correct (voir figure 25).

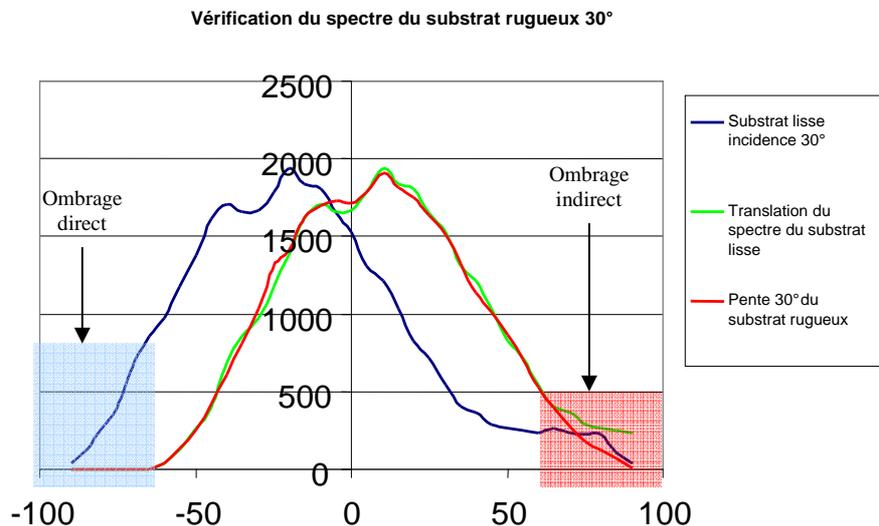


Figure 23 : Bon changement de repère

Nous avons réalisé une première simulation sur une surface lisse avec un angle d'incidence de 30°. Les résultats obtenus sont présentés sur la figure 24. Une deuxième simulation a été réalisée sur une surface rugueuse avec des créneaux de pente 30° en incidence normale. Et de manière à comparer les deux simulations, nous avons translaté de -

30° les résultats de la surface lisse pour résonner dans le même repère. Les résultats des deux simulations sont en très bon accord.

Cependant, un décalage des courbes est visible, au-delà de 60° d'angle de collection. En fait, cette variation est due à l'effet d'ombrage indirect. Nous observons aussi qu'aucun électron n'est détecté entre -60° et -90°, du à l'effet d'ombrage direct.

2. Effet d'ombrage.

Nous avons réalisé plusieurs simulations sur une surface de Si à une énergie de 200eV. Les figures 26 et 27 représentent le nombre d'électrons élastiques collectés par un H.S.A. tournant.

- La figure 26 pour une surface ayant des créneaux de 30°
- La figure 27 pour des créneaux de 60°

Les deux courbes représentent la même simulation avec et sans ombrage.

L'effet d'ombrage commence à se voir pour des angles de collection de 65° à 90° (et -65° à -90°) pour une surface en créneaux de 30° et de 55° à 90° (-55° à 90°) pour une surface en créneaux de 60°. De plus, l'ombrage est de plus en plus important lorsqu'on accroît la rugosité de la surface c'est-à-dire lorsque les créneaux possèdent des pentes de plus en plus importantes.

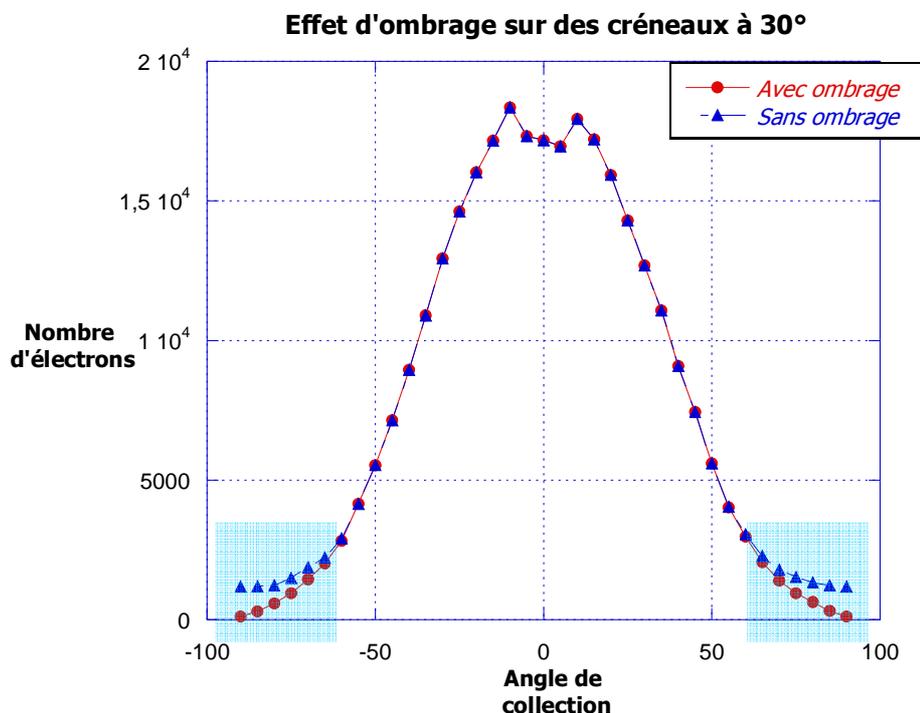


Figure 26 : Ombrage sur des créneaux à 30° de Si à 200eV

Effet d'ombrage sur des créniaux à 60°

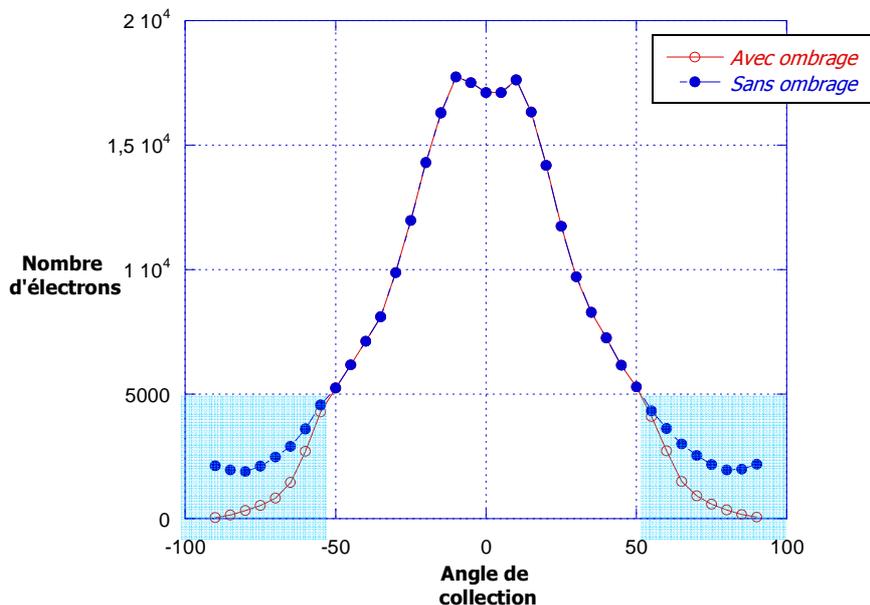


Figure 27 : Ombrage sur des créniaux à 60° de Si à 200eV

B. Résultats de simulation.

La distribution angulaire des électrons dépend de l'énergie du faisceau incident mais aussi de l'élément Z présent sur la surface. De manière à vérifier nos résultats, nous avons étudié trois éléments différents à trois énergies différentes. Pour l'étude qui suit, l'angle d'incidence est toujours normal à la surface plane de référence.

1. Silicium Z=14 à 200, 500 et 1000eV.

C'est le premier que nous avons étudié et qui nous a permis de bien modéliser les surfaces rugueuses que nous avons déjà définies.

On s'aperçoit qu'à 200eV, il n'y a pas de grande différence entre surfaces lisse et rugueuse. De plus, les formes des différentes courbes sont identiques. On peut la comparer avec la probabilité de répartition $f(\theta)$ jointe en annexe. Il apparaît une faible diminution de la largeur du spectre lorsque la rugosité augmente représentée sur la figure 28.

