

# THÈSE

présentée en vue de  
l'obtention du titre de

**DOCTEUR**

de

**L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE  
DE L'AÉRONAUTIQUE ET DE L'ESPACE**

**ÉCOLE DOCTORALE : MATÉRIAUX - STRUCTURES - MÉCANIQUE**

**SPÉCIALITÉ : Matériaux**

**Thomas TONDU**

**Étude de la pulvérisation ionique  
Application aux effets de jet de la propulsion plasmique**

Soutenue le 9 décembre 2005 devant le jury :

<b>MM.</b>	<b>C. SCHWEBEL</b>	<b>Président</b>
	<b>J.P. BOEUF</b>	
	<b>F. DARNON</b>	
<b>Mme</b>	<b>V. INGUIMBERT</b>	<b>Directeur de thèse</b>
<b>MM.</b>	<b>J.P. LANDESMAN</b>	<b>Rapporteur</b>
	<b>M. TOUZEAU</b>	<b>Rapporteur</b>



## *Remerciements*

Chaque doctorant a certainement une perception de la thèse qui lui est propre. Si je devais décrire la thèse de façon concise, je dirais que je l'ai perçue comme un exercice long et exigeant. Ainsi, si la curiosité scientifique est un moteur certain, elle ne suffit pas à faire avancer un sujet tous les jours durant trois années. Des soutiens sont indispensables, et ce sont tous ces soutiens, que je souhaite remercier.

Je remercie donc de façon évidente le Département environnement spatial de m'avoir accueilli pour effectuer ce travail de thèse. Mais tous ceux qui sont passés par le DESP savent qu'au-delà d'un laboratoire scientifique, le DESP est une sorte de petite famille. Et comme pour une famille, ce sont des gens que l'on ne choisit pas mais qui sont proches. Et comme dans toute famille il y a le chef de famille, l'oncle étrange, des grands frères, des membres que l'on connaît moins, d'autres que l'on apprécie énormément, des joies de familles histoires de familles, parfois des incompréhensions, des grandes occasions de familles... Mais en dehors de l'affection particulière que l'on peut avoir avec chaque personne prises séparément, il existe un attachement, une appartenance à tout le groupe.

Je tiens donc tout particulièrement, et c'est naturel, à remercier Virginie qui a été le premier témoin des différentes phases de mon travail, les meilleures et les moins bonnes. C'est un directeur de thèse d'une grande humanité, et malgré des différences certaines comme son caractère bavard opposé à ma grande discrétion, je peux dire aujourd'hui que j'ai eu de la chance d'avoir eu Virginie comme directrice de thèse. Et si Virginie était là pour m'aider à aller vers le détail dans mon travail, il y a toujours eu Franck, très disponible, qui m'aidait au contraire à prendre de la hauteur et appréhender les problèmes dans leur globalité. Mais là où Franck mérite le plus mes remerciements, c'est dans la liberté d'action qu'il m'a laissé durant ma thèse.

Je parlais de grands frères (pour ne pas dire vieux), je pense par exemple à Daniel, toujours motivant, toujours joyeux, toujours prêt à venir dans mon bureau pour discuter et communiquer sa bonne humeur. Mais bien sûr dans mon bureau, il y a également Josef. J'ai beaucoup apprécié nos discussions banales ou techniques mais toujours argumentées, contradictoires ou consensuelles. C'était pour moi l'occasion d'oublier pour un temps mes ions érodants, ou au contraire d'exprimer mes idées, mes problèmes techniques, ou mes petits bonheurs de chercheur.

Enfin, je ne peux pas ne pas parler de ceux qui m'ont soutenus moralement, car une thèse, ce n'est pas que de la science. Étrangement, c'est au près de deux personnes totalement différentes que j'ai trouvé le plus de soutiens au sein du département : Renaud très différent de moi, m'a apporté l'entrain, la fête, la motivation, du dynamisme. Nous n'avons pas le même regard sur la vie et c'est agréable de changer de regard. Athina au contraire est d'un caractère beaucoup plus proche du mien m'a apporté l'écoute, la sympathie, la générosité. C'est une vraie chance aussi de se sentir compris, de sentir que quelqu'un voit les choses comme soi.

Je ne dois pas oublier non plus mes amis toulousains, qui m'ont sorti de mon travail tous les WE, et qui m'ont ainsi apporté sans le savoir une aide précieuse pour franchir cet effort d'endurance qu'est une thèse.

Voilà pour les principales personnes que je tenais absolument à remercier. Mais il y en a bien d'autres qui méritent des remerciements, je citerais brièvement ceux qui m'ont aidé techniquement (à commencer par Jean-Pierre), et scientifiquement, mes collègues sportifs, joueurs de Go de cartes, et tous ceux que j'oublie.





# Résumé

L'utilisation de la propulsion à plasma sur les satellites et sondes spatiales, en remplacement de la propulsion chimique, permet de réduire significativement la masse d'ergol nécessaire aux manœuvres orbitales. Son champ d'application est donc amené à se développer. Cependant, les effets à long terme liés l'utilisation de la propulsion à plasma sur un satellite ne sont pour l'instant pas maîtrisés et difficilement prédictibles. En particulier, les propulseurs éjectent un faisceau d'ions Xénon énergétiques (quelques centaines d'eV) qui peut impacter certaines parties du satellite et conduire à de l'érosion des surfaces externes. Les produits ainsi érodés peuvent ensuite se redéposer et contaminer d'autres parties du satellite ce qui peut conduire à des baisses de performances, par exemple pour les surfaces optiques. Il est donc important de quantifier ce risque d'érosion / contamination, de manière d'une part à optimiser l'aménagement des propulseurs sur le satellite et d'autre part à s'assurer que les impacts à long terme sur le satellite sont acceptable.

Dans cette optique, nous avons développé à l'ONERA un moyen expérimental permettant d'étudier la pulvérisation ionique au moyen d'ions Xénon de quelques centaines d'eV. Durant cette thèse, cette installation expérimentale a été caractérisée pour optimiser les conditions d'utilisation de la source d'ion (de type Kaufman). En particulier, un travail approfondi a été mené sur la caractérisation et la compréhension du faisceau d'atomes neutres rapides produits par échange de charge. Ces neutres participent à l'érosion et leur flux ne peut pas être mesuré au moyen d'une sonde de Langmuir. Nous avons en particulier mis en évidence qu'une partie de ces neutres peuvent avoir une énergie supérieure à celle des ions quand ils sont produits dans la gaine électrostatique située en aval de la grille d'accélération de la source d'ion. Ainsi ils perturbent fortement les mesures de taux d'érosion. Pour pallier à ce problème nous avons mis au point un dispositif expérimental permettant de mesurer la participation de ces neutres à l'érosion. Nous avons ainsi obtenu des mesures de taux d'érosion non perturbées par le flux de neutres.

Affranchis des problèmes liés au fonctionnement de la source, nous avons étudié la mesure de taux d'érosion au moyen de microbalances à Quartz. Nous avons ainsi étudié le taux d'érosion de l'argent à incidence normale dans une gamme entre 50eV et 400eV, ainsi que l'influence de l'angle d'incidence sur le taux d'érosion. La mesure par QCM s'est avérée être une technique très performante permettant des mesures rapides et précises.

Nous nous sommes également intéressés à l'émission des produits d'érosion et à la contamination qu'ils produisent. Pour cela nous avons étudié l'émission directive au moyen d'un spectromètre de masse. Quant à la contamination, nous l'avons étudié au moyen de micro balances à quartz. Ces mesures ont été réalisées dans le cas de l'érosion d'aluminium. La spectrométrie de masse nous a également permis d'étudier l'émission issue d'une cible polymère. En effet nous nous sommes intéressés à la pulvérisation ionique du Kapton.

En parallèle de ces études expérimentales, nous avons étudié la pulvérisation par le biais de la simulation numérique. Nous avons développé un Code Simulant la Pulvérisation Ionique (CSiPI), basé sur l'approximation des collisions binaires. Ce code nous a servi de comparaison pour nos mesures expérimentales. Nous avons par exemple obtenu une excellente corrélation entre nos mesures de contamination ou de taux d'érosion et la simulation. Nous avons alors étudié la pulvérisation dans des conditions que nous n'avons pas

étudiées expérimentalement. En particulier, nous nous sommes intéressés à la forme des lobes d'émission. Pour cela, nous avons étudié l'influence des paramètres physiques expliquant leur forme. Nous avons en particulier mis en évidence l'importance des phénomènes de surface sur la direction des lobes d'émission.

Le passage d'études de matériaux en laboratoire à des matériaux réels est parfois difficile. En effet, les cibles réelles diffèrent parfois des cibles idéales étudiées par la simulation numérique ou par l'expérimentation. Nous avons ainsi mis en évidence tant par l'expérience que par la simulation la grande influence de l'état de surface (rugosité) des cibles. Nous avons ainsi expliqué par le raisonnement et pas la simulation des comportements a priori surprenants observés expérimentalement. Par ailleurs, nous avons observé expérimentalement une croissance de la rugosité d'échantillons de Kapton exposés au bombardement ionique.

Enfin, nous avons également mis en évidence par la simulation et par des mesures par spectrométrie de masse l'influence des ions implantés sur l'érosion. En particulier dans le cas de cibles légères, les ions implantés modifient les propriétés de surface et donc le taux d'érosion.

Cette thèse a permis de développer des outils expérimentaux permettant l'étude de l'érosion et de la contamination. Ainsi, en se basant sur des données expérimentales, nous avons validé notre code de simulation de la pulvérisation ionique et expliqué qualitativement l'influence des paramètres de cible et des ions sur la pulvérisation ionique.

Ces résultats permettent de maîtriser les paramètres à prendre en compte lors de la conception d'un satellite. En particulier, nous avons mis en évidence l'intérêt de prendre en compte le vieillissement des cibles du à l'implantation d'ions et au développement de rugosité.

# Table des matières

Partie A. Introduction	10
A.I. Contexte de la thèse	10
A.II. Problématique	20
A.III. La thèse	25
Partie B. La pulvérisation ionique	27
B.I. Introduction	27
B.II. Principe de la pulvérisation ionique	27
B.III. Taux d'érosion	29
B.IV. Préviation du taux d'érosion	33
B.V. Simulation BCA	37
B.VI. Physique des collisions binaires traitée par TRIM et CSiPI	45
B.VII. Réalisation d'un programme de simulation de cascades de collisions	48
B.VIII. Validation de CSiPI	52
B.IX. Conclusion	55
Partie C. Etude expérimentale de la pulvérisation Ionique	56
C.I. Introduction	56
C.II. Installation expérimentale	56
C.III. Neutres énergétiques	62
C.IV. Mesure de taux d'érosion par QCM	80
C.V. Emission et Contamination	90
C.VI. Conclusion	112
Partie D. Utilisation de la simulation numérique pour étudier l'émission	113
D.I. Introduction	113
D.II. Effet de l'énergie de surface sur l'émission	113
D.III. Effet de l'énergie des ions incidents	119
D.IV. Effet de l'angle d'incidence des ions érodants	120
D.V. Effets de la cible	124
D.VI. Effet de l'atome érodé	131
D.VII. Etude des cascades de collisions	133
D.VIII. Conclusion	146
Partie E. Pulvérisation de cibles réelles	147
E.I. Introduction	147
E.II. Effet de la rugosité sur le taux d'érosion	148
E.III. Effet de la rugosité sur le lobe d'émission	157
E.IV. Evolution de la rugosité	164
E.V. Evolution de la cible durant la pulvérisation ionique	184
E.VI. Conclusion	197
Partie F. Conclusion	198
Bibliographie	195
Annexes	





# Partie A. Introduction

Cette thèse effectuée au sein du département Environnement Spatial de l'ONERA avec un cofinancement du CNES a comme contexte général la propulsion plasmique et plus particulièrement la pulvérisation ionique produite par les propulseurs plasmiques sur les satellites en étant équipés. Cette introduction est l'occasion d'exposer le contexte général lié à la propulsion plasmique, c'est à dire son intérêt, son historique et les technologies concurrentes. Nous exposerons ensuite la problématique liée à la pulvérisation ionique qui a motivé cette thèse et enfin le contenu de ce manuscrit de thèse. En particulier nous verrons que les ions des bords du jet des propulseurs plasmiques risquent d'atteindre certaines parties des satellites et d'y provoquer de la pulvérisation ionique. Les travaux présentés par la suite traiteront de la mesure, de la compréhension et de la modélisation de la pulvérisation ionique dans le but de prévoir les effets des propulseurs plasmiques sur les satellites.

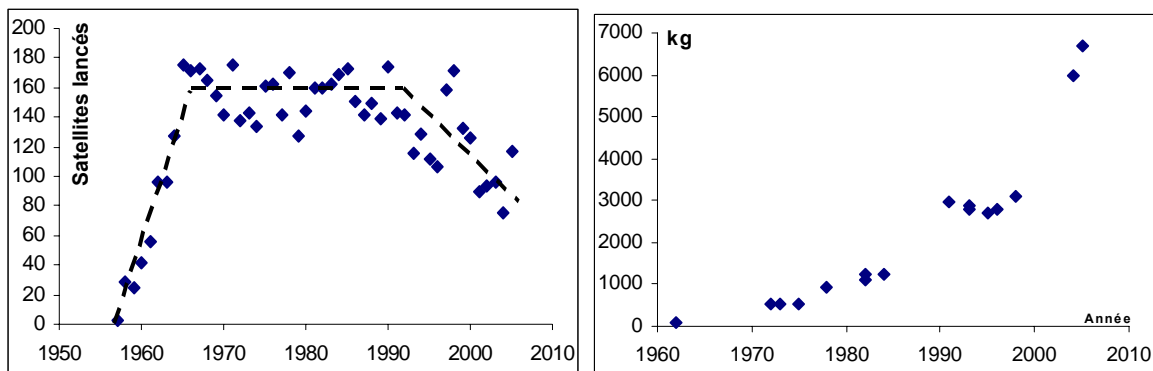
## A.I. Contexte de la thèse

### A.I.1. Tendances des nouveaux satellites

Depuis Spoutnik en 1957, l'homme envoie des satellites dans l'espace. Si dans un premier temps les satellites ont eu intérêt technologique et surtout idéologique, ils ont vite trouvé des applications notamment militaires. Aujourd'hui nous pouvons tous profiter des satellites par exemple pour les prévisions météorologiques ou encore les télécommunications.

Ainsi aux origines de l'ère spatiale, la rivalité entre l'Est et l'Ouest a fait les beaux jours de l'industrie spatiale, comme la Figure A-1 le montre, mais depuis l'effondrement de l'union soviétique le nombre de satellites lancés diminue.

Par contre depuis les années 1990 il y a un fort développement des satellites de télécommunication. Ces satellites sont commerciaux et sont donc soumis à une forte concurrence. Ainsi dans un but de rentabilité maximale ces satellites tendent à être de plus en plus puissants et ont des durées de vie croissantes de telle façon que leur masse augmente comme le montre le second graphique de la Figure A-1.



**Figure A-1 : Evolution du nombre de lancement de satellites depuis Spoutnik en 1957 jusqu'à aujourd'hui (gauche) et évolution de la masse des satellites de télécommunication**

Ces évolutions des satellites font que de nouvelles technologies sont développées pour optimiser leur rentabilité. Ainsi, la masse des satellites étant coûteuse au lancement, sa diminution est un souci permanent de la recherche spatiale. Or pour la majorité des satellites de télécommunications le carburant représente 50 à 60% de la masse initiale. C'est alors dans le but de réduire cette masse considérable de carburant embarqué que la propulsion électrique trouve son formidable intérêt.

En effet, la propulsion électrique permet un gain de masse puisqu'elle utilise son propulsif bien plus efficacement que la propulsion classique. Ainsi, la propulsion électrique est amenée à se développer rapidement dans les années à venir. Plusieurs technologies sont concurrentes, et les industriels européens ont choisi de s'orienter vers la propulsion dite plasmique ou à effet Hall. Nous nous intéresserons donc plus particulièrement à cette technologie.

## **A.I.2. La propulsion de satellite**

### **A.I.2.1. Rôles**

Tous les satellites modernes sont équipés de sous-systèmes propulsifs. Le sous-système propulsif a plusieurs rôles fondamentaux <sup>1</sup>:

- Le transfert de l'orbite lanceur vers l'orbite définitive (mise à poste) ou sur sa trajectoire interplanétaire pour les satellites d'exploration du système solaire quittant l'orbite terrestre.
- Le contrôle d'orbite et contrôle d'attitude
- La déorbitation en fin de vie du satellite
- La mise en orbite autour d'une planète dans le cas de missions scientifiques.

Pour un satellite géostationnaire de télécommunication, environ la moitié du carburant est consommée juste après le lancement pour atteindre son orbite de fonctionnement. Au contraire les opérations de contrôle de position et d'orientation ont lieu jusqu'à la fin de vie du satellite. D'ailleurs cette dernière correspond souvent à l'épuisement du carburant. Ainsi, le maintien à poste Nord/Sud correspond au second plus grand besoin en carburant. C'est sur ce genre de fonction nécessitant une faible poussée que la propulsion plasmique trouve ses premières applications. Toutefois la mise à poste des satellites pourrait être effectuée avec la prochaine génération de propulseurs plasmiques.

### **A.I.2.2. Caractéristiques des systèmes propulsifs**

Un système propulsif produit une poussée par réaction à une éjection de matière (gaz). Il peut être caractérisé par la poussée  $F$  qu'il produit. En première approximation, on peut considérer que :

$$F = \dot{m} \cdot V_s \quad [N] \text{ où } V_s \text{ est la vitesse d'éjection des gaz.}$$

L'efficacité de l'utilisation de la masse de carburant est décrite par l'impulsion spécifique  $I_{sp}$  exprimée en secondes. L'impulsion spécifique correspond au temps pendant lequel une masse de carburant peut produire une poussée égale au poids de cette masse sur terre.

$$I_{sp} = \frac{F}{g_0 \cdot \dot{m}} \quad [s] \text{ où } F \text{ est la poussée et } g_0 \text{ l'accélération standard de la pesanteur}$$

On peut alors calculer la masse de carburant nécessaire à un incrément total de vitesse  $\Delta V$  par la relation :

$$\Delta M = M_0 \left( 1 - e^{-\frac{\Delta V}{g_0 \cdot I_{sp}}} \right) \text{ Pour une masse au lancement } M_0$$

On voit donc qu'une forte impulsion spécifique permet de diminuer la masse des satellites.

Selon les technologies utilisées on aura des poussées différentes, des impulsions spécifiques différentes, des masses d'équipement (réservoir, tuyère, tuyauterie, générateurs solaires...) différentes, éventuellement des consommations énergétiques, et des coûts différents. Tous ces critères font que certains types de propulsion sont plus adaptés pour certaines applications que pour d'autres.

### **A.1.2.3. Techniques de propulsions**

On distingue plusieurs techniques de propulsions que l'on peut regrouper en plusieurs catégories.

**La propulsion chimique**, produit une poussée en éjectant à grande vitesse un gaz issu de la réaction chimique d'une ou plusieurs phases condensées. La phase condensée peut être solide, on parlera alors de Propulsion à propergol solide (produit métastable ou composite formé de produits oxydants et réducteurs). La phase condensée peut également être liquide (Monoergol : décomposition catalytique de produits métastables, diergol : réaction oxydo-réductrice entre deux liquides, ou mixte).

**La propulsion à gaz froid**, consiste à détendre un gaz comprimé.

**La propulsion thermique** vaporise puis détend un gaz liquéfié par un apport d'énergie. Cet apport d'énergie peut être solaire, nucléaire ou électrique (dans ce dernier cas on classera ce type de propulsion comme propulsion électrique)

**La propulsion électrique** consiste à utiliser de l'énergie électrique pour fournir une énergie cinétique à un propulsif. Cette transmission d'énergie peut s'effectuer par voie thermique en chauffant un gaz (on parle alors de propulsion électrothermique) ou en créant et accélérant un plasma. Cette seconde voie permet plusieurs technologies qui seront développées dans le paragraphe suivant.

Toutes ces technologies ont des performances<sup>1</sup> très différentes résumées sur la Figure A-2.

Technologie	Isp (s)	Poussée (N)	Vitesse d'éjection des gaz (km/s)
Gaz froid	50-170	0.05-20	
Chimique (diergol)	280-315	5-500	3 - 4
Thermique (nucléaire)	800	72000	
Electrique			
<i>Electrothermique</i>	500 - 1000	0.1-0.5	Jusqu'à 9
<i>Electrostatique (a grille)</i>	3000-3500	0.01-0.2	30
<i>Effet Hall</i>	1200-2500	0.02-0.3	20

**Figure A-2 : Comparaison des différents modes de propulsion**

La propulsion la plus utilisée est actuellement la propulsion chimique. Elle est bien maîtrisée et permet des poussées importantes. C'est en particulier la seule technologie actuellement disponible pour effectuer le transfert d'orbite des satellites géostationnaires, mais les progrès rapides de la propulsion électrique devraient rapidement lui permettre d'effectuer ces missions.

La propulsion à gaz froid a l'avantage de n'être pas contaminante et de permettre un excellent contrôle de la poussée. Par ailleurs c'est une technologie extrêmement simple. Elle est plus adaptée aux petits satellites.

La propulsion thermique est surtout prometteuse par le nucléaire qui n'est pas utilisé actuellement. Pourtant cette technologie est opérationnelle depuis plus de 20 ans et n'attend plus qu'une décision politique. En effet, ce genre de propulsion est pénalisé par les risques de retombées de produits radioactifs en cas de lancement raté.

Enfin la propulsion électrique n'offre pour l'instant que des faibles poussées, mais elle permet d'ores et déjà des gains de masse substantiels grâce à sa forte impulsion spécifique. Elle trouve un intérêt particulier pour les gros satellites à longue durée de vie. Dans ce cas l'alimentation électrique est fournie par des générateurs solaires.

Pour les satellites effectuant des missions interplanétaires, l'utilisation de propulsion électrique doit permettre de passer d'un mode balistique où le satellite se déplace grâce à une impulsion initiale, à un mode propulsé. On peut alors avoir une poussée continue donc une accélération continue, ce qui permet de réduire les temps de parcours. Ainsi Mars qui se trouve aujourd'hui à 6 mois de la terre pourrait être rapprochée.

Mais si la propulsion électrique permet de réduire la masse de carburant, elle nécessite une source d'énergie électrique. Or en s'éloignant du soleil l'énergie photoélectrique diminue et en augmentant la taille des générateurs solaires on reprend la masse économisée en propulsif. L'alternative est alors l'électricité nucléaire, mais les générateurs manquent encore de puissance. A titre d'exemple, à ce jour, le plus puissant générateur nucléaire utilisé en vol est le réacteur soviétique Topaz 1 utilisé en 1987, délivrant une puissance électrique de 5kW.

On voit donc que chaque technologie a ses points forts et ses points faibles. En général, une forte poussée correspond à une faible impulsion spécifique. L'avantage des propulseurs électriques est donc leur grande impulsion spécifique. Toutefois ces technologies sont jeunes et l'impulsion spécifique et la poussée sont amenées à augmenter.

## A.I.3. La propulsion électrique

### A.I.3.1. Intérêt

Comme nous venons de le voir, l'intérêt de la propulsion électrique réside dans sa forte impulsion spécifique. Cela permet d'utiliser des masses de carburant plus faibles pour une même impulsion (intégration dans le temps de la poussée). Ce gain d'impulsion spécifique par rapport à la propulsion chimique est obtenu par un apport d'énergie d'origine électrique qui permet d'atteindre des vitesses d'éjection des gaz plus élevées que dans le cas de la propulsion chimique classique.

Ainsi, alors que la vitesse d'éjection des gaz est limitée à quelques km/s par la thermodynamique de la réaction chimique, la propulsion électrique permet d'atteindre des vitesses d'éjection de plusieurs dizaines de km/s.

### A.I.3.2. Historique

L'histoire de la propulsion en général commence au XI<sup>ème</sup> siècle quand les Chinois fabriquent des fusées en remplissant des tiges de bambou avec de la poudre noire. Les poudres de charbon et de soufre étant réductrices et le salpêtre oxydant, on peut parler de propulsion chimique solide (parfois appelée propulsion à poudre).

Mais les concepts modernes de la propulsion sont nés au début du XX<sup>ème</sup> siècle avec des visionnaires comme Konstantin Eduardovitch Tsiolkovsky. En 1903 il publie *L'exploration de l'espace cosmique par des engins à réaction* que l'on peut considérer comme le livre fondateur de la conquête spatiale. En 1911 il mentionne pour la première fois dans une publication le concept de propulsion électrique. Tsiolkovsky était bien conscient de l'intérêt d'une grande vitesse d'éjection des gaz. En réalité il pensait à une propulsion par un flux d'électrons, en effet l'existence d'ions était alors encore débattue.

Robert Hutchings Goddard, autre grand nom de la propulsion et contemporain de Tsiolkovsky le précéda en publiant dès 1906 le concept de propulsion électrique. C'est la naissance du concept de la propulsion électrique. Choueiri<sup>2</sup> offre une bonne description des origines de ce concept. Si Goddard a lui aussi dans un premier temps envisagé un faisceau d'électron à la vitesse de la lumière, il a finalement opté pour un faisceau d'ions. Ainsi en 1917 il brevetait le premier propulseur électrostatique, ancêtre commun des propulseurs électriques modernes.

Nous venons de voir que les concepts ont été d'une étonnante précocité. Mais ce n'est qu'en 1947 que Ernst Stuhlinger mena des études sérieuses de faisabilité de la propulsion électrique sous la direction de Wernher Von Braun qui aurait dit « Je ne serais pas surpris si un jour nous allions vers Mars électriquement ». Mais la réalisation pratique était ardue, et les efforts des scientifiques se sont plutôt portés sur la course à l'espace entre russes et américains, course que la propulsion électrique ne pouvait pas faire gagner. Ainsi les études technologiques n'ont réellement commencé que quand on a été capable d'envoyer des satellites dans l'espace, c'est à dire dans les années 60. Plusieurs voies ont alors été explorées. Les articles de Martinez-Sanchez<sup>3</sup> et Jahn<sup>4</sup> permettent une bonne vue d'ensemble de la propulsion électrique. Nous allons citer les principales avant de voir avec plus de détails les technologies électrostatiques.

Parmi les principales technologies de propulsion électrique, on peut citer les technologies suivantes :

- Résitojet (chauffage des gaz d'éjection par une résistance)
- Arcjet (chauffage des gaz d'éjection par un arc électrique)

- Propulsion Ionique (gaz ionisé sous un potentiel électrique et extrait par un système de grilles polarisées)
- Propulsion Plasmique ou à effet Hall (Les grilles sont supprimées et on utilise un champ magnétique pour confiner une forte densité d'électrons en sortie de source)
- Propulsion à effet de champ : Un métal à basse température de fusion est ionisé par effet de champ
- Propulsion à force de Lorentz : c'est la force de Lorentz qui accélère le propulsif ionisé.

Ce sont les technologies électrothermiques, certes moins efficaces que les technologies électrostatiques ou magnétiques mais plus simples à mettre en œuvre qui ont le plus rapidement vu le jour. Ainsi les Résistojets qui ont équipé un satellite de l'US Air Force dès 1965, avant de trouver leurs premières applications commerciales en 1980 pour les contrôles de position et d'orientation de satellites géostationnaires. La technologie Arcjet quant à elle est utilisée sur satellites commerciaux depuis le début des années 1990 pour le contrôle Nord-Sud.

Mais les technologies offrant les meilleures perspectives sont les propulsions ionique et à effet hall. Ces deux technologies diffèrent peu et ont été étudiées dans les années 60 simultanément, à la fois en URSS et aux Etats-Unis. Les propulseurs ioniques ont également été étudiés en Allemagne (famille RIT) et en Angleterre (QinetiQ). Pour des raisons historiques, l'union soviétique s'est orientée vers la propulsion à effet Hall à cause des difficultés rencontrées pour l'élaboration des grilles nécessaires aux propulseurs ioniques, mais surtout suite aux succès du développement des sources à effet Hall. Quant aux américains, ils ont dû abandonner la propulsion à effet Hall suite à des restrictions budgétaires. Devant la difficulté de mise au point de cette technologie ils ont préféré se concentrer sur les propulseurs ioniques à grilles.

Depuis la chute de l'union soviétique en 1990, l'occident a découvert l'avancement russe dans le domaine de la propulsion à effet Hall (ou plasmique), avec plus de 120 propulseurs de la famille SPT (produits par Fakel) lancés depuis 1972<sup>3</sup>. Ainsi la fin des années 90 marque le début des utilisations commerciales des technologies plasmiques et ioniques. Depuis 1994 la série des satellites de télécommunication EKSPRESS (produits en collaboration russe et occidentale) sont équipés de propulseurs plasmiques de la famille SPT pour le contrôle de position Nord-Sud. Depuis, plus d'une dizaine de satellites commerciaux russe ou américains (Loral) sont équipés de SPT. En Europe, la SNECMA (groupe Safran) a entamé une collaboration avec Fakel depuis 1990 et a développé son propre moteur à effet Hall. Les producteurs européens de satellites Astrium et Alcatel proposent ces propulseurs sur leurs satellites. Ainsi la gamme des satellites InMarSat 4 est équipée de PPS1350 produits par la SNECMA, alors que la sonde SMART-1 également propulsée par un moteur PPS1350 explore la surface de la lune.

La puissance de ces propulseurs est limitée et ne permet pas encore d'effectuer le transfert d'orbite. La prochaine génération (SPT 140 et PPS5000) en cours de tests au sol en sera capable. Elle permettra la mise en orbite en 3 mois au lieu de 3 jours actuellement, mais le gain de masse est prometteur.

### **A.I.3.3. Technologies de la Propulsion Electrostatique**

La propulsion plasmique et la propulsion ionique sont deux technologies très proches l'une de l'autre. On peut les regrouper dans la famille des propulsions électrostatiques. En

effet, ces deux technologies sont basées sur l'ionisation d'un gaz et son éjection à grande vitesse grâce à un potentiel électrique. Nous allons nous attarder sur ces deux technologies.

Nous ne verrons donc pas en détail les propulsions électrothermiques qui sont plus une amélioration de la propulsion chimique qu'une rupture technologique.

Par ailleurs, nous n'exposerons pas non plus la propulsion à force de Lorentz qui certes est l'une des technologies les plus prometteuses (poussée et impulsion spécifique importantes), mais qui reste une technologie de laboratoire.

### A.I.3.3.1. Propulsion Ionique

La propulsion ionique dite à grilles est le mode de propulsion électrostatique permettant la plus forte impulsion spécifique. Son principe est d'ioniser un gaz sous un fort potentiel et de convertir son énergie potentielle électrique en énergie cinétique. Les ions peuvent être produits par bombardement électronique comme représenté sur la Figure A-3 ou par ionisation RF (Famille RIT). Dans le premier cas, les électrons sont produits par une Hollow Cathode et traversent la chambre de décharge pour finir par être collectés par les parois de l'anode. Le long de leur parcours, ils sont susceptibles d'entrer en collision avec des atomes de gaz propulsif et de l'ioniser.

Les ions ainsi produits sont extraits de la chambre d'ionisation grâce à une optique ionique constituée de deux grilles. La première est à un potentiel légèrement inférieur au potentiel de l'anode alors que la seconde est polarisée négativement et sert à améliorer l'extraction des ions. En sortie du propulseur, le jet d'ions est neutralisé par les électrons produits par une Hollow cathode.

