



HAL
open science

Formules analytiques pour le calcul du profil d'ions implantés

J.P. Eymery, A. Fnidiki

► **To cite this version:**

J.P. Eymery, A. Fnidiki. Formules analytiques pour le calcul du profil d'ions implantés. Revue de Physique Appliquée, 1988, 23 (5), pp.925-932. 10.1051/rphysap:01988002305092500 . jpa-00245894

HAL Id: jpa-00245894

<https://hal.science/jpa-00245894>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Classification

Physics Abstracts

02.60 — 61.70T — 61.80J

Formules analytiques pour le calcul du profil d'ions implantés

J. P. Eymery et A. Fnidiki

Laboratoire de Métallurgie Physique, U.A. 131 du C.N.R.S., 40 avenue du Recteur Pineau, 86022 Poitiers, France

(Reçu le 4 décembre 1987, révisé le 28 janvier 1988, accepté le 29 janvier 1988)

Résumé. — Les deux premiers moments m_1 et m_2 (ou σ) décrivant le profil d'ions implantés dans un matériau cible à basse énergie peuvent maintenant être estimés à partir de formules analytiques simples. Dans cet article, nous proposons pour m_1 une expression qui fait seulement intervenir la fonction exponentielle intégrale et qui est valable pour deux potentiels interatomiques différents. En ce qui concerne le calcul de σ , nous donnons deux possibilités d'inégale difficulté ; la première est une expression dans laquelle m_2 s'exprime sous la forme d'un trinôme du second degré en m_1 ; la deuxième, plus simple, exploite la proportionnalité qui existe entre m_1 et σ .

Abstract. — The first two moments m_1 and m_2 (or σ) describing the profile of ions implanted into a target material at low energies can now be estimated with the help of simple analytical formulae. In this paper, we propose for m_1 an expression which only uses the exponential integral function ; moreover it appears to be valid for two different interatomic potentials. Concerning the estimation of σ , we suggest two possibilities of unequal difficulty ; first one is an expression in which m_2 appears as a quadratic trinomial ; the second one, which is more simple, uses the proportionality existing between m_1 and σ .

1. Introduction.

L'étude du profil des ions implantés dans un matériau cible est un sujet d'intérêt croissant essentiellement pour deux raisons ; la première est que l'implantation ionique a reçu récemment de nombreuses applications et demeure encore en voie d'expansion ; la seconde est qu'il existe maintenant des techniques très précises pour déterminer les profils expérimentaux, citons par exemple le SIMS — *secondary ion mass spectroscopy* —, ce qui permet d'effectuer des comparaisons avec les profils théoriques. La majorité des approches pour le calcul des moments de la distribution de dopants est basée soit sur la résolution de l'équation de transport de Boltzmann [1], soit sur des simulations de type Monte-Carlo où les trajectoires des ions injectés dans la cible sont calculées à l'aide de la théorie des collisions binaires [2]. La principale difficulté, pour l'utilisation pratique de ces méthodes, réside dans la nécessité d'élaborer des algorithmes de calculs compliqués qui ont en fait conduit souvent à des tables numériques de moments, par exemple celles publiées par Littmark et Ziegler [3]. Une première tentative de simplification des calculs de profils a été

effectuée par Biersack [4] avec l'algorithme PRAL (*projected range algorithm*) ; ceux-ci pouvaient alors être réalisés avec une calculatrice programmable.

Des recherches ont été également entreprises pour obtenir, avec le minimum de calculs et par suite le maximum de rapidité, les moments de la distribution et en particulier les deux premiers. Dans ce domaine, les formules analytiques conduisant à une application numérique réalisable avec une simple calculatrice de poche offrent de bonnes solutions. Le présent article traite de ce sujet et les résultats présentés ici font suite à ceux publiés récemment dans une lettre [5]. Ils s'inscrivent également au côté de ceux des références [4, 6-7]. Nous proposons des formules simples pour le calcul du premier moment m_1 et deux possibilités d'inégale difficulté pour le calcul du second moment m_2 et de l'écart-type σ . Comme dans l'article [5], elles sont établies en tenant seulement compte du ralentissement nucléaire, ce qui correspond à un domaine d'énergie réduite ε_0 tel que : $0,01 \leq \varepsilon_0 \leq 0,2$. Avant de les aborder, nous rappellerons les notations employées ainsi que les résultats de [5] qui serviront de point de départ.