Celle-ci s'accroît lorsque l'énergie d'incidence augmente. A 500eV, on aperçoit, en plus de ce rétrécissement, que pour les substrats très rugueux, c'est-à-dire au-delà de 45°, que la forme de la courbe change. En effet, sur la figure 29, un palier apparaît vers 40° ~ 45° et symétriquement vers -40 ~ -45°. Ceci correspond à l'émergence d'une deuxième direction privilégiée de réflexion sur chaque pente.

A 1000eV, sur la figure 30, la différence entre les deux types de surface est indéniable. Mise à part la forme qui reste approximativement identique pour les substrats peu rugueux, les différences deviennent importantes. Les paliers des surfaces très rugueuses à 500eV se transforment en maxima secondaires.

On peut donc dire que, pour le Silicium, plus on augmente l'énergie plus les écarts se creusent entre surface lisse et surface rugueuse.

Distribution angulaire H.S.A. du Si à 200eV

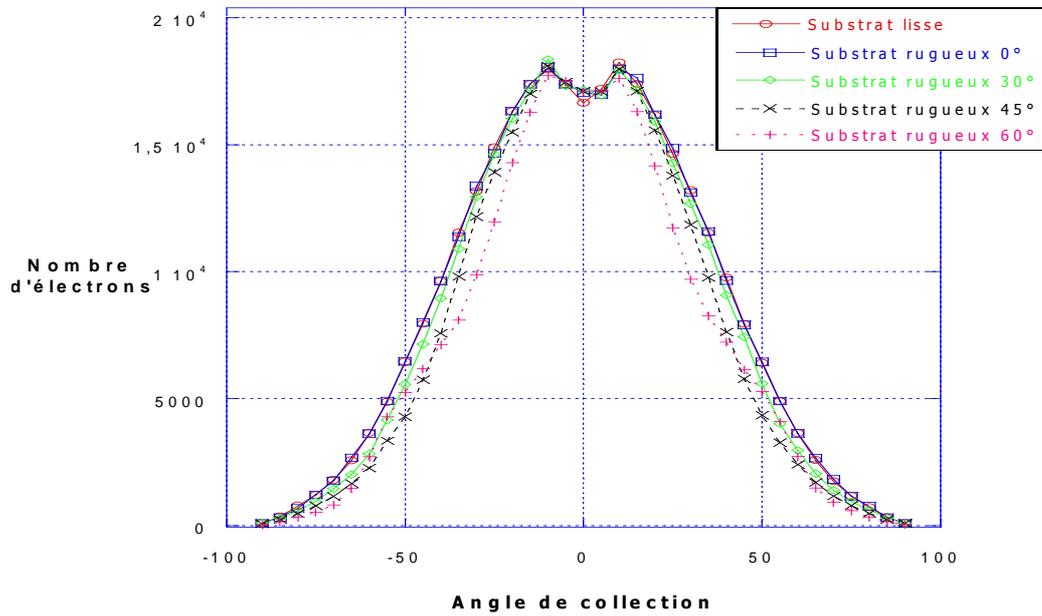


Figure 28 : Collection sur le Si à 200eV

Distribution angulaire H.S.A. du Si à 500eV

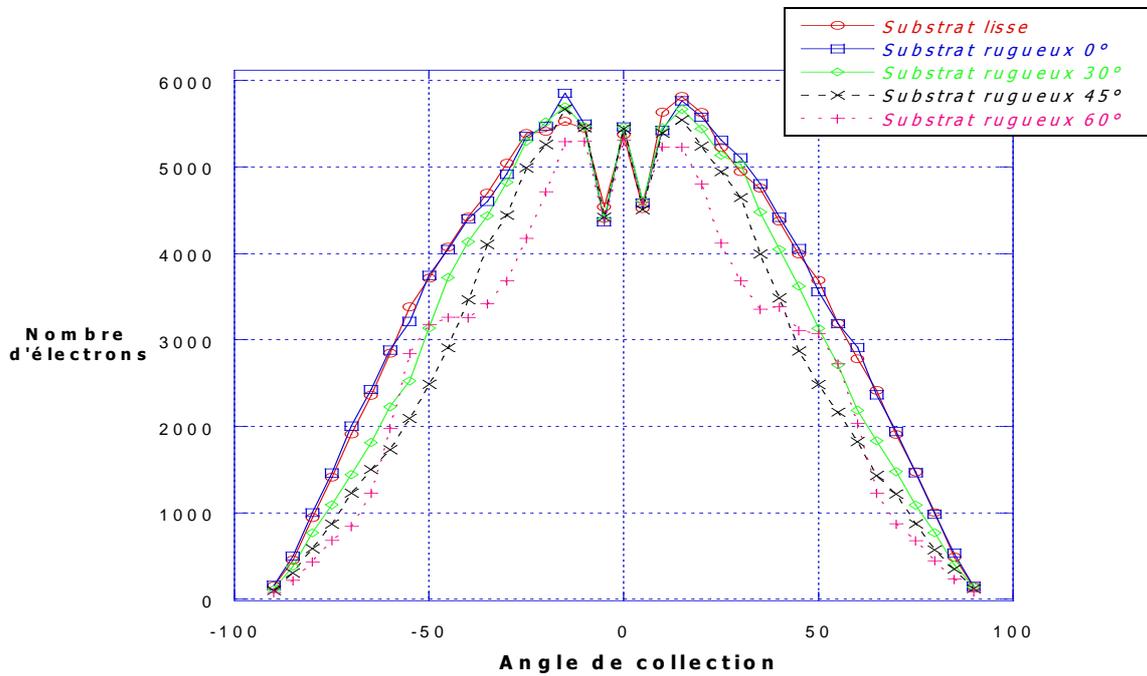


Figure 29 : Collection sur le Si à 500eV

Distribution angulaire H.S.A. du Si à 1000eV

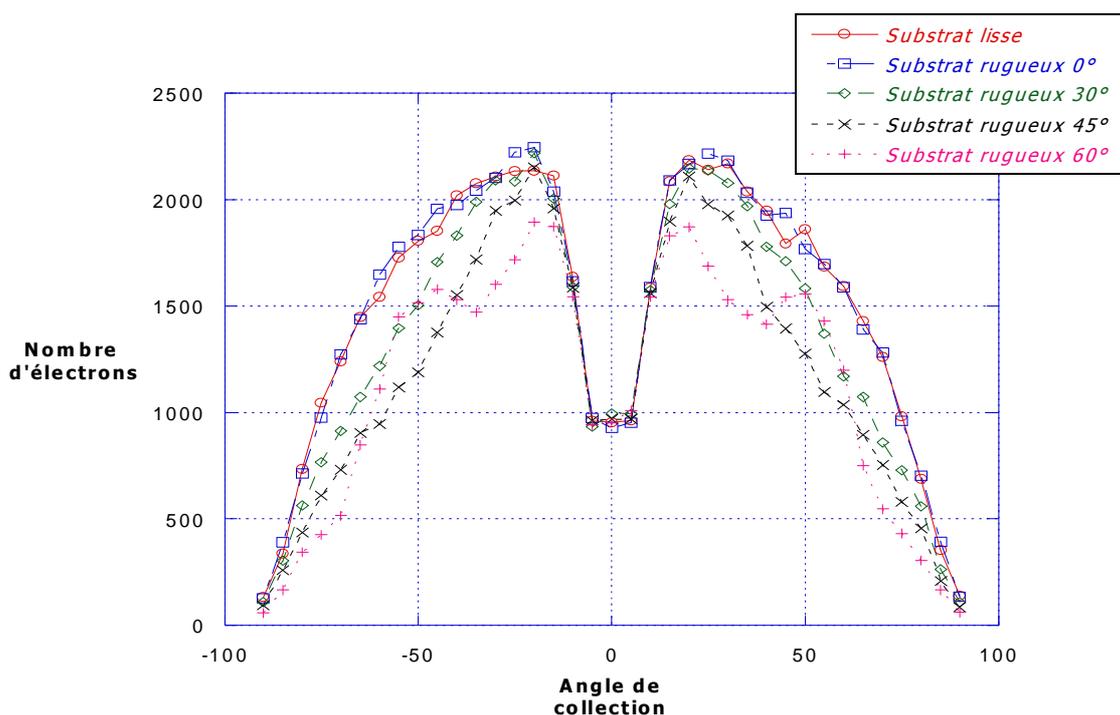


Figure30 : Collection sur le Si à 1000eV

Nous avons réalisé une comparaison entre notre simulation théorique et des points expérimentaux publiés [7]. Les résultats sont en annexe et on observe un très bon accord entre les différents résultats.