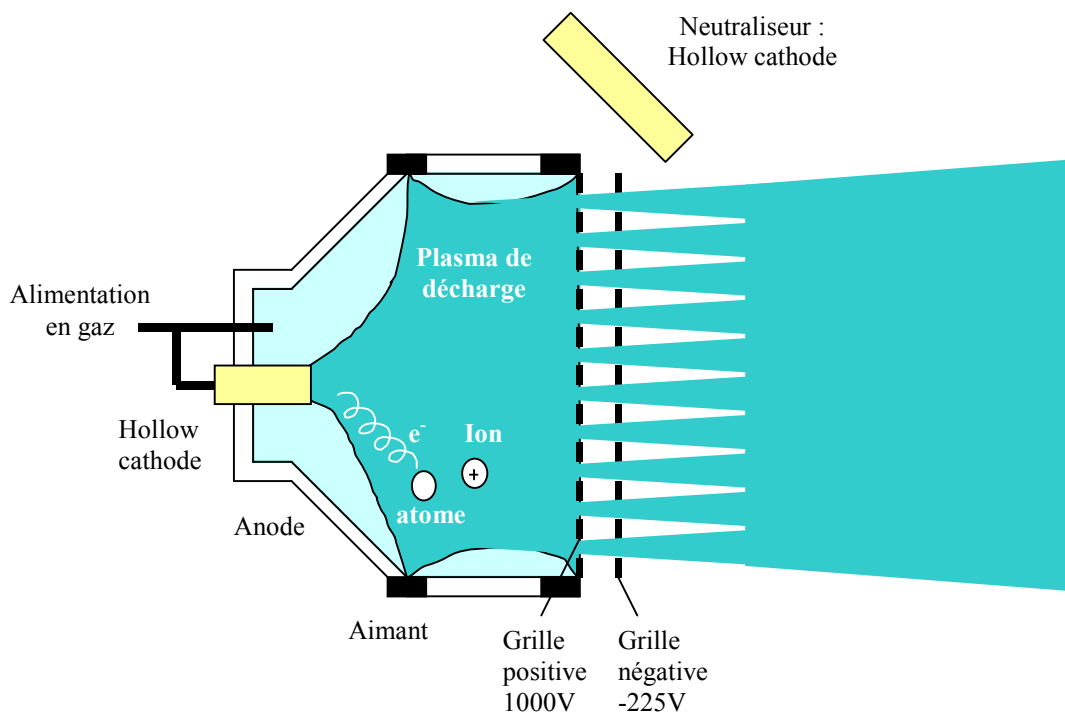


Figure A-3 : principe de la propulsion électrique à grilles

On est donc en présence d'un plasma à peu près neutralisé dans la chambre d'ionisation et dans le faisceau en sortie du propulseur. Par contre, entre les deux grilles le



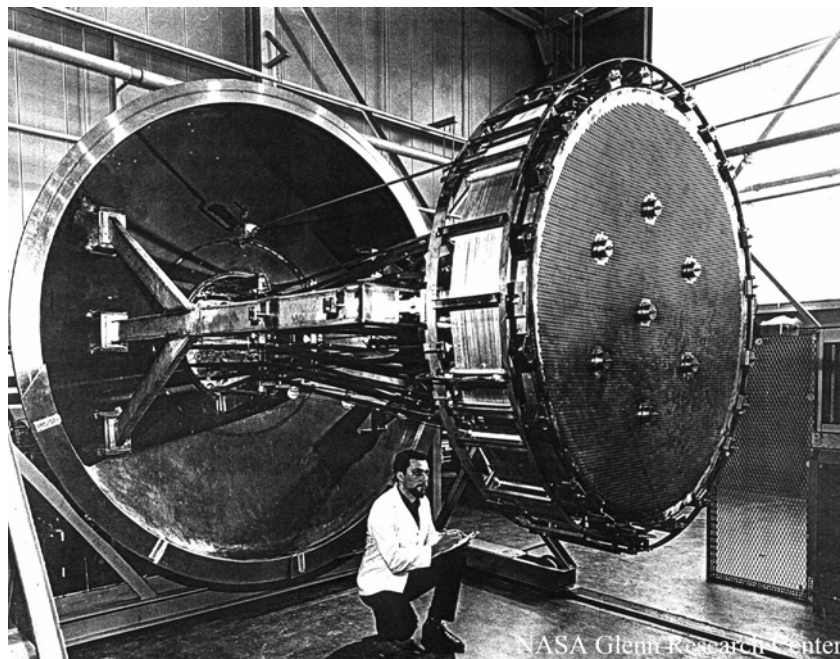
faisceau d'ions positifs n'est pas compensé par des électrons. Le flux d'ions est alors limité par la charge d'espace.

L'équation de Child-Langmuir établit la densité de courant d'ions  $j$  maximale pour une différence de potentiel  $V$  sur la distance  $d$  entre les grilles:

$$j = \frac{4\varepsilon}{9} \left( \frac{2q}{M} \right)^{1/2} \frac{V^{3/2}}{d^2}$$

$q$  étant la charge de l'ion et  $M$  sa masse,  $\varepsilon$  étant la constante diélectrique du vide.

Ainsi la poussée est limitée par cette limitation de flux. La seule solution pour augmenter la poussée est d'augmenter la taille du propulseur. Ainsi la NASA travaillait dans les années 60 sur des propulseurs de 150cm de diamètre comme celui que l'on peut observer sur la Figure A-4.



**Figure A-4 : Propulseur à grille géant : seule solution d'accroître la poussée**

Cette nécessité d'accroître la taille du propulseur pour accroître la poussée est un problème de ce type de propulsion. Par ailleurs le système constitué de deux grilles est le talon d'Achille de cette technologie. En effet, la seconde grille est soumise à une pulvérisation ionique par le faisceau d'ions. Ce problème limite la durée de vie de ce genre de propulseurs.

Par ailleurs, des poussières cosmiques sont susceptibles de se placer entre les grilles et de créer des courts-circuits.

La propulsion ionique est utilisée commercialement depuis 1997 sur le satellite PAS-5 produit par Hughes Space and Communication Company (aujourd'hui racheté par Boeing) pour PanAmSat Corporation. Il est équipé de propulseurs à grille de type XIPS (Boeing). Mais depuis 15 satellites commerciaux équipés de propulseur XIPS ont été lancés dont quatre ont perdu leurs propulseurs (ainsi que les propulseurs de secours), alors qu'un autre satellite utilise ses propulseurs de secours depuis la panne des propulseurs primaires. La cause soupçonnée de ces pannes est un court circuit entre les grilles du propulseur.

### A.I.3.3.2. Propulseur plasmique

Les propulseurs plasmiques utilisent le même principe de propulsion en créant des ions sous un potentiel élevé par bombardement électronique. Mais les grilles sont supprimées car les fonctions d'ionisation et d'accélération sont confondues. En supprimant les grilles, on supprime tous les problèmes qui leurs sont associés, à savoir la limitation de densité de flux et les problèmes de durée de vie des grilles. Ainsi, les propulseurs à effet Hall sont plus compacts que les propulseurs ioniques à grilles et ils sont plus robustes. C'est à dire qu'ils tombent bien moins souvent en panne.

Par contre, l'absence des grilles fait que la focalisation du faisceau d'ions est moindre que dans le cas d'un propulseur à grilles.

Sur la Figure A-5, on peut observer une représentation schématique d'un propulseur plasmique. Les grilles sont remplacées par une forte densité d'électrons en sortie du canal du propulseur. Ces électrons sont confinés au moyen d'un champ magnétique. En effet, le champ magnétique et le champ électrique croisés font tourner les électrons autour du canal annulaire du propulseur par effet Hall. Les électrons qui échappent à ce confinement sont attirés par l'anode polarisée positivement et produisent des ions par bombardement du gaz introduit au fond du canal du propulseur.

Les électrons sont produits par une hollow Cathode en sortie de propulseur qui sert également à neutraliser le faisceau d'ions.

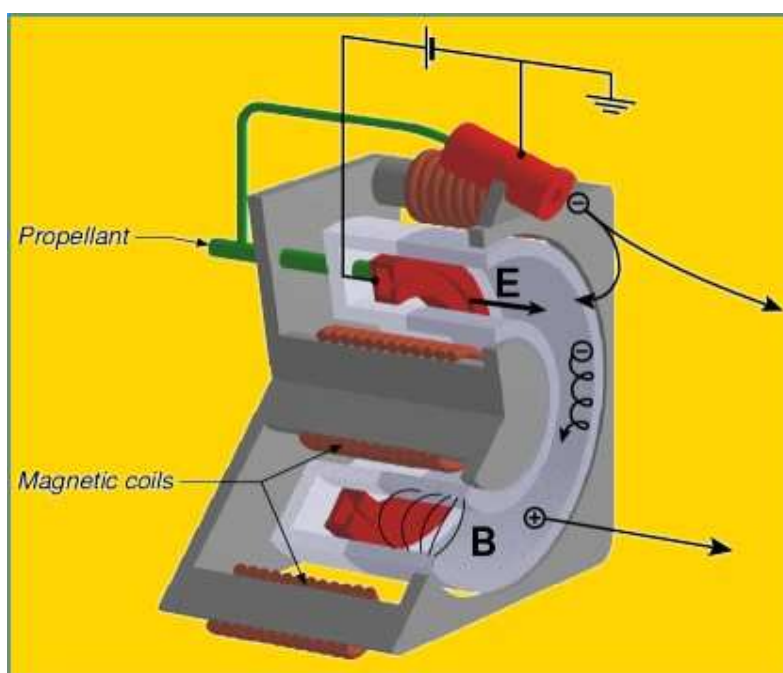


Figure A-5 : Schéma de fonctionnement d'un propulseur plasmique

### A.I.3.3.3. Propulsion plasmique ou électrique

Les deux technologies Ionique et Plasmique sont donc concurrentes. Pour des poussées équivalentes, la propulsion ionique a la meilleure impulsion spécifique. Mais la propulsion plasmique est plus robuste, plus compacte donc moins lourde, et surtout moins chère (alimentation électrique plus simple). Ainsi, la meilleure technologie dépend de la mission considérée. La NASA qui avait dans un premier temps opté pour le tout ionique a

révisé sa position et considère maintenant la propulsion plasmique pour certaines missions interplanétaires<sup>5</sup>.

Pour ce qui est de la propulsion de satellites en orbite terrestre, les deux technologies cohabitent, avec les XIPS ioniques équipant des satellites Boeing et les propulseurs à effet Hall équipant des satellites de Loral, Alcatel (si les lancements d'Astra1K et Stentor n'avaient pas échoué), d'Astrium ainsi que des satellites russes.

#### **A.I.4. Conclusion**

Les propulseurs à effet Hall forts de la longue expérience russe et de leurs bonnes performances associées à une robustesse que n'ont pas les propulseurs ioniques, sont amenés à équiper un nombre croissant de satellites. Toutefois cette technologie est encore jeune et ses effets sur les satellites sont encore mal déterminés.

## A.II. Problématique

Nous venons d'exposer le contexte général de la propulsion plasmique. Mais comme toute technologie neuve elle fait apparaître des problèmes nouveaux. Ainsi, nous allons voir que des ions du bord du faisceau d'ions sont susceptibles d'atteindre d'autres parties des satellites. C'est ce problème qui a motivé cette thèse. Nous allons donc exposer en détails la problématique qui a rendue nécessaire la thèse présentée par ce manuscrit.

### A.II.1. Divergence du jet d'un SPT

Nous avons vu dans la présentation du contexte que deux solutions semblent s'imposer pour la propulsion électrique : La propulsion ionique et la propulsion plasmique. Cette thèse entre dans le cadre de la prévision des effets de jet de la propulsion plasmique.

Cette dernière a comme avantage sa robustesse et son coût moindre. Mais l'un de ses principaux inconvénients est la divergence du jet d'ions. Cette divergence est caractérisée par l'angle  $\alpha_{95}$  du cône contenant 95% des ions. Cet angle dépasse en général  $40^\circ$  pour les propulseurs à effet Hall. Ainsi pour le PPS1350 on atteint  $\alpha_{95}=42^\circ$ . La Figure A-6 permet d'observer la divergence d'un propulseur de type SPT-100 mesurée au sol<sup>6</sup>.

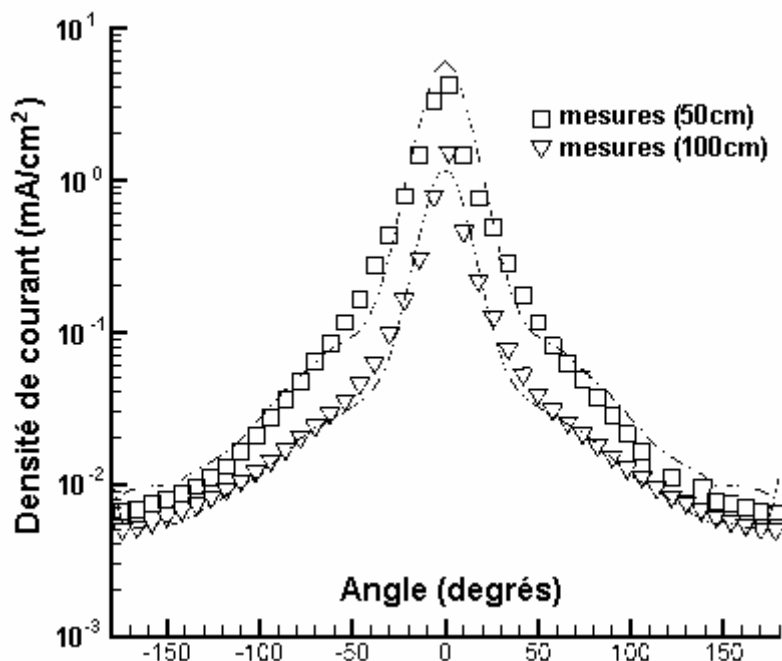


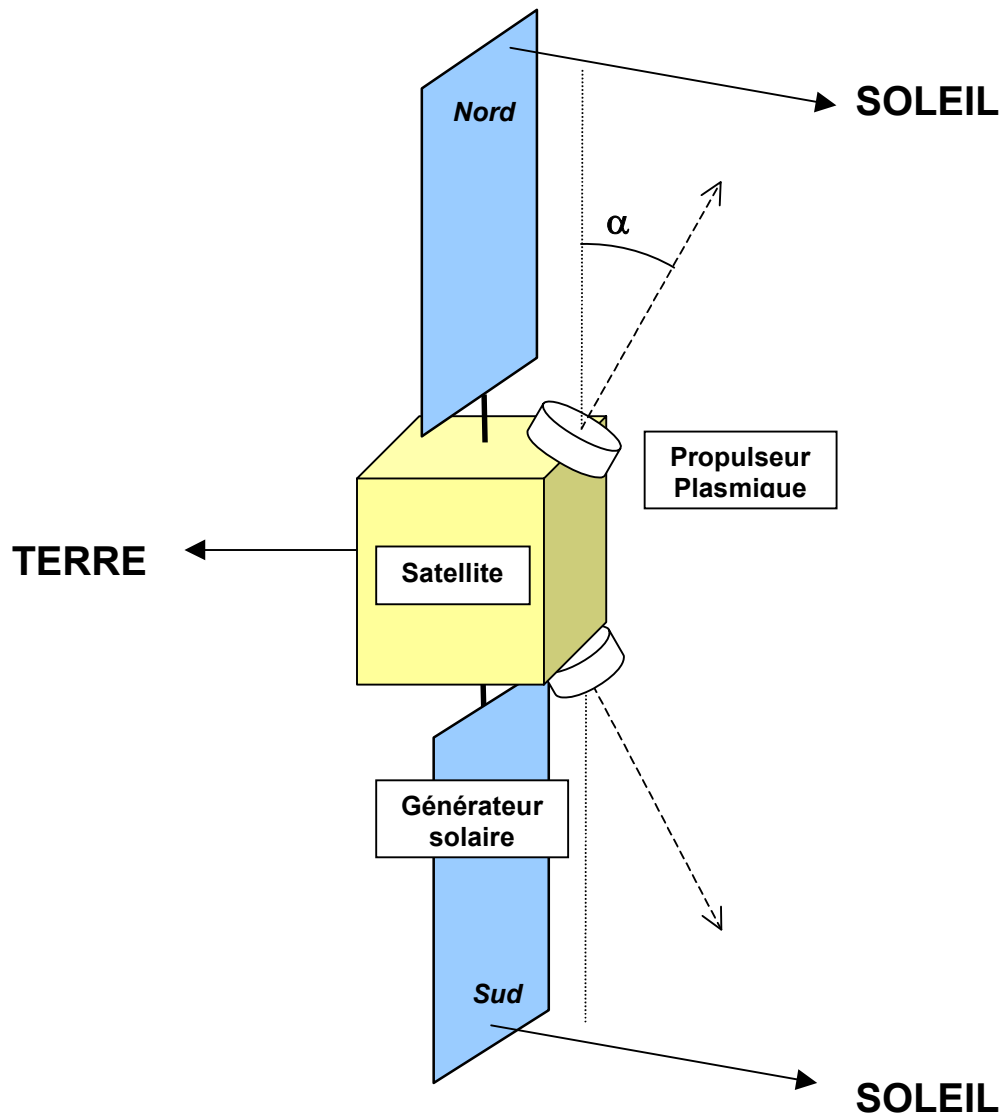
Figure A-6 : Divergence du faisceau d'ions issu d'un propulseur à effet Hall SPT-100<sup>6</sup>

### A.II.2. Géométrie des satellites

#### A.II.2.1. Satellites géostationnaires

Dans le cas d'un satellite géostationnaire la face appelée « terre » est toujours orientée vers la terre alors que les générateurs solaires sont situés sur les faces Nord et Sud. Ainsi quand des propulseurs plasmiques sont utilisés pour le contrôle de position Nord/Sud, ils sont

disposés comme sur la Figure A-7 et risquent d'entrer en interaction avec les générateurs solaires.



**Figure A-7 : Géométrie d'un satellite géostationnaire dont le contrôle Nord/Sud est assuré par des propulseurs plasmiques**

Malheureusement cette géométrie est impérative. En effet les instrumentations de communication pointent toujours en direction de la terre. Alors que les générateurs solaires sont toujours orientés vers le soleil et ne doivent pas pouvoir subir d'ombrage par le reste du satellite : ils sont donc obligatoirement placés sur l'axe Nord sud du satellite.

Afin de limiter l'exposition des générateurs solaires aux ions du propulseur, on peut augmenter la valeur de l'angle  $\alpha$  décrit sur la Figure A-7. Mais cette augmentation se traduit par une perte d'efficacité de la poussée. La détermination de l'angle  $\alpha$  optimum résulte donc du compromis entre de faibles interactions entre le propulseur et les générateurs solaires et une bonne efficacité de la poussée.

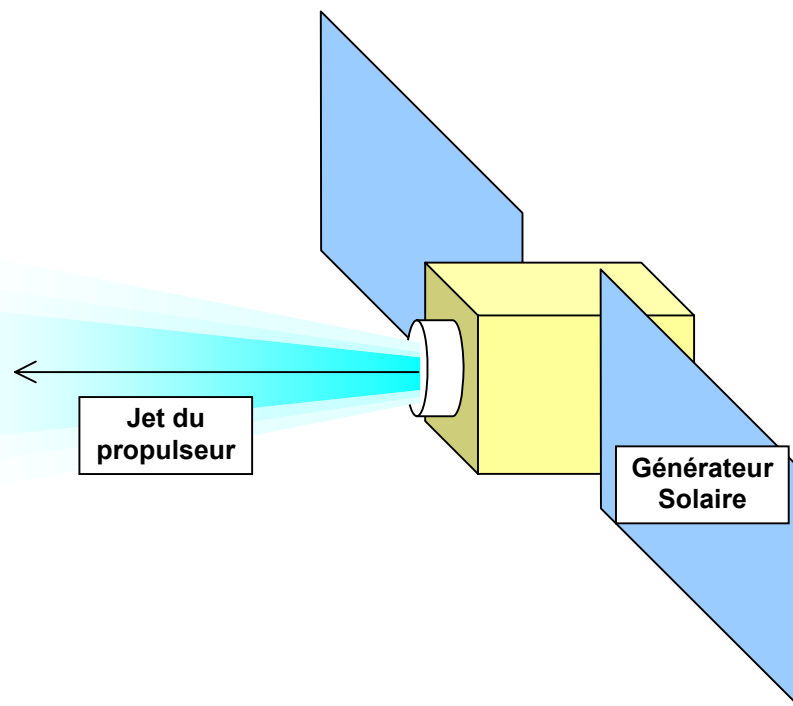
Pour déterminer la meilleure valeur de l'angle  $\alpha$ , il est indispensable de bien connaître les interactions entre les propulseurs et les générateurs solaires. La connaissance de ces

interactions permet également un meilleur dimensionnement des générateurs solaires (épaisseur de matériaux, position...). Ces dans la compréhension et la connaissance de ces interactions ion-satellite que réside la motivation de cette thèse.

*Remarque* : Suivant le moment de la journée, les positions relatives de la terre, du soleil et du satellite varie. Ainsi, à midi la face avant des générateurs solaires est exposée au jet, à 6h et 18h, c'est la tranche qui est exposée et à minuit, c'est la face arrière.

### **A.II.2.2. Cas d'une mission interplanétaire**

Les missions interplanétaires utilisant la propulsion électrique sont encore rares. On peut toutefois citer Smart-1, sonde européenne équipée d'un propulseur à effet Hall PPS1350. Dans ce cas, la propulsion a permis de quitter l'attraction terrestre pour atteindre une satellisation autour de la lune. Toutefois pour une telle géométrie les risques d'interaction du jet d'ions avec le satellite sont limités. La Figure A-8 montre en effet pour le cas de la sonde SMART-1<sup>7</sup> que les ions même divergents du faisceau d'ions ne risquent pas d'atteindre d'autres parties du satellite.



**Figure A-8 : Géométrie de la sonde SMART-1**

### **A.II.3. Les effets de jet**

Le jet du propulseur est un flux neutralisé d'ions énergétiques. Ces ions sont susceptibles de provoquer des phénomènes dommageables pour le satellite. Les effets de jet qui sont l'objet de cette thèse sont ceux provoqués par la pulvérisation ionique. Ainsi, une érosion de la surface des panneaux solaires est provoquée par les ions incidents, alors que les produits d'érosion sont susceptibles de se redéposer sur le satellite et provoquer de la contamination<sup>8</sup>.

### A.II.3.1. Erosion

Le phénomène d'érosion ionique sera étudié en détail dans la Partie B. Il s'agit d'une ablation de matière entraînée par une cascade de collisions initiée par un ion énergétique à l'intérieur d'une cible. Les conséquences possibles de l'érosion ionique ont une influence sur les générateurs solaires dont on peut observer une représentation schématique sur la Figure A-9.

Ainsi, à cause de l'érosion, on risque supprimer des couches minces. Par exemple dans le cas des connecteurs en argent des cellules solaires, on risque de perdre le courant produit par un certain nombre de cellules solaires.

Des couches minces filtrantes (UV) déposées sur les verres de protection des cellules solaires peuvent également être érodées et perturber fortement le fonctionnement des cellules solaire.

L'érosion peut également induire une modification des propriétés de surface des matériaux atteints. Ainsi la nature chimique des surfaces (par érosion sélective) ou encore la topologie peuvent être modifiées. Ces modifications de surface peuvent par exemple entraîner des modifications des propriétés optiques des verres de protection, ou des propriétés thermo-optiques des matériaux des générateurs solaires.

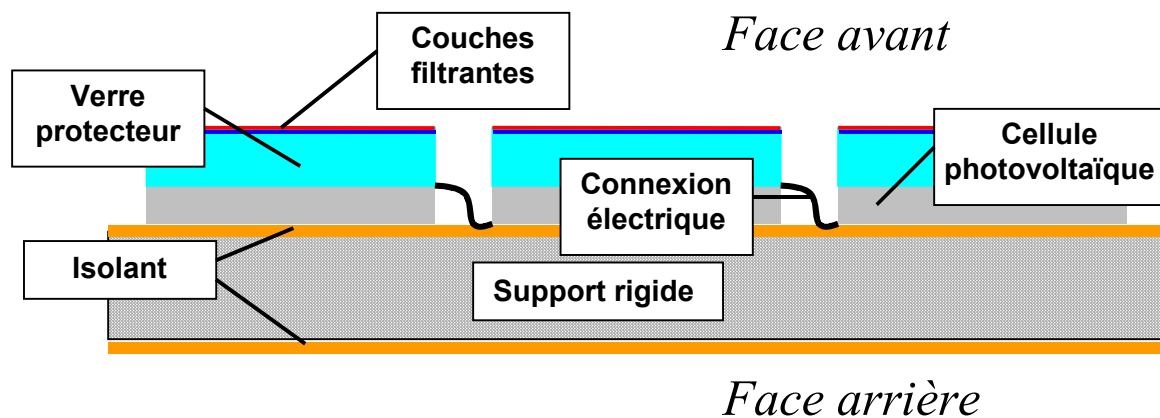


Figure A-9 Vue schématique en coupe d'un générateur solaire

L'érosion ionique risque donc d'entraîner une perte de puissance ou de limiter la durée de vie des générateurs solaires.

*Remarque* : Les propulseurs eux même sont soumis à l'érosion ionique. Ainsi, l'érosion du canal isolant des propulseurs plasmiques est également l'objet d'études<sup>9,10</sup>. Quant aux propulseurs ioniques à grilles, ils sont également soumis à l'érosion. Dans leur cas, ce sont les grilles qui sont érodées<sup>11</sup>.

### A.II.3.2. Contamination

Les produits d'érosion sont réémis et une fraction est susceptible de se redéposer sur le satellite. Cette déposition de produits d'érosion à la surface du satellite est appelée contamination. Elle modifie les propriétés de surface du satellite.

Parmi les effets néfastes pour le satellite, on peut citer le masquage d'une optique, la métallisation d'un isolant électrique ou encore la modification des propriétés thermo-optiques de la surface du satellite.

Remarques : Encore une fois, il faut également tenir compte de la contamination par les produits d'érosion issus du propulseur lui même. Cela reste vrai également pour les propulseurs ioniques à grilles<sup>12</sup>.

### **A.II.3.3. Conséquences**

Ces phénomènes d'interaction entre le jet du propulseur et le satellite sont lents et se produisent tout le long de la vie du satellite. Ils risquent d'entraîner une limitation de la durée de vie du satellite. Or, du fait de la courte histoire de ce type de propulsion, le retour d'expérience n'a pas permis de mettre en évidence de problèmes d'érosion et de contamination. Par ailleurs, la perspective d'utilisation de propulseurs plus puissants laisse craindre un accroissement de ces phénomènes d'érosion et de contamination.

Ainsi ces phénomènes demandent à être mieux connus, afin d'assurer des durées de vie correctes, d'optimiser le dimensionnement des satellites et en particulier la valeur de l'angle  $\alpha$ , définis sur la Figure A-7.

Il faut remarquer également que les conditions d'érosion ionique rencontrées dans le cadre de la propulsion plasmique sont très spécifiques :

- La gamme d'énergie : 300eV
- Angles d'incidence rasants
- Matériaux spécifiques : Polymères (isolants ), oxydes (verres de protection)
- Faibles flux d'ions

Ainsi, il est nécessaire d'acquérir des connaissances tant théoriques qu'expérimentales correspondant à ces conditions très spécifiques et pallier des manques de la littérature mis en évidence par I.D. Boyd et al.<sup>13</sup> pour ces conditions particulières. L'accumulation de données doit permettre de prévoir les effets de l'érosion et la contamination sur des satellites<sup>14,15,16,17</sup>. Or actuellement les résultats de ce genre de simulation sont fortement dépendants des données d'entrée (taux d'érosion en fonction de l'incidence des ions, de leur énergie, ainsi que la direction d'émission des contaminants).

Les mesures expérimentales de la littérature correspondant aux applications aux effets de jet de la propulsion plasmique sont rares. Par ailleurs, toutes les données de la littérature ne sont pas toujours cohérentes. Ainsi à titre l'illustration, Nackles et al.<sup>18</sup> cite dans le cas de l'érosion du molybdène par du Xénon à 100eV six mesures expérimentales homogènement réparties entre 0.02 et 0.17 atomes par ion.

Quant à la simulation, elle peut être efficace pour certains codes non disponibles, et est inefficace pour TRIM qui est un code disponible et que nous étudierons par la suite.

Toutes ces raisons ont motivé l'étude de la pulvérisation ionique appliquée aux effets de jet de la propulsion plasmique.



## **A.III. La thèse**

### **A.III.1. Objectifs**

La thèse effectuée au sein du département Environnement Spatial de l'ONERA a eu plusieurs objectifs. En amont, nous nous sommes intéressés à la compréhension des phénomènes intervenants dans la pulvérisation ionique. Alors qu'en aval, nous avons étudié les paramètres influant sur la pulvérisation ionique pour l'application des effets de jet de la propulsion plasmique sur des satellites géostationnaires. Enfin pour des raisons pratiques, nous avons travaillé au développement d'outils expérimentaux et de protocoles permettant d'établir des données utiles pour la production de satellites.

### **A.III.2. Démarche**

Afin d'atteindre nos objectifs, nous avons suivi une démarche mêlant expérimentation et modélisation. Dans un premier temps, nous avons développé des outils permettant d'observer expérimentalement la pulvérisation ionique, ce qui nous a permis de modéliser un certain nombre de phénomènes et de confronter l'expérience à ces modèles. Enfin, nous avons toujours gardé en tête l'application finale à savoir les effets de jet de la propulsion plasmique. Ainsi, nous nous sommes concentrés sur les phénomènes influants pour cette application.

### **A.III.3. Le manuscrit de thèse**

Ce manuscrit permet de répondre à bon nombre d'objectifs et développe la démarche entreprise.

Nous verrons ainsi dans un premier temps les notions nécessaires à la compréhension de la pulvérisation. Nous étudierons en particulier les événements qui interviennent lors des cascades de collisions produites par une particule énergétique entrant en interaction avec une cible. A une compréhension qualitative, nous associons une modélisation quantitative qui nous a permis de développer le Code de Simulation de la Pulvérisation Ionique CSiPI. Cet outil numérique servira par la suite à discuter les résultats expérimentaux.

Nous verrons par la suite l'étude expérimentale de la pulvérisation ionique que nous avons entreprise. Nous avons dans un premier temps étudié les caractéristiques de l'Installation Dédicée à l'Erosion sous un Flux d'Ions Xénon IDEFIXe. Ensuite, nous avons développé des techniques de mesure en temps réel de taux d'érosion, de contamination et d'émission en nous basant sur des microbalances à quartz et sur la spectrométrie de masse.

Après validation de CSiPI grâce à nos mesures expérimentales, nous l'avons utilisé afin de comprendre les résultats macroscopiques mesurés en raisonnant sur les événements microscopiques qui ont lieu au sein des cascades de collisions. Cette étude nous a permis de comprendre qualitativement les paramètres influants sur les lobes d'émission.

Enfin, riches de mesures expérimentales et de résultats de simulation, nous avons voulu nous rapprocher de la pulvérisation ionique telle qu'elle risque d'exister réellement sur

les satellites. En effet, nous avons délaissé les cibles idéales afin d'étudier des cibles réelles. Nous avons en particulier mis en évidence la grande influence de la rugosité sur la pulvérisation ionique, ainsi que celle des ions implantés dans la cible de pulvérisation.

# Partie B. La pulvérisation ionique

## **B.I. Introduction**

Le phénomène de pulvérisation ionique, c'est à dire l'éjection d'atomes ou groupes d'atomes d'une cible bombardée par une particule énergétique est connu depuis plus de 150 ans. On avait en effet remarqué que les ampoules à décharge se métallisaient. Cette métallisation était due au bombardement de la cathode par des ions produits par la décharge. On sait aujourd'hui que cette érosion est causée par des cascades de collisions d'atomes à l'intérieur de la cible qui conduit à l'éjection d'atomes de la surface de la cible. La pulvérisation ionique est caractérisée par le taux d'érosion défini comme le nombre moyen d'atomes éjectés de la cible par particule énergétique incidente.

Dans cette partie, nous allons développer ces notions, en détaillant les principes généraux menant à l'érosion ionique. Nous exposerons ensuite quelques détails de la physique à l'échelle de l'atome mis en jeu dans le phénomène de pulvérisation ionique dans le but d'expliquer les conséquences macroscopiques.

Nous verrons ensuite comment la pulvérisation ionique peut être modélisée, et nous étudierons en particulier l'approximation des collisions binaires, qui permet de simuler des cascades de collisions et ainsi de prévoir la pulvérisation ionique. Nous avons développé notre propre code de simulation de type Monte-Carlo basé sur cette approximation des collisions binaires. Nous avons développé notre propre code pour contrôler tous les paramètres physiques considérés. Certains logiciels similaires sont accessibles, mais pas leur code, ainsi on ne sait pas exactement comment ils fonctionnent. Nous verrons en détail la modélisation des cascades de collisions que nous avons retenue.

Plusieurs documents de références nous ont aidé à rédiger ce chapitre. Les articles de Zalm<sup>19</sup>, Thompson<sup>20</sup> et Smentkowski<sup>21</sup>. On peut s'y référer pour plus de précisions sur la physique des cascades de collisions.

