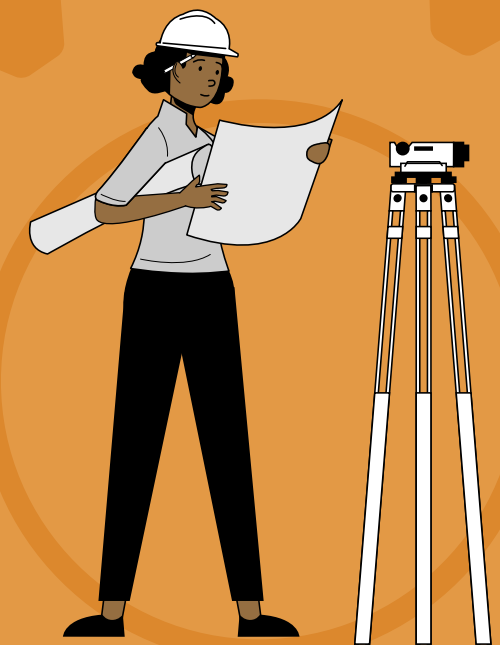
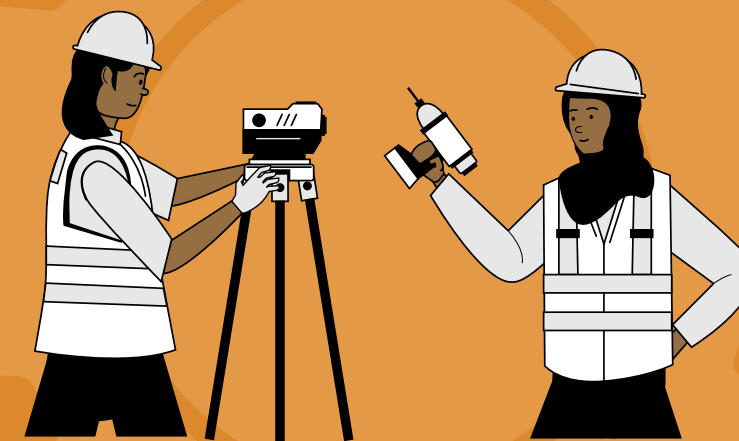
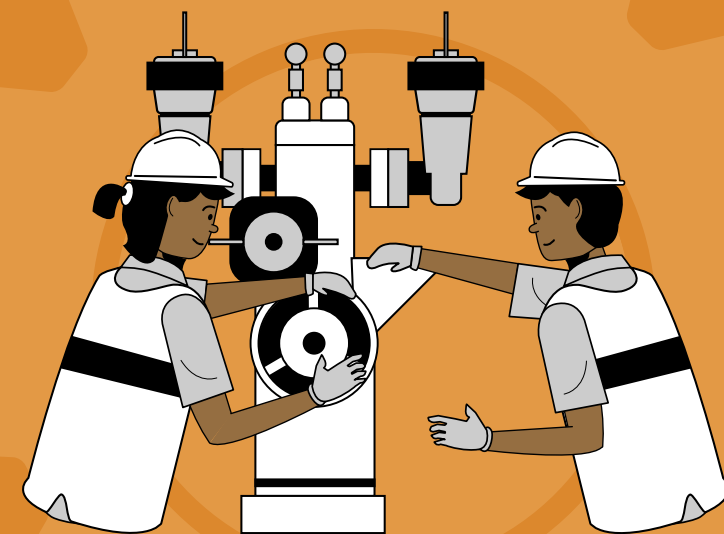
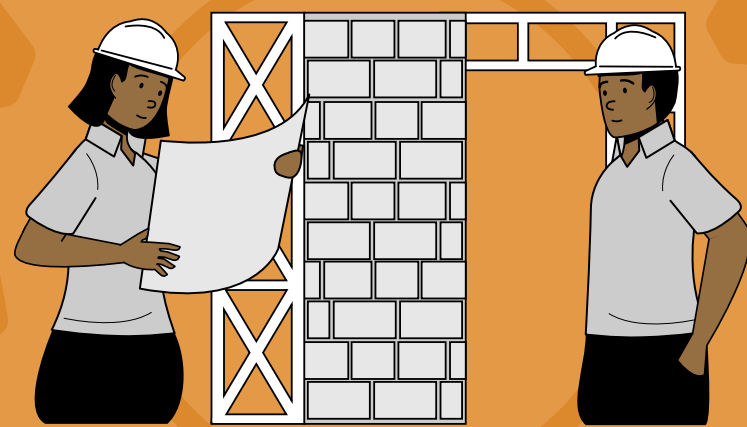