2. Notations et rappels.

Les notations et relations employées sont les suivantes :

E = énergie de l'ion, valeur initiale E_0 ; homologues en coordonnées réduites : ε et ε_0 ;

M_1, M_2 = masses atomiques, respectivement de l'ion et de la cible ; $u = M_2/M_1$;

Z_1, Z_2 = numéros atomiques, respectivement de l'ion et de la cible ;

e = charge de l'électron ;

a_0 = rayon de Bohr ($5,3 \times 10^{-9}$ cm) ;

V = volume atomique ; $N = 1/V$ = densité atomique de la cible ; expression du ralentissement nucléaire : $S_n(E) = DS'_n(\varepsilon)$ avec :

$$D = (4 \pi a Z_1 Z_2 e^2 M_1 N) / (M_1 + M_2)$$

$$a = 0,8853 a_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2} ;$$

relation entre E et ε : $\varepsilon = PE$ avec $P = aM_2 / (Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2))$. Dans l'article [5], nous avons utilisé une expression du ralentissement nucléaire de Wilson *et al.* [8] :

$$S'_n(\varepsilon) = A \ln B\varepsilon / (B\varepsilon - (B\varepsilon)^{-c}) \quad (1)$$

où A, B et C sont des constantes caractéristiques du potentiel interatomique (Molière, Bohr, Thomas-Fermi...) pour établir la relation suivante qui donne simplement le moment d'ordre 1 :

$$m_1 = Q / (AB(B\varepsilon_0)^{u/2}) [E_1(T_1) - E_1(T_2)] \quad (2)$$

où l'on a posé :

$$Q = (M_1 + M_2)^2 / 4 \pi a^2 M_1 M_2 N ;$$

$$T_1 = - (u/2 - C + 1) \ln B\varepsilon_0 ;$$

$$T_2 = - (u/2 + 2) \ln B\varepsilon_0 ;$$

la fonction $E_1(x)$ est définie par :

$$E_1(x) = \int_x^{+\infty} \exp(-t)/t \cdot dt .$$

Nous avons également montré l'intérêt de cette formule en utilisant le potentiel de Molière [9] où les constantes A, B et C valent respectivement : 0,691, 3,60 et 0,713.

3. Calcul du moment d'ordre 1 : utilisation de la relation (2).

3.1 UTILISATION D'APPROXIMATIONS POUR LA FONCTION $E_1(x)$. — Pour éviter de consulter des tables pour déterminer $E_1(T_1)$ et $E_1(T_2)$, nous préconisons l'emploi des développements suivants. Dans le cas où $0 < x \leq 1$, on peut se servir de l'approximation polynomiale [10] :

$$E_1(x) + \ln(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4 + a_5 x^5 + \eta(x) \quad (3)$$

avec :

$$a_0 = -0,57721, a_1 = -0,99999, a_2 = -0,24991, \\ a_3 = 0,05519, a_4 = -0,00976, a_5 = 0,00107$$

et : $|\eta(x)| < 2 \times 10^{-7}$.

De même, dans le cas où $1 \leq x < +\infty$, il sera intéressant d'utiliser l'approximation rationnelle [11] :

$$x \exp(x) E_1(x) = \frac{x^2 + a_1 x + a_2}{x^2 + b_1 x + b_2} + \eta(x) \quad (4)$$

avec :

$$a_1 = 2,334733, a_2 = 0,250621, b_1 = 3,330657, \\ b_2 = 1,681534 \quad \text{et} \quad |\eta(x)| < 5 \times 10^{-5} .$$

On notera que pour des calculs approchés, on peut arrêter le polynôme de la relation (3) au terme d'ordre 3. Au contraire, si l'on désire des résultats plus précis, on peut non seulement l'utiliser intégralement, mais encore remplacer l'expression (4) par l'approximation :

$$x \exp(x) E_1(x) = \frac{x^4 + a_1 x^3 + a_2 x^2 + a_3 x + a_4}{x^4 + b_1 x^3 + b_2 x^2 + b_3 x + b_4} + \eta(x) \quad (5)$$

avec :

$$a_1 = 8,57332 \quad b_1 = 9,57332 \\ a_2 = 18,05901 \quad b_2 = 25,63295 \\ a_3 = 8,63476 \quad b_3 = 21,09965 \\ a_4 = 0,26777 \quad b_4 = 3,95849$$

et : $|\eta(x)| < 2 \times 10^{-8}$.

Nous avons testé la formule (2) en utilisant le potentiel de Molière et, pour le calcul de $E_1(x)$, les expressions (3) ou (4) suivant la position de x par rapport à 1. Les résultats ont été tout d'abord comparés avec ceux obtenus par le programme TRIM (*transport of ions in matter*) de Biersack [12] ou plus exactement la nouvelle version de celui-ci, TRIM 86, adaptée pour les microordinateurs. Rappelons que les programmes TRIM sont basés sur une méthode de Monte-Carlo et qu'ils demandent un temps de calcul relativement long, par exemple de l'ordre d'une demi-heure pour 500 ions incidents. Les couples ions-cibles choisis pour effectuer la comparaison sont Bi \rightarrow Be et Te \rightarrow LiF et les résultats sont reportés sur les figures 1a et 1b respectivement pour la gamme d'énergie réduite retenue, soit : $0,01 \leq \varepsilon_0 \leq 0,2$. Sur la première figure (cas de Bi \rightarrow Be), on constate un très bon accord entre la formule (2) et le programme TRIM ; l'écart, qui est pratiquement nul au début de la gamme d'énergie, n'excède pas 5 % en fin de gamme. Sur la seconde figure (cas de Te \rightarrow LiF), l'accord est encore bon entre les deux modes de calculs ; toutefois, TRIM donne des résultats légèrement supérieurs à ceux de