## **B.II. Principe de la pulvérisation ionique**

### **B.II.1. Transfert de l'énergie de l'ion incident**

Quand une particule énergétique atteint une cible constituée d'atomes, elle interagit par répulsion électrostatique avec des atomes de la cible. Ces interactions sont appelées chocs ou collisions. Pendant un choc, une partie de l'énergie de la particule incidente est alors transférée de façon élastique à l'atome atteint. En première approximation on peut considérer que ces collisions sont dues aux répulsions électrostatiques entre les noyaux de la particule

incidente et de l'atome de la cible. Ce phénomène a été compris par Rutherford<sup>22</sup> dans le cas de la diffusion de Rutherford. On considère alors la répulsion entre les atomes positivement chargés. Mais pour les faibles énergies que l'on considère, les charges positives des noyaux sont partiellement écrantées par les nuages électroniques respectifs de la particule incidente et de l'atome de la cible. Pour des ions à basse énergie (<1keV), une grande partie de leur énergie est transférée à la cible de façon élastique en mettant en mouvement des atomes de la cible.

Toutefois des interactions entre les nuages électroniques peuvent également avoir lieu et provoquer du freinage inélastique de la particule incidente<sup>23</sup>. Ces interactions inélastiques se traduisent par l'ionisation locale de la cible le long du parcours de la particule incidente. Ce phénomène devient prépondérant quand l'énergie de la particule incidente est importante (plusieurs keV). Une description de tous ces phénomènes est présentée par la référence<sup>24</sup>.

Enfin les atomes heurtés par l'ion peuvent recevoir trop peu d'énergie pour quitter leur position. L'énergie qu'ils reçoivent crée alors un échauffement de la cible. Ainsi la particule incidente produit de l'énergie thermique. Ce phénomène intervient également quand une particule qui a transmis une grande partie de son énergie est piégée par un puits de potentiel dans la cible. En général, les ions sont également piégés par la cible et on parle d'implantation.

## **B.II.2. Cascade de collisions**

On a vu que les chocs élastiques mettent des atomes de la cible en mouvement. Ces atomes peuvent alors à leur tour entrer en collision et déplacer un certain nombre d'atomes. L'ensemble des déplacements d'atomes produit par une particule incidente est appelée : cascade de collisions. La cascade de collisions se développe jusqu'à ce que les atomes mis en mouvement atteignent une faible énergie suite à un certain nombre de collisions. Ils finissent alors par être piégé par un puits de potentiel au sein de la cible. Leur énergie résiduelle se transforme ainsi en énergie thermique.

Parmi les atomes mus dans la cascade de collisions, il arrive que certains sortent de la cible : C'est le phénomène de pulvérisation ionique. On caractérise ce dernier par la quantité d'atomes arrachés à la cible par ion incident : c'est le taux d'érosion. Les particules arrachées à la cible sont aussi caractérisées par leur direction et leur énergie : il s'agit de l'émission.

Dans le cas général, on considère qu'un atome en mouvement se trouve dans un environnement d'atomes immobiles. Cette approximation est correcte quand le flux d'ions est assez faible pour que les cascades dans une même zone de la cible soient considérées comme successives. Pour des flux d'ions élevés et des cascades d'envergure, deux cascades peuvent être simultanées et interagir. Quand la densité d'atomes de la cible en mouvement est grande, on atteint le régime de pointe qui provoque un accroissement de la pulvérisation ionique. De façon générale, nous considérerons que chaque cascade de collisions est indépendante, le taux d'érosion est alors indépendant du flux d'ions.

L'étude statistique des cascades de collisions permet de prévoir les effets du bombardement ionique. Cette étude menant à la théorie des cascades linéaires effectuée par Sigmund<sup>25</sup> fait référence.

## **B.II.3. Notion d'énergie de surface**

Les atomes au sein de la cible reçoivent des interactions stabilisantes de la part des atomes de leur entourage. Ainsi en sortant de la cible, ils subissent une déstabilisation. Ils doivent donc franchir une barrière de potentiel pour quitter la cible. Cette barrière de potentiel

est aussi appelée énergie ou potentiel de surface. Cette énergie de surface joue un rôle de filtre en énergie sur les particules susceptibles d'être érodées. Il s'agit donc d'un paramètre clé dans le phénomène d'érosion. Dans le cas des métaux, par exemple, on propose souvent une énergie de surface égale à l'énergie de sublimation. En effet, l'énergie de sublimation correspond à l'énergie qu'il faut fournir à un atome du cœur de la cible (donc en interaction avec cette dernière) pour le vaporiser à l'extérieur de la cible.

En première approximation, on peut considérer que l'énergie de surface est le paramètre qui fait qu'un matériau s'érode facilement ou difficilement.

Pour résumer, la pulvérisation ionique est le résultat d'une cascade de collisions au sein d'une cible engendrée par le transfert élastique de l'énergie cinétique d'un ion énergétique. Ce sont les atomes mus vers l'extérieur de la cible avec suffisamment d'énergie pour franchir le potentiel de surface de la cible qui provoquent la pulvérisation.

## **B.III. Taux d'érosion**

### **B.III.1. Définition du taux d'érosion**

La pulvérisation ionique se traduit par une perte de matière de la cible. On peut alors parler d'érosion ionique. Cette érosion est quantifiée par le taux d'érosion  $Y$  (ou rendement de pulvérisation). Il est généralement exprimé en atomes par ion.

$$Y = \frac{\text{Atomes érodés}}{\text{Ions incidents}}$$

Le taux d'érosion dépend de la cible, de l'ion incident, de son énergie et de son angle d'incidence. En effet les interactions entre l'ion et les atomes de la cible sont fonction de la nature de l'ion et de la cible. Ainsi, la cascade de collisions dépend fortement du couple ion-cible. Suivant les cas, la cascade pourra être très étendue ou restreinte. On étudiera par la suite plus finement les interactions entre l'ion et les atomes de la cible, mais on peut déjà retenir que la taille de la cascade est fonction de l'énergie de l'ion incident alors que sa localisation dans la cible est fonction de l'angle d'incidence.

Par contre on considère que le taux d'érosion est indépendant du flux d'ions tant qu'on n'atteint pas le régime de pointe. Le régime de pointe correspond à la mise en mouvement simultanée d'un grand nombre d'atomes dans la cible. Dans ce cas, l'érosion est accrue.

### **B.III.2. Influence de l'énergie de l'ion**

Comme nous l'avons vu, l'érosion ionique nécessite de transférer à des atomes de la cible une certaine quantité de mouvement suffisante pour les extraire du puits de potentiel que représente la cible. On comprend alors que plus l'ion incident est énergétique plus il aura d'énergie à transmettre aux atomes de la cible. La cascade sera alors plus vaste et la probabilité de fournir à des atomes l'énergie nécessaire à l'érosion sera d'autant plus importante. Et inversement, il existe une énergie seuil en dessous de laquelle l'ion est

incapable de transmettre assez d'énergie pour provoquer de l'érosion ionique. Il s'agit du seuil d'érosion.

Toutefois il se trouve que la section efficace de collision entre un ion incident et un atome de la cible diminue quand l'énergie de l'ion croît. Ainsi, à partir d'une certaine énergie, le taux d'érosion chute puisque l'énergie de l'ion est transférée aux atomes de la cible en profondeur. Les atomes déplacés ont alors une plus faible probabilité d'atteindre la surface de la cible. La Figure B-1 illustre expérimentalement ce phénomène dans le cas du bombardement du cuivre par des ions  $Xe^+$  selon Oeschner<sup>26</sup>.

Dans les cas qui nous intéressent, l'énergie des ions est de quelques centaines d'eV, donc très inférieure à l'énergie produisant le maximum de taux d'érosion. Ainsi, on peut considérer qu'au-dessus du seuil d'érosion (quelques dizaines d'eV) le taux d'érosion croît avec l'énergie des ions incidents.

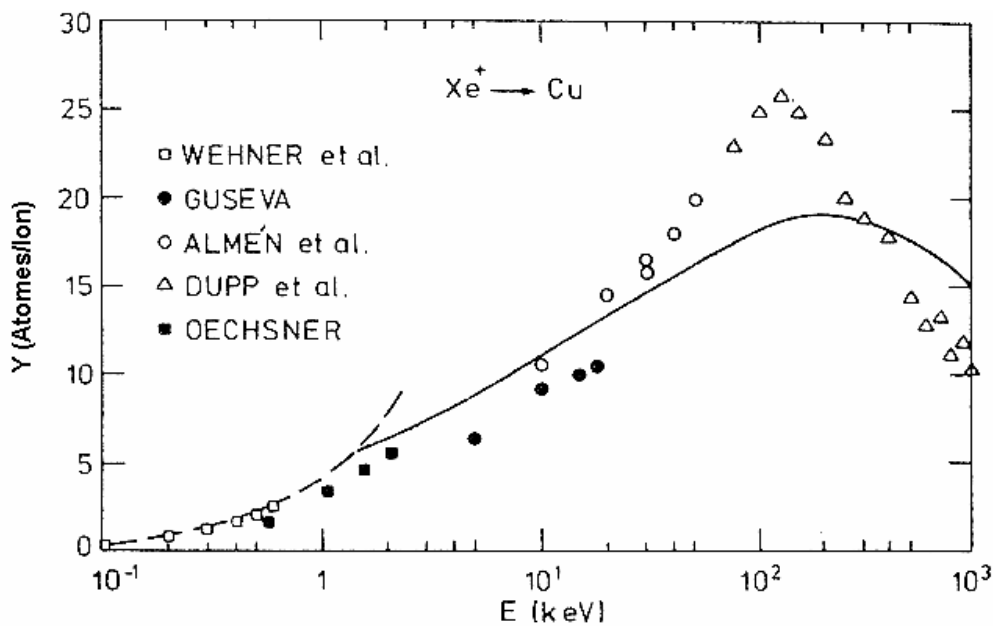
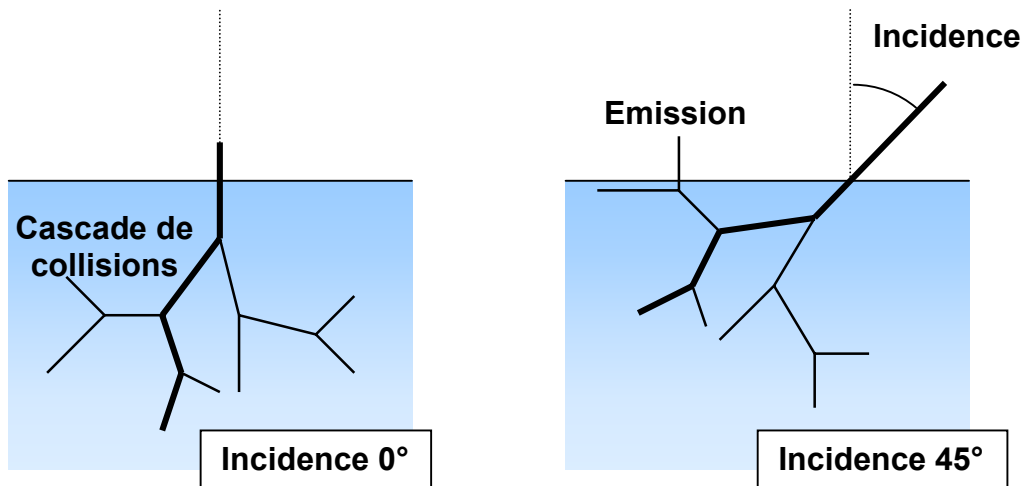


Figure B-1 : Effet de l'énergie de l'ion incident sur le taux d'érosion

### B.III.3. Influence de l'angle d'incidence

On définit par convention l'angle d'incidence d'un ion comme étant l'angle formé par la direction de l'ion et la normale à la cible. Ainsi, une incidence de  $0^\circ$  est une incidence normale et les incidences élevées sont des incidences rasantes.

L'incidence a une forte influence sur le taux d'érosion. En effet, quand l'incidence augmente, la cascade de collisions est rapprochée de la surface de la cible. On augmente alors la probabilité d'arracher des atomes de la cible. La Figure B-2, illustre ce phénomène, en montrant qu'une même cascade a une plus forte probabilité de provoquer de l'érosion ionique à incidence  $45^\circ$  qu'à incidence  $0^\circ$ . Sur la Figure B-2, la trajectoire de l'ion est représentée en gras et celle des atomes en traits fins.



**Figure B-2 : Erosion par une même cascade à incidence 0° et 45°**

En général, un ion transfère la totalité de sa quantité de mouvement à des atomes de la cible, et finit par y être implanté. Toutefois il peut arriver qu'après un certain nombre de collisions il ressorte de la cible en conservant une fraction de son énergie initiale. La Figure B-3 présente trois cas pour lesquels toute l'énergie de l'ion n'est pas déposée dans la cible.

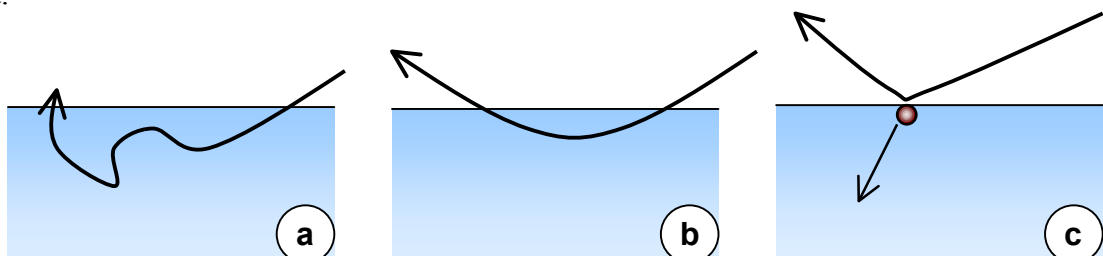
Le cas a correspond à un ion qui quitte la cible après un grand nombre de collisions avec les atomes de la cible. Cette émission provient d'un grand nombre de déviations aléatoires durant les chocs. Dans ce cas, l'ion sort de la cible en ayant déposé une grande partie de son énergie dans la cible.

Le cas b correspond à une trajectoire particulière à l'intérieur de la cible qui fait qu'en quelques chocs l'ion est redirigé vers l'extérieur de la cible.

Le cas c enfin est un cas extrême pour lequel l'ion ne pénètre pas dans la cible et rebondit sur cette dernière. Il transfère alors très peu d'énergie (dans son unique choc).

Si l'ion ne dépose pas toute son énergie dans la cible, l'énergie disponible pour déplacer des atomes et leur permettre de quitter la cible est diminuée d'autant. Or pour des incidences rasantes, les interactions de l'ion avec la cible peuvent se réduire à un unique choc. Dans ce cas seule l'énergie transférée lors du premier choc est transmise à la cible.

On comprend aisément que la probabilité pour un ion de quitter la cible sans avoir déposé toute son énergie croît avec l'angle d'incidence, puisque la déviation totale nécessaire décroît.

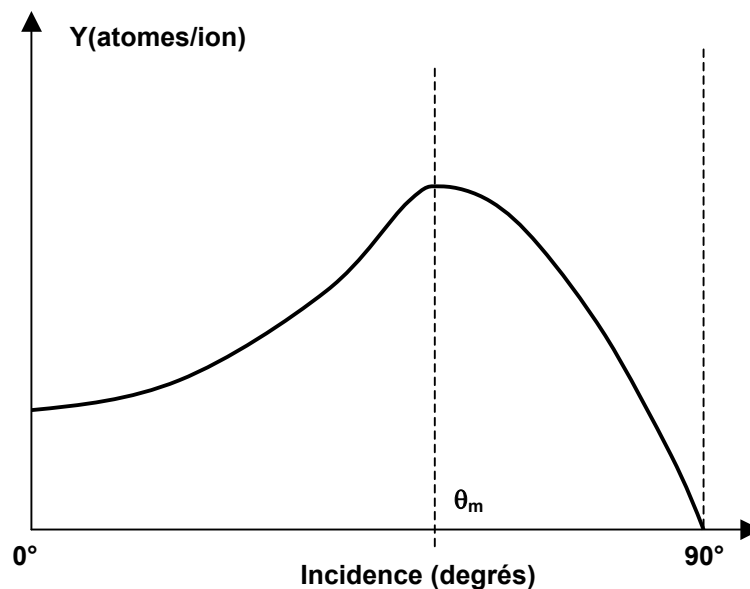


**Figure B-3 : Trois trajectoires de l'ion durant la cascade de collisions pour lesquelles l'ion ne dépose pas toute son énergie dans la cible**

Ainsi, quand l'angle d'incidence croît, deux phénomènes antagonistes s'opposent. Le rapprochement de la cascade de collisions de la surface tend à augmenter le taux d'érosion

alors que les rebonds sur la surface tendent à le diminuer. Il existe donc un angle d'incidence  $\theta_m$  à partir duquel les rebonds l'emportent sur l'augmentation du taux d'érosion. La probabilité de rebond est fonction de la nature des atomes de la cible et de l'ion. Plus les atomes de la cible sont lourds plus les rebonds sont probables et inversement, plus l'ion est léger, plus les rebonds sont probables. Ainsi, plus les atomes de la cible sont légers, plus l'angle d'incidence  $\theta_m$  est faible et plus l'érosion relative  $Y(\theta_m)/Y(0^\circ)$  correspondante est faible. Les mesures d'Oeschner<sup>26</sup> illustrent ces phénomènes.

La Figure B-4 représente l'allure générale de la courbe décrivant le taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence. On y observe un minimum local d'érosion à incidence nulle. Ensuite, le taux d'érosion croît quand l'angle d'incidence croît. En première approximation on peut estimer que le taux d'érosion croît en  $1/\cos(\theta)$  où  $\theta$  est l'angle que fait le faisceau d'ions avec la normale de l'échantillon. En effet, la distance de la cascade avec la cible peut grossièrement être approximée comme étant proportionnelle à  $\cos(\theta)$ . Sigmund dans la théorie des cascades linéaires prévoit un taux d'érosion en  $\cos^{-u}(\theta)$ .

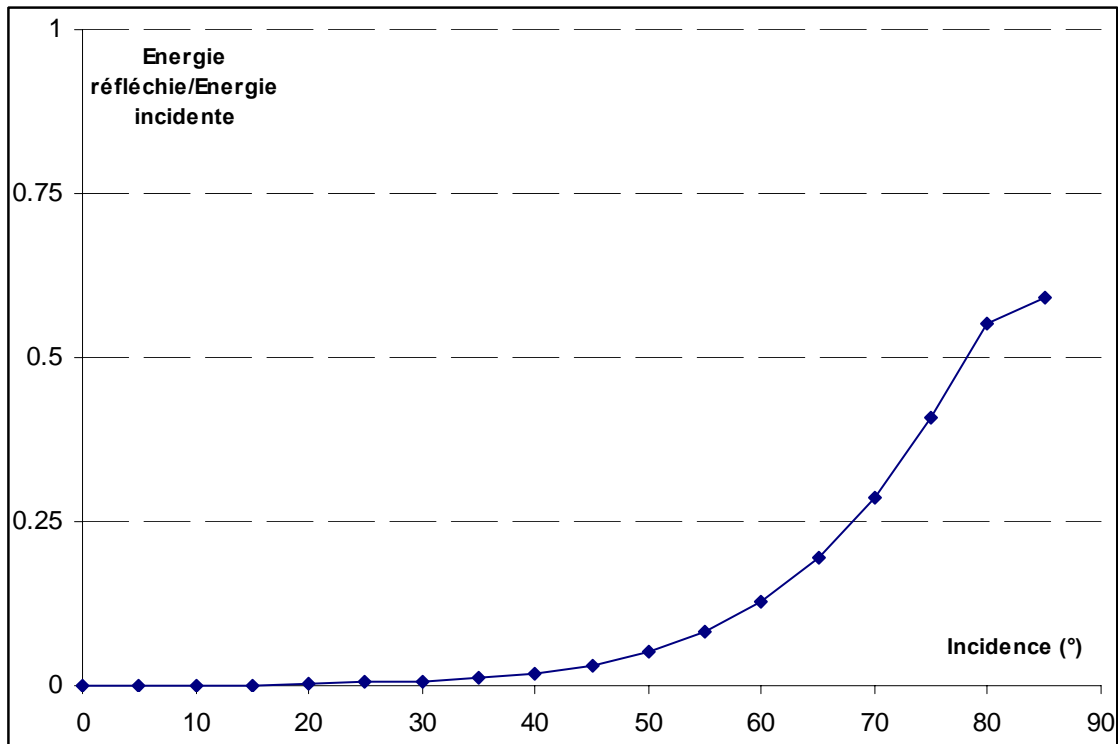


**Figure B-4 : Forme générale de la courbe du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence**

Quand l'angle d'incidence croît, la proportion d'énergie des ions qui est rebondie croît. A titre d'illustration, nous avons étudié avec un code de simulation que nous allons présenter dans cette partie (§-B.VII), l'énergie rebondie en fonction de l'angle d'incidence. Cette simulation présentée à la Figure B-5 a été effectuée dans le cas du bombardement d'une cible d'argent par des ions  $Xe^+$  à 300eV. On observe alors que l'énergie rebondie est quasi nulle jusqu'à une incidence de  $40^\circ$  et qu'elle croît ensuite rapidement.

On atteint ainsi un angle d'érosion maximale  $\theta_m$  à partir duquel le taux d'érosion commence à diminuer jusqu'à s'annuler à incidence  $90^\circ$ .





**Figure B-5 : Simulation de la fraction d'énergie d'ions Xe<sup>+</sup> à 300eV rebondie sur une surface d'argent en fonction de l'angle d'incidence**

## **B.IV. Prédiction du taux d'érosion**

L'étude des taux d'érosion a fait l'objet de beaucoup de travaux expérimentaux. Toutefois, du fait de la large gamme d'énergies étudiée, de la variété des cibles et des ions incidents, il arrive souvent que des données nécessaires ne se trouvent pas dans la littérature. Ainsi, pour des raisons de coût et de temps, il est toujours préférable de pouvoir se passer de mesures expérimentales pour déterminer un taux d'érosion.

### **B.IV.1. Effet de l'énergie des ions sur le taux d'érosion**

#### **B.IV.1.1. Formules proposées**

Il existe ainsi un certain nombre de fits expérimentaux et de formules théoriques qui permettent d'obtenir simplement des prévisions de taux d'érosion. La plus célèbre de ces formules est certainement celle de Bohdansky<sup>27</sup> qui détermine le taux d'érosion au-dessus du seuil d'érosion  $E_{th}$ . Cette formule fait intervenir le paramètre  $E_{th}$  qui a un sens physique ainsi que le paramètre de fit  $K$ . On voit donc qu'on ne peut pas complètement se passer de données expérimentales avec ce genre de formule, puisque  $K$  et  $E_{th}$  sont inconnus a priori. Toutefois, elle permet d'interpoler ou d'extrapoler des données expérimentales.

$$Y(E,0^\circ) = K.E. \left( 1 - \left( \frac{E_{th}}{E} \right)^{2/3} \right) \cdot \left( 1 - \frac{E_{th}}{E} \right)^2$$

Cette formule a été révisée par Garcia-Rosales et al.<sup>28</sup> en se basant sur des données expérimentales et de simulation numérique.

$$Y(E,0^\circ) = Qs_n(\varepsilon) \left( 1 - \left( \frac{E_{th}}{E} \right)^{2/3} \right) \cdot \left( 1 - \frac{E_{th}}{E} \right)^2$$

où  $\varepsilon$  et  $s_n$  sont respectivement l'énergie réduite et le pouvoir d'arrêt nucléaire, utilisant le potentiel Kr-C:

$$\varepsilon = E(eV) \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{0.03255}{Z_1 Z_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}}$$

$$s_n = \frac{0.5 \ln(1 + 1.2288\varepsilon)}{\varepsilon + 0.1728\sqrt{\varepsilon} + 0.008\varepsilon^{0.1504}}$$

$Z_1$  et  $Z_2$  sont les numéros atomiques respectifs du projectile et de la cible,  $M_1$  et  $M_2$  leurs masses.  $Q$  est un paramètre d'ajustement et il est utilisé avec  $E_{th}$  comme paramètre de fit.

*Remarque* : La notion d'énergie seuil est une notion ambiguë. En effet cette notion a été introduite expérimentalement, or on s'est aperçu au fur et à mesure que les techniques de mesures progressaient que ce seuil diminuait continuellement. Ainsi, il s'agit plus d'un paramètre de fit qu'un paramètre réellement physique. Une énergie seuil existe réellement et elle est minorée par l'énergie de surface. Toutefois, Bohdansky<sup>27</sup> avait proposé une loi pour calculer  $E_{th}$  en utilisant l'énergie de surface  $E_s$  et  $\gamma = 4M_1M_2/(M_1+M_2)^2$  :

$$E_{th} = \begin{cases} \frac{E_s}{\gamma(1-\gamma)} & \text{pour } \frac{M_1}{M_2} < 0.2 \\ 8.E_s \left( \frac{M_1}{M_2} \right)^{2/5} & \text{pour } \frac{M_1}{M_2} > 0.2 \end{cases}$$

Mais cette loi ne s'avère pas toujours juste.

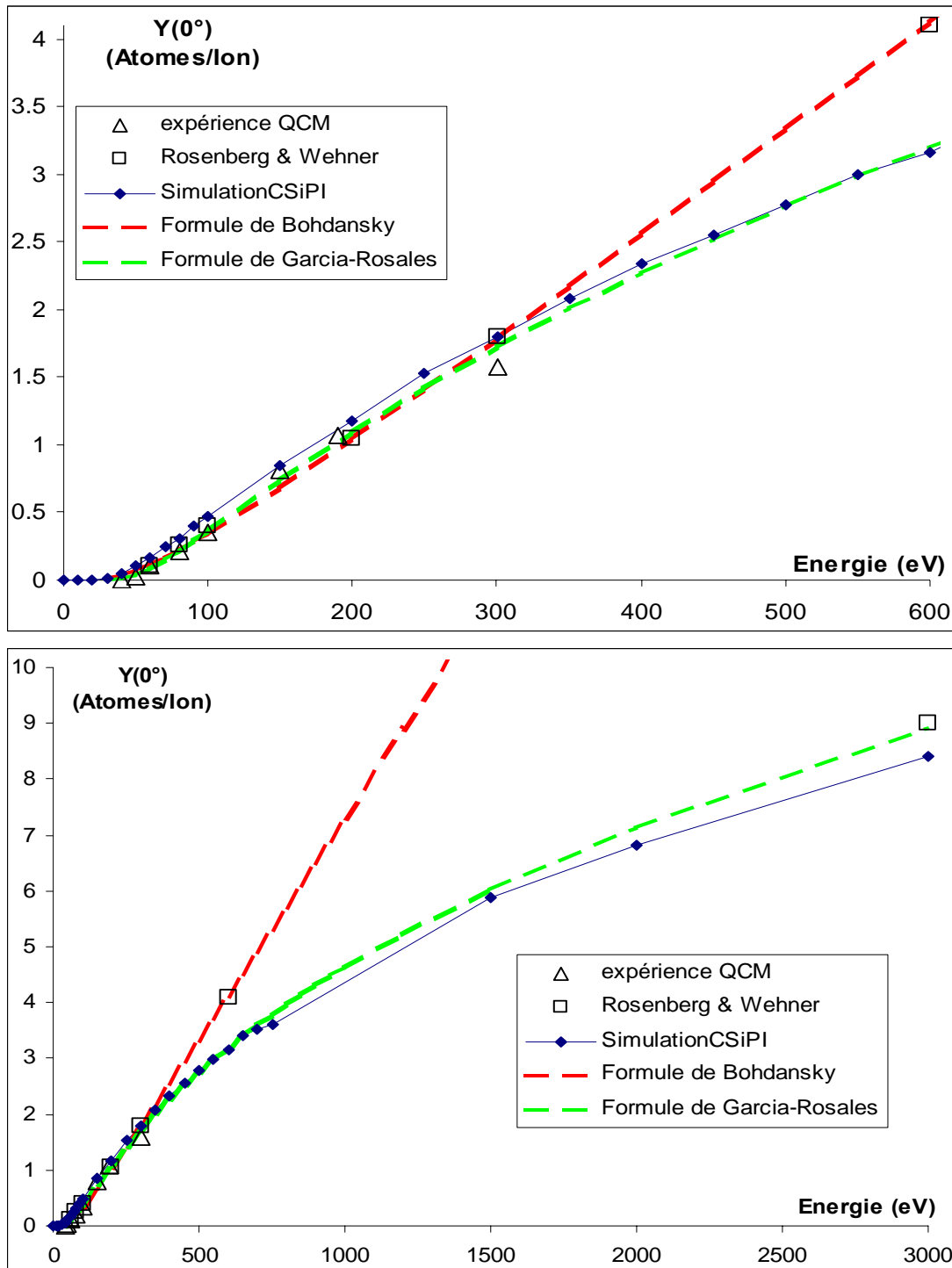
#### **B.IV.1.2. Comparaison des formules avec l'expérience**

La Figure B-6 permet de comparer le taux d'érosion de l'argent en fonction de l'énergie des ions  $Xe^+$  incidents pour des mesures expérimentales présentées au §-C.IV.2.3, des données de la littérature<sup>29</sup>, une simulation avec le code CSiPI qui sera présenté au §-B.VII, ainsi que les formules de Bohdansky et Garcia-Rosales.

On observe alors que la formule de Bohdansky est très performante à basse énergie, mais elle s'éloigne des mesures expérimentales au-delà du keV. La formule révisée par Garcia-Rosales a été établie sur la base de données expérimentales et de simulations obtenues par TRIM.SP. Il s'agit d'un code de simulation de pulvérisation ionique basé sur les mêmes principes que CSiPI et que nous allons présenter au §-B.VII. On comprend alors que la formule de Garcia-Rosales corresponde bien à nos simulations.

Elle offre de bien meilleurs résultats à la formule de Bohdansky à plus haute énergie. Nous discuterons plus tard des performances de la simulation par CSiPI, mais on peut déjà remarquer que dans ce cas la corrélation avec l'expérience est bonne.

On peut également conclure de ce cas que la formule de Bohdansky et celle de Garcia-Rosales qui en dérive décrivent très bien les évolutions du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence. La formule de Bohdansky ne dépasse pas le domaine du keV, alors que celle de Garcia-Rosales reste encore performante pour quelques keV.



**Figure B-6 : Taux d'érosion de l'argent bombardé par des ions  $Xe^+$  selon l'expérience (ONERA, voir §-C.IV.2.3), la littérature, la simulation numérique et les formules de Bodansky et Eckstein.**

## B.IV.2. Effet de l'incidence sur le taux d'érosion

### B.IV.2.1. Formules proposées

Comme pour l'étude de l'effet de l'énergie sur le taux d'érosion, des fits ont été proposés pour prévoir le taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence des ions.

La théorie linéaire des cascades prévoit une dépendance en angle du taux d'érosion de la forme  $\cos(\theta)^{-u}$ . Cette loi ne prend pas en compte le rebond d'énergie des ions incidents à incidence élevée. Elle ne permet donc pas de décrire l'érosion à forte incidence.

Parmi les premières données expérimentales de pulvérisation ionique dans des conditions d'énergie proches de celles qui nous intéressent et pour des ions lourds, on peut citer les travaux d'Oeschner<sup>30</sup>.

A partir de ses données expérimentales, Oeschner a proposé le fit suivant :

$$Y(E, \theta) = Y(E, 0^\circ) \cdot \left( 1 + \left( \frac{Y(E, \theta_m)}{Y(E, 0)} - 1 \right) \times 1.284 \left( \frac{\theta}{\theta_m} \right)^2 \exp \left[ -0.25 \left( \frac{\theta}{\theta_m} \right)^8 \right] \right)$$

Cette formule n'est plus guère utilisée aujourd'hui dans la mesure où elle prévoit un même taux d'érosion à  $90^\circ$  et à  $0^\circ$ . En outre, une telle formule contredit certaines données expérimentales produites par Oeschner lui-même.

Nous n'avons pas encore présenté en détail les collisions, mais on peut déjà considérer que plus une interaction s'effectue à distance, plus le transfert d'énergie est faible. Ainsi un ion ayant une incidence tendant vers  $90^\circ$  s'approche infiniment lentement de la cible et rebondit sur la cible en effectuant une infinité de collisions de transfert d'énergie infiniment faible. Ainsi l'ion ne transmet l'énergie nécessaire pour échapper au potentiel de surface à aucun atome de la cible. Par conséquent le taux d'érosion à incidence  $90^\circ$  doit être nul.