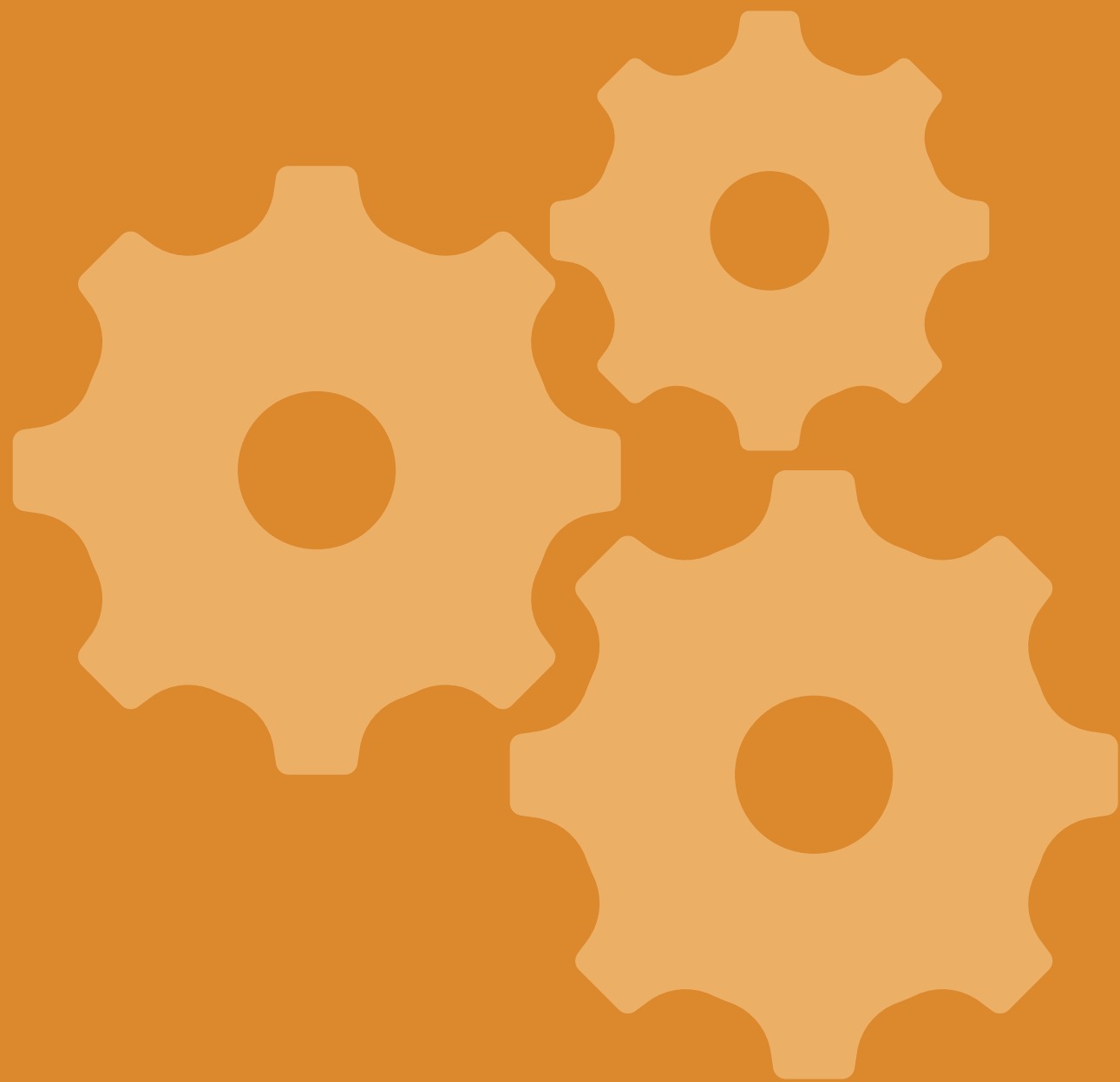
SOUTENANCE DE DOCTORAT D'UNIVERSITÉ SPÉCIALITÉ

SPÉCIALITÉ : Matériaux et Composants pour l'Électronique

SIMULATION DU PARCOURS DES ÉLECTRONS ÉLASTIQUES DANS LES MATÉRIAUX ET STRUCTURES. APPLICATION À LA SPECTROSCOPIE DU PIC ÉLASTIQUE MULTI-MODES MM-EPEs



PLAN



- Contexte de l'étude Simulation MC1 décrivant le cheminement des électrons élastiques
- Résultats et application use surface rugueuse
- Nouvelle simulation MC2 adaptée à l'échelle nanométrique
- Résultats et applications :
 - *Modèle analytique pour un analyseur RFA ;*
 - *Surface nanoporeuse(MC2-NP) ;*
- Conclusions et perspectives

Contexte de l'étude

Compréhension approfondie des phénomènes d'interactions des électrons élastiques avec le substrat