2. Carbone Z=12 à 200, 500 et 1000eV.

Au cours de sa thèse, S ; Chelda a réalisé des expériences E.P.E.S. sur une surface de Carbone. Ces résultats permettent de calculer la transmission d'un nouvel analyseur. Cependant, il a rencontré quelques problèmes. A l'aide de ce programme, nous avons réalisés plusieurs simulations sur du Carbone avec des énergies primaires de 200, 500 et 1000eV.

A 200eV, de grosses différences sont perceptibles. Malgré la forme identique des différents spectres, il subsiste quand même de gros écart. Les substrats très rugueux possèdent deux maxima secondaires dès les basses énergies. La fonction $f(\theta)$ du Carbone à 200eV est jointe en annexe.

Lorsqu'on augmente l'énergie, à 500eV et à 1000eV, les variations sont de plus en plus grandes. Les courbes garde à peu près la même allure. Cette différence ressemble un peu à celle du Silicium et montre que lorsque l'énergie augmente la différence entre les spectres des différentes surfaces augmente pour les éléments légers.

A l'aide de ces différents résultats, nous avons pu déterminer que les écarts obtenus sur les résultats expérimentaux sont dus non pas à une erreur de manipulation mais à la rugosité des surfaces de Carbone étudiées.

Distribution angulaire H.S.A. du C à 200eV

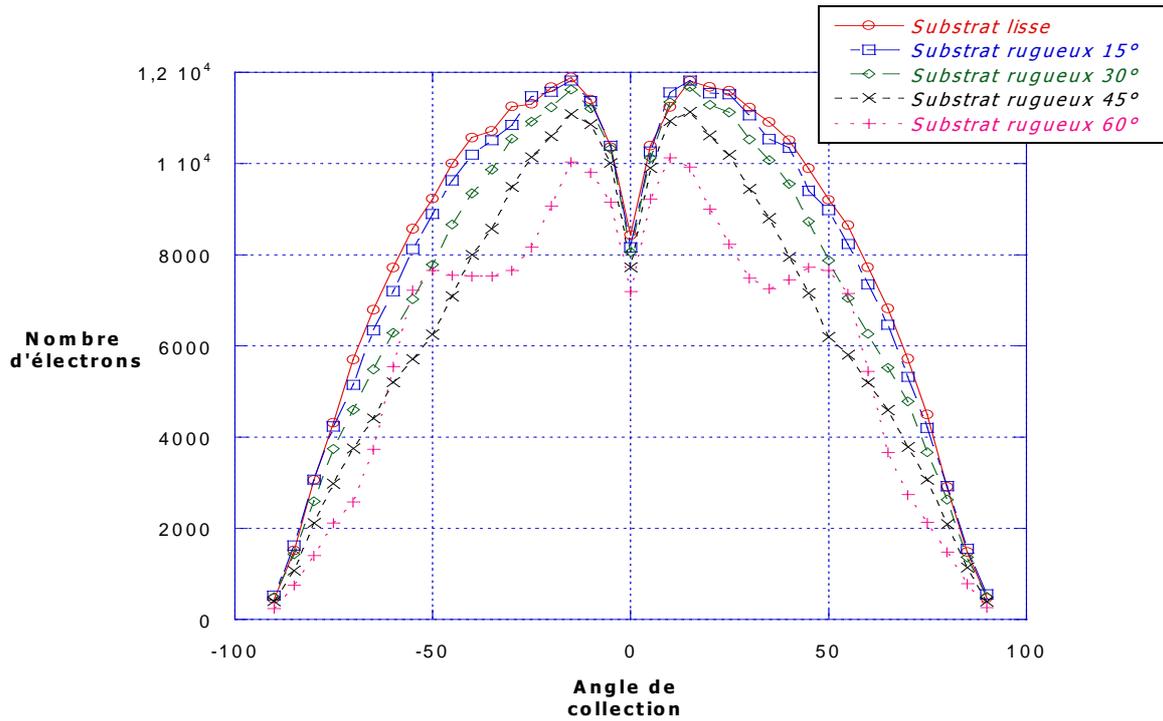


Figure 31 : Collection sur le C à 200eV

Distribution angulaire H.S.A. du C à 500eV

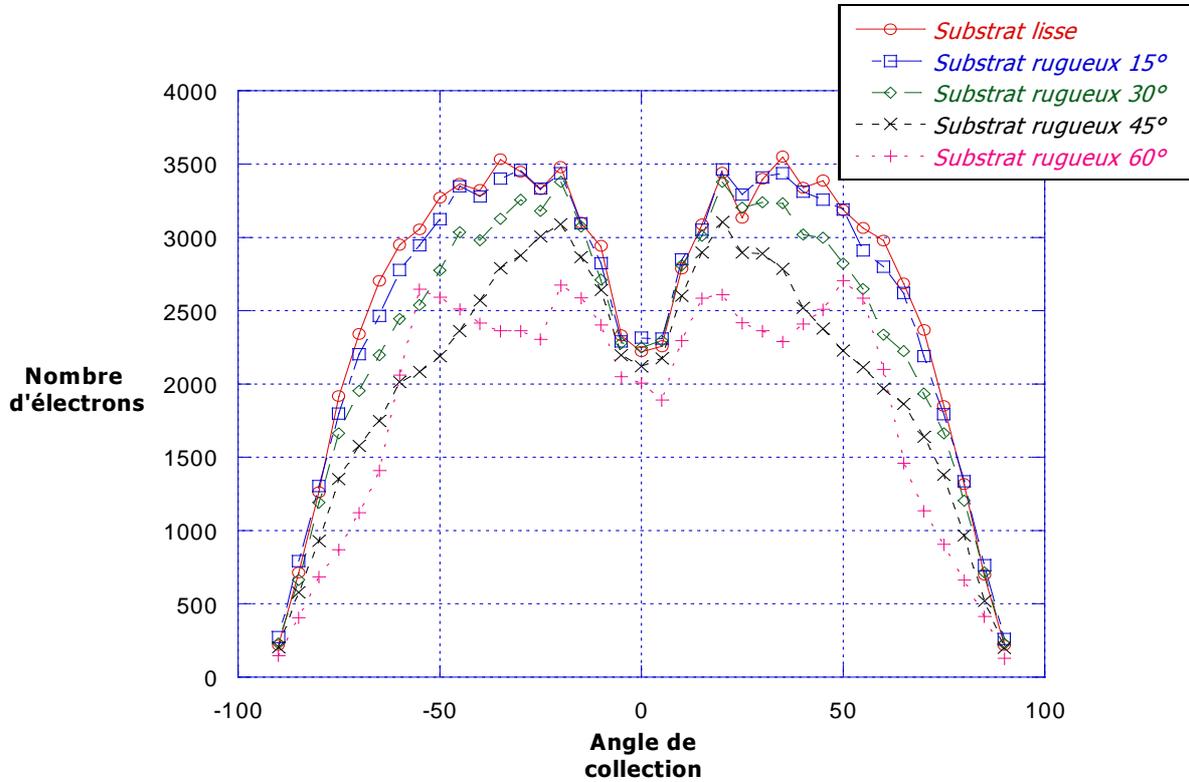


Figure 32 : Collection sur le C à 500eV

Distribution angulaire H.S.A. du C à 1000eV

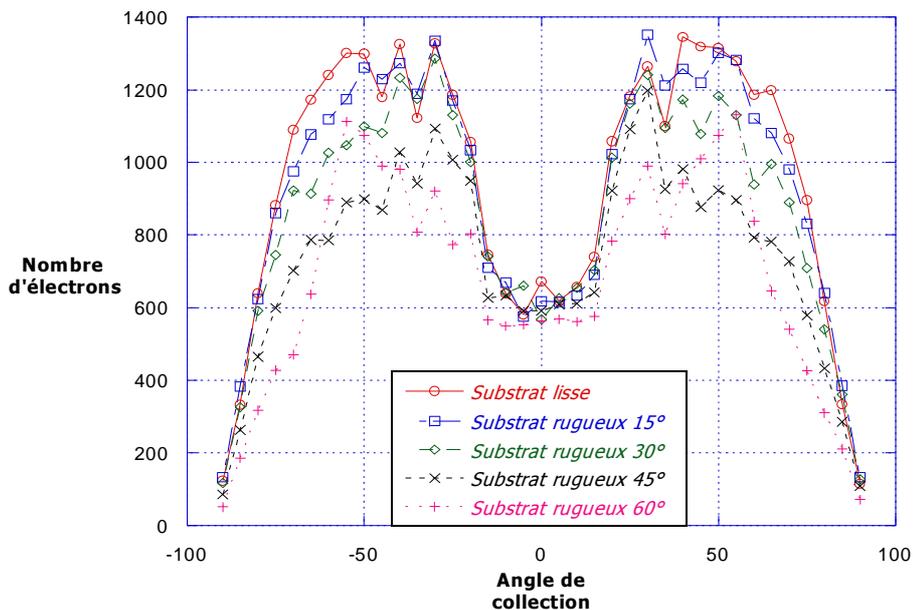


Figure 33 : Collection sur le C à 1000eV

3. Or Z=79 à 200, 500 et 1000eV.

Quand est t'il des éléments un peu plus lourds ?