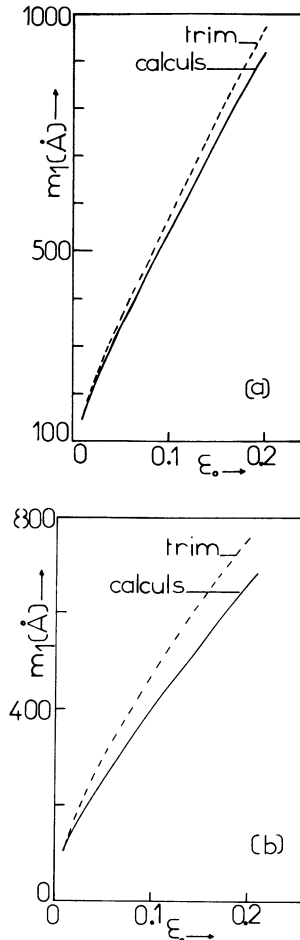


Fig. 1. — Variations de m_1 en fonction de l'énergie réduite ϵ_0 et comparaison entre les calculs et le programme TRIM 86 : (a) implantation Bi \rightarrow Be ; (b) implantation Te \rightarrow LiF.

[Variations in m_1 as a function of reduced energy ϵ_0 and comparison between present calculations and TRIM 86 computer code : (a) Bi \rightarrow Be implantation ; (b) Te \rightarrow LiF implantation.]

la formule (2) et la différence atteint 13 % pour $\epsilon_0 = 0,2$. Ceci se produit bien que TRIM tienne compte du ralentissement électronique ; dans la mesure où les calculs de cet article ne le prennent pas en compte, on pourrait s'attendre à ce que les parcours donnés par la relation (2) soient supérieurs à ceux donnés par TRIM ; or, il n'en est rien, sans doute parce que TRIM contient lui aussi des approximations et que le choix du potentiel interatomique conditionne de façon importante la valeur de m_1 déduite de la formule (2) (cf. paragraphe 3.2). Précisons également que pour le composé LiF, les seules approximations employées ont consisté à prendre pour masse et numéro atomiques la moyenne arithmétique de ceux des constituants.

Après avoir comparé les résultats donnés par la formule (2) avec ceux d'un programme théorique, il est intéressant de les comparer également à ceux déduits de l'expérience. C'est précisément l'objet du tableau I qui a été établi dans le cas d'une cible de

silicium. On peut y constater que les parcours déduits de la relation (2) soutiennent une bonne comparaison avec ceux qui ont été déterminés expérimentalement dans les références [13-15].

Tableau I. — *Comparaison entre les parcours (m_1) expérimentaux et théoriques dans le cas du silicium implanté à basse énergie.*

[Comparison between theoretical and experimental ranges (m_1) in the case of silicon implanted at low energy.]

ion incident	énergie (keV)	m_1 (Å) expérimental	références	m_1 (Å) : formule (2)
Sb	45	250	[13]	245
As	15	120 ± 8	[14]	123
—	10	106 ± 5	—	94
Xe	40	~ 200	[15]	226
—	10	~ 115	—	100
Kr	8	~ 100	—	83

3.2 RÔLE DU POTENTIEL INTERATOMIQUE. — On se propose ici de tester la formule (2) dans laquelle on emploie les approximations (3) et (4) vis-à-vis de tous les potentiels interatomiques cités dans la référence [8], soit respectivement : Thomas-Fermi, Molière, Bohr, Kr-C et *average*. Les calculs de la référence [5] et ceux du paragraphe précédent ont déjà mis en relief l'intérêt du potentiel de Molière [9]. En fait, il s'avère que le potentiel de Thomas-Fermi (constantes $A = 0,494$, $B = 1,357$, $C = 0,504$) donne également de bons résultats. Pour s'en persuader, on peut se reporter à la figure 2 qui

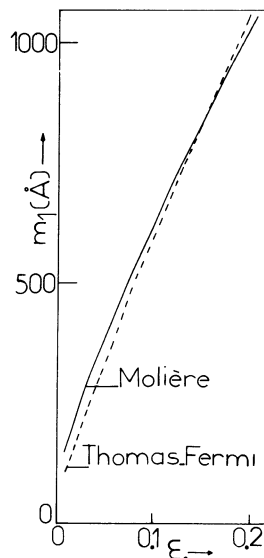


Fig. 2. — Variations de m_1 en fonction de l'énergie réduite ϵ_0 : comparaison entre deux potentiels interatomiques dans le cas de Ag implanté dans $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$.