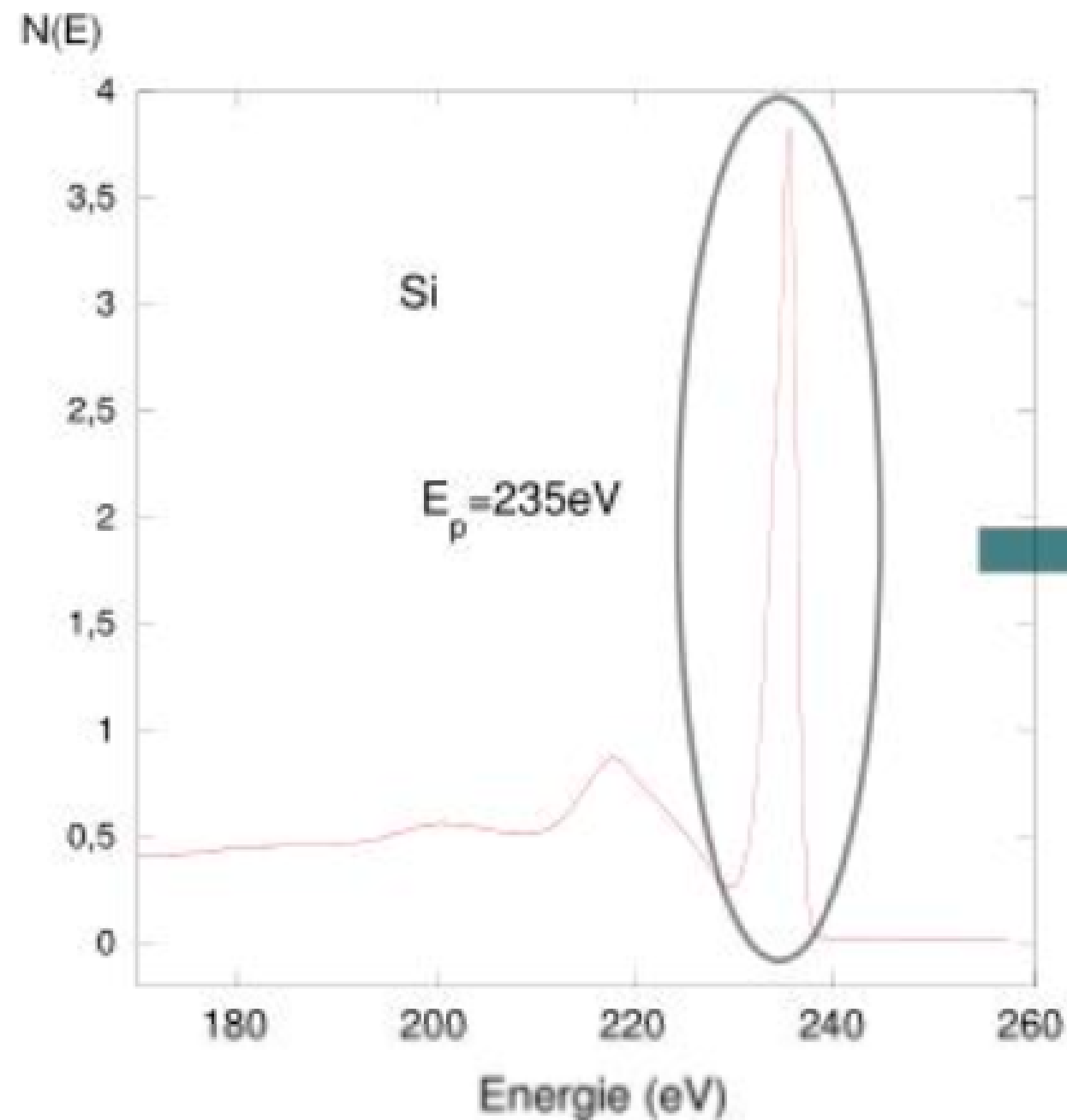
Simulation informatique basée sur la méthode Monte Carlo



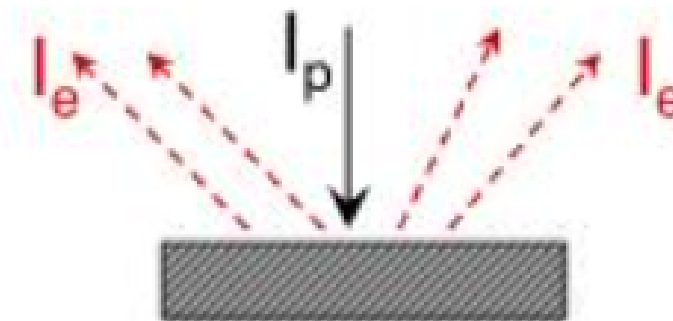
Contribution à l'interprétation
des résultats expérimentaux (EPES)



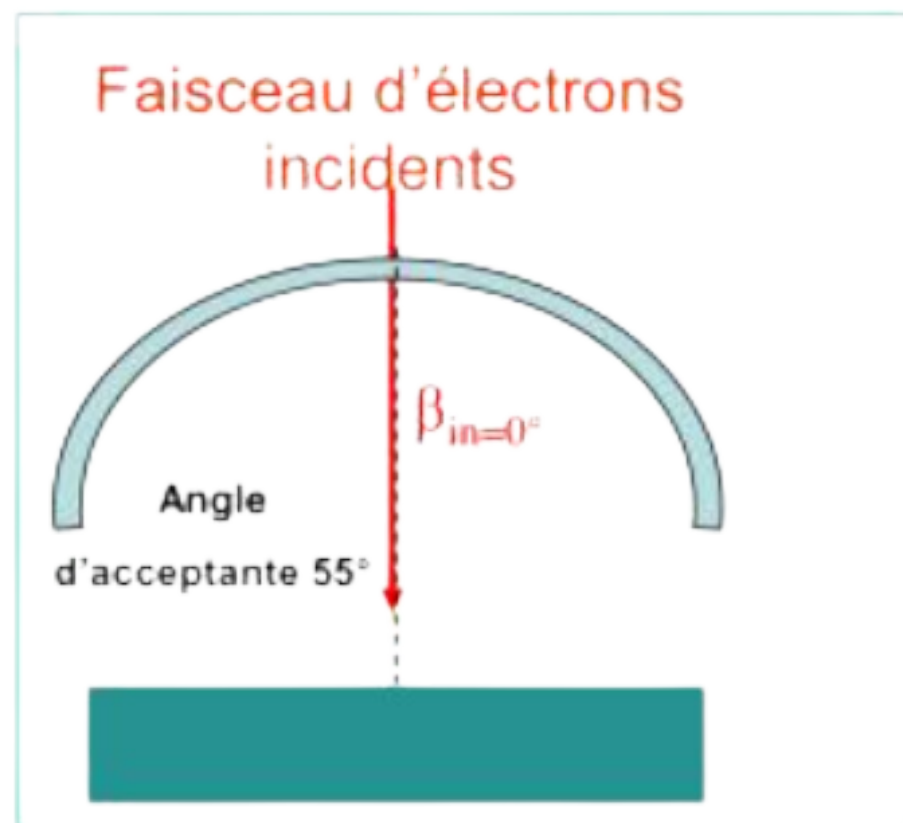
Étude des surfaces à l'échelle
micro et nano-transformées