Distribution angulaire H.S.A. du Au à 200eV

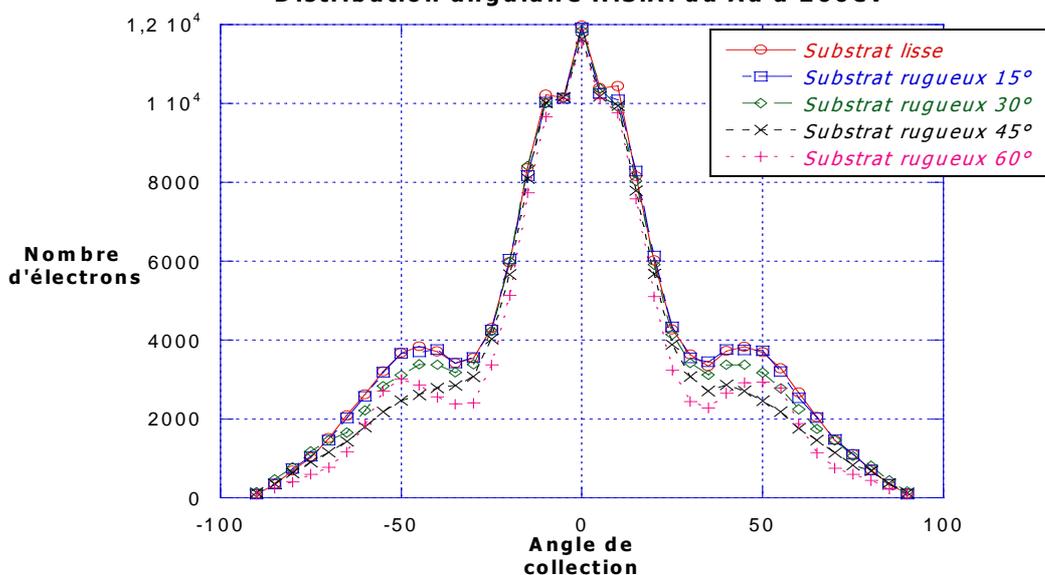


Figure 34: Collection sur le Au à 200eV

Nous avons réalisé des simulations sur des éléments de faibles numéros atomiques. Nous avons choisi d'étudier l'or et l'argent afin d'observer ce qui se passe pour un élément à plus grand numéro atomique. La distribution angulaire $f(\theta)$ est donnée en annexe. Très

différentes des précédentes, celle-ci a une forme bien spécifique qui rend cet élément particulier.

A 200eV, les résultats des différentes surfaces se juxtaposent assez bien malgré quelques variations lorsque l'on collecte les électrons avec des angles de collection supérieurs à 25°.

Lorsque l'on augmente l'énergie jusqu'à 500eV, la distribution change totalement de forme. On observe tout de même une variation assez importante des différents spectres, comme pour le Silicium, celle-ci s'accroît quand on augmente l'énergie primaire.

Comme on peut le voir sur la figure 34, à 1000eV, la forme se rapproche de celle du spectre à 200eV. Par contre, le nombre d'électrons détectés est passé du simple au double. Le nombre d'électrons réfléchis élastiquement dépend de l'élément de surface. Pour des éléments de faibles numéro atomique ($Z=12$ ou 14), ce nombre diminue avec l'énergie primaire des électrons. Tandis que pour $Z=79$, ce nombre augmente avec l'énergie primaire. Les résultats obtenus vont tout à fait dans le bon sens [8].