La formule la plus utilisée semble être la formule de Yamamura<sup>31</sup> :

$$Y(E, \theta) = Y(E, 0^\circ) \cdot \left( (\cos(\theta))^{-f} \exp \left[ f \left( 1 - (\cos(\theta))^{-1} \right) \cos(\theta_m) \right] \right)$$

pour laquelle  $f$  et  $\theta_m$  sont les deux paramètres d'ajustement. On rappelle que  $\theta_m$  est l'angle d'incidence qui produit l'érosion maximale.

Dans ce cas, la détermination de la fonction  $Y(E, \theta)$  nécessite quatre paramètres :  $E_{th}$ ,  $Q$ ,  $f$  et  $\theta_m$ .

### B.IV.2.2. Comparaison entre les formules et la mesure

La Figure B-7 permet de comparer l'expérience et les trois formules présentées ci-dessus pour l'exemple de la pulvérisation ionique du cuivre par des ions  $Xe^+$  à 550eV. On peut alors observer que les trois formules permettent une assez bonne corrélation avec la mesure pour les incidences faibles. Par contre, aucune formule n'est vraiment satisfaisante quand on dépasse l'angle d'incidence  $\theta_m$ .

La formule en  $\cos(\theta)^{-u}$  ne prétend pas prévoir le taux d'érosion pour les grands angles d'incidence. Nous avons choisi la valeur de  $u=3.5$  qui produit un comportement similaire à la formule de Yamamura.

Le fit de Yamamura produit un taux d'érosion qui chute beaucoup trop vite pour les forts angles d'incidence.

La formule d'Oeschner chute également trop vite dans un premier temps puis plafonne à 1.

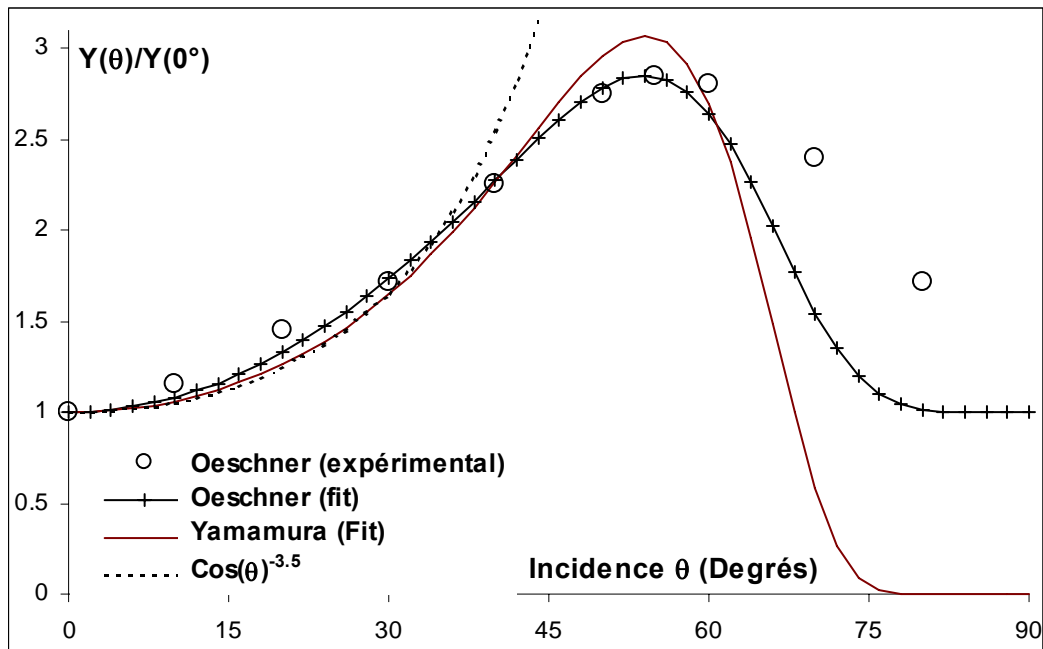


Figure B-7 : Comparaison de données expérimentales avec diverses formules

### B.IV.3. Conclusion

Nous venons de voir que plusieurs formules existent qui permettent de prévoir le taux d'érosion. En particulier, la littérature donne des lois de variation du taux d'érosion en fonction de l'énergie des ions incidents et de l'angle d'incidence avec plus ou moins de succès. En effet, si les résultats sont très satisfaisants dans le cas de l'influence de l'énergie sur l'érosion à incidence normale, la prévision de l'érosion à forte incidence rencontre moins de succès.

Par ailleurs, ces formules nécessitent des paramètres que l'on ne peut pas connaître a priori. Ainsi ces formules ne sont pas prédictives, par contre elles permettent d'interpoler ou d'extrapoler des données expérimentales.

## B.V. Simulation BCA

Nous venons de voir que les taux d'érosion peuvent être prévus dans certaines limites par des formules proposées par la littérature. Une seconde approche permettant de prévoir des taux d'érosion est de simuler les cascades de collisions produites dans la cible par les ions incidents et d'en déduire l'érosion. Nous allons voir maintenant plusieurs façons de modéliser les cascades de collisions. Nous allons en particulier nous attarder sur le code TRIM qui fait référence dans le domaine des interactions entre une cible et une particule incidente.

## B.V.1. Catégories de simulation

Il existe plusieurs approches pour modéliser le phénomène de pulvérisation ionique. Les calculs faisant appel au minimum d'approximations sont les calculs de dynamique moléculaire.

La dynamique moléculaire simule une cible de taille finie dont tous les atomes sont pris en compte pendant la cascade de collisions. Le déplacement des atomes est suivi en temps réel, c'est à dire que l'on peut considérer des interactions simultanées avec plusieurs atomes, et que deux atomes mobiles peuvent interagir l'un avec l'autre. Ces simulations reproduisent donc une cascade fidèle à la réalité. Ces calculs sont extrêmement gourmands en temps de calcul.

Pour remédier à ces problèmes de temps de calcul, on effectue de façon classique l'approximation des collisions binaires ou BCA (Binary Collision Approximation). Dans cette approximation, on considère uniquement des chocs simples entre un ion incident et un atome de la cible sans se soucier des interactions avec le reste de la cible. Le suivi temporel de la cascade n'est pas effectué. C'est à dire que tous les événements sont considérés distinctement les uns des autres. Ce genre de modèle donne des résultats très satisfaisants et permet un grand gain de temps de calcul.

Nous nous intéresserons plus particulièrement aux logiciels utilisant la BCA. Ainsi nous allons étudier TRIM qui est le logiciel de référence dans le domaine. D'autres codes tel ACAT<sup>32</sup> sont inspirés de TRIM. Nous avons également développé notre propre Code de Simulation de la Pulvérisation Ionique (CSiPI) qui s'est avéré être un outil d'un grand intérêt pour expliquer les résultats macroscopiques de pulvérisation ionique.

*Computer Simulation of Ion-solid interactions* de Eckstein<sup>33</sup> peut servir de référence pour l'étude par simulation de la pulvérisation ionique.

## B.V.2. Présentation de TRIM

L'un des logiciels de simulation les plus célèbres est TRIM. Il doit entre autres sa popularité au fait qu'il soit disponible gratuitement. TRIM effectue des simulations particulièrement performantes en temps de calcul.

Ce logiciel de type Monte-Carlo simule l'interaction entre un ion et une cible en se basant sur l'approximation BCA. La cible est considérée comme amorphe. C'est à dire que les chocs considérés n'ont pas lieu aux nœuds d'un réseau cristallin, mais à chaque fois que l'ion parcourt un libre parcours moyen. Un grand nombre de collisions est généré, ce qui permet d'obtenir des données statistiques comme le taux d'érosion, la profondeur de pénétration des ions ou encore les lobes d'émission des particules érodées.

Les données d'entrée de TRIM sont les caractéristiques de l'ion et de la cible. On rentre ainsi la composition chimique de la cible, sa densité, la nature de l'ion, son énergie et son incidence.

Pour chaque atome de la cible, on fournit trois énergies caractéristiques :

- L'énergie de liaison  $E_L$  : Elle correspond à l'énergie qui lie un atome de la cible aux atomes voisins.

- L'énergie de déplacement  $E_D$  : Il s'agit de l'énergie qu'il faut fournir à un atome de la cible pour créer un défaut Interstitiel/Lacune.

- L'énergie de surface  $E_s$ : comme décrit au paragraphe §-B.V.4.2, il s'agit de la valeur de la barrière de potentiel qu'il faut franchir pour traverser la surface de la cible.

Nous reviendrons en détail sur ces énergies quand nous décrirons notre code CSiPI. En effet, ces trois paramètres ont une très forte influence sur l'érosion.

*Remarque* : l'énergie de liaison et l'énergie de déplacement sont deux notions différentes. En effet, on peut parfois arracher un atome de sa position en lui fournissant une énergie supérieure à son énergie de liaison. L'atome arraché va finir en général en position interstitielle et laisser une lacune. Mais si ces deux défauts ne sont pas trop éloignés, il y a possibilité de réarrangement. Ce sont ces possibilités de réarrangement qui expliquent la différence entre l'énergie de liaison et l'énergie de déplacement.

### **B.V.3.Limites de TRIM**

#### **B.V.3.1. Non disponibilité du code**

La première limitation de TRIM pour notre application est que la source est inconnue. Il est donc impossible d'effectuer des adaptations et de cerner avec précision comment les paramètres d'entrée sont utilisés. C'est la première motivation qui nous a poussés à développer notre propre code de simulation.

#### **B.V.3.2. Lacunes dans la description des phénomènes**

D'un point de vue plus physique, on peut reprocher à TRIM de ne pas gérer les évolutions de la cible dans le temps. Le code TRIDYN dérivé de TRIM permet de prendre en compte ces effets dynamiques.

La prise en compte des modifications de cible est indispensable si l'on étudie une cible polyatomique. En effet le taux d'érosion de chaque composant de la cible est différent a priori. Ainsi la cible s'enrichit en certains composants pendant le bombardement ionique. Or puisque TRIM ne tient pas compte de cette évolution de la cible il propose une érosion non stœchiométrique qui n'a un sens qu'au début de la pulvérisation ionique.

Le même problème intervient dans le cas d'une cible monoatomique si l'on considère les ions implantés. Ces derniers risquent en effet de modifier les propriétés de la cible.

Enfin, TRIM n'est pas capable de gérer des fragments de molécule dans le cas de la pulvérisation ionique d'une cible moléculaire. On limite ainsi fortement le domaine d'application de TRIM.

Enfin, nous verrons par la suite que les résultats fournis par TRIM vérifient mal les résultats expérimentaux. En effet, TRIM a été conçu à l'origine pour traiter l'implantation d'ions et non pas la pulvérisation ionique. Il existe toutefois une version de TRIM appelée TRIM.SP qui prévoit beaucoup mieux la pulvérisation ionique mais qui n'est pas disponible.

### **B.V.4.Données d'entrée**

Comme pour toute simulation, il est préférable de n'avoir un nombre minimum de données d'entrée à fournir. Pour celles qu'il est tout de même nécessaire d'entrer, le mieux serait qu'elles correspondent à des valeurs physiques que l'on peut connaître. Nous allons voir

que c'est parfois, mais pas toujours le cas. Nous allons d'abord voir comment ces données d'entrée sont prises en compte.

Nous avons déjà vu que les données d'entrée qu'il est nécessaire de déterminer sont au nombre de trois. En réalité, dans le cas de l'étude de la pulvérisation ionique, l'énergie de déplacement n'intervient pas puisqu'elle sert uniquement à étudier des profondeurs de pénétration ou des densités de lacunes ou interstitiels.

#### **B.V.4.1. Energie de liaison**

Une liaison est une interaction stabilisante qui fait qu'un atome se trouve préférentiellement au voisinage des atomes avec lesquels il est lié plutôt qu'isolé à l'infini. L'énergie de liaison quantifie l'intensité de cette stabilisation. Toutes les liaisons ne sont pas de même nature, ainsi on peut en citer quatre grandes familles<sup>34</sup> :

Liaison covalente<sup>35</sup> : Il s'agit d'une liaison forte et très directive entre deux atomes résultant d'un recouvrement d'orbitales atomiques permettant l'appariement d'électrons de chaque atome.

Liaison ionique : Il s'agit d'une liaison produite par l'interaction électrostatique entre un ion chargé positivement et un ion chargé négativement.

Liaisons de Van der Waals : Il s'agit de liaisons faibles qui font intervenir des interactions entre dipôles. Les liaisons de Van der Waals les plus fortes font intervenir des molécules possédant intrinsèquement un dipôle électrique. Au contraire pour les interactions les plus faibles, les dipôles sont induits grâce à la polarisabilité des atomes.

Liaison métallique : La mise en commun par plusieurs atomes métalliques d'électrons périphériques produit une stabilisation qui croît avec le nombre d'atomes mis en jeu. Il s'agit d'une interaction forte.

L'énergie de liaison intervient dans la simulation de la cascade de collisions quand un atome de la cible entre en collision avec une particule énergétique. L'atome ne peut alors quitter sa position dans la cible que s'il peut franchir la barrière de potentiel correspondant à sa déstabilisation due à sa sortie de sa position initiale. L'énergie de cette déstabilisation est alors retranchée à son énergie cinétique acquise grâce au choc.

Par conséquent l'énergie de liaison considérée dans la simulation numérique ne tient compte que des interactions que l'atome étudié possède dans son site et qu'il ne possède plus quand il se trouve dans la cible mais hors de son site d'équilibre. Ainsi par exemple les interactions de type métallique ne sont pas perdues quand un atome quitte sa position. Elles ne doivent donc pas être comptées dans l'énergie de liaison.

#### **B.V.4.2. Energie de surface**

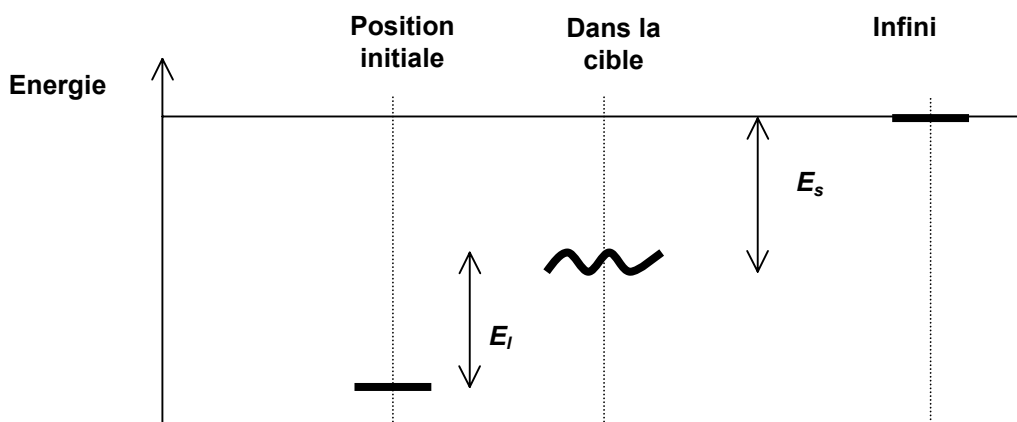
L'énergie de surface traduit la stabilisation reçue par un atome dans la cible par rapport à un atome hors de la cible. Il s'agit donc de l'énergie stabilisante d'un atome dans son site d'équilibre moins l'énergie de liaison qui est retranchée à l'énergie cinétique de tout atome mis en mouvement dans la cible.

Ainsi, pour un métal, on peut considérer que l'énergie de surface est son énergie de sublimation.



### **B.V.4.3. Bilan d'énergie**

La Figure B-8 résume le potentiel d'un atome positionné dans sa position initiale, en mouvement dans la cible et hors de la cible à une distance infinie de la cible de pulvérisation. Quand l'atome est dans la cible, hors de son site initial, son énergie potentielle dépend des interactions qu'il reçoit de ses voisins. Pour cette raison nous avons tracé une énergie oscillante. Ces interactions variables peuvent être stabilisantes ou déstabilisantes. Ainsi, parmi les interactions stabilisantes, on compte les interactions métalliques, les interactions de Van der Waals qui dépendent de la proximité de dipôles voisins ou encore les interactions ioniques dans le cas d'un ion interagissant avec un ion de signe opposé. Parmi les interactions déstabilisantes, on compte les interactions stériques ainsi que les interactions ioniques dans le cas d'un ion interagissant avec un ion de même signe.



**Figure B-8 : Energie d'un atome dans son site initial, en déplacement dans la cible et à l'infini hors de la cible**

Suivant les matériaux étudiés, ce sera soit l'énergie de liaison soit l'énergie de surface qui sera prépondérante.

### **B.V.4.4. Cas des métaux**

Les métaux sont les matériaux qui sont décrits par les codes de simulation basés sur la BCA avec le plus de succès. En effet dans le cas des métaux, l'interaction entre un atome et ses voisins est non directionnelle. Ainsi un atome a à peu près les mêmes interactions stabilisantes qu'il soit sur son site ou ailleurs dans la cible. On ferait ainsi une erreur en comptant une énergie de surface et une énergie de liaison égales aux liaisons métalliques.

D'ailleurs, Eckstein<sup>33</sup> préconise de prendre l'énergie de liaison comme nulle sans bien en préciser les raisons, sinon que le résultat est satisfaisant. Ainsi pour un métal on peut fixer l'énergie de liaison comme étant nulle et l'énergie de surface comme étant l'énergie de sublimation. On obtient alors des résultats satisfaisants. Nous le verrons par la suite en comparant des mesures expérimentales et des simulations.

### **B.V.4.5. Cas des solides covalents**

Par contre pour les solides comportant des liaisons covalentes, l'atome est fortement lié à son site d'origine. La valeur de l'énergie de liaison peut alors être prise comme étant la

somme des énergies des liaisons qui lient l'atome avec les atomes voisins. Par contre l'énergie de surface est beaucoup plus difficile à estimer.

On peut remarquer que si les collisions peuvent engendrer des ruptures de liaisons, on peut également considérer qu'un atome de basse énergie peut entrer en interaction avec des atomes de la cible et ainsi créer des liaisons chimiques. Ainsi, il faut considérer la pulvérisation chimique dans le cas des cibles à liaison covalente.

Ainsi, si l'on considère une cible polymère contenant de l'hydrogène, des atomes d'hydrogène peuvent être mus par une collision et rompre des liaisons chimiques à un autre endroit de la cible. Ce genre de réaction peut être étudié par Dynamique moléculaire<sup>36</sup> mais reste encore mal modélisé. Ainsi Hopf et al.<sup>37</sup> présente une étude expérimentale d'érosion chimique de matériaux de formule (C :H) par l'hydrogène à basse température et montre que l'on forme des hydrocarbures qui désorbent de la surface.

### **B.V.5. Exemple de l'étude des paramètres d'entrée du graphite**

En pratique, quand on s'intéresse à un solide covalent, on est également confronté au problème de la stœchiométrie et de la gestion des fragments de molécule érodés. Pour cette raison, l'étude du cas du diamant ou du graphite est particulièrement intéressante puisqu'il s'agit de solides covalents monoatomiques.

Par ailleurs l'érosion du graphite est d'un grand intérêt pour la propulsion électrique dans la mesure où les grilles les plus performantes pour les propulseurs ioniques sont en graphite. Enfin, le graphite par la nature de ses liaisons et la masse de son unique atome se rapproche des polymères. Or les polymères sont complexes donc compliqués à modéliser. Ainsi le graphite peut servir de matériau modèle pour la compréhension de l'aspect physique de l'érosion des polymères.

Pour toutes ces raisons, nous allons nous attarder sur le cas des paramètres d'entrée du graphite. Ce sera l'occasion d'illustrer la détermination des données d'entrée présentée ci-dessus, et d'argumenter l'utilisation de paramètres d'entrée différents de ceux proposés par TRIM.

#### **B.V.5.1. Structure du graphite**

Le graphite est un matériau lamellaire, formé de plans de carbones. Ces plans sont formés de motifs en C<sub>6</sub> aromatiques. La structure du graphite est représentée à la Figure B-9.

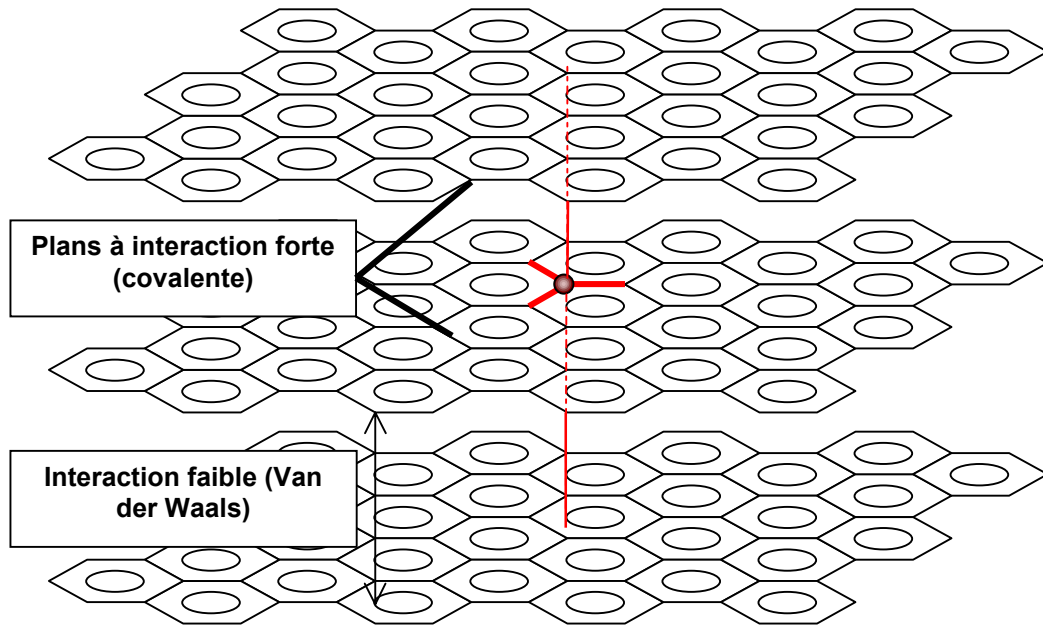


Figure B-9 : Structure du graphite

### B.V.5.2. Energie de liaison

En négligeant les effets de stabilisation de l'aromaticité, on peut estimer en première approximation que chaque atome de carbone est lié de façon covalente par deux liaisons simples C-C et une liaison double C=C, ainsi que par des forces de Van Der Waals avec les plans de graphite voisins.

Les énergies de liaison sont de l'ordre de 6.3eV pour une double liaison C=C, 3.8eV pour une simple liaison C-C, alors que l'interaction de Van Der Waals entre deux plans de graphite est de l'ordre de 0.05eV par atome de carbone<sup>39</sup>. On atteint ainsi une énergie de liaison de l'ordre de 14eV.

On rappelle que l'énergie de liaison correspond à la stabilisation énergétique produite par une interaction entre des atomes comparée à l'absence d'interaction (atomes à l'infini), il s'agit donc d'une énergie négative.

La littérature propose une énergie de cohésion du graphite de 7.8eV. Le rapport 2 entre l'énergie de liaison d'un atome et l'énergie de cohésion vient du fait qu'à chaque fois que l'on rompt une liaison, on déstabilise deux atomes, l'énergie de cohésion est donc la moitié de l'énergie de liaison.

### B.V.5.3. Conservation de l'énergie lors d'un choc.

Lors d'un choc comme décrit par la Figure B-10, l'atome (ou ion) noté 1 transfère de façon élastique une partie de son énergie cinétique  $E_{C1}$  à l'atome 2 ( $E_{C2}$ ). L'atome 2 engagé dans des liaisons covalentes les rompt, mais pour cela l'énergie nécessaire consomme une partie de son énergie cinétique. Le choc produit donc un atome isolé en mouvement et un site déstabilisé dans la cible. Il se peut que ce site se stabilise en créant de nouvelles liaisons. Ce processus est exothermique et libère une énergie thermique  $Q$ . Par ailleurs, l'atome avant le choc était également stabilisé par des interactions faibles de type Van der Waals d'énergie  $E_{VDW}$ . Tant que l'atome est dans la cible, il reçoit toujours une stabilisation par interaction faible avec les atomes l'entourant. Cette stabilisation disparaît uniquement quand l'atome sort de la cible. Nous avons résumé ces transferts d'énergie sur la Figure B-11.

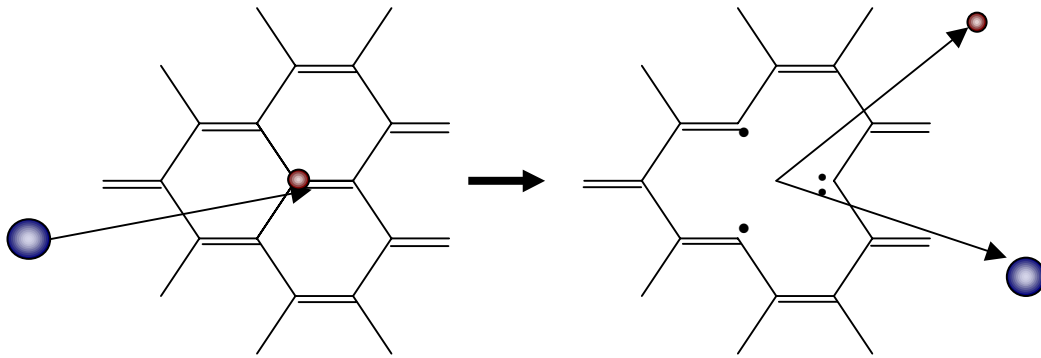


Figure B-10 : Description de la cible avant et après le choc

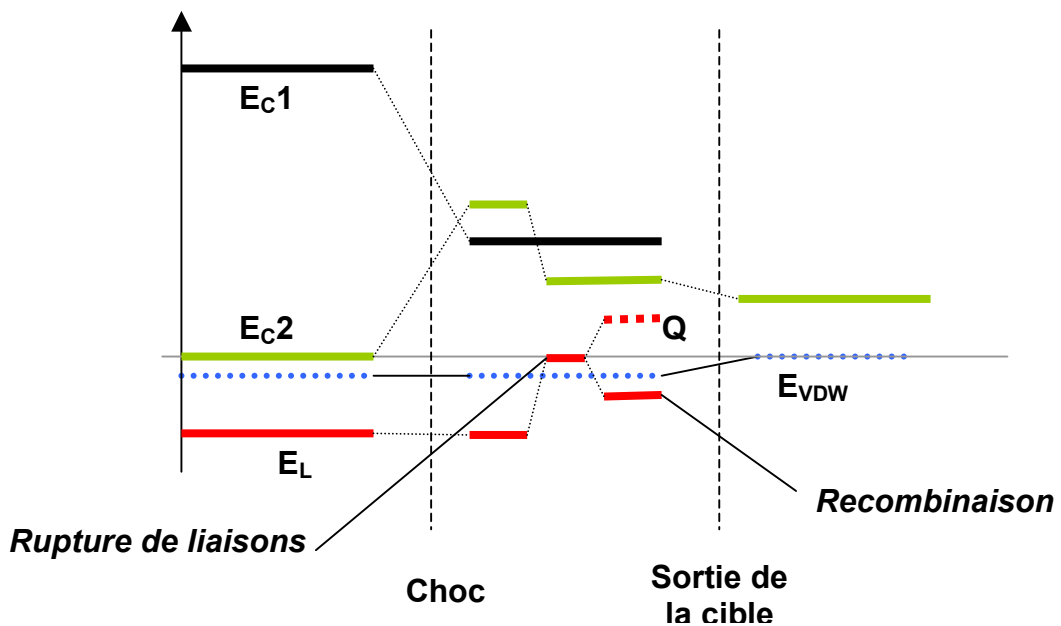


Figure B-11 : Diagramme d'énergie du système composé de la cible, l'atome incident et l'atome déplacé.

C'est donc bien l'énergie de liaison et non pas l'énergie de cohésion qu'il faut retrancher à l'énergie cinétique de l'atome mis en mouvement. Par ailleurs, cette énergie est une énergie de liaison et pas une énergie de surface comme TRIM le propose. En effet, TRIM propose par défaut une énergie de liaison de 2eV et une énergie de surface de 7.63eV. La seconde énergie correspondant à l'énergie de cohésion du graphite.

La valeur de l'énergie de surface du graphite est difficile à connaître. Toutefois, les études de Marker et al<sup>38</sup> montrent que le coefficient de collage du carbone sur une cible de contamination est faible. Nous verrons au chapitre §-C.V.3.3 que cela correspond à une faible énergie de surface. C'est un argument supplémentaire pour rejeter la valeur de 7.63eV qui serait une énergie de surface extrêmement élevée.

La littérature propose des valeurs très faibles pour les interactions de van der Waals entre un atome de carbone et son entourage. Ces valeurs seraient de l'ordre de 0.1eV<sup>39</sup>, ce qui semble extrêmement faible pour une énergie de surface. Ainsi la détermination de l'énergie de surface pour les matériaux covalents reste un problème.

*Remarque* : En toute rigueur, on ne peut pas considérer la pulvérisation ionique du graphite comme une simple cascade de collision. En effet, il faudrait tenir compte de la possibilité de réaction des atomes de Carbone avec d'autres atomes de carbone de la cible réactifs. Par ailleurs, des études de spectrométrie de masse montrent que l'on n'émet pas uniquement des atomes isolés mais également des groupes d'atomes<sup>40</sup>.

## **B.VI. Physique des collisions binaires traitée par TRIM et CSiPI**

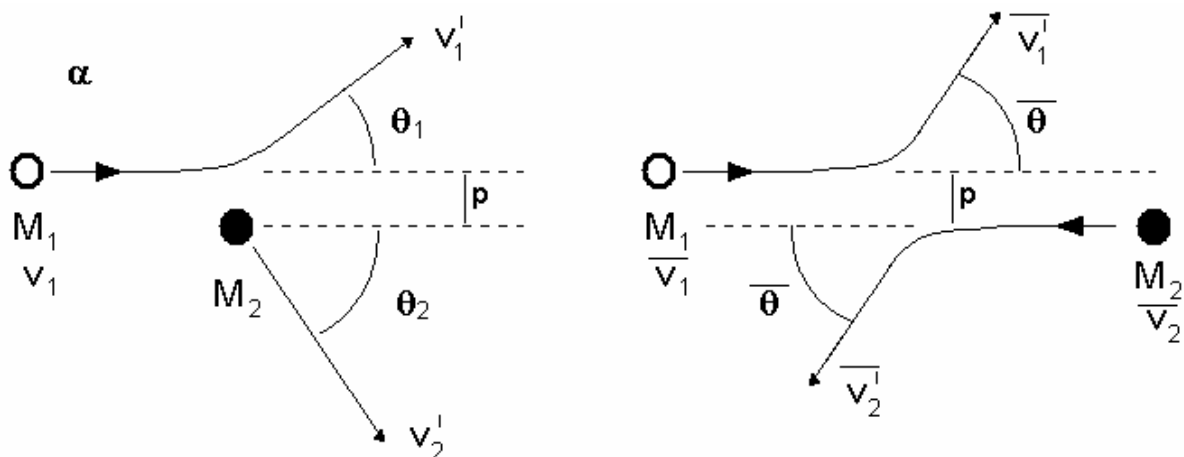
Comme nous l'avons déjà évoqué, dans le but de mieux comprendre les phénomènes à l'origine de la pulvérisation ionique, nous avons décidé de produire le Code de Simulation de la Pulvérisation Ionique CSiPI basé sur le même principe que TRIM. Cela nous permet de maîtriser la manière dont tous les paramètres mis en jeu dans les cascades de collisions sont modélisés.

Dans ce chapitre, nous allons développer la physique des collisions telle que elle est traitée par TRIM, et telle que nous l'avons reprise dans CSiPI.

### **B.VI.1. Collision binaire**

La collision élastique entre un atome énergétique (1) et un atome immobile (2) est régie par des lois fondamentales de la physique telles que la conservation de la quantité de mouvement et la conservation de l'énergie.

Ce type de collision est décrit dans le référentiel du laboratoire et dans le référentiel barycentrique par la Figure B-12. Dans le référentiel lié au laboratoire, les vitesses avant et après collision sont notées respectivement  $v$  et  $v'$ , la masse des atomes  $M$  et les angles de déflection  $a_1$  et  $a_2$ . Dans le référentiel barycentrique les notations sont identiques mais surlignées.