[Variations in m_1 as a function of reduced energy ϵ_0 : comparison between two interatomic potentials in the case of Ag implanted into $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$.]

compare le potentiel de Molière à celui de Thomas-Fermi dans le cas de Ag implanté dans $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Pour $\varepsilon_0 < 0,1$, on observe un écart qui n'excède pas 13 % et, pour $\varepsilon_0 > 0,1$, il n'existe pratiquement pas de différence. Les trois autres potentiels surestiment m_1 si bien qu'il n'y a pas lieu de les retenir ; à titre d'exemple, pour $\varepsilon_0 = 0,01$, le potentiel Kr-C conduit à une valeur de m_1 double de celle calculée avec le potentiel de Thomas-Fermi. Les résultats décrits ici se sont avérés aussi valables pour tous les autres couples ions-cibles étudiés. Précisons enfin que les approximations employées pour le calcul de M_2 et Z_2 dans le cas du composé $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ sont analogues à celles employées pour LiF.

3.3 SIMPLIFICATION DE LA FORMULE (2). — L'utilisation de la formule (2) montre que souvent le terme $E_1(T_2)$ est petit devant $E_1(T_1)$ et par suite, peut être négligé dans certains cas que nous allons préciser. D'une façon qualitative, on peut expliquer ceci de la manière suivante ; on vérifie aisément que l'on a toujours $T_2 > 3 T_1$ avec le potentiel de Molière et la conditions $u < 1$; d'autre part, la fonction $E_1(x)$ est fortement décroissante pour $0 < x \leq 3$ (voir son graphe dans la Réf. [5]) ; il en résulte donc des circonstances où $E_1(T_2) \ll E_1(T_1)$ et par suite la formule (2) peut se réduire à :

$$m_1 = Q / (AB(B\varepsilon_0)^{u/2}) \cdot E_1(T_1). \quad (6)$$

La figure 3 permet de préciser le domaine de validité de la formule (6). Elle correspond à une implantation de Xe dans Ge et a été tracée en utilisant le potentiel de Molière. On peut constater que la

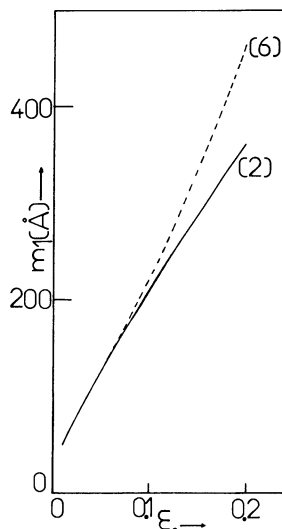


Fig. 3. — Variations de m_1 en fonction de l'énergie réduite ε_0 : comparaison entre la formule complète (2) et la formule simplifiée (6) (implantation : Xe \rightarrow Ge).

[Variations in m_1 as a function of reduced energy ε_0 : comparison between complete formula (2) and simplified formula (6) (Xe \rightarrow Ge implantation).]

formule (2) et la formule (6) diffèrent très peu l'une de l'autre pour $\varepsilon_0 < 0,1$; au contraire, l'écart s'accroît nettement dans le domaine $\varepsilon_0 > 0,1$, et la formule (6) donne toujours un résultat supérieur à celui de la formule (2). Toutefois, comme le programme TRIM conduit également à une valeur de m_1 légèrement plus forte que celle calculée par la formule (2), il sera possible d'obtenir des résultats raisonnables avec la relation (6) jusqu'à $\varepsilon_0 = 0,15$. Au vu de ce qui précède et des calculs effectués sur d'autres couples ions-cibles, nous préconisons donc l'emploi de la formule simplifiée (6) dans le domaine $0,01 \leq \varepsilon_0 \leq 0,15$.

4. Calcul du moment d'ordre 2 : formule analytique.

Dans notre précédent article [5], nous avons déjà proposé une première formule analytique pour le calcul de m_2 . En partant de la même expression, nous en proposons ici une autre ; sa formulation et sa démonstration sont plus élégantes puisque nous montrons que m_2 peut s'exprimer sous la forme d'un trinôme du second degré en m_1 ; de plus, son emploi pour les calculs numériques sera plus rapide.

La relation de départ est comme dans la référence [5] :

$$m_2 = 2(Q/AB)^2 \int_0^{x_0} x_2^{u/2} (x_2 - x_2^{-c}) / \ln x_2 \times \left[\int_{x_2}^{x_0} x_1^{-u/2} (x_1 - x_1^{-c}) / \ln x_1 \cdot dx_1 \right] dx_2 \quad (7)$$

avec : $x = B\varepsilon$.