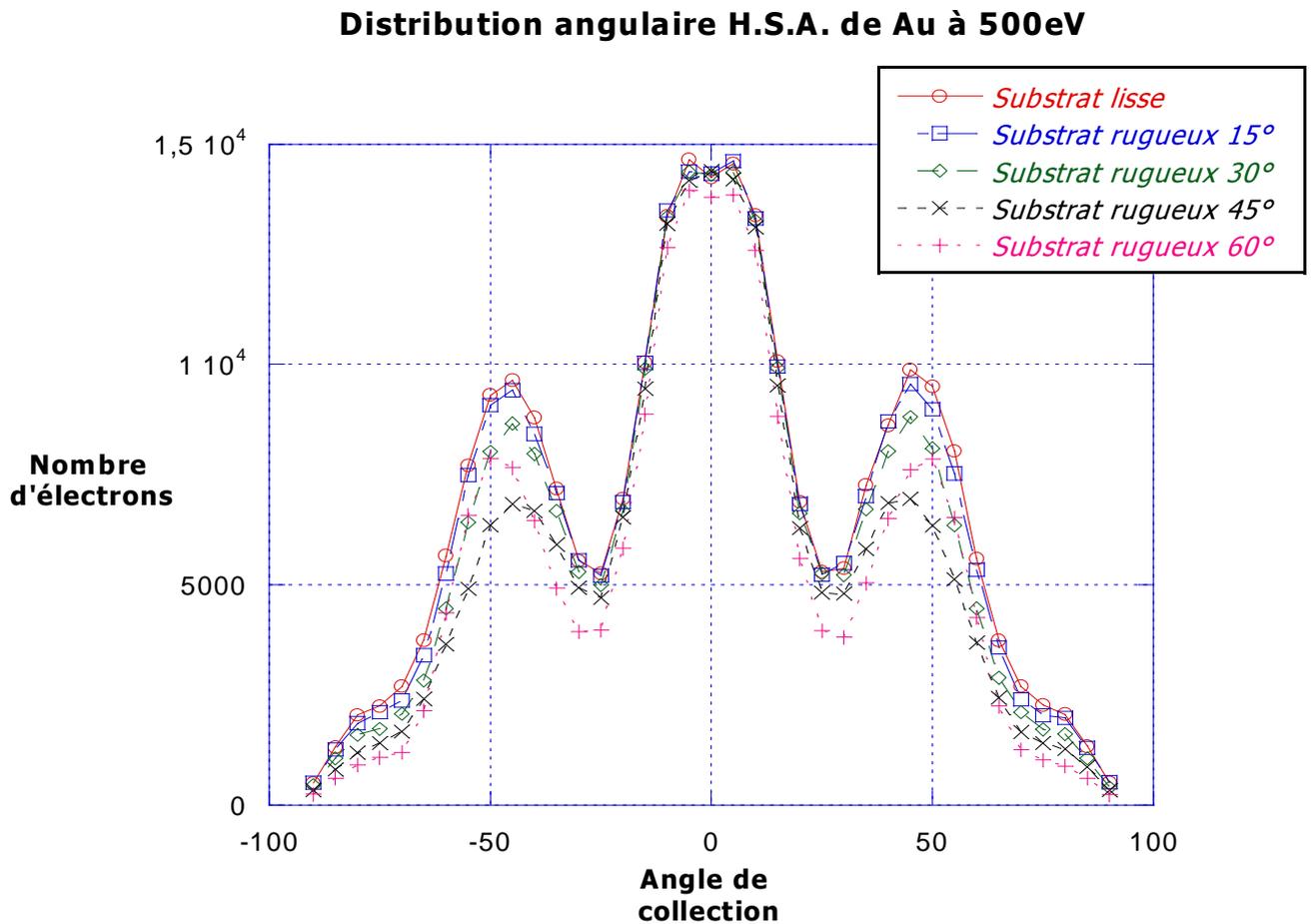


Figure 35 : Collection sur le Au à 500eV

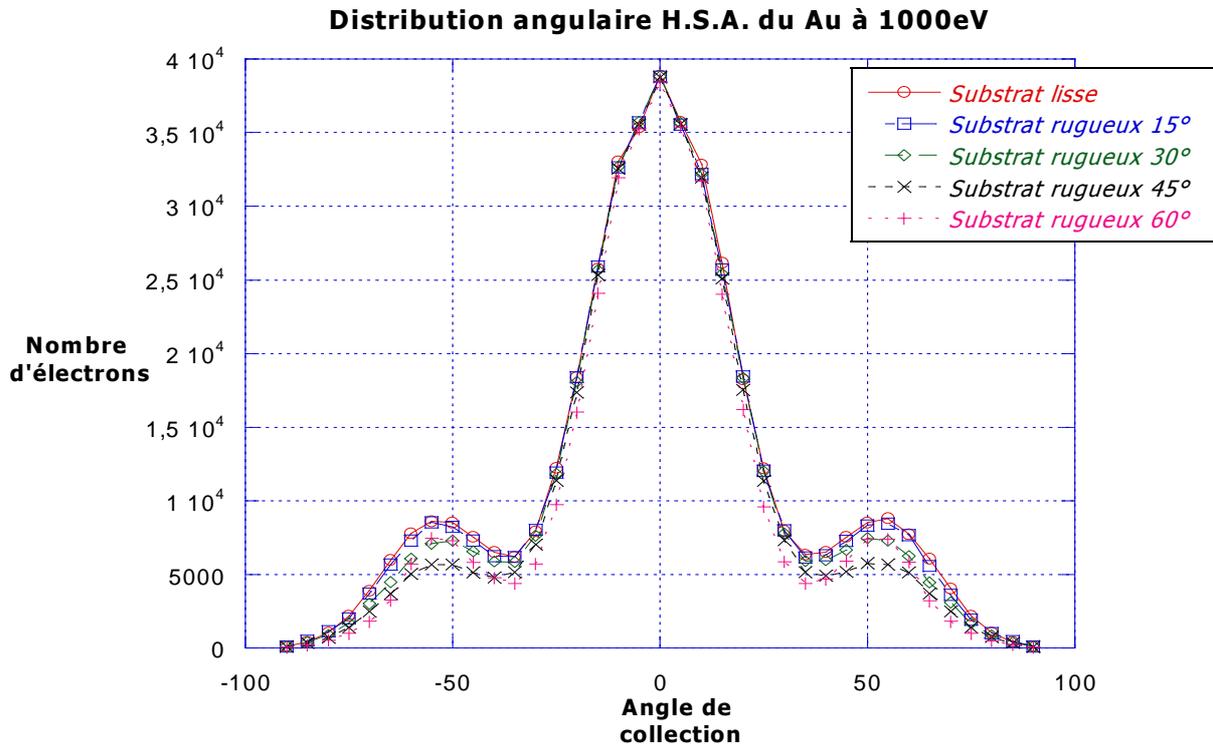


Figure 36 : Collection sur le Au à 1000eV

C. Incidence non normale sur les surfaces rugueuses.

Cette partie est encore en cours de validation à l'heure actuelle, mais certaines vérifications ont déjà donné des résultats intéressants. En effet, grâce aux simulations sur surface lisse, on arrive, en considérant les électrons perdus par ombrage, à retrouver les résultats des surfaces rugueuses. D'ailleurs dans ces conditions, l'ombrage augmente avec l'incidence. Les résultats suivants, qui ne sont pas forcément suffisant pour valider cette partie du programme, montre tous de même qu'une partie du spectre respecte les attentes de ce module.

On remarque, sur la figure 37, que les deux simulations sont très proches. Par contre, une différence s'observe nettement lorsque l'on effectue une collection inférieure à -60° . Celle-ci est due à l'effet d'ombrage. Il est surligné sur la figure.

Pour vérifier entièrement cet élément du programme, il faudrait effectuer d'autres tests sur d'autres éléments et à d'autres énergies. Malheureusement, par manque de temps, ils n'ont pu être effectués avant la remise de ce rapport.

Vérification de l'incidence non normale

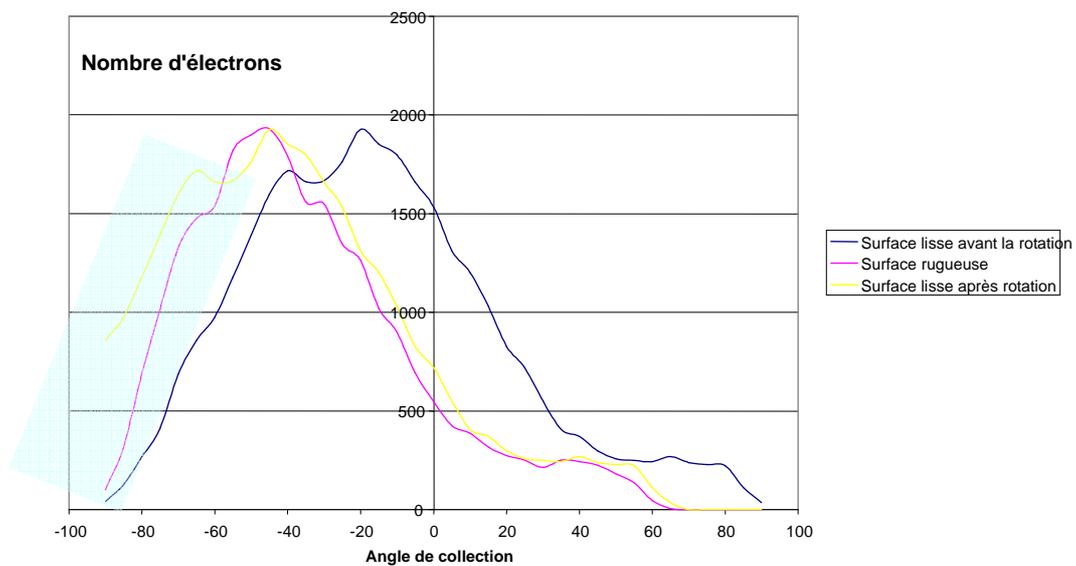


Figure 37 : Vérification de la modélisation de l'incidence non normale (30°) sur du Si à 200eV

IV. Extrapolation des résultats & perspectives de la simulation.

A. Exploitation des résultats.

Grâce à toutes les simulations effectuées entre surface lisse et surfaces rugueuses, plusieurs conclusions sont intéressantes.

Tout d'abord, l'évolution des spectres avec l'énergie montre que l'influence de la surface grandit lorsque l'énergie primaire augmente. Cela signifie, en pratique, qu'il vaut mieux utiliser les basses énergies pour limiter l'effet de surface et donc obtenir des résultats plus cohérents avec la théorie. En effet, les surfaces de manipulation n'étant jamais parfaitement lisse, cette étude apporte une solution pour obtenir une bonne exploitation des données expérimentales. Pour l'instant, l'étude n'a été menée que pour les incidences normales mais il est possible, après la vérification menée actuellement, d'étudier les incidences quelconques. Il a l'air logique que ces simulations futures montreront de grandes différences entre les deux types de surfaces. Cette variation sera en grande partie due à l'ombrage.

Ensuite, on s'aperçoit quand même que les différentes surfaces rugueuses ont toutes leur propre spectre. Même si les différences ne sont pas majeures, à l'aide d'un bon détecteur il sera peut être possible de retrouver cette différence et donc d'en tirer sa rugosité. Cette étude demande quand même d'opérer à haute énergie pour obtenir des écarts plus importants.

Enfin, la réaction des surfaces dépend pour beaucoup de l'élément composant la surface.

A terme, cette étude pourrait mener à une image de la surface. En effet, en parcourant le chemin inverse, c'est-à-dire en ayant la réflexion de la surface, on pourrait modéliser la surface en 3 dimensions. Mais pour cela les études doivent continuer sur les différentes géométries d'abord, et sur les différents substrats existants. Il semble évident que cela n'est pas encore pour tout de suite.