**Figure B-12 : Collision entre deux particules décrite dans le référentiel du laboratoire et dans le référentiel barycentrique**

Dans le cas d'une collision élastique, les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique permettent de relier les angles de déflexion dans le repère du laboratoire à la déflexion dans le référentiel barycentrique :

$$\text{On a les relations suivantes : } \theta_2 = \pi/2 - \bar{\theta}/2 \text{ et } \tan(\theta_1) = M_2 \frac{\sin(\bar{\theta})}{M_1 + M_2 \cos(\bar{\theta})}$$

On peut alors calculer le transfert d'énergie.

$$T = \gamma \cos^2(\theta_2) \text{ avec } \gamma = 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \text{ transfert maximum d'énergie}$$

Ainsi, connaissant les conditions initiales d'une collision, la détermination de l'angle  $\bar{\theta}$  permet de déduire toutes les inconnues qui sont les angles de déflexion dans le référentiel du laboratoire et la vitesse des deux particules après le choc.

Par ailleurs la valeur de  $\bar{\theta}$  dépend de la distance  $p$  et de l'interaction entre les deux particules. Nous rappelons que cette interaction est de type coulombienne résultant de la répulsion entre les noyaux. Toutefois, dans le domaine d'énergies qui nous intéresse, cette interaction doit être corrigée par l'écrantage produit par les nuages électroniques. Ainsi toute la description de la collision repose sur la description de l'écrantage que l'on utilise.

*Remarque* : Une autre conséquence de la collision binaire est que quand un atome lourd entre en collision avec un plus léger, sa déviation atteint un maximum. Cet angle de déviation maximale noté  $\theta_{\max}$  vaut :

$$\theta_{\max} = \arctan\left(\frac{M_1 M_2 \sin(\arccos(-M_2/M_1))}{M_1^2 - M_2^2}\right)$$

## B.VI.2. Potentiels d'interaction

Le potentiel d'interaction  $V$  entre deux particules de numéro atomiques  $Z_1$  et  $Z_2$  à une distance  $r$  prend alors la forme :  $V(r) = \Phi(r) \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$  où  $\Phi$  est la fonction d'écrantage.

Dans le but d'obtenir des expressions générales, on introduit des valeurs réduites.

Ainsi on introduit le rayon réduit :  $x=r/a$  avec  $a = \frac{0.8853 a_0}{(Z_1^\alpha + Z_2^\alpha)^\beta}$  où  $a_0$  est le rayon de

Bohr,  $\alpha$  et  $\beta$  deux constantes qui dépendent de la description de l'interaction choisie.

Dans ce cas, le potentiel d'interaction pour tout couple d'atomes est une fonction du seul paramètre  $x$ . La littérature propose plusieurs potentiels d'interactions valables dans des conditions différentes. Les plus connus sont ceux de Thomas-Fermi, Bohr, Molière et Lenz-Jensen<sup>24,25</sup>. TRIM utilise un potentiel dit universel car il s'applique à toutes les gammes d'énergies. Ainsi, le potentiel universel d'interaction qui est en réalité un fit de données expérimentales est décrit par la fonction d'écrantage  $\Phi_u(x)$ . Ainsi,

$$\Phi_U = .18175e^{(-3.1998x)} + .50986e^{(-.94229x)} + .28022e^{(-.4029x)} + .028171e^{(-.20162x)}$$

$$\text{Avec } a = 0.885 a_B \frac{E}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \text{ et } x=r/a$$

### B.VI.3. La "Formule magique"

Connaissant les conditions initiales de la collision entre deux particules et étant capable de décrire l'interaction entre les particules, on dispose de toutes les données nécessaires pour prévoir les conditions finales après la collision.

Ce calcul peut être lourd. Ainsi Ziegler et al.<sup>24</sup> ont proposé une méthode rapide pour calculer l'angle de déflexion dans le référentiel barycentrique. Cet angle peut alors être calculé par une formule simple appelée "formule magique" :

$$\cos \frac{\bar{\theta}}{2} = \frac{B + R_c + \Delta}{R_0 + R_c} \quad B = \frac{p}{a} \quad R_c = \frac{\rho}{a} \quad R_0 = \frac{r_0}{a} \quad \Delta = \frac{\delta}{a}$$

Nous n'allons pas détailler tous les termes de la "formule magique", mais il semble important de la citer car il s'agit de l'équation centrale de TRIM. C'est cette formule qui permet la grande rapidité de calcul de TRIM et qui a ainsi permis son succès. Pour plus de détails on peut se référer à *The stopping and Range of Ions in Solids*<sup>24</sup>.

### B.VI.4. Calcul de la section efficace

En théorie, l'interaction entre la cible et le projectile a lieu quel que soit le paramètre  $p$  (distance minimale entre la trajectoire incidente de l'ion et l'atome supposé immobile). En réalité, cette interaction décroît rapidement. On ne considère donc que la section efficace correspondant à une interaction supérieure à une valeur limite de transfert d'énergie :  $E_{min}$

Ziegler et al. proposent alors un fit expérimental pour le paramètre maximum  $p_{max}$  correspondant au transfert d'énergie  $E_{min}$ .

$$p_{max} = \frac{a}{\varepsilon' + \sqrt{\varepsilon'} + 0.125(\varepsilon')^{0.1}}$$

avec  $\varepsilon' = \sqrt{\varepsilon \varepsilon_{min}}$

$$\text{où } \varepsilon = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{a}{Z_1 Z_2 e^2} E \text{ et } \varepsilon_{min} \text{ est la valeur de } \varepsilon \text{ pour } E=E_{min}.$$

Ce calcul de la section efficace totale est reprise dans le code CSiPI.

## **B.VII. Réalisation d'un programme de simulation de cascades de collisions**

Nous avons donc réalisé notre propre programme permettant de simuler des cascades de collisions et ainsi de calculer des taux d'érosion et des lobes d'émission de particules érodées. Nous avons déjà vu comment nous avons modélisé les chocs au moyen de la formule magique. Nous allons voir maintenant comment nous avons décrit le déroulement de la cascade de collisions. En général, nous ne pourrions pas comparer notre approche à celle de TRIM puisque nous l'ignorons dans le détail.

### **B.VII.1. Description de la cascade de collisions**

#### **B.VII.1.1. Description générale**

La Figure B-13 représente tous les phénomènes pris en compte pour la simulation d'une cascade de collisions. Ainsi, un ion incident a une énergie et un angle d'incidence initial. Sa position initiale est prise hors de la cible. L'ion peut alors entrer en collision hors de la cible avant de pénétrer dans cette dernière. A chaque choc, il perd de l'énergie et déplace un atome de la cible.

Les atomes mus par l'ion peuvent à leur tour déplacer des atomes et créer ce que l'on appelle une cascade secondaire.

Puisque le but de CSiPI est d'étudier la pulvérisation ionique, nous arrêtons la cascade de collisions quand les atomes ont une énergie inférieure à l'énergie de surface.

Enfin, quand un atome atteint la surface de la cible, il peut encore interagir avec la cible. Il subit également l'effet du potentiel de surface qui infléchit sa trajectoire et diminue son énergie. Ces notions seront reprises en détail au paragraphe §-B.VII.2.

Après cette vue d'ensemble de la gestion de la cascade, nous allons maintenant décrire avec précision comment est gérée chaque étape élémentaire de la cascade de collisions.



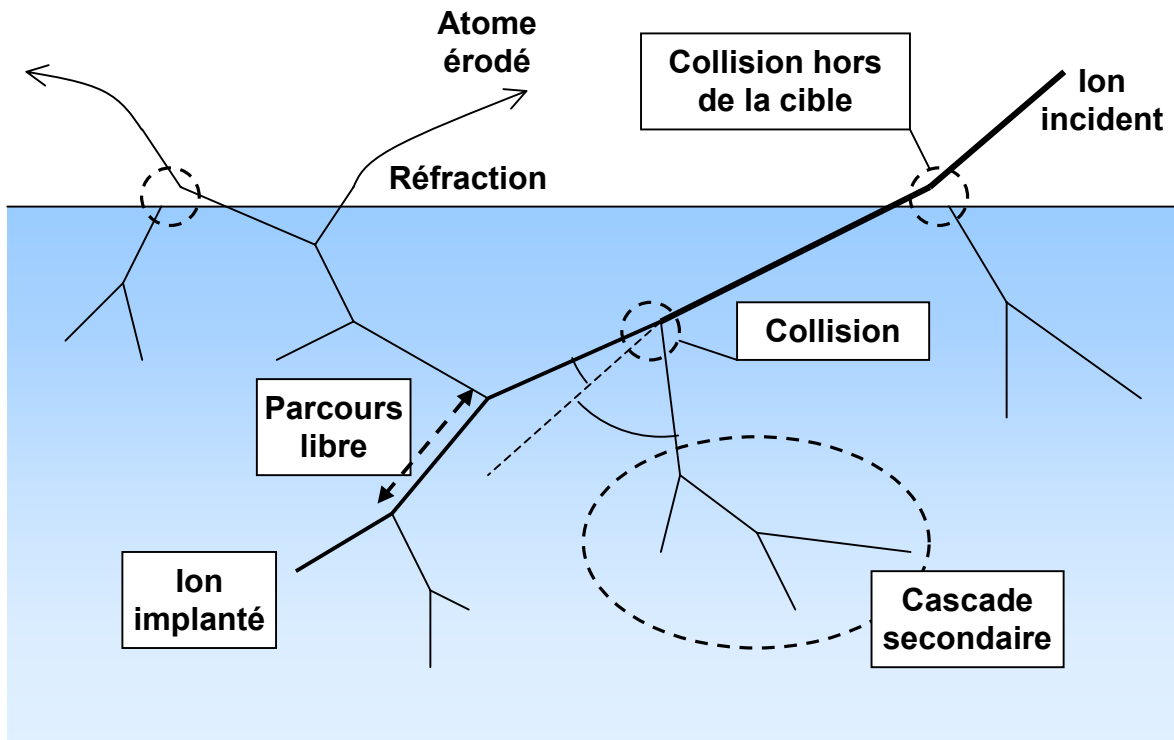


Figure B-13 : Modélisation de la cascade de collisions

### B.VII.1.2. Collision binaire

Le paramètre de collision  $p$ , ainsi que le plan de collision repéré par l'angle  $\varphi$  sont alors tirés aléatoirement. On utilise alors la "formule magique" (§-B.VI.3) pour déterminer l'angle de déviation dans le référentiel barycentrique. Enfin, la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie permettent de déterminer l'énergie des deux particules participant au choc, ainsi que leurs nouvelles directions (repérées par les angles  $\theta_1$  et  $\theta_2$ ) dans le plan déterminé par l'angle  $\varphi$ .

La Figure B-14 permet de décrire le choc. On voit en particulier que la position d'inflexion de la trajectoire de la particule incidente est prise sur la normale à sa trajectoire initiale passant par l'atome déplacé.

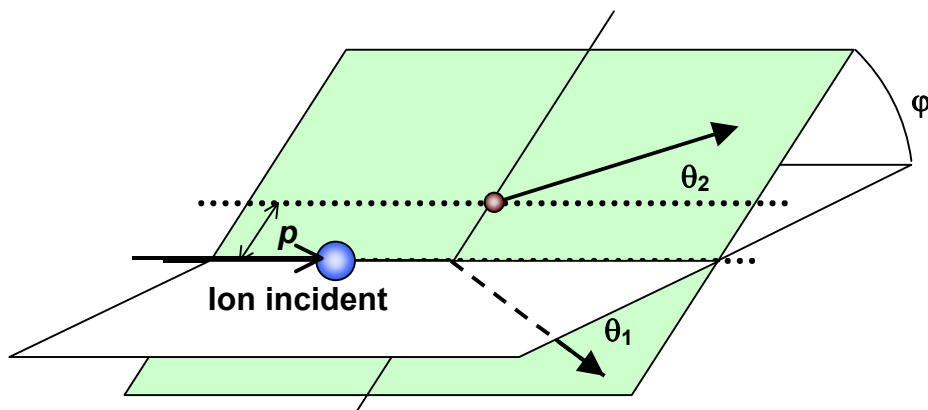


Figure B-14 : Description de la collision binaire

### **B.VII.1.3. Parcours libre entre deux collisions**

On considère une cible idéalement amorphe, c'est à dire que la distance entre deux particules est totalement aléatoire. Ainsi, en reprenant la formule utilisée par TRIM pour calculer le paramètre maximum de collision  $p_{max}$  (qui est aussi  $R_{SE}$ ) pour chaque atome de la cible, on déduit la section efficace de collision  $\sigma$  et le libre parcours moyen entre deux collisions  $LPM$ .

$\sigma = \pi p_{max}^2$  et  $LPM = (\sigma N)^{-1}$ , avec  $N$  le nombre d'atomes dans la cible par unité de volume. Ainsi la probabilité  $dP$  de collision sur un parcours  $dl$  vaut  $dP = LPM^{-1} \cdot dl$ . Cette loi de probabilité permet de déterminer le parcours libre de façon aléatoire.

On note maintenant  $dP'/dL$  la densité de probabilité pour qu'une particule ait parcouru la distance  $L$  sans entrer en collision, il s'agit donc du libre parcours. Entre la position  $L$  et  $L+dL$ , la probabilité de collision vaut  $dL/LPM$ .

Alors,  $dP'(L+dL) = dP'(L) \cdot (1 - dL/LPM)$ , soit :

$$\frac{d^2 P'}{dL^2} = -\frac{dP'}{LPM}$$

On aboutit par intégration et normalisation à la densité de probabilité:

$$\frac{dP'}{dL} = LPM^{-1} \exp\left(-\frac{L}{LPM}\right) \text{ correspondant à la densité de probabilité pour le libre}$$

parcours sans choc jusqu'à la distance  $L$ .

En pratique, il faut inverser la fonction de répartition  $P'(L)$  pour faire un tirage statistique. On tire alors le paramètre aléatoire  $u$  qui permet de tirer aléatoirement le libre parcours  $L$ .

$$P'(L) = 1 - \exp\left(-\frac{L}{LPM}\right)$$

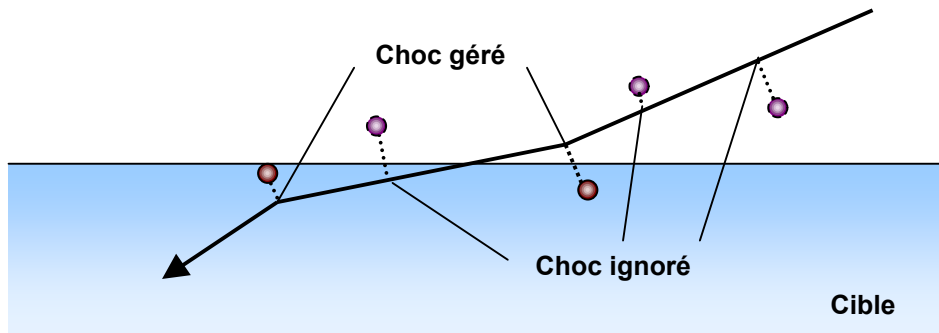
$$L = -LPM \cdot \ln(1-u)$$

*Remarque* : Les libres parcours sont tirés de façon aléatoire. La simulation produit donc des collisions impossibles. Par exemple, on peut générer deux collisions successives à forte interaction à une distance très inférieure à la distance interatomique. Cette incohérence est négligée et pourrait faire l'objet d'une amélioration ultérieure.

## **B.VII.2. Effets de surface**

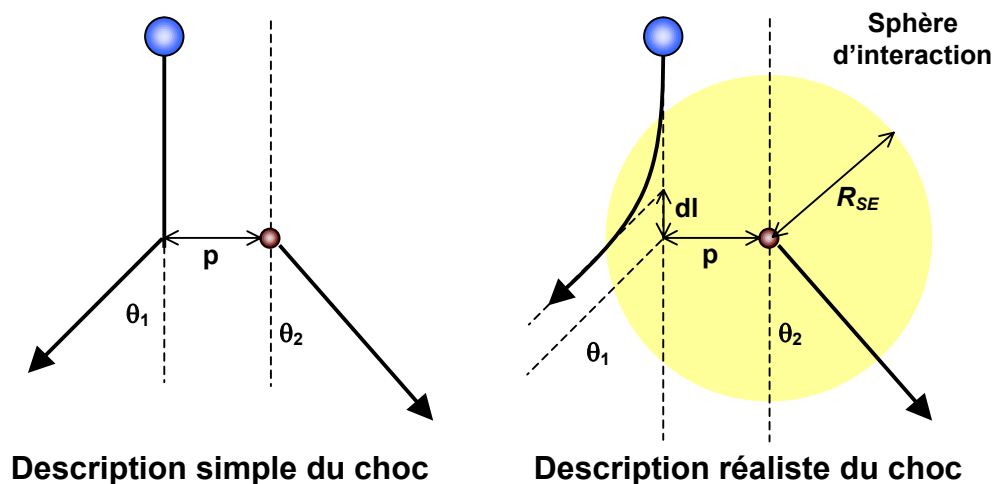
### **B.VII.2.1. Chocs hors de la cible**

L'angle  $\phi$  et le paramètre  $p$  permettent de déterminer la position de l'atome 2 avant collision. Ainsi, comme on peut le voir sur la Figure B-15, seuls les chocs avec des atomes réellement dans la cible sont pris en compte. Cela permet de gérer les effets de surface qui font que quand un ion approche de la cible, il peut entrer en collision avec des atomes de la cible avant de pénétrer dans cette dernière. Cette description des interactions nous permet de gérer les rebonds d'ions. Par ailleurs, ces chocs interviennent également au moment de la sortie d'atomes arrachés à la cible.



**Figure B-15 : Gestion des chocs en fonction de l'atome cible**

*Remarque :* La description des positions lors d'un choc n'est pas fidèle à la réalité. Ainsi la Figure B-16 montre que notre description du choc est ponctuelle et se situe dans le plan normal à la trajectoire initiale de la particule 1 et contenant la particule 2. En réalité, la déviation de la particule 1 se produit tant que les deux particules sont en interaction, soit dans la sphère de rayon  $R_{SE}$  (rayon de section efficace). Par conséquent, puisque par simplicité on considère une interaction ponctuelle, la position de la déviation pourrait être localisée avec plus de précision. Une des conséquences de notre description imparfaite est que pour une incidence normale on interdit toute interaction de l'ion avec la cible avant qu'il n'ait pénétré cette dernière.



**Figure B-16 : Description des chocs dans CSiPI (gauche) et une description plus réaliste (droite)**

### **B.VII.2.2. Phénomène de réfraction**

Hors de la cible, mais au voisinage de la surface, les atomes érodés sont encore soumis aux interactions stabilisantes avec les atomes de surface. La surface exerce donc une force de rappel sur les atomes sortant de la cible et dévie leur trajectoire en réduisant la vitesse des atomes selon leur composante normale à la surface. Durant ce ralentissement l'atome perd une énergie égale à l'énergie de surface. Si la composante normale à la surface de l'énergie

cinétique de l'atome est inférieure à  $E_s$ , alors l'atome est recollecté par la surface. Ces phénomènes de réfraction et recollection au voisinage de la surface sont illustrés par la Figure B-17.

L'angle d'émission  $\theta$  après réfraction peut être calculé à partir de l'angle d'émission avant déviation  $\theta_0$  et de l'énergie de la particule érodée. Ce calcul correspond à la diminution de la composante de la vitesse normale à la surface de façon à diminuer l'énergie de la particule de  $E_s$ . Ainsi,

$$\sin(\theta) = \sin(\theta_0) \cdot \sqrt{\frac{E}{E - E_s}}$$

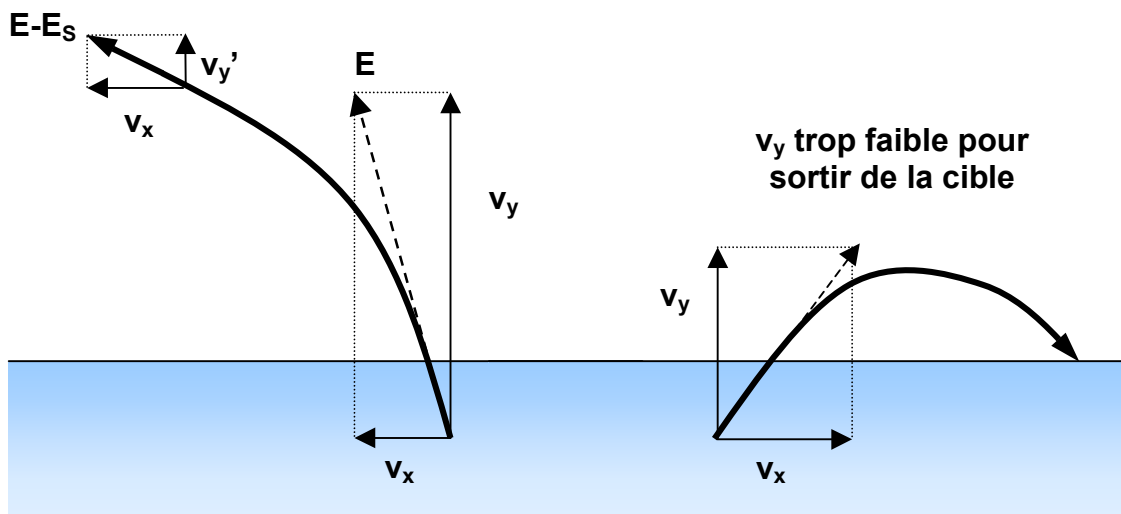


Figure B-17 : Réfraction en sortie de cible et piégeage d'atome pas assez énergétiques

### B.VII.3. Conclusion

Nous avons donc décrit la cascade de collisions en nous basant sur quelques approximations, la principale étant l'approximation des collisions binaires qui fait que toutes les collisions sont gérées indépendamment. Mais nous avons également effectué l'hypothèse d'une cible amorphe, ce qui autorise des suites de collisions impossibles. Sur ce point notre code diffère de TRIM dans la mesure où TRIM effectue des libres parcours de la valeur du libre parcours moyen, alors que nous tirons de façon aléatoire la valeur de ce parcours. Nous introduisons ainsi des séries de collisions irréelles, mais ne considérons que des parcours identiques est également irréal. Nous verrons par la suite que la comparaison de l'expérience avec la simulation nous donne raison.

## B.VIII. Validation de CSiPI

Nous verrons par la suite (Partie C) que nous avons effectué des mesures expérimentales d'érosion et de contamination, en particulier avec l'argent et l'aluminium. Nous n'allons pas nous attarder ici sur nos résultats expérimentaux, mais nous allons juste les utiliser pour montrer la corrélation entre certains résultats produits par CSiPI et l'expérience. A titre d'information, nous ajoutons également les résultats obtenus avec TRIM.

## B.VIII.1. Etude du taux d'érosion

Nous nous sommes intéressés à l'influence de l'angle d'incidence sur le taux d'érosion. Ainsi la Figure B-18 présente le taux d'érosion mesuré expérimentalement et simulé par TRIM et CSiPI. La corrélation entre CSiPI et l'expérience peut alors être considérée comme bonne. En effet, on retrouve qualitativement la même forme et quantitativement un taux d'érosion du même ordre quel que soit l'angle d'incidence. On rappelle par ailleurs que les formules de Yamamura et Oeschner ne donnaient pas de meilleurs résultats dans le cas du cuivre (§-B.IV.2.2).

Au contraire, TRIM fournit un taux d'érosion qui fait une erreur d'un rapport 2 environ à incidence normale. En outre, pour les fortes incidences, le taux d'érosion est surestimé. Nous pensons que le taux d'érosion est sous estimé à incidence nulle car la collision a toujours lieu à une profondeur égale au libre parcours moyen. Dans notre cas, cette première collision a lieu à une profondeur aléatoire. Or plus cette profondeur est limitée, plus on a une grande probabilité de produire de l'érosion. Nous avons vérifié ce phénomène en fixant nous même des libres parcours toujours égaux au libre parcours moyen.

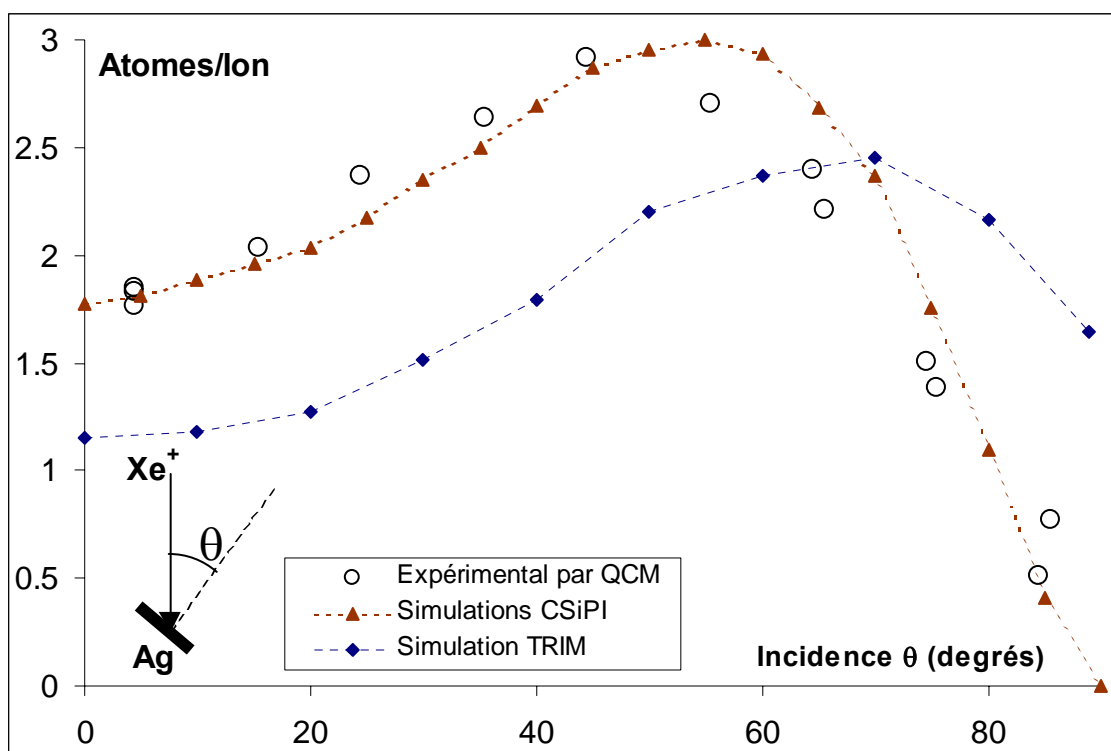


Figure B-18 : Taux d'érosion de l'argent bombardé par le Xénon à 300eV en fonction de l'angle d'incidence

## B.VIII.2. Etude de l'émission

Avec l'érosion, l'émission est l'autre aspect important de la pulvérisation ionique. On voit sur la Figure B-19, dans le cas du bombardement de l'aluminium par des ions  $Xe^+$  d'énergie 300eV sous incidence 30° que CSiPI peut prévoir la forme du lobe d'émission. Au contraire, TRIM produit une direction d'émission aberrante. Nous ne savons pas comment sont gérés les phénomènes de surface par TRIM, or ce sont ces phénomènes qui régissent fortement l'émission. Ces mauvais résultats proviennent certainement d'une mauvaise

description de ces phénomènes. Nous devons tout de même rappeler que TRIM a été conçu à l'origine pour étudier l'implantation des ions et pas l'érosion. Cela explique certainement les mauvaises performances de TRIM pour prévoir la pulvérisation ionique. Nous rappelons également que d'autres versions, notamment TRIM.SP (qui contrairement à TRIM n'est pas en libre accès) gère beaucoup mieux le phénomène de pulvérisation ionique.

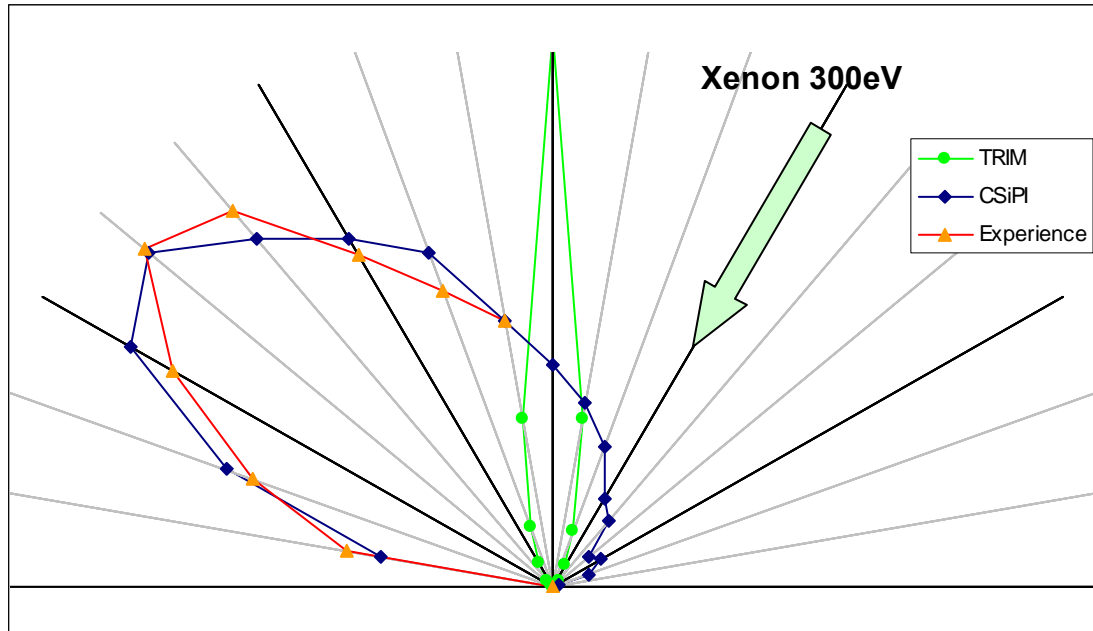


Figure B-19 : Emission de l'aluminium bombardé par du Xénon à 300eV sous incidence 30°

### B.VIII.3. Conclusion

Nous avons vu sur deux exemples que CSiPI produit des résultats très proches de l'expérience. Ainsi, nous pourrions utiliser CSiPI par la suite pour discuter nos résultats expérimentaux. Il pourra ainsi éclairer certaines observations et servira à étudier dans Partie D l'émission produite par la pulvérisation ionique.

## **B.IX. Conclusion**

Dans cette partie, nous nous sommes intéressés à la physique qui permet de décrire et expliquer le phénomène de pulvérisation ionique. Nous avons également introduit les notions qui permettent de caractériser et décrire ce phénomène.

Nous avons ensuite vu comment on peut simuler les cascades de collisions en utilisant l'approximation des collisions binaires. En particulier, nous nous sommes attardés sur le cas du modèle TRIM et sur ses paramètres d'entrée. TRIM est un logiciel disponible mais pas son code, ainsi, pour étudier la pulvérisation ionique en maîtrisant la description physique du phénomène, nous avons développé le code de simulation de la pulvérisation ionique CSiPI.

Dans cette partie, nous avons décrit le principe de fonctionnement de ce code en discutant des approximations que nous avons utilisées. Ainsi, après avoir validé sur quelques cas les bons résultats de la simulation, ce code sera utilisé dans la suite de la thèse comme comparaison de données expérimentales et comme outil pour simuler l'influence de paramètres que l'on ne peut pas toujours contrôler de façon expérimentale.

# Partie C. Etude expérimentale de la pulvérisation Ionique

## C.I. Introduction

Dans le but de produire des données expérimentales et de mieux comprendre les phénomènes de pulvérisation ionique, l'ONERA/DESP s'est doté de l'installation IDEFIXe (Installation Dédiee à l'Erosion sous un Flux d'Ions Xénon).

Cette installation a été initialement développée dans le but de produire des données expérimentales sur la pulvérisation ionique. Elle a été utilisée durant la thèse dans le but d'acquérir une meilleure connaissance des phénomènes mis en jeu durant la pulvérisation ionique.

L'Annexe a. décrit l'installation expérimentale et en particulier la source d'ions. En effet, c'est elle qui détermine les propriétés du faisceau d'ions qui produit la pulvérisation ionique. Nous verrons en particulier que nous avons été confrontés à une population de particules électriquement neutres, mais fortement énergétiques qui participent à l'érosion. Dans cette partie nous verrons comment nous avons dû tenir compte de ces neutres énergétiques dans la mesure du taux d'érosion.