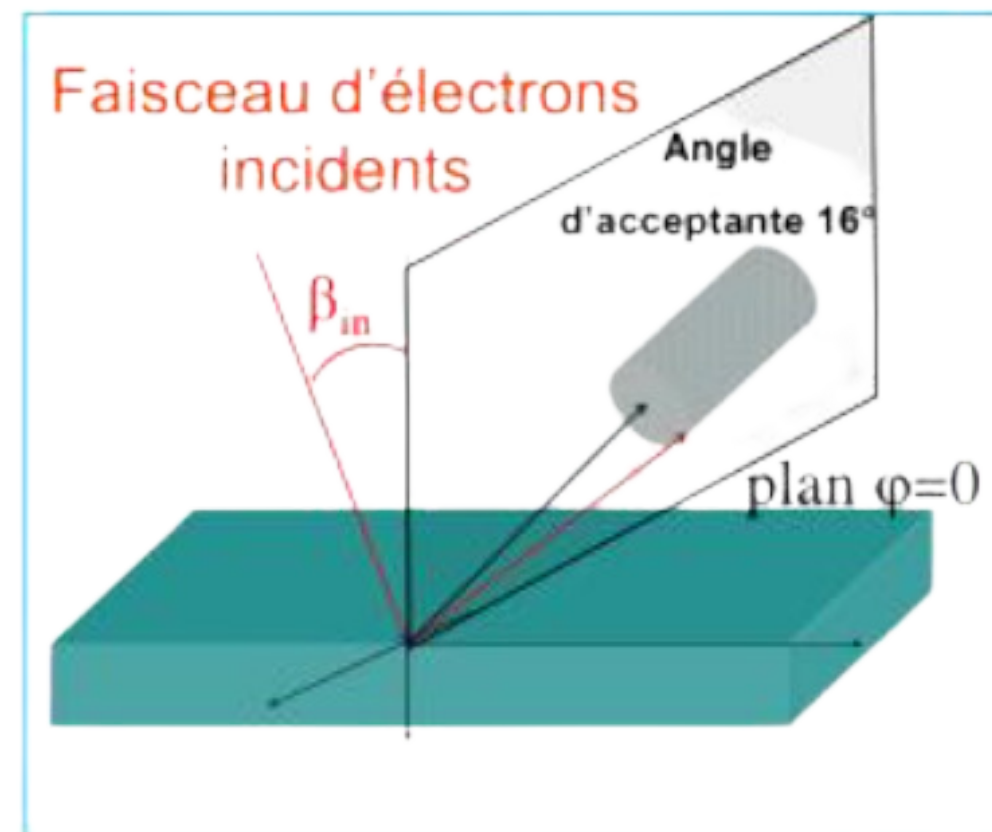
Spectroscopie de rétrodiffusion
élastique des électrons E.P.E.S
(Elastic Peak Electron Spectroscopy)



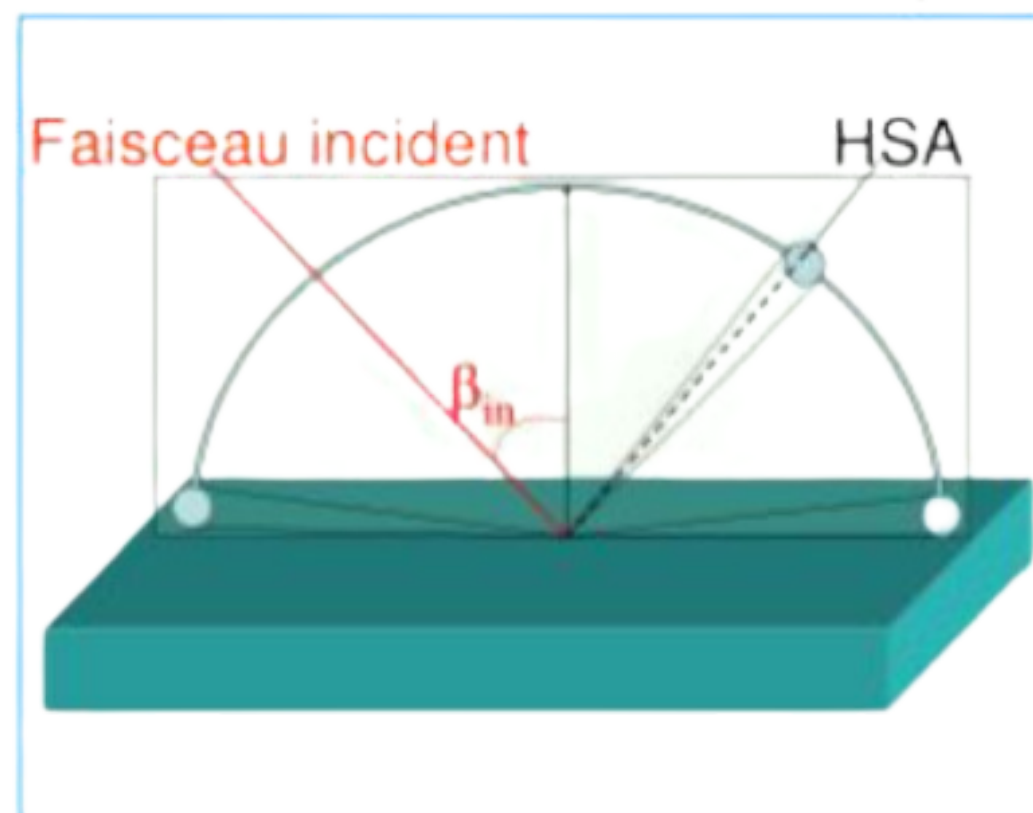
- Méthode expérimentale : mesure de l'intensité élastique $h_e = I_e/I_p$;
- Variation de l'énergie primaire des électrons: multi-modes EPES (MM-EPES).