B. Projet de simulation future.

Plusieurs morphologies de surface pourraient être étudiées pour optimiser les simulations. Chaque étude demande du temps pour la programmer mais aussi pour mettre en place la théorie physique. Ce n'est pas toujours évident de voir tous les problèmes surtout ceux liés à l'outil informatique.

Dans cette partie, nous allons décrire rapidement les différents morceaux de programme en cours de développement. En effet, grâce à la modularité du programme, il sera aisé d'ajouter des parties, comme les surfaces binaires rugueuses par exemple. On peut donc, comme dans une étude théorique, amener l'ordinateur et le programmeur à une approche assez simpliste des surfaces rugueuses, comme la notre, à une un peu plus complexe avec plus de paramètres. Cela permettra, dans le futur proche, de se rapprocher des figures de rugosité réelle.

1. Plan d'incidence des créneaux.

Dans l'étude faite dans le deuxième chapitre le plan d'incidence était choisi perpendiculaire aux créneaux. Expérimentalement, cela est très délicat à mettre en oeuvre. Pour cela, il va falloir prendre en compte des plans d'incidence qui ne soient pas

obligatoirement orthogonaux aux créneaux (figure 38). Si cette idée est mise en place, elle permettra plus tard de montrer l'influence générale des surfaces rugueuses et donc de pouvoir les représenter. Le développement de détecteur plus performant doit être mis en place pour cette simulation, comme un H.S.A. parcourant tout l'espace.

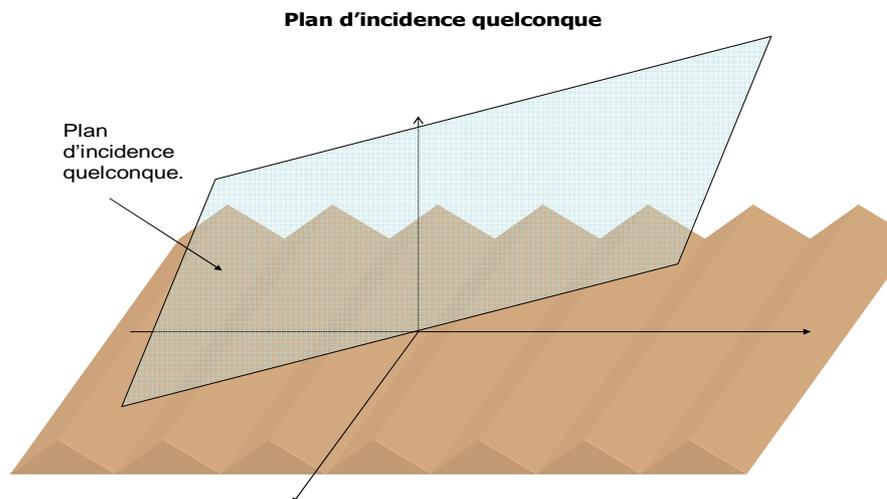


Figure 38 : Schématisation d'un plan d'incidence quelconque sur la surface rugueuse

2. Surface en pyramide.

Les créneaux modélisés dans notre programme sont en deux dimensions. Une autre approche serait de modéliser des pyramides sur la surface (modèle 3D).

Comme on peut le voir figure 39, pour retomber sur le repère de référence, il faudra utiliser quatre rotations différentes. Malheureusement, elle ne sont pas dans le même plan ce qui complique les choses.

Les résultats ne devraient pas être très différents des créneaux à deux dimensions. Par contre, grâce au H.S.A. couvrant tout le demi espace, il peut apparaître une distinction entre les surfaces. Cette simulation pourra être très précieuse lors de l'analyse d'échantillon comportant des pointes sur le substrat.

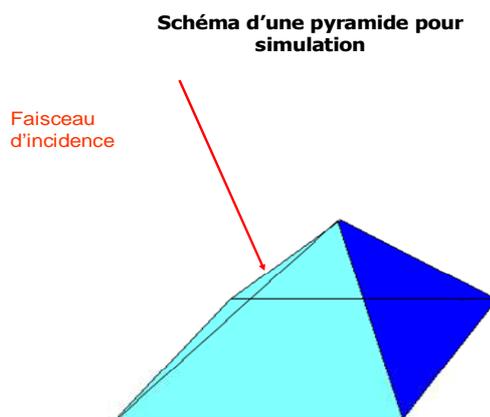


Figure 39 : Représentation d'une pyramide en 3D

3. Couches ternaires sur surface rugueuse ou lisse.

Grâce à l'ergonomie du programme, on peut réutiliser les fonctions de rugosité, d'incidence non normale et de détecteur pour toutes autres types de simulation. Bien entendu, certaines modifications doivent être apportées pour prendre en compte les nouveaux paramètres. C'est pour cela que dans l'avenir les couches ternaires, c'est-à-dire à trois éléments différents par couche, pourront être simulés figure 40.

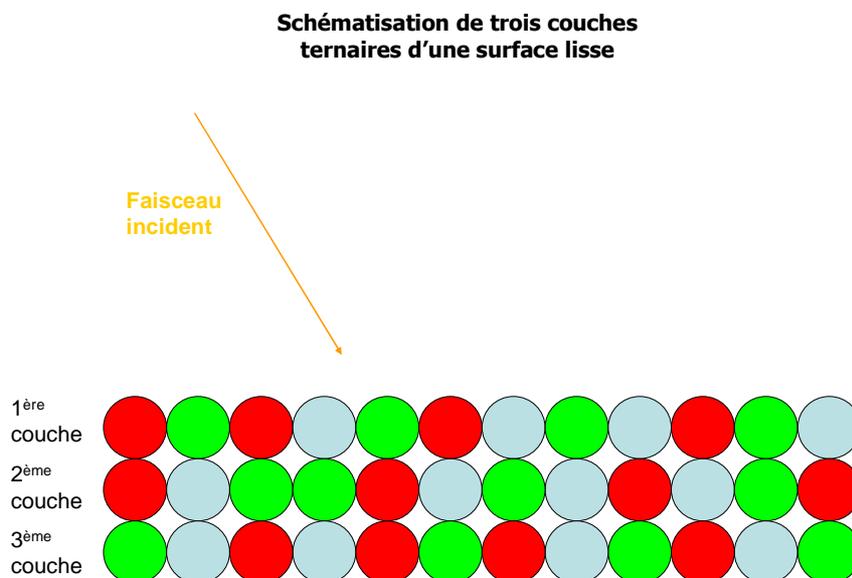


Figure 40 : Schématisation de plusieurs couches ternaires

Le problème peut être vite résolu si l'on prend pour hypothèse le fait qu'il n'y a pas d'influence d'un atome sur l'autre. Cela signifie que les libres parcours moyens ne changent pas mais qu'il faut tous les prendre en compte, c'est-à-dire les trois couples de valeurs. De plus, les atomes seront choisis aléatoirement. Cela signifie que leurs positions ne sont pas prédéfinies dans la maille.

4. Représentation du parcours de l'électron dans l'échantillon.

L'emploi de cette fonction, en cours de programmation, pourrait montrer le chemin de l'électron dans la matière aux différentes énergies d'incidence. Cela permettrait de voir l'évolution de ce parcours quand l'énergie augmente et donc, de trouver quelles énergies utilisées pour « visiter » une couche plutôt qu'une autre. En effet, on s'aperçoit que plus l'énergie est grande et plus l'électron pénètre profondément dans l'échantillon comme le représente le schéma ci-dessous. Cette fonction ne demande pas une grosse modification du programme. Par contre, même à l'heure actuelle, elle demande de grosses ressources informatiques car, pas à pas et pour des millions d'électrons, l'ordinateur doit garder en mémoire dans des tableaux les différentes positions des particules incidentes.