Ces mesures du taux d'érosion ont été effectuées au moyen de microbalances à Quartz. Ainsi, nous verrons comment nous avons développé cette technique de mesure, ainsi que des résultats expérimentaux dans le cas de l'érosion de l'argent, tant à incidence normale qu'à incidence oblique.

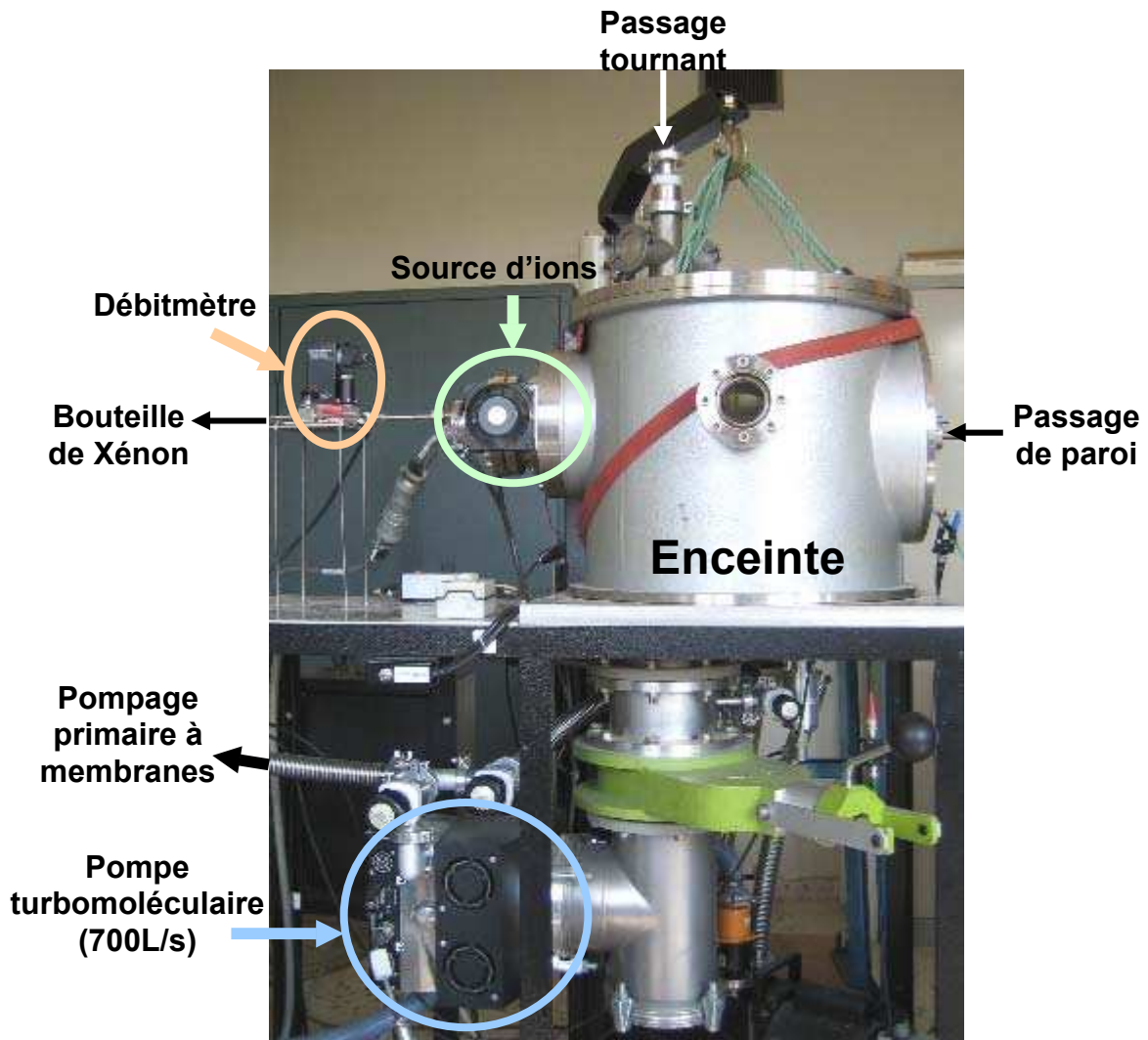
Pour finir, nous verrons un autre aspect de la pulvérisation ionique qui est l'émission et sa conséquence : la contamination. Nous verrons que nous avons développé des outils expérimentaux pour étudier ces deux phénomènes.

## C.II. Installation expérimentale

### C.II.1. Description de l'installation expérimentale

L'installation IDEFIXe est une enceinte sous vide munie d'une source d'ions et de diverses possibilités d'équipements (brides, passages de parois, passages électriques). La Figure C-1 permet de visualiser de les visualiser.





**Figure C-1 : Photo de l'installation expérimentale IDEFIXe**

Le pompage est effectué par une pompe turbomoléculaire elle-même pompée par une pompe primaire à membrane. Ainsi le pompage est "sec", ce qui est important quand on étudie la contamination. En effet, on évite alors la déposition d'huiles de pompage sur les cibles de contamination étudiées. Le pompage atteint 700L/s, ce qui permet d'obtenir un vide de l'ordre de  $10^{-7}$  mBar. Toutefois, en fonctionnement, du gaz est injecté dans l'enceinte via la source d'ions à hauteur de quelques dixièmes de Nml/min, ce qui fait augmenter la pression autour de  $10^{-4}$  mBar.

Cette installation est basée sur une source d'ions de type Kaufman<sup>41</sup>. L'utilisation de ce genre de source est plus souple que l'utilisation d'un vrai propulseur comme cela a pu être effectué parfois<sup>42,43,44</sup>. En effet, les réglages des champs magnétiques<sup>45</sup> pour différentes énergies d'ions ne sont pas évidents. Ainsi, la gamme d'énergie que l'on peut étudier avec un propulseur à effet hall est restreinte. La Figure C-2 présente brièvement une source de type Kaufman. Les ions sont produits sous le potentiel de l'anode par bombardement électronique dans la chambre d'ionisation. Les électrons sont produits par la cathode qui est polarisée négativement par rapport à l'anode (quelques dizaines de volts). Les ions sont alors extraits de la chambre d'ionisation par le système d'extraction composé de la grille écran fermant la chambre d'ionisation et la grille d'accélération polarisée négativement. Une description plus

détaillée de cette source d'ions est effectuée dans l'Annexe a. On y décrit également comment les réglages de source peuvent être optimisés de façon à limiter le flux d'ions sur la grille d'accélération.

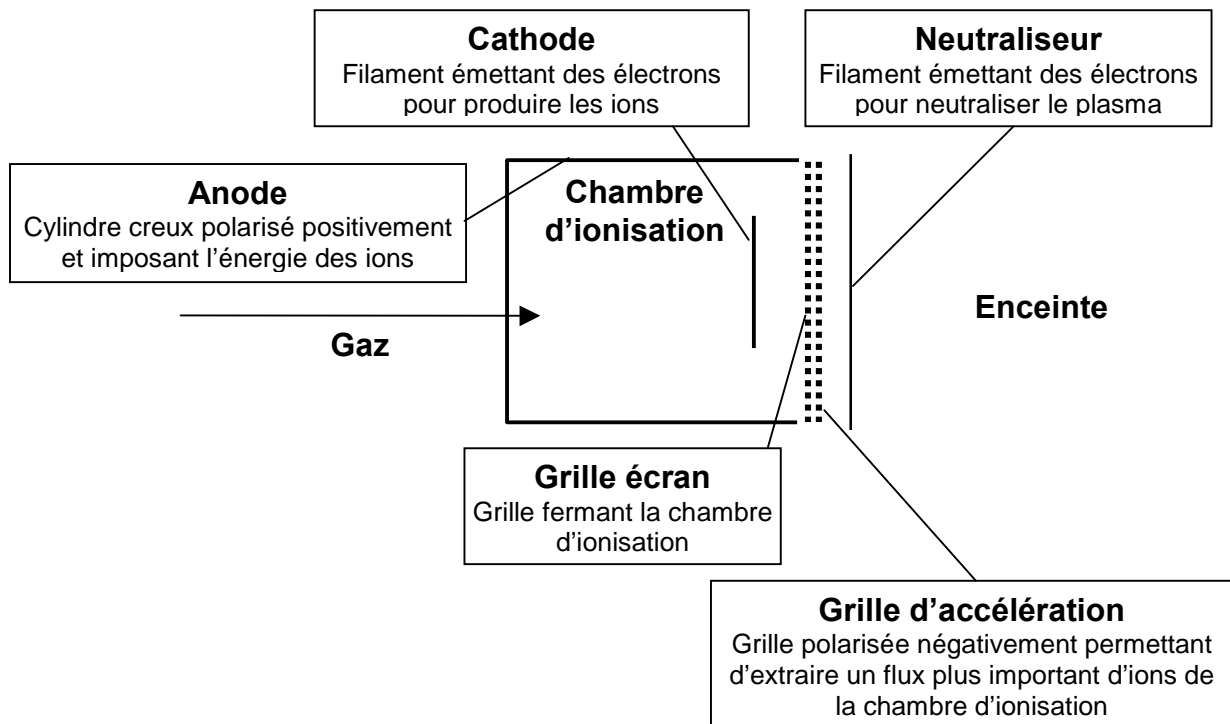


Figure C-2 : Représentation schématique de la source d'ions

## C.II.2. Caractérisation du jet d'ions

### C.II.2.1. Mesure du courant d'ions par sonde de Langmuir plane

La mesure du flux d'ions érodants est effectuée au moyen d'une sonde de Langmuir plane. De façon générale, une sonde de Langmuir est une surface conductrice polarisée placée au sein d'un plasma. Du fait de sa polarisation, la sonde collecte des électrons ou/et des ions, et c'est l'étude du courant ainsi collecté en fonction du potentiel imposé à la sonde qui permet de tirer des informations sur le plasma. Une méthodologie de mesure du courant d'ions<sup>10</sup> a été mise au point par Yvan Garnier durant sa thèse au sein du DESP<sup>46</sup>. On trace alors la « caractéristique » représentant le courant collecté en fonction de la polarisation de la sonde pour déterminer suite à un traitement mathématique le courant d'ions énergétiques érodants.

En pratique, on extrapole la branche ionique de la caractéristique (potentiels négatifs) supposée linéaire entre  $-20V$  et  $-40V$ . On détermine alors le flux d'ions énergétiques comme correspondant au courant extrapolé à  $0V$ . Ce calcul est expliqué dans l'Annexe a.

La Figure C-3 présente une photo d'une sonde de Langmuir plane. Cette sonde est en graphite, ce qui permet de limiter l'érosion de la sonde, et est isolée sur les cotés et en face arrière par un film d'adhésif en Kapton.

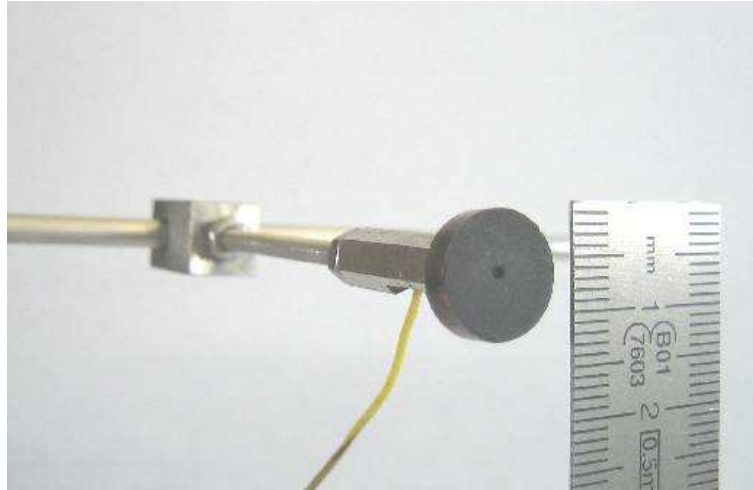


Figure C-3 : Sonde de Langmuir plane utilisée pour caractériser le flux d'ions érodants

### C.II.2.2. Mesure de l'énergie des ions par RPA

La source d'ions que nous utilisons est prévue par le constructeur pour fonctionner de 50 à 1000 eV. Le jet d'ions avait déjà été caractérisé à 300eV par Yvan Garnier<sup>10</sup>. Nous avons souhaité vérifier la validité de l'énergie des ions produits par la source aux limites basses d'énergie. Afin d'étudier l'énergie des ions produits par la source d'ions, nous avons utilisé un analyseur à potentiel retard communément appelé RPA (Retarding Potential Analyser). Le RPA a été placé au centre du faisceau et nous avons étudié l'énergie des ions Xénon pour les énergies de consigne de source 30, 40, 50 et 100eV.

#### C.II.2.2.1. **Principe de la mesure par RPA**

La mesure par RPA<sup>47</sup> est basée sur la collection d'ions par une surface collectrice (le collecteur), avec un filtrage en énergie de ces ions au moyen d'une grille polarisée. Les ions d'énergie cinétique supérieure à la barrière de potentiel créée par la grille polarisée la traversent et sont collectés alors les autres sont repoussés. Les charges collectées sont écoulées vers la terre en produisant un courant électrique mesuré au moyen d'un ampèremètre.

Pour être précis, le RPA n'effectue pas rigoureusement un filtrage en énergie. En effet, le filtre agit en réalité sur le quotient *Energie Cinétique/Charge*. Ainsi un ion doublement chargé produit sous un potentiel de 300V acquiert une énergie cinétique de 600eV, mais sera analysé par le RPA comme deux ions d'énergie 300eV. Une mesure distinguant les ions simplement chargés des ions doublement chargés peut être effectuée avec un analyseur de Wien utilisant un champ magnétique et un champ électrique croisés<sup>48</sup>. Toutefois, nous travaillons dans des conditions qui permettent de limiter fortement la production d'ions doublement chargés. Ils seront donc ignorés dans cette étude.

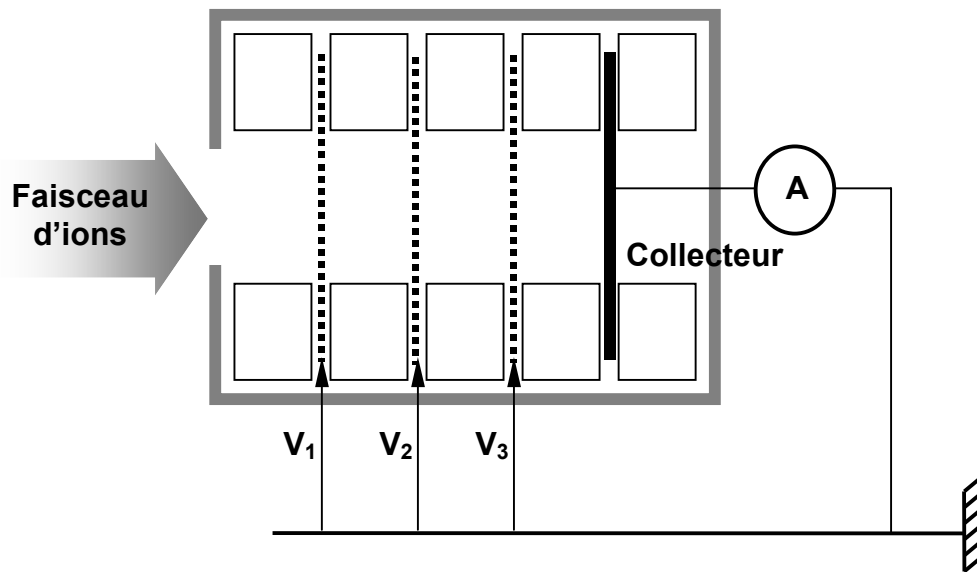
En pratique, le RPA n'est pas constitué d'une seule grille polarisée mais de trois, comme décrit par la Figure C-4.

La première grille fait face au flux d'ions et est polarisée au potentiel plasma pour ne pas perturber le plasma environnant ( $V_1 = V_{plasma}$ ).

La deuxième grille au potentiel variable  $V_2$  sert de filtre.

La troisième grille est polarisée négativement au potentiel  $V_3$ . Cette grille sert à empêcher la perturbation de la mesure du courant d'ions par les électrons issus soit de

l'enceinte, soit du collecteur par émission secondaire. Dans ce second cas, la grille polarisée négativement permet au collecteur de recollecter les électrons qu'il aurait émis.



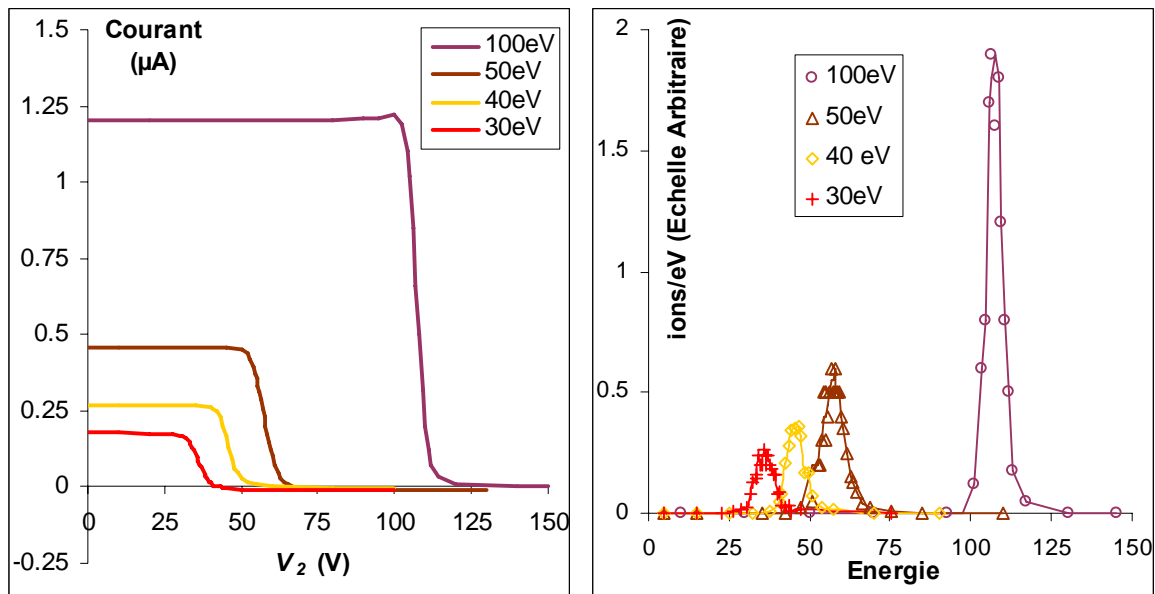
**Figure C-4 : Schéma du RPA**

En pratique, les valeurs des potentiels  $V_1$  et  $V_3$  sont fixes et ont été fixées à :  $V_1 = 4V$  (potentiel plasma) et  $V_3 = -20V$ . La valeur du courant collecté par le collecteur n'a pas de sens absolu, puisque ce dernier fait intervenir l'angle de vue du détecteur et la transparence du système de grilles. Ainsi, on ne s'intéresse qu'aux variations relatives du courant mesuré en fonction de la polarisation de la grille.

### **C.II.2.2.2. Résultats expérimentaux**

La caractérisation énergétique du faisceau d'ions a été effectuée pour des énergies de consigne de 30, 40, 50 et 100eV et un courant total de 10mA. Le premier graphique de la Figure C-5 montre les mesures brutes du courant reçu par le collecteur en fonction de la tension appliquée à la grille filtrante. On rappelle que la valeur du courant n'a pas grand sens en absolu, par contre elle est significative en tant que valeur relative. Ainsi la mesure effectuée pour une tension de filtration nulle montre une décroissance sensible du courant mesuré avec l'énergie de consigne. Cette décroissance est due à l'augmentation de la tension d'accélération pour les énergies d'ions les plus faibles. Il s'en suit une divergence du faisceau d'ion comme décrit dans l'Annexe a.

La forme globale de la courbe est un palier aux bas potentiels suivi d'une chute rapide du courant correspondant à l'énergie des ions. C'est la dérivée de cette courbe que l'on peut observer sur le second graphique de la Figure C-5 qui permet d'observer directement la répartition en énergie des ions.

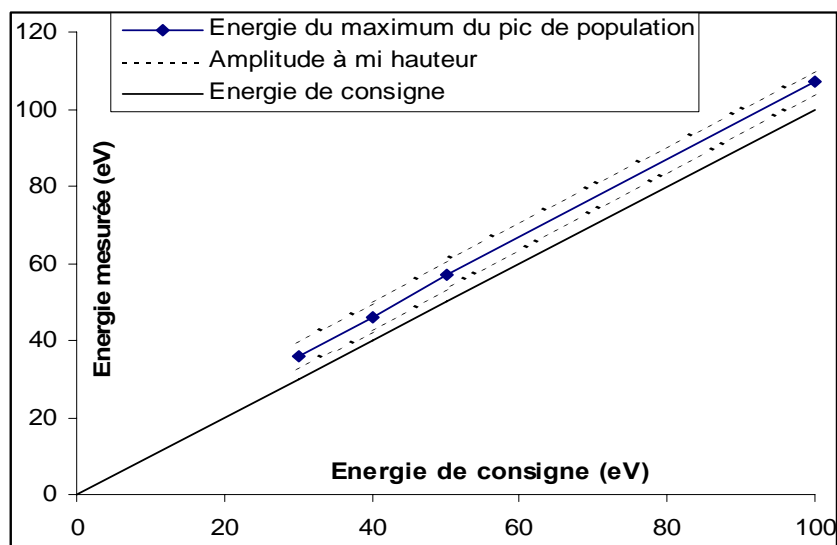


**Figure C-5 : Mesures avec une sonde RPA pour différentes consignes en énergie. Mesures brutes (gauche) du courant de collection en fonction de la tension de filtration  $V_2$ , et mesures dérivées (droite) décrivant la population énergétique du faisceau.**

### C.II.2.3. Conclusion

La source d'ions que nous utilisons permet d'obtenir des ions à basses énergies (jusqu'à 30eV). Toutefois, quand on abaisse le courant, on perd en intensité au centre du faisceau d'ions. Par ailleurs on se trouve dans un mauvais régime de fonctionnement pour la source d'ions.

Comme le montre la Figure C-6, les mesures par RPA montrent qu'il existe un décalage entre la consigne et l'énergie principale des ions créés. Ce décalage est de 6 à 7 eV pour les énergies étudiées. De plus, on observe une largeur de pic à mi-hauteur de 6 à 7eV pour les énergies étudiées. Cette différence peut être considérée comme négligeable au-dessus de 100eV, mais pour les plus faibles énergies, il faudra en tenir compte.



**Figure C-6 : Ecarts entre l'énergie des ions et l'énergie de consigne de la source**

D'autre part, nous rappelons qu'en toute rigueur cette étude ne permet pas de distinguer les ions simplement et doublement chargés. Or ces derniers ont une énergie double de celle mesurée par le RPA.

## **C.III. Neutres énergétiques**

Durant le travail de thèse, des mesures surprenantes de taux d'érosion ont attiré notre attention sur les neutres énergétiques produits par échange de charge. En particulier, nous avons mis en évidence leur existence et leur participation à l'érosion. Par conséquent, ces neutres perturbent fortement les mesures d'érosion puisqu'ils y participent sans être pris en compte par la sonde de Langmuir. On risque donc de mesurer une érosion excessive si on n'en tient pas compte.

Nous verrons par ailleurs que le faisceau de neutres n'a pas toujours les mêmes propriétés que le faisceau d'ions. Il peut en particulier être plus énergétique.

Il est donc d'une importance primordiale au mieux de supprimer, mais au moins de maîtriser le faisceau de neutres énergétiques.

### **C.III.1. Mise en évidence**

#### **C.III.1.1. Observations expérimentales**

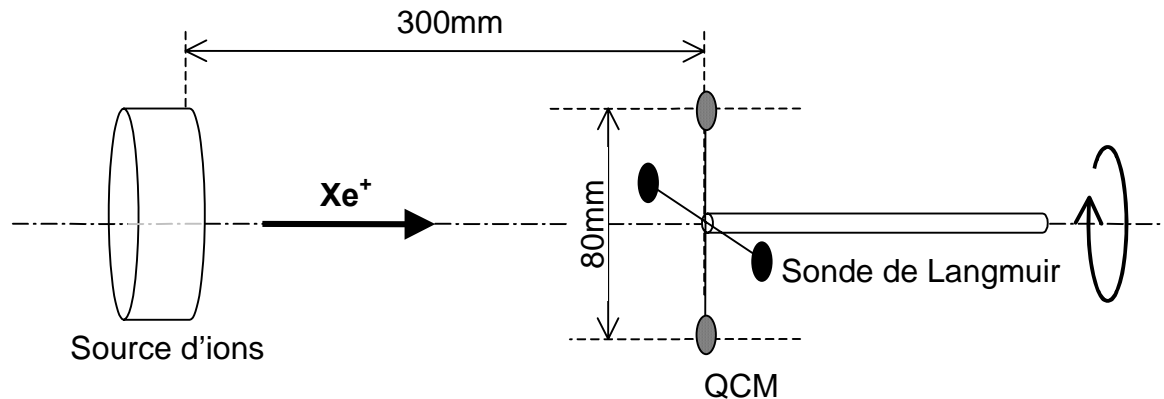
Avant le début de cette thèse, les mesures d'érosion étaient effectuées par pesées. Un échantillon exposé à un flux d'ions xénon était pesé avant et après érosion. Quant au flux d'ions, il était estimé au moyen d'une sonde de Langmuir. Dans ces conditions, les taux d'érosion mesurés par ce procédé étaient plus élevés que ceux proposés par la littérature. C'est un premier indice, certes mince, de l'existence d'une érosion que nous allons attribuer aux neutres énergétiques et qui s'ajoute à celle des ions. L'écart entre les mesures effectuées à l'ONERA et la littérature était d'autant plus important que l'on étudiait l'érosion à basse énergie. On est ainsi allé jusqu'à observer dans certaines conditions des taux d'érosion supérieurs lors de bombardement ionique à 100eV qu'à 300eV.

#### **C.III.1.2. Hétérogénéité spatiale du taux d'érosion**

Dans le but de comprendre cette érosion anormalement élevée, nous avons étudié l'érosion produite par notre source au moyen de microbalances à quartz (QCM). Nous verrons dans le paragraphe §-C.IV.1 le détail de cette technique de mesure que nous avons adapté à la mesure d'érosion. Nous pouvons d'ores et déjà retenir que les microbalances à quartz sont des disques de quartz de 14mm de diamètre sur lesquels on dépose le matériau dont on souhaite étudier l'érosion. La QCM permet alors de déterminer la masse du dépôt en temps réel donc de suivre la vitesse d'érosion d'un échantillon exposé à un flux d'ions. Il s'agit donc d'une mesure de taux d'érosion par pesée, mais qui a l'avantage d'être réalisée en temps réel et avec une excellente précision.

Nous avons ainsi équipé un passage de paroi dans l'axe de la source de deux microbalances à quartz et de deux sondes de Langmuir, comme indiqué par la Figure C-7. La rotation du passage de paroi permet de positionner successivement à une même position une

QCM (Microbalance à quartz) couverte d'argent et une sonde de Langmuir de façon à mesurer le taux d'érosion de l'argent.

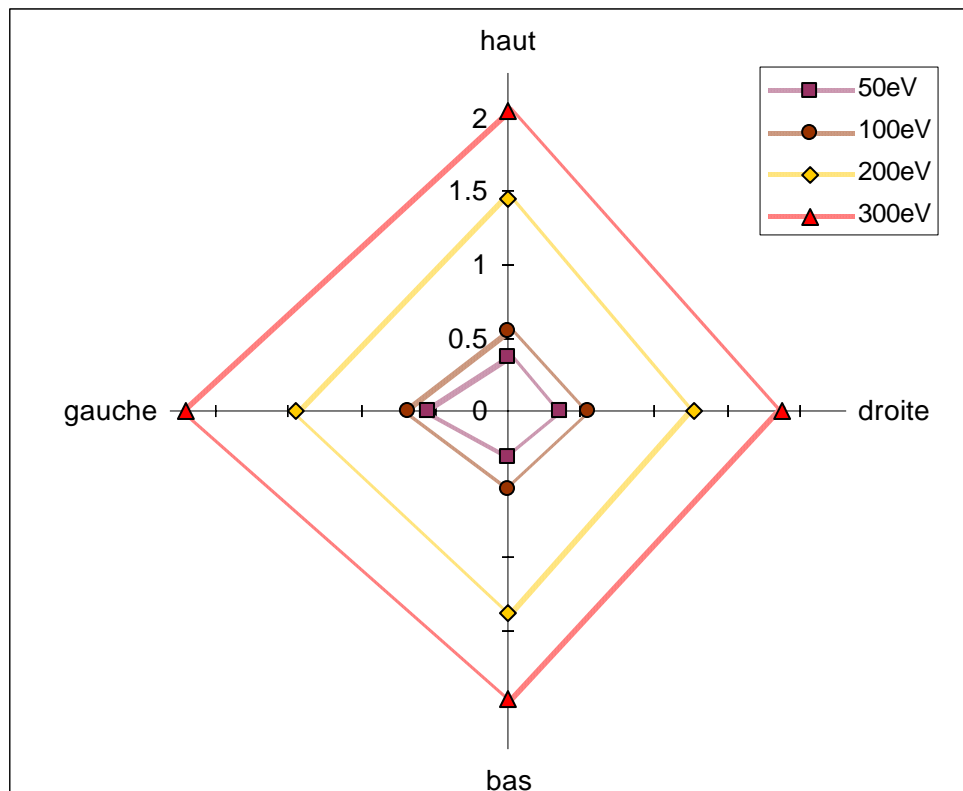


**Figure C-7 : Montage expérimental permettant la mesure de taux d'érosions en divers endroits**

On rappelle que le taux d'érosion pour un matériau bombardé par des d'ions d'énergie donnée et d'incidence donnée est une constante. Ainsi, nous avons étudié en divers endroits de l'enceinte le taux d'érosion au moyen d'une QCM et d'une sonde de Langmuir. Nous sommes particulièrement intéressés à quatre positions notées " haut", "bas", "droite" et "gauche" définies en regardant les échantillons à partir de la source. Et contre toute attente, nous avons mesuré des taux d'érosion différents pour ces quatre positions.

Ainsi la Figure C-8 montre ces différences spatiales de taux d'érosion mesurées aux quatre positions citées ci-dessus pour des énergies d'ions de 50, 100, 200 et 300eV. On observe que le taux d'érosion est plus fort à gauche. Par ailleurs, ces taux sont toujours supérieurs aux valeurs de la littérature<sup>49</sup>, ainsi le taux d'érosion de l'or vaut respectivement 0.16, 1.0 et 3.1 atomes par ion à 100, 200 et 300eV. Nous sommes donc confrontés au problème d'une érosion excessive.

Nous avons également vérifié qu'il s'agit bien d'un effet spatial, puisque les mesures effectuées au même endroit avec deux microbalances à quartz et deux sondes de Langmuir différentes donnent les même résultats (incertitude de l'ordre de 5%).