RFA : analyseur à champ retardateur



HSA: analyseur hémisphérique



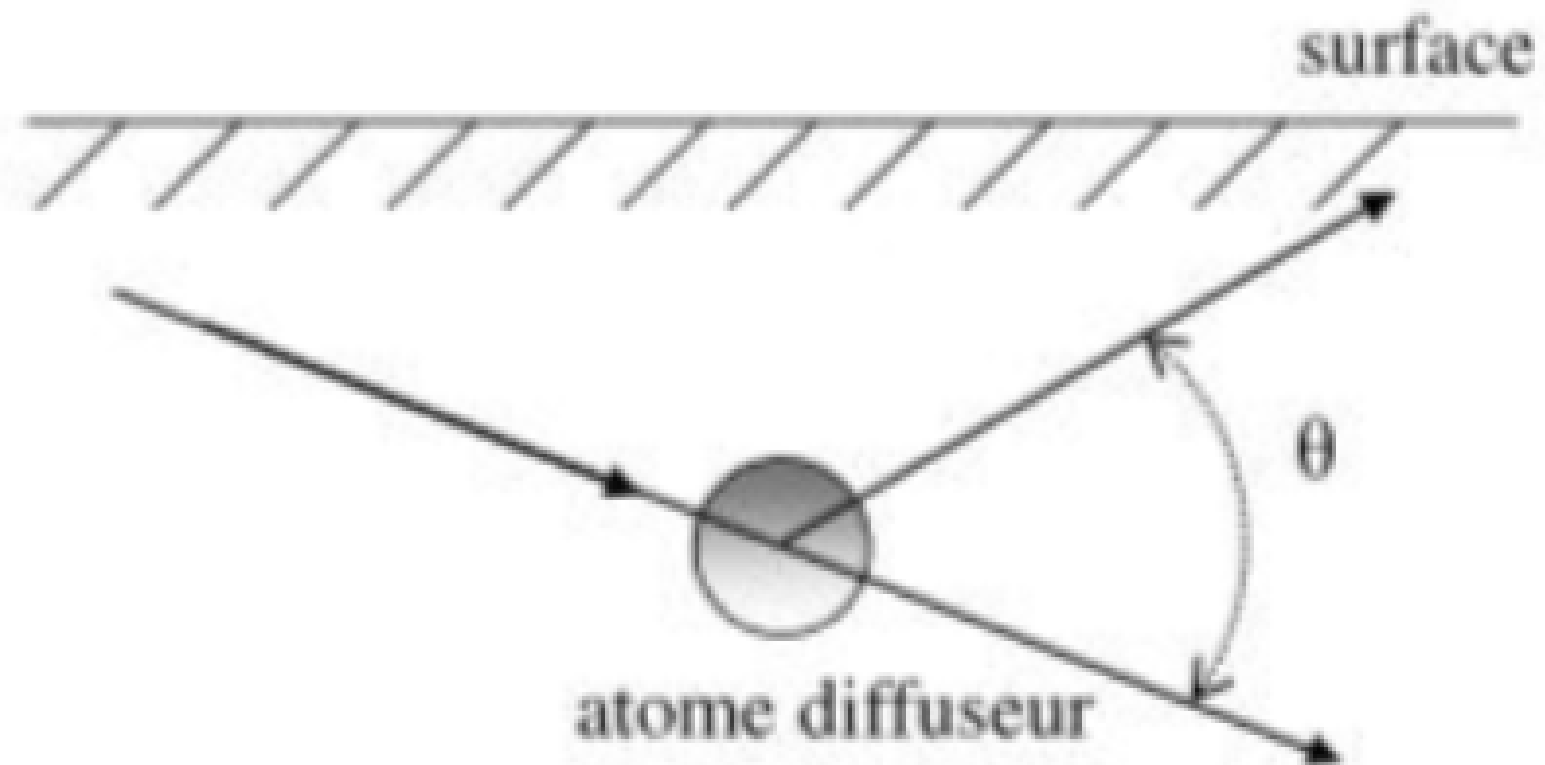
HSA tournant



**SIMULATION MC1 DÉCRIVANT
LE CHEMINEMENT DES
ÉLECTRONS ÉLASTIQUES**

Cheminement des électrons élastiques dans la matière

- Basée sur des interactions Coulombiennes avec les centres diffuseurs.
- Étude théorique dans le cadre de la mécanique quantique.
- A l'issue de l'interaction : déviation de l'électron d'un angle q déterminé au moyen d'une fonction $f(q)$ (amplitude de diffusion).