Représentation du parcours électronique

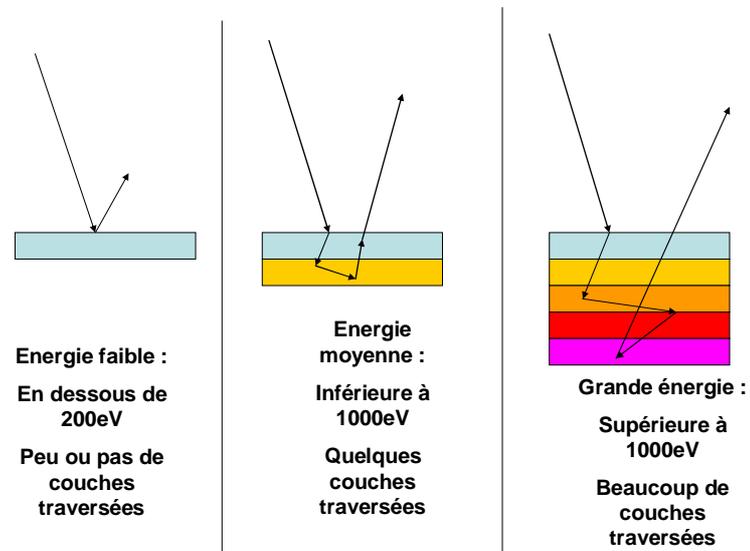


Figure 41 : Représentation du parcours d'un électron à différentes gammes d'énergies

A défaut de pouvoir être utilisé en même temps que le programme de simulation, elle peut être utilisée en dehors pour obtenir une représentation plus informative que démonstrative. Elle permet tout de même de voir cette évolution vis-à-vis de l'énergie.

Conclusion

Depuis le début de ce stage, plusieurs étapes se sont succédées.

Tout d'abord, il a fallu comprendre le fonctionnement de l'ancien programme basé sur une méthode Monte-Carlo. Celui-ci permettait de suivre le trajet des électrons dans le matériau. Pour optimiser les simulations, nous devons ensuite prendre en compte de nouveaux paramètres (surfaces rugueuses, couches binaires, ...). Nous avons alors conçu un nouveau programme, tout en pensant à le rendre ergonomique pour de futures optimisations.

Ce programme nous a permis d'étudier avec satisfaction les surfaces rugueuses et les couches binaires. Cependant, pour obtenir des résultats cohérents avec l'expérience, nous avons dû corriger des erreurs autant physiques (ombrage, changement de repère) qu'informatiques (mauvaise lecture des fichiers d'entrée).

Nous avons trouvé des résultats de simulations en bon accord avec les données expérimentales prouvant la validité de notre simulation.

Bien évidemment, le programme est en cours de développement. Il reste encore de nouveaux paramètres ou contraintes à prendre en compte (couches ternaires, pyramides, ...). Certaines sont d'ailleurs en cours de vérification.

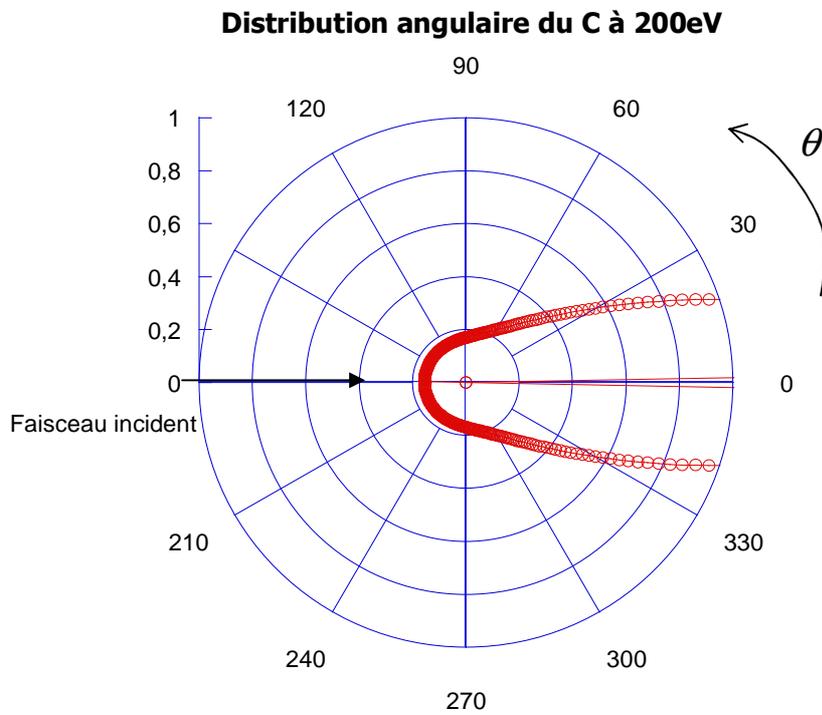
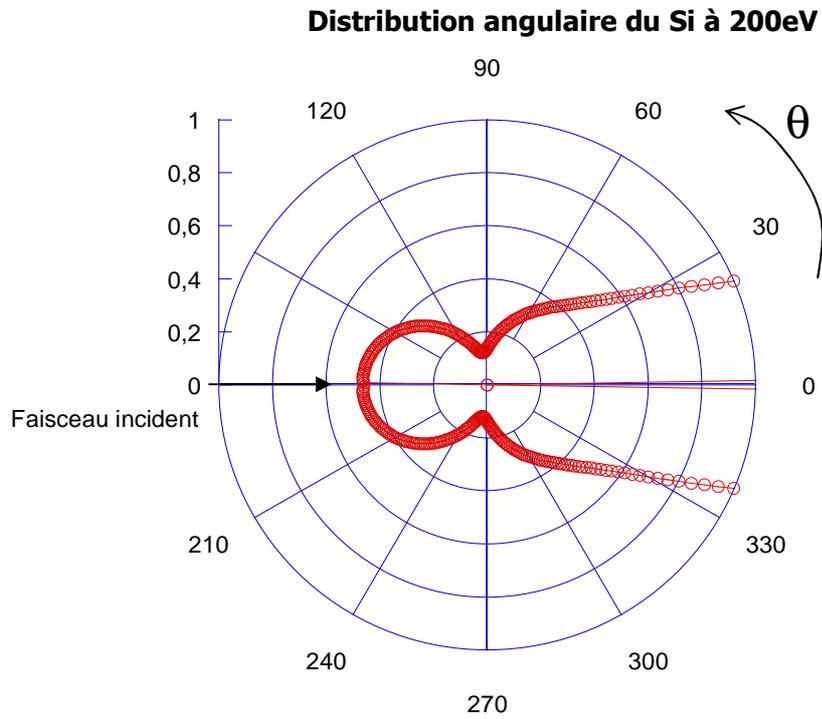
Le développement de la spectroscopie E.P.E.S. passe par une compréhension fine du parcours des électrons dans la matière et donc repose sur des simulations Monte-Carlo. Il sera alors envisageable d'effectuer une image 3D des différentes couches ou éléments de la surface à l'aide des résultats des simulations.