Tout d'abord, nous posons :

$$x_1^{-u/2} = x_1^{u/2} \cdot x_1^{-u}$$

et travaillons avec l'hypothèse où $u \cdot \ln x$ est petit, ce qui permet d'écrire : $x_1^{-u} \sim 1 - u \cdot \ln x_1$; de plus, on note :

$$G(x) = x^{u/2} (x - x^{-c}) / \ln x.$$

L'expression (7) devient alors :

$$m_2 = 2(Q/AB)^2 \left[\int_0^{x_0} G(x_2) \left(\int_{x_2}^{x_0} G(x_1) dx_1 \right) \times \times dx_2 - u \int_0^{x_0} G(x_2) \left(\int_{x_2}^{x_0} \ln x_1 G(x_1) dx_1 \right) dx_2 \right]. \quad (8)$$

L'équation (8) peut alors s'écrire à l'aide de deux intégrales I_1 et I_2 :

$$m_2 = 2(Q/AB)^2 (I_1 - uI_2) \quad (9)$$

qu'il est nécessaire de calculer successivement.

Calcul de $I_1 = \int_0^{x_0} G(x_2) \left(\int_0^{x_0} G(x_1) dx_1 \right) dx_2 :$

$$I_1 = \int_0^{x_0} G(x_2) \left(\int_0^{x_0} G(x_1) dx_1 \right) dx_2 - \int_0^{x_0} G(x_2) \left(\int_0^{x_2} G(x_1) dx_1 \right) dx_2$$

$$I_1 = \left(\int_0^{x_0} G(x_1) dx_1 \right)^2 - 1/2 \left(\int_0^{x_0} G(x_1) dx_1 \right)^2 = 1/2 \left(\int_0^{x_0} G(x_1) dx_1 \right)^2 .$$

Compte tenu de la relation : $\int_0^{x_0} x^\alpha / \ln x \cdot dx = -E_1(-(\alpha + 1) \ln x_0)$, on trouve aisément :

$$\int_0^{x_0} G(x_1) dx_1 = E_1(T_1) - E_1(T_2) = (AB/Q) x_0^{u/2} m_1 ,$$

ce qui permet d'exprimer I_1 en fonction de m_1 de la façon suivante : $I_1 = 1/2 (AB/Q)^2 x_0^u m_1^2$.

On calcule maintenant :

$$I_2 = \int_0^{x_0} G(x_2) \left(\int_{x_2}^{x_0} \ln x_1 G(x_1) dx_1 \right) dx_2 .$$

L'expression entre parenthèses conduit facilement à :

$$\left(x_0^{u/2+2}/(u/2+2) - x_0^{u/2-c+1}/(u/2-C+1) \right) - \left(x_2^{u/2+2}/(u/2+2) - x_2^{u/2-c+1}/(u/2-C+1) \right) .$$

On constate que le premier terme (soit K_1) ne dépend pas de x_2 ; par contre, le second (soit $K_2(x_2)$) en dépend. L'intégrale I_2 s'écrit alors :

$$I_2 = K_1 \int_0^{x_0} G(x_2) dx_2 - \int_0^{x_0} G(x_2) K_2(x_2) dx_2$$

que nous notons :

$$I_2 = K_1 J_1 - J_2 .$$

Il est donc nécessaire de calculer maintenant les intégrales J_1 et J_2 .

L'obtention de J_1 est immédiate compte tenu des résultats précédents :

$$J_1 = E_1(T_1) - E_1(T_2) = (AB/Q) x_0^{u/2} m_1 .$$

Le calcul de J_2 fait intervenir seulement la fonction $E_1(x)$. On trouve aisément :

$$J_2 = \frac{E_1(- (u+4) \ln x_0)}{u/2+2} - \frac{E_1(- (u-2C+2) \ln x_0)}{u/2-C+1} + \frac{u-C+3}{(u/2+2)(u/2-C+1)} \times E_1(- (u-C+3) \ln x_0) . \quad (10)$$

Le report dans la relation (9) conduit à :

$$m_2 = 2(Q/AB)^2 [(AB/Q)^2 x_0^u m_1^2 - \times u \left\{ \left(\frac{x_0^{u/2+2}}{u/2+2} - \frac{x_0^{u/2-c+1}}{u/2-C+1} \right) \times (AB/Q) x_0^{u/2} m_1 - J_2 \right\}] .$$

Finalement m_2 s'écrit de la façon suivante :

$$m_2 = x_0^u m_1^2 - 2(Q/AB) \times u \left(\frac{x_0^{u+2}}{u/2+2} - \frac{x_0^{u-c+1}}{u/2-C+1} \right) m_1 + 2(Q/AB)^2 u J_2 \quad (11)$$

où J_2 est donné par la relation (10). Comme annoncé, m_2 se présente donc sous la forme d'un trinôme du second degré en m_1 et seul le calcul du terme constant nécessite l'emploi de la fonction $E_1(x)$; encore celle-ci n'est-elle nécessaire que trois fois. Dans la pratique, il est en fait plus intéressant de calculer $\sigma = (m_2 - m_1^2)^{1/2}$.