Simulation MC1

Détermination des libres parcours moyens des électrons

■ Formule de Bauer¹

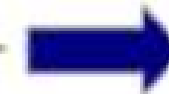
$$\lambda_e = \frac{1}{\sigma_T N_A}$$

σ_T : section différentielle totale de diffusion élastique

N_A : densité des atomes

■ Formule de TPP-2M²

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



Loi de Poisson

$$l_e = -\lambda_e \ln(r)$$

$$l_i = -\lambda_i \ln(r)$$

¹ E. Bauer, J. Vac. Sci. Technol. 7 (1970) 3

² S. Tanuma, C.J. Powell, D.R. Penn, Surf. Interf. Anal. 21 (1994) 165

Détermination du coefficient de réflexion élastique

$$\eta_e(E_p, \beta_{in}) = \frac{N_{él}}{N}$$

$N_{él}$: nombre d'électrons réfléchis élastiquement

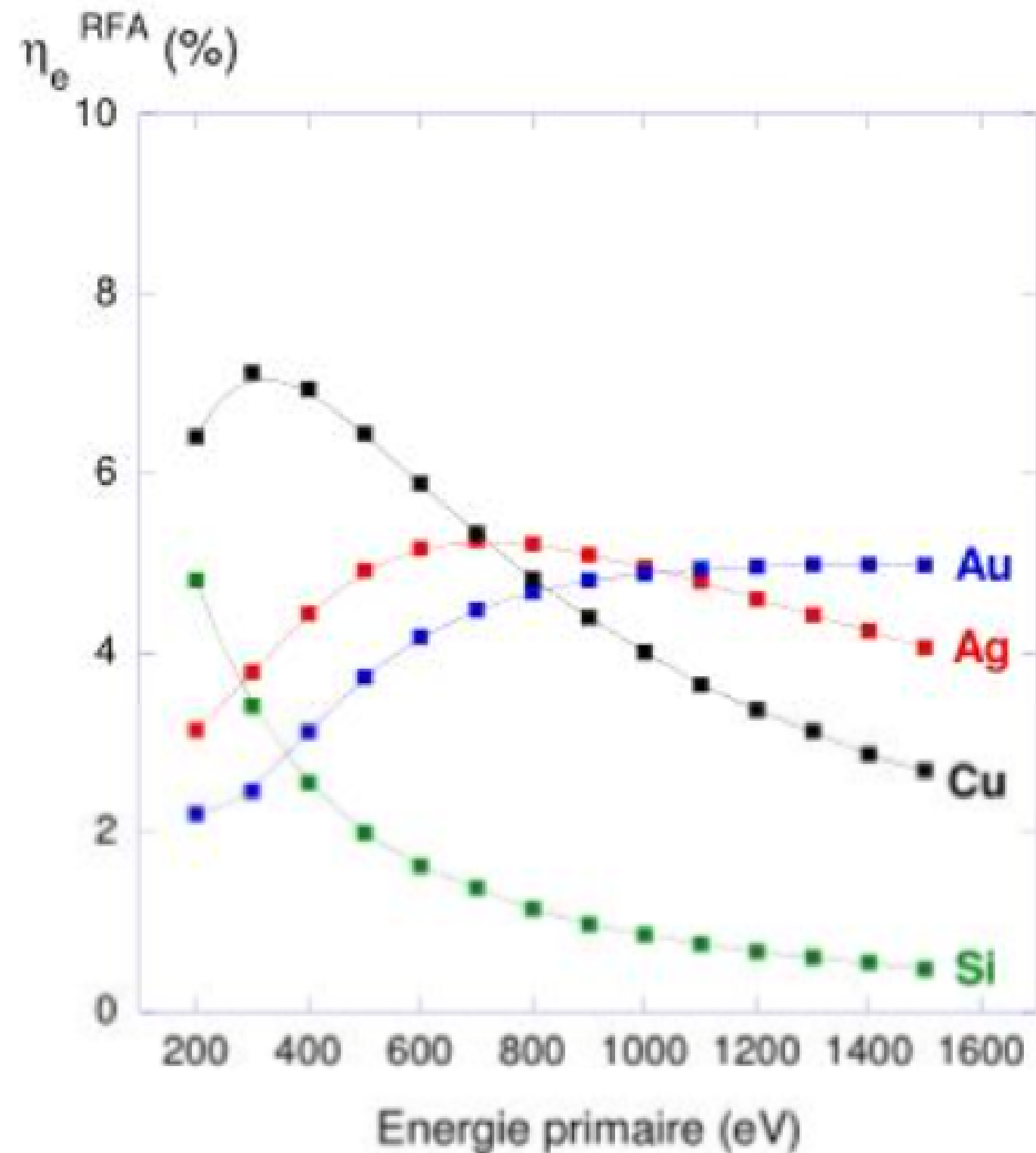
N : nombre total d'électrons ayant permis de réaliser la simulation (10^7 électrons)

- E_p : énergie primaire des électrons incidents
- β_{in} : angle d'incidence des électrons primaires
- les angles d'émission des électrons élastiques
- l'état de surface de l'échantillon à étudier