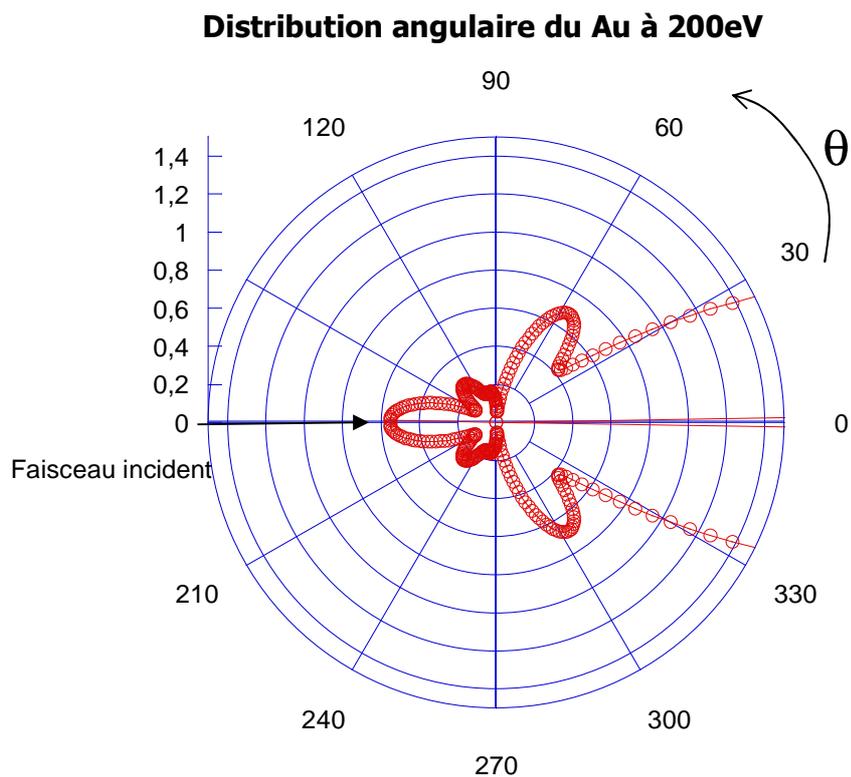
Bibliographies

- [1] : G. Gergely
Progress in Surface Science (2002) p. 31-88.
« Elastic backscattering of electrons : determination of physical parameters of electron transport processes by elastic peak electron spectroscopy »
- [2] : B. Gruzza, C. Robert, L. Bideux
Applied Surface Science 212-213 (2003) p. 667-673.
« E.P.E.S. applied to the study of gold/alumina interface »
- [3] : C. Robert, S. Zuber, L. Bideux, S. Merle, B. Gruzza, V. Nehasil, V. Matelin
Surface Interface Anal 29 (2000).
« Angular distribution of electrons elastically reflected from polycrystalline metals (Pd, In) »
- [4] : W.E. Milne
American Mathematical Monthly 33 (1926) p. 455.
- [5] : M. Fink, J. Ingram
Atomic Data 4 (1972) p. 129.
- [6] : S. Tanuma, C. J. Powell, D. L. Penn
Surface Interface Anal 21 (1994) p. 165.
- [7] : A. Jablonski G. Zemek
Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena 152 (2006) p. 100-106
- [8] : B. Gruzza
Thèse
...
- [9] : F. Alvy
Mémoire de D.E.A. de Physique (1992).
« Etude par simulation informatique des propriétés de la spectroscopie des électrons élastiques »
- [10] : C. Robert, B. Gruzza, L. Bideux, P. Bondot
Mathematical and Computers in Simulation 47 (1998) p. 419-427.
« A Monte-Carlo study for electron elastic backscattering based on layered models substrates »
- .

V. Annexes.

A. Probabilité de diffusion des différents éléments étudiés.

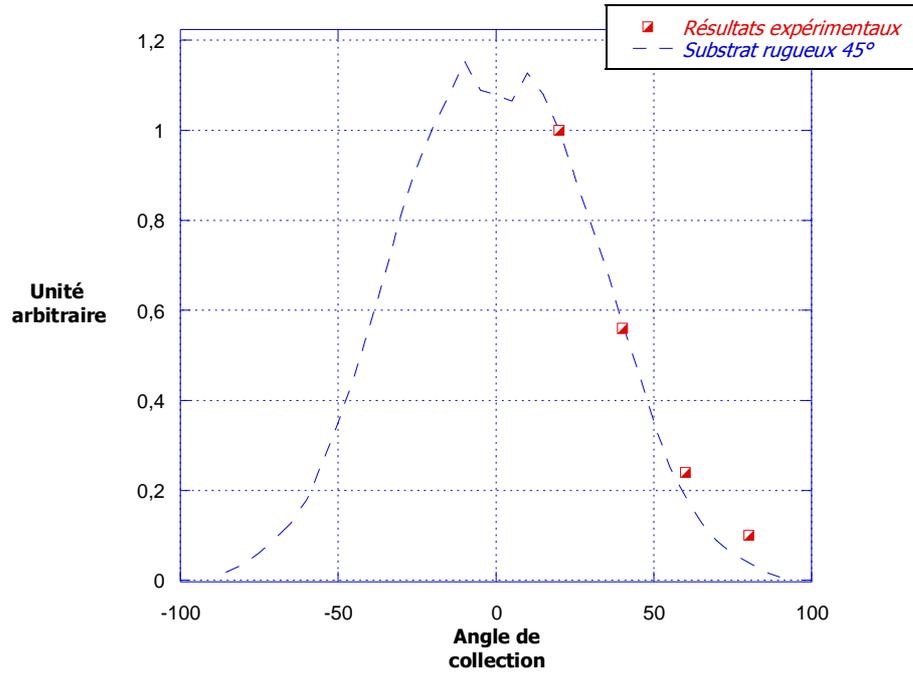




B. Représentation normalisée.

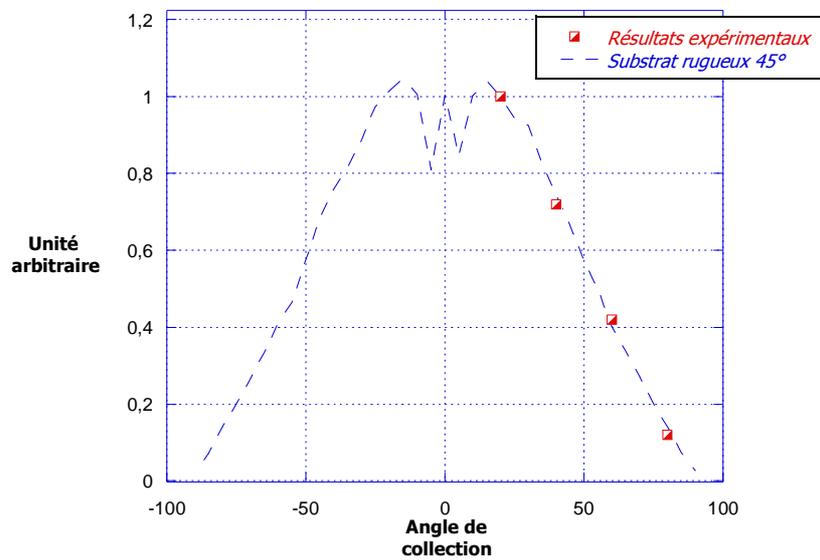
Pour vérifier notre modèle, nous avons repris les résultats expérimentaux de Jablonski et nous les avons ensuite comparé.

Représentation normalisée des créneaux 45° du Si à 200eV



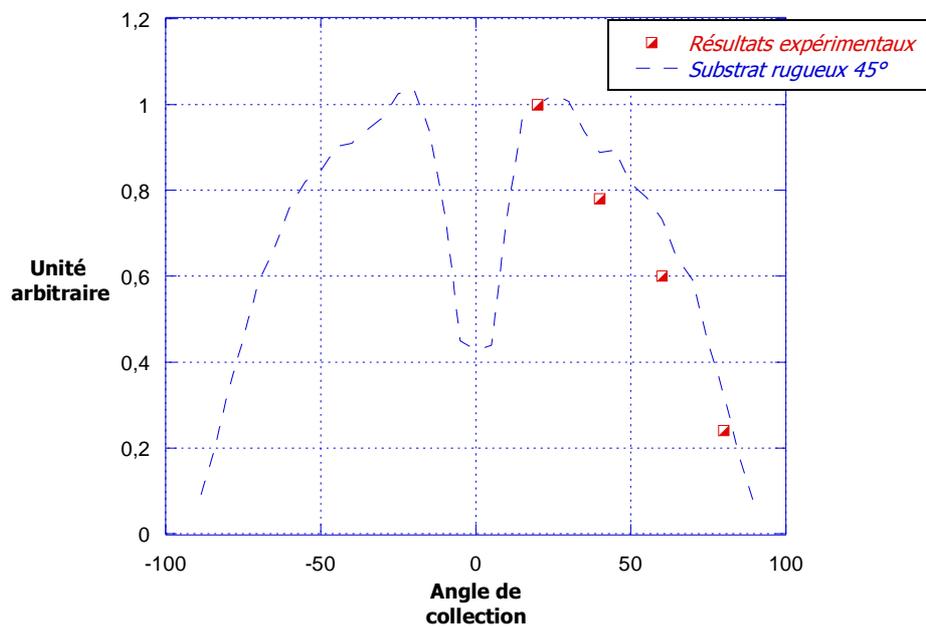
Annexe B-1 : Représentation normalisée du Si à 200eV

Représentation normalisée des créneaux 45° du Si à 500eV



Annexe B-2 : Représentation normalisée du Si à 500eV

Représentation normalisée des crêneaux 45° du Si à 1000eV



Annexe B-3 : Représentation normalisée du Si à 1000eV

VI. Programme de simulation.