Nous avons testé la formule (11) en utilisant comme précédemment le potentiel de Molière et pour le calcul de $E_1(x)$, les expressions (3) et (4). Les exemples choisis sont les mêmes qu'au paragraphe 3.1, soit Bi \rightarrow Be et Te \rightarrow LiF; les résultats sont également comparés à ceux déduits du programme TRIM. Les comparaisons sont reportées sur les figures 4a et 4b respectivement pour la gamme d'énergie réduite : $0,01 \leq \varepsilon_0 \leq 0,2$. Sur la figure 4a (cas de Bi \rightarrow Be), on constate un accord satisfaisant entre le calcul analytique de σ et le programme TRIM, l'écart entre les deux atteignant 28 % en fin de gamme. Il en est de même sur la figure 4b (cas de Te \rightarrow LiF) où l'écart en fin de gamme n'est que de 18 %. D'une manière générale, il s'avère que la formule (11) donne des résultats légèrement supérieurs à ceux de TRIM. Comme au paragraphe 3.1, il est nécessaire maintenant d'effectuer une comparaison entre la formule (11) et l'expérience. La référence [16] qui concerne une implantation de Kr dans Si à 40 keV ($\varepsilon_0 = 0,16$) en fournit la possibilité; expérimentalement on peut déduire un écart-type de l'ordre de 140 Å alors que la formule (11) conduit à 95 Å. Les écarts que l'on constate entre le programme TRIM, la formule (11) et l'expérience reflètent une certaine dispersion des valeurs de σ qu'il est habituel de constater dans la littérature mais qui n'altèrent en rien la validité de la relation (11). Il reste cependant à préciser les restrictions apportées

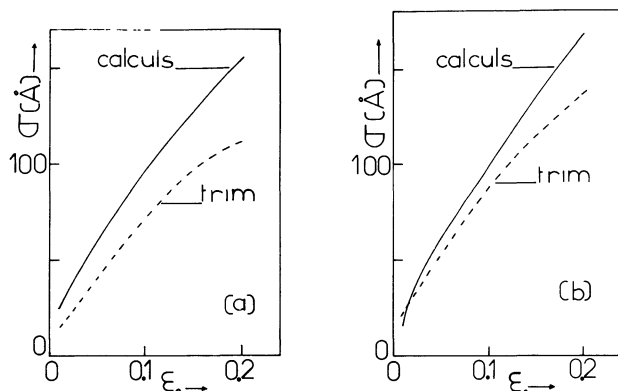


Fig. 4. — Variations de σ en fonction de l'énergie réduite ϵ_0 et comparaison entre les calculs et le programme TRIM 86 : (a) implantation Bi \rightarrow Be, (b) implantation Te \rightarrow LiF.

[Variations in σ as a function of reduced energy ϵ_0 and comparison between present calculations and TRIM 86 computer code : (a) Bi \rightarrow Be implantation, (b) Te \rightarrow LiF implantation.]

par la condition $u \cdot \ln x_0$ petit nécessaire pour l'intégration de la relation (7) dans le domaine : $0,01 \leq \epsilon_0 \leq 0,2$. Au voisinage de la borne inférieure $\epsilon_0 = 0,01$, il est impératif que u vérifie la condition : $u \ll 0,3$; en fait, l'expérience montre que u est tolérable jusqu'à environ 0,15. De même au voisinage de la borne supérieure $\epsilon_0 = 0,2$, u doit vérifier : $u \ll 3$ et en pratique, on peut tolérer des valeurs de u allant jusqu'à 1 ou 1,5.

5. Calcul de l'écart type : proportionnalité entre m_1 et σ .

Les calculs de moments d'ordre 2 peuvent tirer parti de la constatation suivante qu'il est bon de noter pour apporter des solutions extrêmement rapides : m_1 et σ s'avèrent être proportionnels dans la gamme d'énergie réduite retenue. Ceci peut être à la fois démontré analytiquement et vérifié, par exemple à l'aide des programmes PRAL et TRIM.