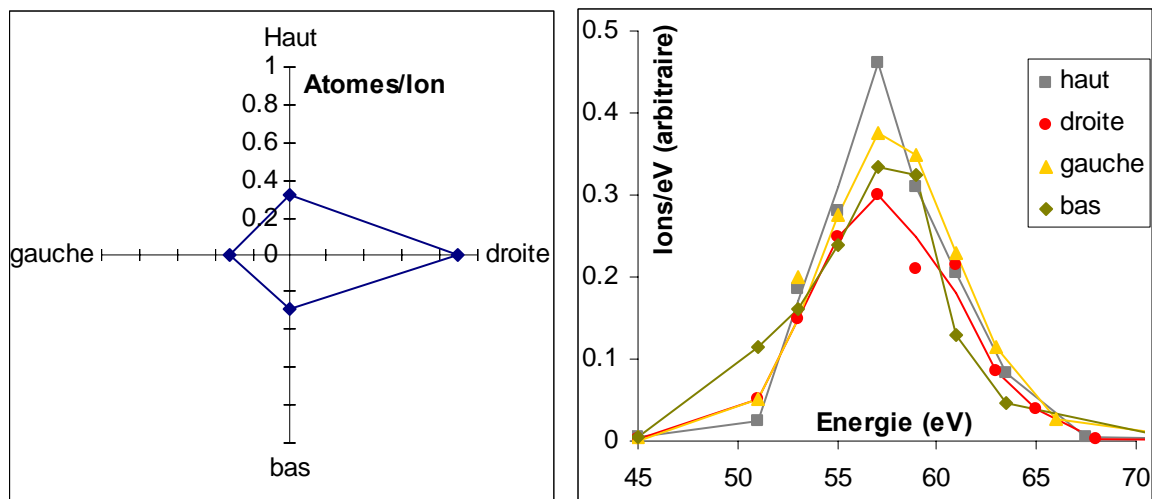


**Figure C-8 : Taux d'érosion mesurés pour l'argent par le xénon à diverses énergies aux quatre positions " haut", "bas", "droite" et "gauche" (Atomes par ion)**

Lors d'une autre expérience, nous avons mesuré à nouveau le taux d'érosion de l'or dans les quatre positions. Nous observons alors que la reproductibilité de la mesure est très mauvaise puisque cette fois ci, c'est à droite que l'érosion est plus importante. Cette modification à été obtenue en faisant passer la tension d'accélération de  $-550$  à  $-400V$ .

Afin d'exclure l'hypothèse d'ions trop énergétiques à certaines positions, nous avons analysé l'énergie du faisceau aux différentes positions au moyen d'un RPA. Certes, l'intensité des pics présentés par la Figure C-9 n'est pas la même pour toutes les positions, mais le calcul du taux d'érosion tient compte du flux d'ions. Par contre, l'énergie est identique dans les quatre positions. Les ions ont donc le même effet d'érosion pour chaque position.





**Figure C-9 : Mesure du taux d'érosion de l'or par des ions  $Xe^+$  à 50eV pour quatre positions (gauche) et spectre en énergie mesuré par RPA à ces mêmes positions (droite)**

### **C.III.1.3. Conclusion**

Nous avons observé une érosion excessive lors d'expériences par pesées avant et après érosion, ou lors d'expériences de mesure du taux d'érosion par QCM. Par ailleurs, nous avons mis en évidence le fait que le taux d'érosion dépend de la position dans l'enceinte, sans pour autant être lié au courant d'ions, ou à l'énergie des ions. Un dernier effet des ions a été exploré sans être présenté, il s'agit de la charge des ions. Mais même des ions doublement chargés ne peuvent pas expliquer un taux d'érosion à 50eV supérieur à celui prévu à 100eV.

Nous avons alors émis l'hypothèse qu'un flux de neutres énergétiques s'additionne au flux d'ions et que l'érosion due aux neutres n'est pas proportionnelle à celle due aux ions. Par neutres énergétiques, nous entendons, particules non chargées dont l'énergie est suffisante pour provoquer de l'érosion ionique. L'étude de l'existence et des effets des neutres énergétiques est l'objet du chapitre suivant.

### **C.III.2. Détecteur d'érosion par les neutres**

Afin de valider l'hypothèse d'une érosion produite par des neutres énergétiques, nous avons mis au point un dispositif permettant de caractériser l'érosion produite par les neutres. Nous avons appelé ce dispositif : Détecteur d'Erosion par les Neutres (DEN).

Nous verrons que des réactions dites d'échange de charge permettent de produire de tels neutres énergétiques. Ce sont ces neutres que nous soupçonnons d'être responsables de l'excès d'érosion. Nous verrons par la suite qu'il est nécessaire de proposer une seconde origine pour ces neutres énergétiques.

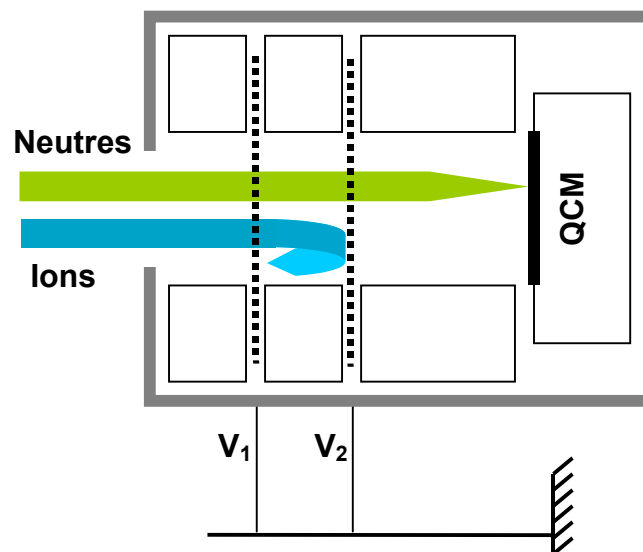
Les problèmes d'étude de la pulvérisation ionique induits par des neutres énergétiques ont déjà été rencontrés et mentionnés dans la littérature. On peut ainsi citer Blandino et al.<sup>50</sup> qui sont équipés d'une installation similaire à la notre. Kolasinski<sup>51</sup>, avec une installation différente, a également observé le même problème.

#### **C.III.2.1. Principe**

Le principe du détecteur que nous avons mis au point consiste à mesurer la vitesse d'érosion d'un dépôt sur une QCM en un endroit de l'enceinte, en présence et en absence des

ions. Pour supprimer les ions du faisceau d'ions, on polarise une grille à un potentiel suffisant pour repousser les ions. En pratique, le DEN dérive d'un RPA, où le collecteur est remplacé par une microbalance à quartz (QCM). Le principe des microbalances à quartz (QCM) sera décrit en détail dans la partie §-C.IV.1.

Le détecteur d'érosion par les neutres (DEN) est décrit par la Figure C-10. Comme dans le cas du RPA, une première grille fait face à l'enceinte et est polarisée au potentiel plasma de façon à ne pas perturber l'environnement du détecteur. La seconde grille portée au potentiel  $V_2$  permet de filtrer les ions, par contre, elle n'a aucun effet sur les neutres. Ainsi avec une polarisation nulle de la seconde grille, les ions et les neutres atteignent la microbalance à quartz et érodent le dépôt sur sa surface. En revanche, quand un potentiel supérieur à l'énergie des ions est imposé, on ne mesure plus que la participation des neutres à l'érosion. En effectuant le rapport des mesures avec et sans ions, on peut déterminer la proportion de l'érosion qui est due aux ions.



**Figure C-10 : Principe du DEN (détecteur d'érosion par les neutres)**

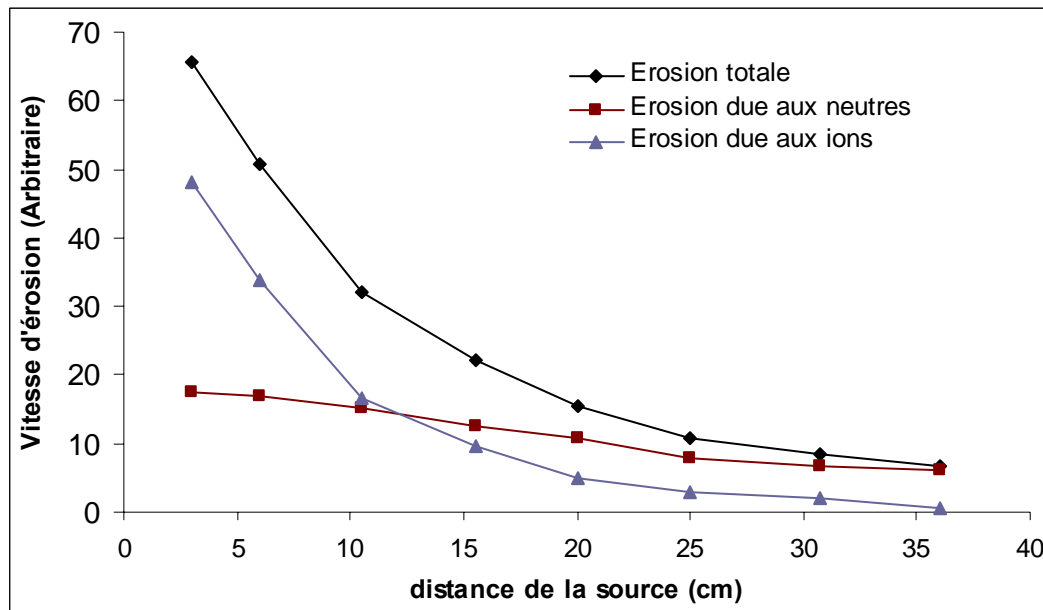
*Remarque :* Comme dans le cas du RPA, la mesure absolue d'érosion n'a pas grand sens puisque l'on maîtrise mal la transparence des grilles. On a donc uniquement accès à la proportion d'érosion due aux ions et celle due aux neutres.

### **C.III.2.2. Mesure de l'érosion due aux neutres**

Nous avons mesuré au moyen du DEN les proportions relatives d'érosion produites par les ions et les neutres dans le cas d'une source réglée pour produire des ions à 100eV (Courant total de 10mA et tension d'accélération de -500V). La Figure C-11 montre ces mesures à différentes positions dans l'axe de la source. L'échelle est arbitraire, toutefois les différentes mesures ont un sens les unes par rapport aux autres. Ainsi, on observe bien que l'érosion décroît quand on s'éloigne de la source à cause de la divergence du faisceau de particules érodantes.

On peut alors observer qu'à proximité de la source, l'érosion due aux ions est majoritaire et atteint 70% à 3cm de la source. Ainsi, déjà 30% de l'érosion est due aux neutres. Du fait de la forte divergence du faisceau d'ions (Annexe a), en s'éloignant de la source, l'érosion due aux ions décroît très rapidement. Mais dans le même temps, on observe

que l'érosion due aux neutres décroît très peu. Ainsi, l'érosion due aux neutres qui n'était déjà pas négligeable au voisinage de la source devient vite majoritaire à 10cm de celle-ci et finit pratiquement par se confondre avec l'érosion totale en fond d'enceinte.



**Figure C-11 : Evolution de l'érosion due aux ions et aux neutres en fonction de la distance à la source pour une source réglée à 100eV (tension d'accélération de -500eV)**

La preuve est ainsi faite de l'existence d'un faisceau de neutres énergétiques qui prend part à l'érosion. De plus, non seulement les neutres prennent part à l'érosion, mais en plus ils ont un poids majoritaire dans certains cas. On peut aussi remarquer que le faisceau de neutres énergétiques n'a pas les mêmes propriétés que le faisceau d'ions dans la mesure ou l'évolution des deux phénomènes en fonction de la distance à la source est très différente.

Ceci peut traduire deux phénomènes : soit il y a production de neutres au sein de l'enceinte de telle façon que la divergence est compensée par la production, soit le faisceau de neutres est beaucoup moins divergent que le faisceau d'ions.

### **C.III.2.3. Caractérisation spatiale du faisceau de neutres**

Nous venons de voir que l'érosion due aux ions et aux neutres évoluent différemment dans l'axe de la source. Nous nous sommes maintenant intéressés à l'influence de la position hors de l'axe de la source.

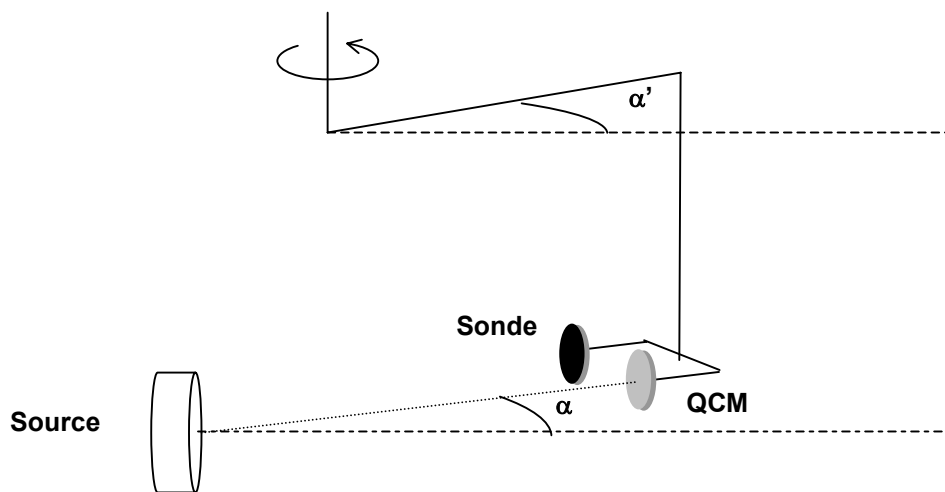
Toutefois, le DEN est parfois lourd d'utilisation. Puisque nous avons identifié l'origine de l'excès d'érosion, nous utilisons maintenant une simple QCM et une sonde de Langmuir pour étudier l'érosion due aux neutres. En effet, la sonde de Langmuir indique le flux d'ions et la QCM l'érosion. On peut donc en déduire l'érosion due aux neutres si on connaît le taux d'érosion des ions.

En pratique, nous avons monté une QCM couverte d'argent ainsi qu'une sonde de Langmuir sur un passage tournant comme décrit par la Figure C-12. L'idéal eut été de placer le passage tournant dans un axe passant par la source. Mais pour des raisons techniques, nous avons été contraints de le placer à 11cm de cet emplacement idéal. Avec notre montage, la

sonde de Langmuir et la microbalance se situent à 37cm de la source quand elles sont dans l'axe de la source.

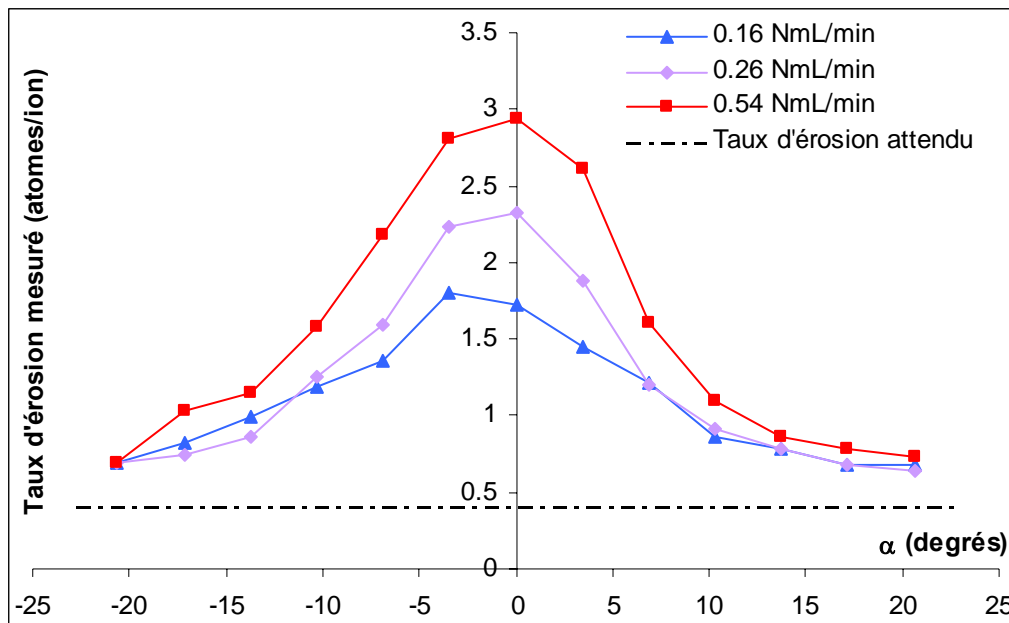
Ainsi, nous plaçons successivement la sonde puis la QCM à la même position en repérant l'angle  $\alpha'$ . On peut ainsi mesurer le taux d'érosion pour l'angle  $\alpha$  correspondant.

*Remarque* : Notre montage est imparfait puisque l'axe du passage tournant ne se situe pas dans l'axe de la source. Ainsi on fait apparaître un angle d'incidence pour les valeurs non nulles de  $\alpha$ . En pratique, cet angle ne dépasse pas  $10^\circ$ . Or on verra par la suite (§-C.IV.2.4) que le taux d'érosion évolue lentement à faible incidence. On peut estimer cette variation entre 5 et 10%.



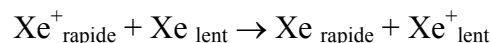
**Figure C-12 : Montage expérimental pour étudier la participation des neutres dans l'érosion hors de l'axe**

Ainsi, nous avons mesuré le taux d'érosion pour des valeurs de l'angle  $\alpha$  entre  $-20^\circ$  et  $20^\circ$ . Sur la Figure C-13 on peut observer les variations de taux d'érosion mesurées pour différents débits de gaz, mais toujours le même courant d'ions total de 10mA. En pratique on ne considère que le gaz non ionisé. On ne peut pas s'affranchir du gaz non ionisé à cause de la mauvaise efficacité d'ionisation de notre source d'ions. On observe alors que le taux d'érosion est toujours supérieur à celui cité par la littérature<sup>29</sup>. En outre cet excès d'érosion est bien plus important au centre du jet que sur les bords. On observe également que plus l'alimentation en gaz est importante, plus le taux d'érosion dans l'axe de la source est grand.



**Figure C-13 : Taux d'érosion de l'argent exposé à un faisceau d'ions  $Xe^+$  100eV en fonction de l'angle  $\alpha$  décrit à la Figure C-12 pour trois débits d'alimentation en gaz**

Cette dernière observation est cohérente avec l'idée de production de neutres énergétiques par échange de charge. Les échanges de charge sont le passage d'un électron d'une particule vers une autre particule passant à son voisinage. En particulier, un ion chargé positivement peut collecter un électron à une particule neutre et la neutraliser. Dans notre cas, la réaction suivante peut intervenir :

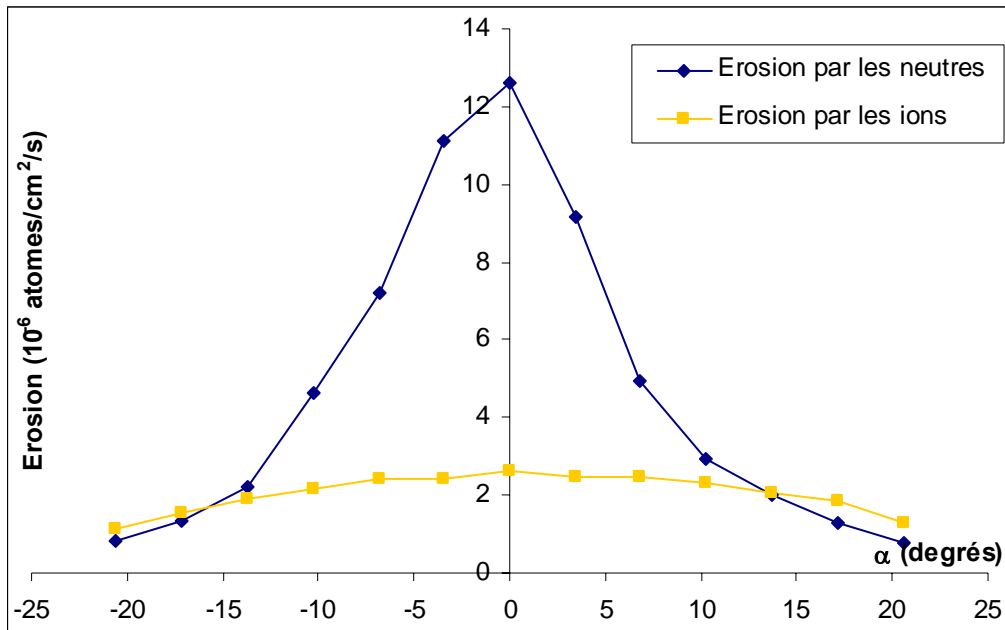


Dans ce cas, plus le débit de gaz est important, plus la densité d'atomes lents de xénon est importante. Donc la production de neutres énergétiques est également accrue.

#### **C.III.2.4. Divergence du faisceau de neutres**

A partir de la Figure C-13 on peut déduire l'érosion produite par les neutres puisque l'on connaît le flux d'ions et leur taux d'érosion. La Figure C-14 montre ainsi l'érosion produite par les neutres et celle due aux ions.

Nous en concluons que le faisceau de neutres est bien moins divergent que le faisceau d'ions. Cela nous permet maintenant d'attribuer la lente décroissance de l'érosion due aux neutres le long de l'axe de la source à la faible divergence du faisceau de neutres. En effet, si des neutres étaient produits par échange de charge en quantité au sein de l'enceinte, la quantité de neutres serait proportionnelle à la quantité d'ions.



**Figure C-14 : Erosion produite par les ions (100eV) et les neutres en fonction de l'angle  $\alpha$  (alimentation en gaz de 0.26 NmL/s)**

Nous proposons donc que les neutres participants à l'érosion sont principalement produits au niveau de la source et divergent ensuite moins que les ions. Pour étayer cette interprétation, nous allons étudier en détail la production des neutres participant à l'érosion.

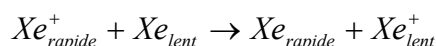
### **C.III.3. Production de neutres énergétiques par échange de charge**

Nous venons de voir que le faisceau de neutres semble être formé au niveau de la source d'ions. Nous allons donc étudier le phénomène d'échange de charge en détail afin d'expliquer pourquoi l'érosion est produite par des ions d'échange de charge produits au niveau de la source. En effet, nous allons voir qu'à cause du mauvais rendement d'ionisation de la source d'ions, une forte densité de neutres se situe au voisinage des grilles d'extraction. Or à cause de l'existence d'une grille d'accélération dans la source d'ions, les ions ont à cet endroit une énergie cinétique supérieure à l'énergie de consigne et peuvent donc y produire par échange de charge des neutres plus énergétiques que les ions.

Nous allons ainsi étudier toutes les données nécessaires à l'estimation de l'érosion induite par les neutres d'échange de charge. Blandino et al.<sup>50</sup> a effectué un travail similaire, mais n'a pas considéré l'énergie des ions au moment de l'échange de charge.

#### **C.III.3.1. Description du phénomène d'échange de charges**

Le phénomène d'échange de charge est le transfert d'un électron d'un ion vers un atome neutre passant à son voisinage. Un échange de charge ne modifie ni la direction ni la vitesse des deux particules s'échangeant un électron. Dans notre cas, ce sont les ions rapides qui captent un électron à des atomes neutres et les ionisent par la même occasion. Ainsi, la réaction d'échange de charge peut être résumée par :



La probabilité pour un ion de subir un échange de charge sur un parcours  $dl$  au sein d'un gaz neutre de concentration  $n$  (atomes par  $m^3$ ) est proportionnelle à la section efficace d'échange de charge  $\sigma_{CEX}$ .

$$dP = n \cdot \sigma_{CEX} \cdot dl$$

Dans le cas de l'échange de charge entre un ion  $Xe^+$  et un atome de xénon neutre, Pullins<sup>52</sup> propose la section efficace d'échange de charge suivante fonction de la vitesse relative entre les deux particules  $v$  (m/s) :

$\sigma_{CEX} = (a - b \log_{10} v)(E_i / E_H)^{-1.5} \times 10^{-20} \text{ m}^2$ , avec  $a$  et  $b$  résultant du fit de données expérimentales:  $a=209.01$  et  $b=26.83$ ,  $E_i$  et  $E_H$  sont les potentiels d'ionisation respectivement du xénon et de l'hydrogène, soit  $12.13\text{eV}$  et  $13.6\text{eV}$ .

Pour estimer la quantité d'échanges de charge, il faut connaître la vitesse des ions qui est fonction du potentiel local, ainsi que la densité des neutres le long du parcours des ions.

### **C.III.3.2. Densité de gaz le long du parcours des ions**

La densité locale en xénon est constituée de deux composantes qui sont la pression résiduelle que l'on peut mesurer avec une jauge de pression et ce que l'on appellera la surpression en sortie de source. Cette surpression est produite par la fraction du gaz injecté dans la source qui n'est pas ionisée.

On peut alors estimer le profil de la surpression à partir de la géométrie de la grille et du flux de gaz. Pour cela, nous allons faire l'hypothèse que l'émission de gaz à partir de chaque trou de la grille se fait à partie d'une distribution isotrope de vitesse. Ainsi, on peut considérer que l'émission suit une loi en cosinus en chaque point ouvert de la grille d'accélération.

*Remarque* : Cette description de l'émission est très simpliste dans la mesure où l'épaisseur des grilles est du même ordre que le diamètre des trous de la grille. En outre, la grille d'accélération est précédée par la grille écran, qui fait que la répartition des vitesses des atomes atteignant la grille d'accélération n'est pas isotrope. Toutefois, nous avons essayé de modéliser la grille plus finement en tenant compte de sa géométrie réelle et nous avons obtenu des résultats très proches de ceux obtenus pour une émission en cosinus.

De manière générale, nous allons considérer une ouverture circulaire de rayon  $R$ , émettant un flux total  $\Phi$  de xénon de vitesse moyenne  $v$  de façon uniforme sur sa surface et selon une loi en cosinus en tout point  $S$  de sa surface d'aire  $A_{ouverture}$ . Tout point  $S$  de l'ouverture est repéré par l'angle  $\alpha$  et le rayon  $r$ . Alors la Figure C-15 montre comment on peut calculer la densité d'atomes en tout point  $M$  de l'espace due à l'émission par l'ouverture.

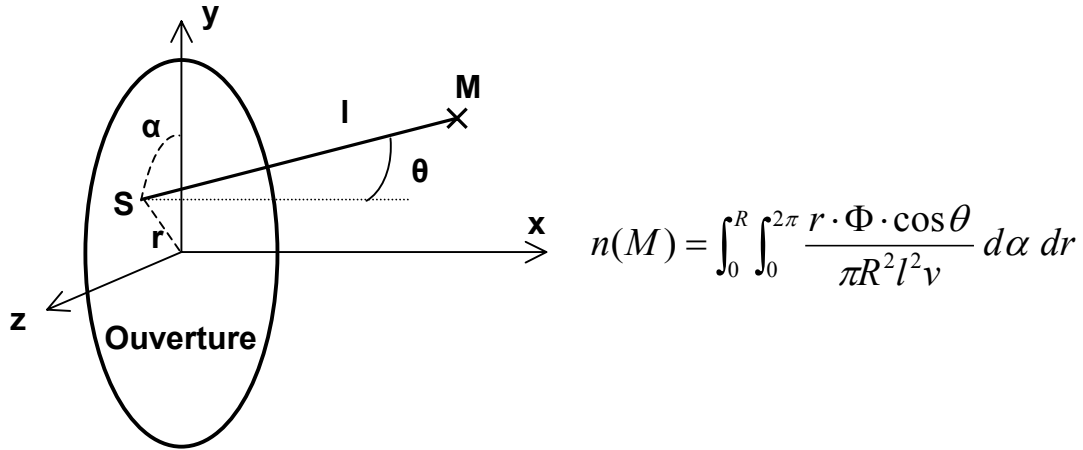


Figure C-15 : Calcul de la densité de xénon en aval d'une ouverture

De façon générale, on ne peut pas calculer de façon analytique la densité produite en tout point M de l'espace, par contre sur l'axe de l'ouverture, ce calcul est possible. Ainsi, sur l'axe, à l'abscisse x, la densité de gaz émise par l'ouverture vaut :

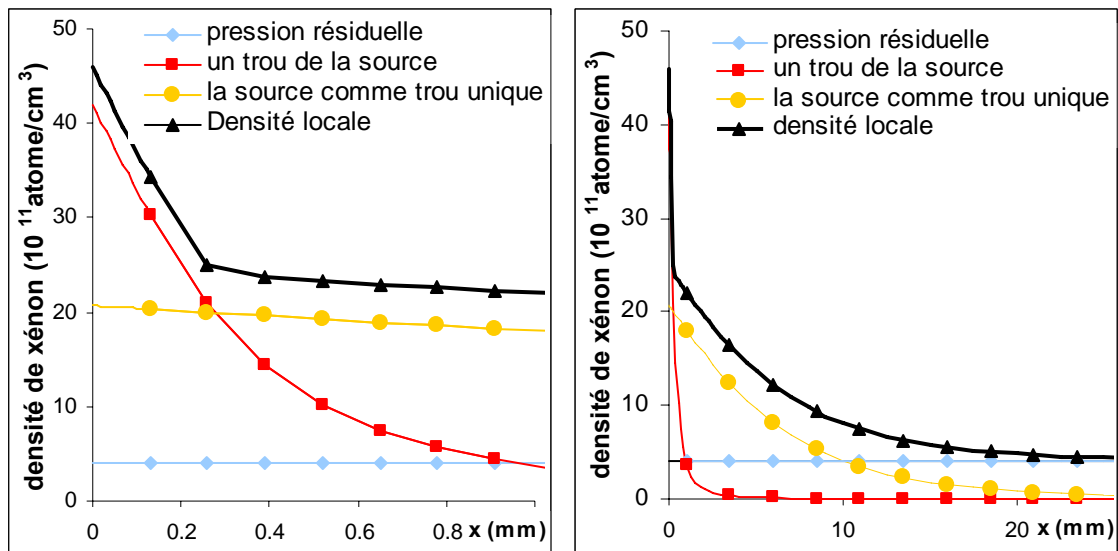
$$n(x) = n(0) \left[ 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + (R/x)^2}} \right] \text{ avec } n(0) = 2 \cdot \frac{\Phi}{\pi R^2 v} \text{ et } v = \sqrt{\frac{8kT}{2\pi m}}$$

Il faut considérer la source différemment suivant que l'on se trouve à une distance faible par rapport à la taille des trous ou à une distance élevée. En effet, si on se place loin de la source, on peut la considérer comme une ouverture unique délivrant une densité de flux égale au rapport du flux  $\Phi$  par l'aire de la source  $A_{source}$ . Si au contraire, on se place à proximité de la source, il faut considérer chaque trou émettant une densité de flux accrue égale  $\Phi / (A_{source} \cdot \tau)$ , où  $\tau$  est la transparence de la grille (45%).

Nous considérons alors que la densité de gaz due à la surpression dans l'axe de la source est le maximum de la pression due à un trou unique et de la pression due à la source considérée comme une ouverture unique.

Ainsi la Figure C-16 présente la densité locale constituée de la densité due à la pression résiduelle à laquelle la surpression est ajoutée. Les calculs ont été effectués pour une grille de 3cm de diamètre de transparence 45% et composée de trous de 1mm de diamètre. Jusqu'à 0.25 mm, cette surpression est considérée comme étant due à un unique trou, puis au-delà, on considère la participation de la source totale.





**Figure C-16 : Estimation de la densité en xénon en aval de la source d'ions pour un flux total de 0.26 NmL/min**

On observe alors que la pression au voisinage de la source est très sensiblement supérieure à la pression résiduelle mesurée au sein de l'enceinte. On observe ainsi que la densité en sortie de la grille d'accélération due à la surpression est 10 fois supérieure à celle due à la pression résiduelle. Toutefois, la surpression décroît rapidement et on peut considérer qu'à 20mm de la grille d'accélération l'influence de la surpression sur la densité de neutres est nulle.

### **C.III.3.3. Poids des neutres dans l'érosion**

#### **C.III.3.3.1. Influence de l'énergie**

Nous venons de voir que la surpression de gaz accroît sensiblement la densité de gaz en sortie de source. Toutefois, cet effet décroît très rapidement et ne s'étend qu'à quelques centimètres. Ainsi l'influence de la surpression sur la production de neutres est limitée en nombre. En effet, en considérant une section efficace d'échange de charge constante sur le parcours des ions, la production de neutres par échange de charge due à la surpression équivaldrait à 3cm parcourus à travers la pression résiduelle.

Mais comme le montre la Figure C-17, à l'intérieur de la grille d'accélération et au sein de la gaine électrostatique les ions ont une énergie cinétique supérieure à l'énergie cinétique des ions dans l'enceinte. La Figure C-17 montre ainsi de façon schématique le potentiel local, et la densité de gaz le long du parcours des ions. L'Annexe a. propose un calcul de gaine électrostatique.

L'excès d'énergie cinétique provient de la conservation d'énergie. Ainsi au voisinage de la grille d'accélération, l'énergie potentielle électrique  $qV$  étant négative, l'énergie cinétique est supérieure à l'énergie potentielle électrique initiale  $qV_{anode}$  acquise dans la chambre d'ionisation:

$$\frac{1}{2}mv^2 + qV = qV_{anode}$$

Ainsi, les échanges de charge produits au voisinage de la grille d'accélération produisent des neutres plus énergétiques que la consigne d'énergie pour les ions, donc produisant une pulvérisation plus importante. Dans ce cas, plus la tension d'accélération est importante, plus le poids des neutres dans l'érosion est grand. Ce poids des neutres est d'autant plus important que l'énergie des ions se rapproche du seuil d'érosion.