RÉSULTATS DE LA SIMULATION MC1

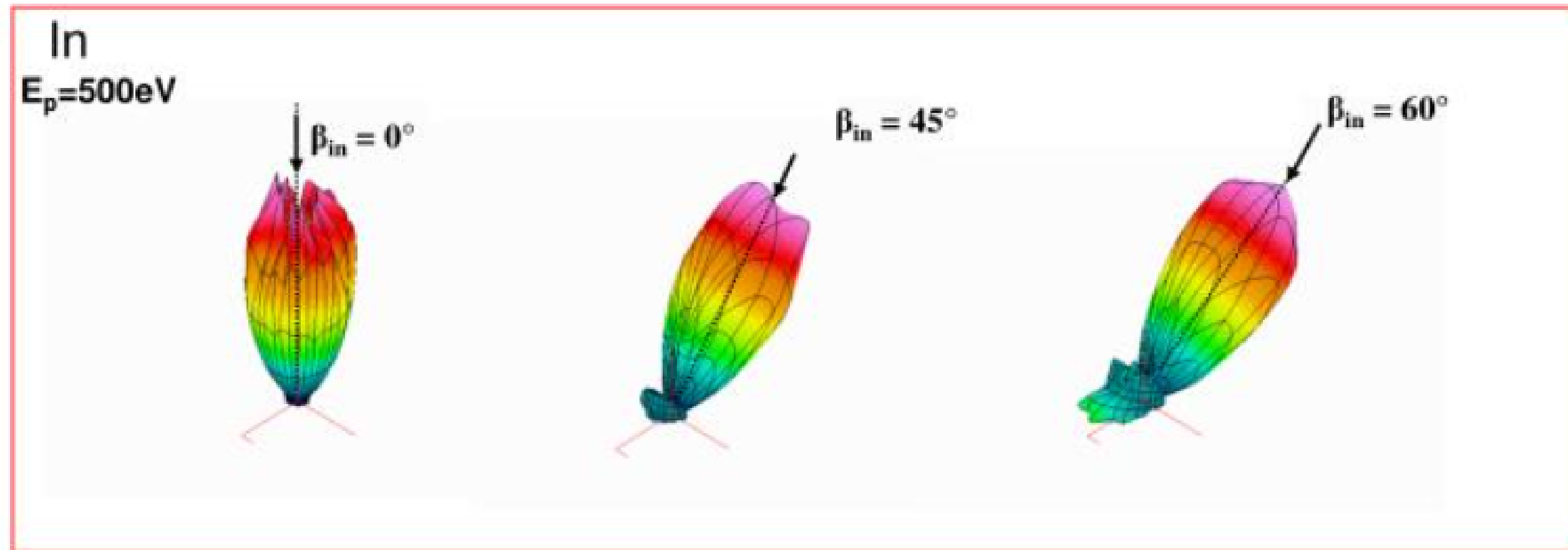
Dépendance énergétique



Très sensible:

- numéro atomique Z
- énergie primaire des électrons incidents

Dépendance angulaire



Distribution dépend des angles d'incidence et d'émission

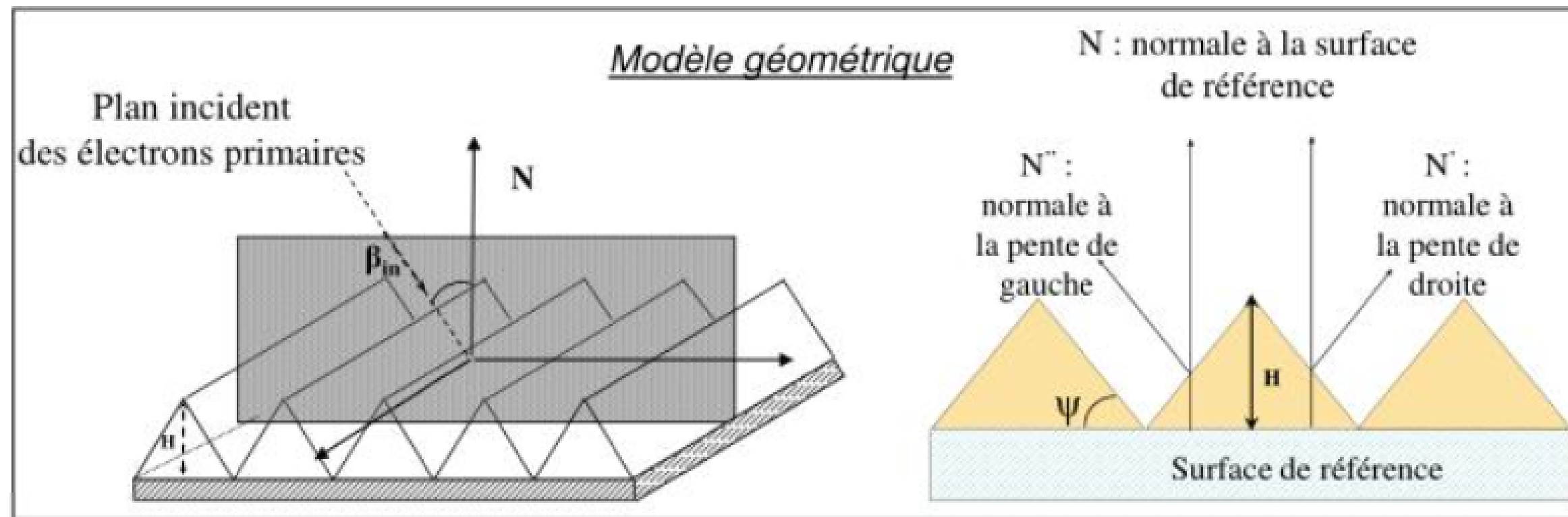
**APPLICATION MC1 APPLICATION DE LA
SIMULATION MC1 À UNE SURFACE
RUGUEUSE À L'ÉCHELLE MICROMÉTRIQUE**