De l'ancienne théorie L.S.S. [17], on peut déjà extraire :

$$\sigma = (\gamma/6)^{1/2} m_1 \text{ avec } \gamma = 4 M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2,$$

ce qui conduit à :

$$\sigma = 0,82 u^{1/2} / (1 + u) \cdot m_1. \quad (12)$$

De même, des formules analytiques de Biersack [4], on peut déduire :

$$\sigma = (u/2 B') / (1 + u/B')^{1/2} \cdot m_1$$

où la constante B' est comprise entre 0,4 et 0,6. Pour la valeur intermédiaire de 0,5, il vient :

$$\sigma = u / (1 + 2u)^{1/2} \cdot m_1. \quad (13)$$

Ensuite des relations établies par Martan et Mulak [6], on peut tirer :

$$\begin{aligned} m_2 &= m_1^2 (1 + 0,6377 u) \\ \sigma &= 0,8 u^{1/2} \cdot m_1. \end{aligned} \quad (14)$$

Enfin, le récent article de Fink *et al.* [7] conduit à :

$$\sigma = 0,6456 \exp(-0,0564 \ln^2(10 u)) \cdot m_1. \quad (15)$$

Les formules (12-15) montrent donc que σ peut se mettre sous la forme : $\sigma = f(u) \cdot m_1$ où $f(u)$ est une fonction simple de u . La proportionnalité entre m_1 et σ peut également être vérifiée à l'aide du programme TRIM 86 ; la figure 5 le montre pour l'implantation Kr \rightarrow Ag d'une part et Cu \rightarrow Ti d'autre part, dans le domaine d'énergie $0,01 \leq \epsilon_0 \leq 0,2$. Des constatations analogues ont été effectuées avec le programme PRAL sur les couples ions-cibles suivants : Au \rightarrow Si, Te \rightarrow Al, Au \rightarrow Cu et Xe \rightarrow Ge.

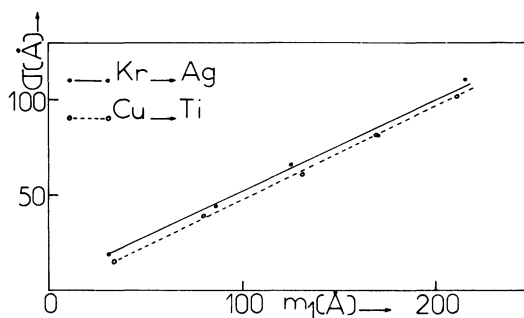


Fig. 5. — Proportionnalité entre m_1 et σ pour $0,01 \leq \epsilon_0 \leq 0,2$ (implantations Kr \rightarrow Ag et Cu \rightarrow Ti).

[Proportionality between m_1 and σ in the $0,01 \leq \epsilon_0 \leq 0,2$ range (Kr \rightarrow Ag and Cu \rightarrow Ti implantations).]

En réalité, la fonction f devrait dépendre non seulement de M_1 et M_2 , mais aussi de Z_1 et Z_2 . Sur une série d'exemples concrets, nous avons vérifié qu'en fait la dépendance vis-à-vis de Z_1 et Z_2 était faible, aussi l'écriture de σ sous la forme : $\sigma = f(u) \cdot m_1$ est une bonne approximation. Pour notre part, nous avons également cherché à déterminer des fonctions $f(u)$ sous la forme de lois puissance du type : $f(u) = \alpha u^\beta$ où α et β sont des constantes. Pour cela, nous avons sélectionné 8 valeurs de u comprises entre 0 et 1,3 puis le tracé de $\ln(d\sigma/dm_1)$ en fonction de $\ln(u)$ a permis de déduire :

i) $\alpha = 0,5$ et $\beta = 0,42$ avec le programme TRIM,

ii) $\alpha = 0,45$ et $\beta = 0,5$ avec le programme PRAL.

Nous proposons donc les relations :

$$\sigma = 0,5 u^{0,42} \cdot m_1 \quad (16)$$

$$\text{et } \sigma = 0,45 u^{1/2} \cdot m_1. \quad (17)$$

Présentant un formalisme voisin de la relation (14), elles s'en démarquent cependant par la valeur du coefficient α qui est ici plus faible.

Sur l'ensemble des formules (12-17), il reste à effectuer des comparaisons et éventuellement des choix. Pour cela, nous avons tracé, sur la figure 6, les fonctions $f(u)$ de ces formules dans le domaine : $0 \leq u \leq 1,5$. On y constate que les fonctions issues des relations (12-13) et (15-17) forment un faisceau de courbes relativement cohérent pour $0,5 \leq u \leq 1,5$; par contre, celles des relations (14) et (15) s'écartent assez notablement des autres pour $u > 0,5$ et $u < 0,5$ respectivement. Pour ces raisons, nous préconiserons surtout l'emploi des relations (12-13) et (16-17) dans le domaine de valeurs de u et ε_0 retenu.

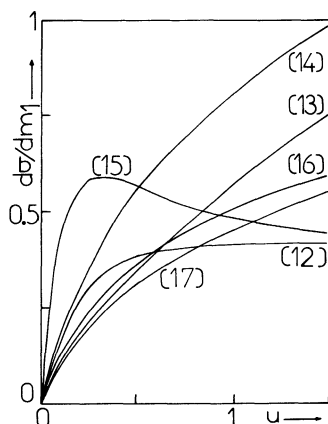


Fig. 6. — Graphes des fonctions $d\sigma/dm_1 = f(u)$ suivant les relations (12-17).