Effet de la rugosité de surface sur les mesures EPES

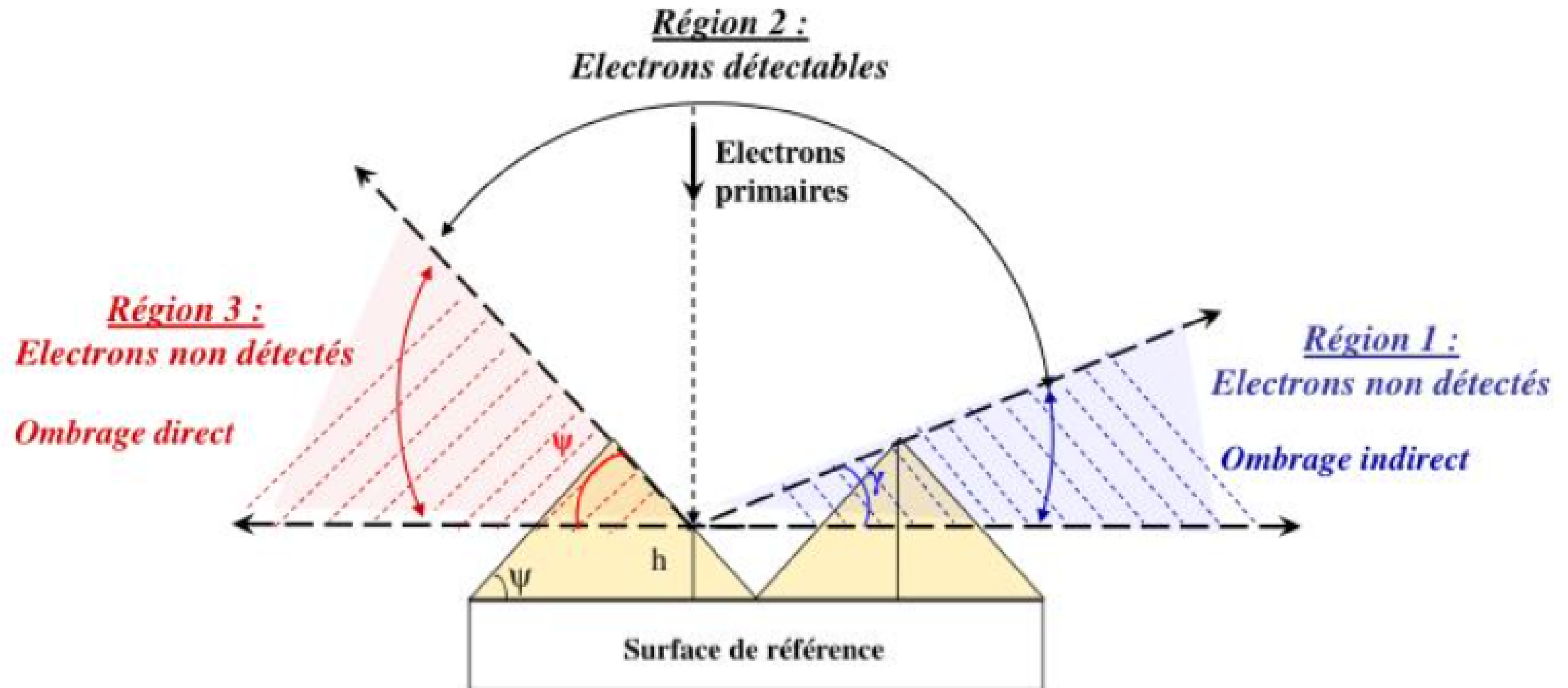
Code de simulation Monte Carlo Surface Rugueuse (MC1-SR) : adapté à une surface possédant des créneaux triangulaires.

Description de la rugosité de surface

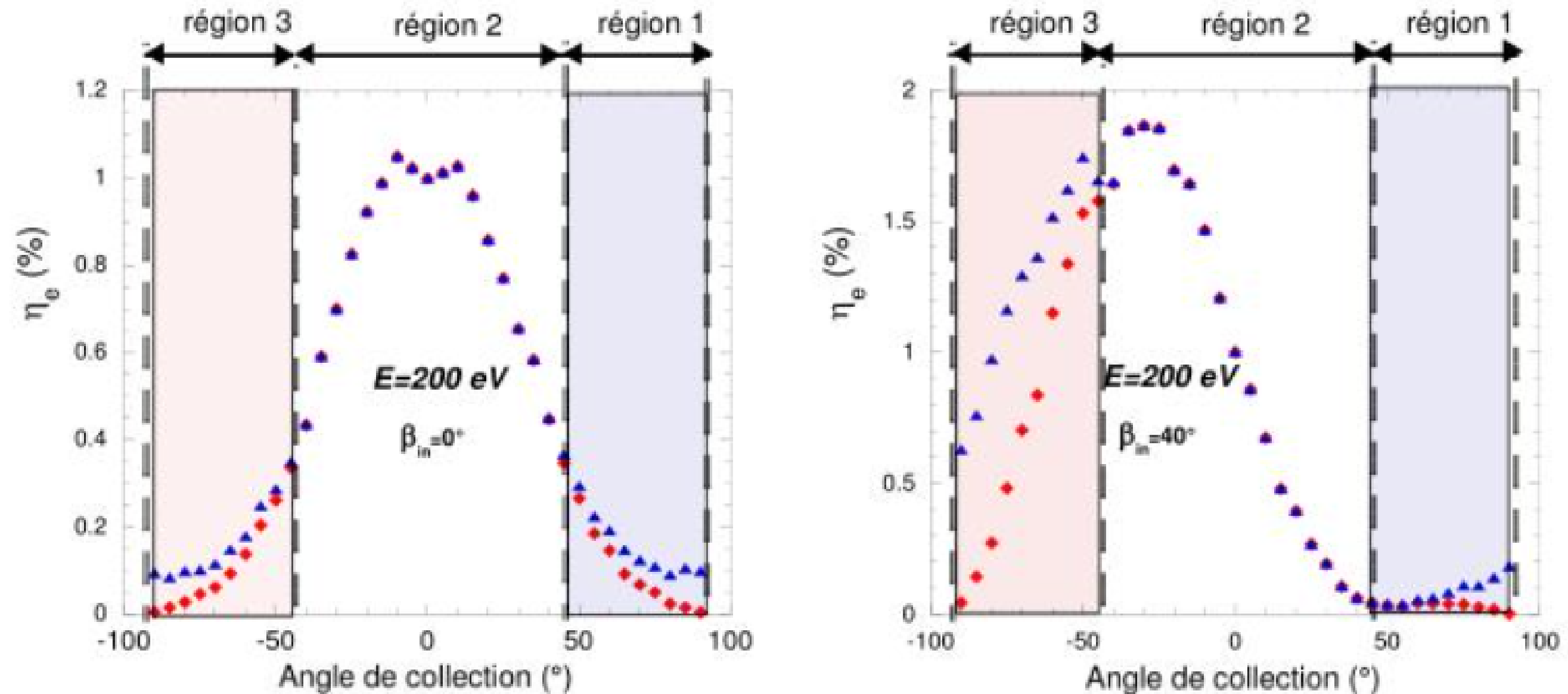


1. Apparition des phénomènes d'ombrage.
2. Position du premier impact des électrons sur la pente du créneau.

Définition de l'effet d'ombrage direct et indirect



Effet d'ombrage direct et indirect



η_e : surface rugueuse sans ombrage
 η_e : surface rugueuse avec ombrage