[Plot of the $d\sigma/dm_1 = f(u)$ functions according to relations (12-17).]

On retiendra essentiellement de ce paragraphe que, connaissant m_1 , on peut très rapidement calculer une valeur approchée, mais cependant satisfai-

sante, de σ grâce à la linéarité entre m_1 et σ et en utilisant de préférence les formules (12, 13) et (16, 17).

6. Conclusion.

Cet article a été rédigé avec le souci majeur de simplifier le calcul des deux premiers moments de la distribution des ions implantés dans une cible à faible énergie ($0,01 \leq \varepsilon_0 \leq 0,2$) ; les formules proposées conduisent à des applications numériques immédiates réalisables avec des calculatrices électroniques de poche. Pour le calcul du moment d'ordre 1, nous avons travaillé à partir de la formule (2) démontrée antérieurement [5]. Il s'est avéré que des approximations polynomiales ou rationnelles pour la fonction exponentielle intégrale étaient satisfaisantes ; de plus, la formule (2) peut être utilisée soit avec le potentiel de Molière, soit avec celui de Thomas-Fermi, ce qui en consolide son intérêt ; enfin, pour $0,1 \leq \varepsilon_0 \leq 0,15$, on peut omettre un terme, ce qui conduit à la formule simplifiée (6). Pour le calcul de m_2 et de l'écart-type σ , nous proposons tout d'abord une formule élégante (11) dans laquelle m_2 apparaît comme un trinôme du second degré en m_1 ; dans ce formalisme, seul le terme constant dépend de la fonction exponentielle intégrale et les résultats obtenus soutiennent une bonne comparaison avec ceux de TRIM 86 qui est un programme très élaboré. Compte tenu des restrictions qui apparaissent alors sur les valeurs de u , nous avons également proposé une autre méthode qui exploite la proportionnalité existant entre m_1 et σ ; il en est alors issu les relations (16) et (17) dont nous suggérons l'emploi au côté des relations (12) et (13).

Remerciements.

Les auteurs remercient l'équipe de recherche de J. P. Biersack (Berlin) qui a fourni au laboratoire les programmes de calcul utilisés.

Bibliographie

- [1] LITTMARK, U. et ZIEGLER, J. F., *Phys. Rev. A* **23** (1981) 64 et références incluses.
- [2] ROBINSON, J. E., KWOK, K. K. et THOMPSON, D. A., *Nucl. Instrum. Methods* **132** (1976) 667.
- [3] LITTMARK, U. et ZIEGLER, J. F., *Handbook of Range Distribution for Energetic Ions in All Elements*, Vol. 6 of *The Stopping and Ranges of Ions in Matter*, Ed. J. F. Ziegler (Pergamon Press, New York) 1980.
- [4] BIERSACK, J. P., *Nucl. Instrum. Methods* **182/183** (1981) 199.
- [5] EYMERY, J. P. et FNIDIKI, A., *Europhys. Lett.* **4**, 2 (1987) 223.
- [6] MARTAN, J. et MULAK, A., *Mat. Sci. Eng.* **69** (1985) 21.
- [7] FINK, D., BIERSACK, J. P., SANCHEZ, P. F. et FICHTNER, P. F., *Radiat. Eff.* **103** (1987) 89.
- [8] WILSON, W. D., HAGGMARK, L. G. et BIERSACK, J. P., *Phys. Rev. B* **15** (1977) 2458.
- [9] MOLIÈRE, G., *Z. Naturforsch. Teil A* **2** (1947) 133.
- [10] ALLEN, E. E., Note 169, *MTAC* **8** (1954) 240.
- [11] HASTINGS, C., *Approximations for digital computers* (Princeton Univ. Press, Princeton, N.J.) 1955.
- [12] BIERSACK, J. P. et HAGGMARK, L. G., *Nucl. Instrum. Methods* **174** (1980) 257.

- [13] RYSSSEL, H., *Ion Implantation Techniques*, Eds. Ryssel and Glawischnig (Springer Verlag, Berlin) 1982, p. 117.
- [14] SCANLON, P. J., BARFOOT, K. M., SKENSVED, P. et WHITTON, J. L., *Nucl. Instrum. Methods* in P.R. **B 7/8** (1985) 342.
- [15] MENZEL, N. et WITTMACK, K. *Nucl. Instrum. Methods* in P.R. **B 7/8** (1985) 366.
- [16] PAINE, B. M. et NICOLET, M. A., *Nucl. Instrum. Methods* **209/210** (1983) 173.
- [17] LINDHARD, J., SCHARFF, M. et SCHIØTT, H. E., *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk* **33** (1963) 14.
-