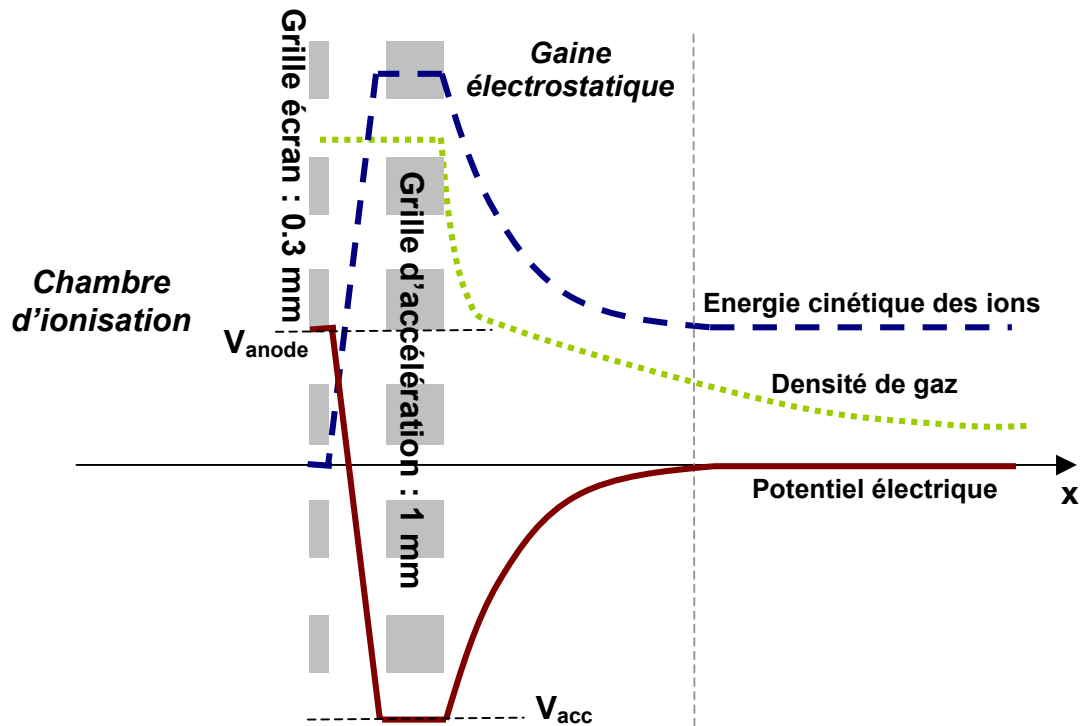


Figure C-17 : Evolution du potentiel électrique, de l'énergie cinétique des ions et de la densité d'ions le long du parcours des ions en sortie de source

### C.III.3.3.2. Différence de divergence des ions et des neutres

Comme nous l'avons vu au §-C.III.1.2, le faisceau de neutres participants à l'érosion est bien moins divergent que celui dû aux ions. Ceci s'explique par le fait que la divergence des ions apparaît principalement au sein de la gaine électrostatique, à cause de la charge d'espace et d'une décélération longitudinale (voir Annexe a).

Or quand un échange intervient, le neutre ainsi produit n'est plus sensible à la gaine qui fait diverger les ions. Le faisceau de neutres énergétiques quand il est produit dans la gaine est donc moins divergent que le faisceau d'ions qui le produit.

### C.III.3.4. Conclusion

Nous avons vu que le phénomène d'échange de charge permet de produire des neutres énergétiques qui participent à l'érosion. Mais à cause du mauvais taux d'ionisation de la source d'ions, une grande quantité d'échanges de charge se produit au voisinage de la grille d'accélération. Or à cause du potentiel négatif de cette dernière, les ions ont à son voisinage une forte énergie cinétique. Ainsi, beaucoup de neutres plus énergétiques que les ions sont produits par échange de charge au voisinage de la source. Nous avons également vu que

puisqu'ils sont produits dans la gaine électrostatique, ces neutres forment un faisceau bien moins divergent que le faisceau d'ions.

### C.III.4. Autre origine pour les neutres énergétiques

Avec les échanges de charge, nous avons identifié une origine des neutres énergétiques qui explique nos observations expérimentales. Toutefois, cela n'exclut pas l'existence d'une autre origine pour les neutres énergétiques. Nous allons voir que les échanges de charge ne suffisent pas à expliquer la totalité de l'érosion par les neutres. Nous proposons alors que des collisions d'ions sur la grille d'accélération peuvent également produire des neutres.

#### C.III.4.1. Insuffisance des échanges de charge pour expliquer l'érosion

En analysant les mesures déjà présentées à la Figure C-13, nous avons déterminé l'érosion totale produite par les neutres. Pour cela, nous avons dû considérer que le domaine d'angles étudié contient la totalité de l'érosion par les neutres. Cette hypothèse est un peu forte et conduit à une sous-estimation. Par érosion totale, nous entendons l'érosion que produiraient les neutres sur une sphère ayant pour centre le centre de la grille d'accélération de la source.

On obtient ainsi une érosion totale pour les trois alimentations en xénon non ionisé dans l'ordre croissant de respectivement 1.4, 1.8 et 2.3  $\mu\text{g/s}$  d'érosion du dépôt d'argent. La Figure C-18 montre ces trois érosions en fonction du débit de gaz non ionisé. On pourrait s'attendre à ce que la production d'ions énergétiques au niveau de la source d'ions soit proportionnelle à la surpression et donc au débit de gaz non ionisé. Or ce n'est pas le cas. Si on extrapole l'érosion pour un flux de gaz nul, on obtient une érosion totale non nulle.

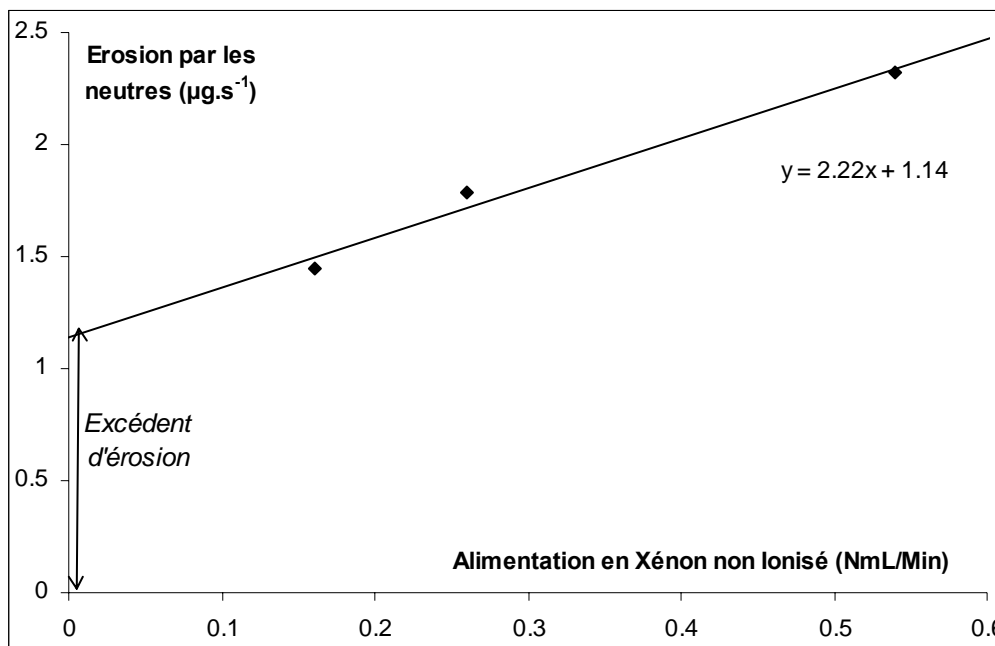
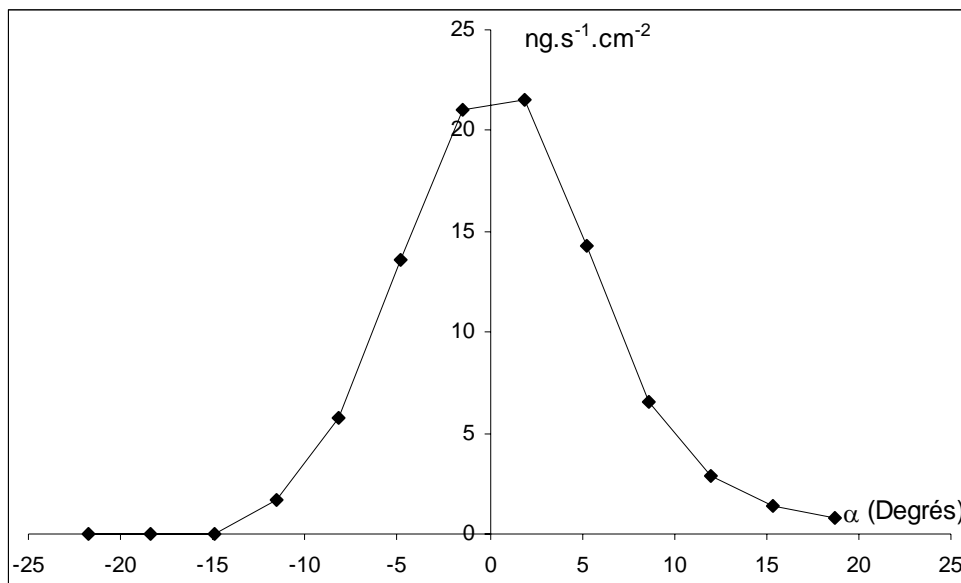


Figure C-18 : Erosion totale due aux neutres en fonction de l'angle du débit de gaz non ionisé

*Remarque:* Ici, on ne raisonne que sur la surpression, alors que la pression résiduelle en Xénon produit également des échanges de charge au niveau de la grille d'accélération. Or la surpression est proportionnelle au débit total de gaz injecté dans l'enceinte. Toutefois, dans la gaine électrostatique (inférieure à 4mm), l'influence de la surpression sur la densité est sensiblement plus importante que celle de la pression résiduelle. Par ailleurs, la pression résiduelle croît avec le débit de gaz non ionisé puisqu'elle est proportionnelle au débit total de xénon. C'est à dire la somme du gaz ionisé (0.14NmL/min dans ce cas) et du gaz non ionisé.

### C.III.4.2. Erosion des neutres en absence d'ions érodants

Afin de ne pas être perturbé par la mesure de l'érosion produite par les ions, nous avons étudié l'érosion d'une QCM recouverte d'argent et bombardée par un flux d'ions à 40eV. Pour cela la source d'ions est réglée pour 10mA d'ion  $Xe^+$  à 40eV et avec une tension d'accélération de -560eV, pour une alimentation totale en gaz de 0.4NmL/min, soit 0.26NmL/min de gaz non ionisé. Dans ces conditions, les ions ont une énergie trop faible pour produire une érosion significative (§-C.IV.2.4.3). Du moins cette érosion est grandement négligeable devant l'érosion produite par les neutres. Ainsi, la Figure C-19 montre l'érosion que nous avons mesurée expérimentalement dans ces conditions. On observe que l'érosion est très forte au centre du jet, alors qu'elle tend vers zéro sur les bords.



**Figure C-19 : Erosion due aux neutres produits par une source réglée pour produire 10mA des ions  $Xe^+$  à 40eV, avec une tension d'accélération de -560V et un débit de gaz total de 0.4NmL/min soit 0.26NmL/min de gaz non ionisé**

*Remarque:* Le profil de courant d'ions mesuré est quasiment plat entre -20 et 20°. Or l'érosion est nulle sur les bords. Cela confirme que l'érosion produite par les ions est nulle.

Pour ce réglage de source, on peut connaître la forme de la gaine en fonction de la distance à la grille d'accélération  $x$  en résolvant l'équation de Poisson (Annexe a) donc les potentiels traversés par les ions. Nous connaissons également le profil de concentration de gaz (§-C.III.3.3.1), ainsi que la section efficace d'échange de charge en fonction de l'énergie cinétique  $Ec$  des ions. Par ailleurs, nous verrons dans le chapitre §-C.IV.2.3 que l'on peut

considérer que le taux d'érosion  $Y$  de l'argent par des ions ou des atomes de xénon d'énergie cinétique  $Ec$  supérieure à 50eV peut être approximé par la loi :  $Y=0.0072(E(eV)-50)$

Nous pouvons alors déterminer l'érosion totale produite par les neutres.

$$Erosion_{totale} = \int_{parcours} \sigma(Ec(x)).n(x).Y(Ec(x)).dx$$

Ce calcul prévoit une érosion totale 0.27µg/s, alors que l'intégration de la courbe de la Figure C-19 correspond à 1.9µg/s. Ainsi, dans ce cas les neutres produits par échange de charge n'expliqueraient qu'un septième de l'érosion produite par les neutres.

*Remarque* : Une érosion 1.9µg/s est l'érosion produite par 6% des 10mA d'ions érodant de l'argent à 600eV. Cela représente une quantité considérable de neutres

### **C.III.4.3. Création de neutres au contact de la grille d'accélération**

#### **C.III.4.3.1. hypothèse**

On observe une importante érosion qui n'est pas totalement produite par les neutres d'échange de charge. Par ailleurs ces neutres sont plus énergétiques que les ions puisque dans l'expérience précédente les ions étaient trop peu énergétiques pour produire de l'érosion. Ainsi, il est très probable que comme les neutres d'échange de charge, les autres neutres soient produits à proximité de la grille d'accélération.

Nous proposons alors que les autres neutres soient produits lors de collisions des ions avec l'intérieur des trous de la grille d'accélération. Ce genre de collisions est bien connu puisqu'il tend à élargir les trous des grilles des propulseurs à grilles et à limiter leur durée de vie<sup>53,54,55</sup>. En fonctionnement normal, les collisions sont sensées être peu nombreuses, mais au fur et à mesure de l'érosion des trous des grilles, ils s'élargissent et modifient ainsi la carte des potentiels électriques. Ainsi, le nombre de collisions sur les grilles a tendance à augmenter avec l'usure des grilles.

Cette hypothèse permet d'expliquer la formation de neutres énergétiques.

*Remarque* : Les chocs sur les parois des trous des grilles permettant un rebond des ions sont ceux qui se font à incidence très rasante, en effet un atome de Xe ne peut pas être dévié d'un angle supérieur à 5° par un atome de C (§-B.VI.1). L'autre conséquence est que l'on ne peut produire ainsi qu'un faisceau très focalisé de neutres, et c'est d'ailleurs ce que nous observons.

#### **C.III.4.3.2. Etude des collisions sur les grilles**

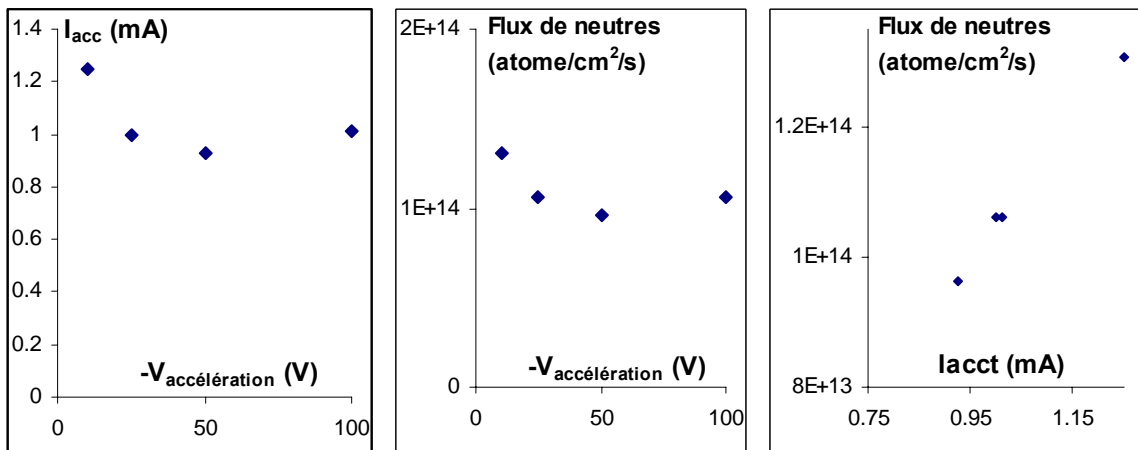
L'Annexe a. explique que les impacts d'ions sur la grille d'accélération sont caractérisés par le courant d'accélération. Ainsi, nous avons entrepris de comparer le flux de neutres et le courant d'accélération afin d'étudier s'il existe une corrélation entre les deux.

Toutefois, nous ne sommes pas capables de connaître directement le flux de neutres. En effet, nous ne connaissons que leur effet, c'est à dire l'érosion. Pour déterminer le flux de neutres à partir de l'érosion qu'ils provoquent, il faut connaître leur énergie. Or il risque d'y avoir une dispersion de l'énergie pour les neutres produits par échange de charge, en fonction de la localisation de l'échange de charge dans la gaine. Pour remédier à ce problème, il faut que la tension d'accélération soit petite devant l'énergie de consigne des ions.

Afin de travailler dans ces conditions, nous avons réglé la source pour une énergie de 300eV et un courant de 5mA. Ainsi, la tension d'accélération peut être pratiquement nulle sans produire un courant d'accélération excessif. Pour faire varier le courant d'accélération, nous avons fait varier la tension d'accélération entre -10V et -100V. Nous avons alors mesuré l'érosion d'une QCM couverte d'argent et le flux d'ions  $Xe^+$ . Connaissant le taux d'érosion de l'argent nous en avons déduit l'érosion produite par les ions et celle produite par les neutres, comme cela avait été fait lors de l'expérience représentée à la Figure C-14.

Nous avons alors émis l'hypothèse que l'énergie des ions est la différence entre l'énergie de consigne et la tension d'accélération. C'est l'énergie attendue dans le cas d'un rebond sur les grilles de la source. Les résultats que nous avons obtenus sont résumés par la Figure C-20.

On peut y voir le courant d'accélération mesuré en fonction de la tension d'accélération. On observe alors qu'il existe un optimum de tension d'accélération vers -50V minimisant le courant d'accélération. On peut également observer sur le deuxième graphique que pour ce minimum de courant d'accélération, on a également un flux minimum de neutres énergétiques. Enfin, si on trace le flux de neutres en fonction du courant d'accélération, on observe qu'il existe une corrélation entre le courant d'accélération et le flux de neutres dans l'axe de la source.



**Figure C-20 : Relations entre la tension d'accélération, le courant d'accélération et le flux de neutres mesuré dans l'axe de la source**

Nous avons ainsi montré qu'il existait bien un lien entre le courant d'accélération et le flux de neutres. Toutefois, le courant d'accélération est également composé de la collection d'ions lents dans l'enceinte. En particulier tous les ions lents produits dans la gaine sont directement collectés par la grille d'accélération. Ainsi plus la gaine est grande plus le courant d'accélération dû aux ions lents est grand. Or il se trouve que dans notre cas, nous n'observons pas ce phénomène. Cela nous indique que les variations de courant d'accélération observées sont bien liées aux collisions directes d'ions sur la grille d'accélération.

*Remarque :* Nous pouvons maintenant attribuer les hétérogénéités spatiales de taux d'érosion présentées sur la Figure C-8 à un décalage entre le faisceau d'ions et de neutres. Ce décalage peut s'expliquer par une imperfection du système d'accélération. Ainsi, on peut proposer que la localisation des collisions des ions sur les grilles dépendent de l'alignement des grilles. Un léger décalage d'alignement entre les grilles pourrait donc expliquer que le faisceau de neutres ne soit pas centré par rapport à l'axe de la source.

#### **C.III.4.4. Conclusion**

Nous avons vu que les neutres énergétiques produits par échange de charge ne suffisent pas à expliquer l'érosion observée expérimentalement. Au contraire, pour les cas que nous avons étudiés, ils semblent provoquer une proportion mineure de l'érosion.

Nous avons alors proposé que lors de collisions avec les parois des trous des grilles des ions perdent leur charge et deviennent ainsi des neutres énergétiques. Cette hypothèse semble validée par une mesure qui montre qu'il existe une corrélation entre les collisions directes d'ions sur la grille d'accélération et la production de neutres énergétiques.

#### **C.III.5. Conclusion et recommandations**

Nous avons observé expérimentalement lors de mesures de taux d'érosion que les ions ne suffisent pas toujours à expliquer la totalité de l'érosion. Nous avons alors étudié l'érosion produite par les neutres énergétiques. Nous avons dans un premier temps attribué la production de ces neutres énergétiques aux collisions d'échange de charge entre un ion rapide, et un atome de gaz lent. Afin de caractériser l'érosion, nous avons mis au point un dispositif expérimental permettant de distinguer l'érosion due aux ions et celle due aux neutres. Nous avons ainsi mis en évidence qu'il existe un faisceau de neutres très focalisé qui prend part de façon importante à l'érosion.

En raisonnant sur l'origine des neutres, nous avons mis en évidence une seconde origine pour la production de neutres énergétiques. Nous proposons que des ions perdent leur charge lors de collisions avec la grille d'accélération.

Quel que soit le processus de formation des ions nous avons mis en évidence le fait que les neutres participant à l'érosion peuvent être bien plus énergétiques que les ions. Ainsi, même si en quantité ils ne sont pas souvent majoritaires, pour l'érosion ils peuvent avoir un poids considérable.

Ces neutres perturbent fortement l'étude de l'érosion ionique. Ainsi, afin de limiter l'influence des neutres, il faut limiter leur production, limiter leur énergie et diminuer la différence de convergence entre les ions et les neutres. Pour cela, il faut diminuer la tension d'accélération au maximum et diminuer la production de neutres en minimisant le débit de gaz non ionisé et en minimisant le courant d'accélération. Comme on peut le voir dans l'Annexe a, la minimisation de la tension d'accélération et du courant d'accélération n'autorise qu'un flux d'ions total possible. Ce courant total est alors d'autant plus faible que l'énergie des ions souhaitée est faible.

## **C.IV. Mesure de taux d'érosion par QCM**

### **C.IV.1. Mesure d'érosion par QCM**

Les microbalances à quartz ou QCM (quartz crystal microbalance) sont couramment utilisées dans l'industrie des couches minces pour mesurer des épaisseurs de dépôt. Pour notre application, au lieu de mesurer la croissance d'un dépôt sur une QCM, nous allons mesurer sa diminution due à l'érosion ionique. Nous avons déjà évoqué les mesures par QCM, mais dans cette partie nous allons expliquer en détail comment nous avons procédé et montrer des résultats expérimentaux d'érosion ionique.

#### **C.IV.1.1. Choix des QCM pour la mesure d'érosion**

Plusieurs techniques permettent de mesurer l'érosion ionique<sup>21,19</sup>. On peut classer ces techniques en plusieurs catégories.

- Perte de masse de la cible
- Perte d'épaisseur de la cible
- Mesure de la contamination induite

Par ailleurs, ces mesures peuvent être effectuées en temps réel ou après l'expérience d'érosion.

Nous avons choisi la mesure d'érosion par QCM qui cumule les avantages d'une mesure en temps réel, in-situ, avec une bonne précision.

Toutefois, cette technique présente quelques inconvénients. Nous verrons par la suite que la face avant des cristaux de quartz qui est soumise à l'érosion sert également d'électrode pour la mesure de masse. Cela limite a priori l'utilisation des QCM à l'érosion de matériaux conducteurs. On arrive toutefois à s'affranchir de cette contrainte dans certains cas. En particulier, nous avons étudié l'érosion du Kapton. Mais pour cela, nous avons dû supprimer le dépôt de Kapton au niveau de la prise de contact électrique en face avant.

Par ailleurs, les QCM sont sensibles à la température. Il faut donc tenir compte de l'effet de la température pour la mesure par QCM.

Enfin, des contraintes internes à l'intérieur du film érodé peuvent faire varier le signal de la QCM. Ces contraintes peuvent être provoquées par l'implantation d'ions érodants qui gonflent le dépôt et créent ainsi une contrainte. Mais selon Zalm<sup>19</sup> un dépôt métallique de quelques microns d'épaisseur permet de supprimer cet effet. Dans notre cas, l'électrode métallique joue ce rôle.

#### **C.IV.1.2. Principe des QCM**

Les QCM utilisent les propriétés piezo-électriques de cristaux de quartz. Ainsi, en imposant une polarisation électrique à un cristal de quartz, on peut mettre ce dernier en oscillation mécanique. On peut atteindre un mode de résonance fin dont la fréquence dépend des propriétés mécaniques et de la géométrie du système oscillant formé par le cristal de quartz. On utilise généralement des cristaux dont la coupe est de type AT. La coupe AT est un standard défini en 1978 par l'Institute of Electrical and Electronics Engineers<sup>56</sup> (IEEE) qui limite les effets de la température. Le mode d'oscillation de la coupe AT est un mode d'oscillation en cisaillement.



Ainsi un cristal de coupe AT oscille à une fréquence  $f_0$  suivant la relation :

$$f_0 = \frac{C_{AT}}{2.d}$$

où  $C_{AT}$  est la vitesse de propagation de l'onde d'oscillation dans le quartz de coupe AT, et  $d$  son épaisseur.

L'ajout d'une masse en surface du quartz modifie les propriétés de l'oscillateur et fait varier sa fréquence de résonance de  $\Delta f$ . Cette variation est directement liée à la variation de densité surfacique de masse  $\Delta\sigma$ .

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = -\frac{\Delta f}{f_0}$$

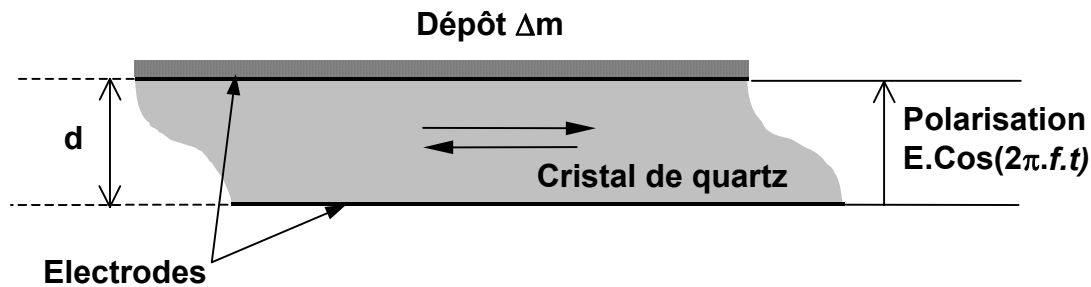


Figure C-21 : Description d'un quartz oscillant

Si on ajoute un dépôt de masse  $\Delta m$  sur l'aire  $A_m$  d'une face du quartz de densité  $\rho_q = 2.65 \text{ g.cm}^{-3}$ , celui-ci va donc entraîner une variation de la fréquence de résonance  $\Delta f$  déterminée par l'équation de Stockbridge<sup>57</sup> :

$$\Delta f = -\frac{Kf_0^2}{\rho_q.C_{AT}/2} \frac{\Delta m}{A_m} = C_q \Delta m, \text{ où } K \text{ proche de } 1 \text{ est une correction traduisant la répartition}$$

du dépôt sur le quartz. Il y a donc une proportionnalité entre la variation de masse et la variation de fréquence et on appelle  $C_q$  ce coefficient de proportionnalité.

On peut considérer que cette relation de proportionnalité entre la variation de fréquence et de dépôt reste valable tant que l'épaisseur de dépôt est négligeable devant celle du cristal de quartz (environ 300 $\mu\text{m}$ ).

### **C.IV.1.3. Montage expérimental pour mesure d'érosion**

Pour la mesure du taux d'érosion d'un matériau avec une QCM, il faut préalablement effectuer un dépôt du matériau sur une face du quartz qui sera exposée au flux d'ions. Ce dépôt est effectué sur toute la surface du cristal de quartz pour ne pas perturber le fonctionnement de la microbalance<sup>21</sup>.

Dans le cas de matériaux conducteurs, le dépôt peut à la fois servir d'électrode et de matériau cible. Dans le cas de matériaux isolants par contre, on ne peut pas se passer de l'électrode métallique. Il faut donc effectuer sur l'électrode le dépôt du matériau à éroder. En pratique, nous déposons un premier dépôt de cuivre de quelques microns d'épaisseur que nous polissons jusqu'à obtenir un aspect miroir (poudre d'alumine submicronique), et s'affranchir des problèmes liés à la rugosité qui seront traités dans la Partie E. Cette couche de cuivre

permet également d'éliminer le problème des contraintes internes dans la cible d'érosion<sup>58,19</sup>. Le dépôt de la cible d'érosion est alors effectué sur ce dépôt de cuivre.

La difficulté pour les mesures d'érosion est la prise de contact électrique de l'électrode située sur la face exposée au jet ionique. En effet, tout ce qui se trouve devant le quartz est sujet à l'érosion et risque donc de le contaminer et fausser la mesure. Pour minimiser la contamination, il faut minimiser la taille des contacts en face avant.

La solution que nous avons retenue est de tenir le quartz en légère compression entre un ressort en face arrière et des crochets en face avant effectuant respectivement la prise de contact électrique en face arrière et face avant. Le montage et une photographie d'une QCM telle que nous les utilisons sont présentés par la Figure C-22.

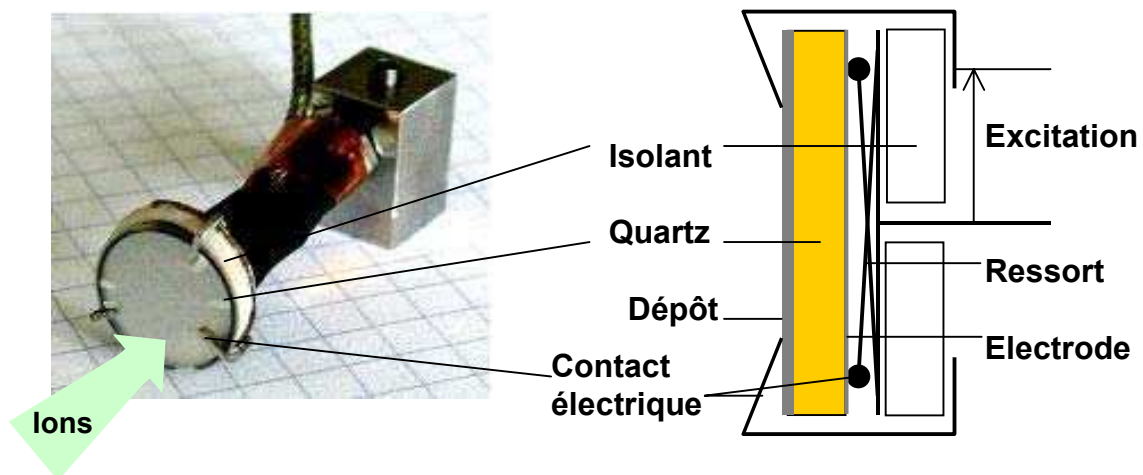


Figure C-22 : Montage d'une QCM

#### C.IV.1.4. Effet de la température

Le neutraliseur de la source d'ions est un filament chauffé et qui émet des électrons. Il est situé en sortie de source et chauffe par rayonnement tout ce qui se trouve dans l'enceinte. En particulier, il provoque l'échauffement de la microbalance à quartz jusqu'à une température d'équilibre de la QCM de l'ordre de 60°C pour des conditions habituelles d'utilisation. Or les variations de température du cristal de quartz provoquent une variation de sa fréquence de résonance. On risque donc d'observer artificiellement des variations de masse de dépôt.

C'est pour cette raison que nous utilisons des quartz de coupe AT. Dont la fréquence de résonance varie peu avec la température.

Pour des raisons pratiques, plutôt que d'étudier directement la fréquence, d'un cristal de quartz, nous caractérisons la dérive de fréquence en l'exprimant comme une épaisseur d'un matériau de densité 1. Cette expression permet de comparer l'effet de température aux vitesses d'érosion.

Nous avons étudié la variation de fréquence (exprimée en épaisseur (kÅ) de matériau de densité 1) de deux QCM pendant leurs échauffements dus au rayonnement du neutraliseur, alors que le reste de la source était éteint. De telles variations aberrantes de masse sont illustrées par la Figure C-23 et la Figure C-24 qui montrent l'évolution de la masse dans le temps et en fonction de la température pour deux QCM.

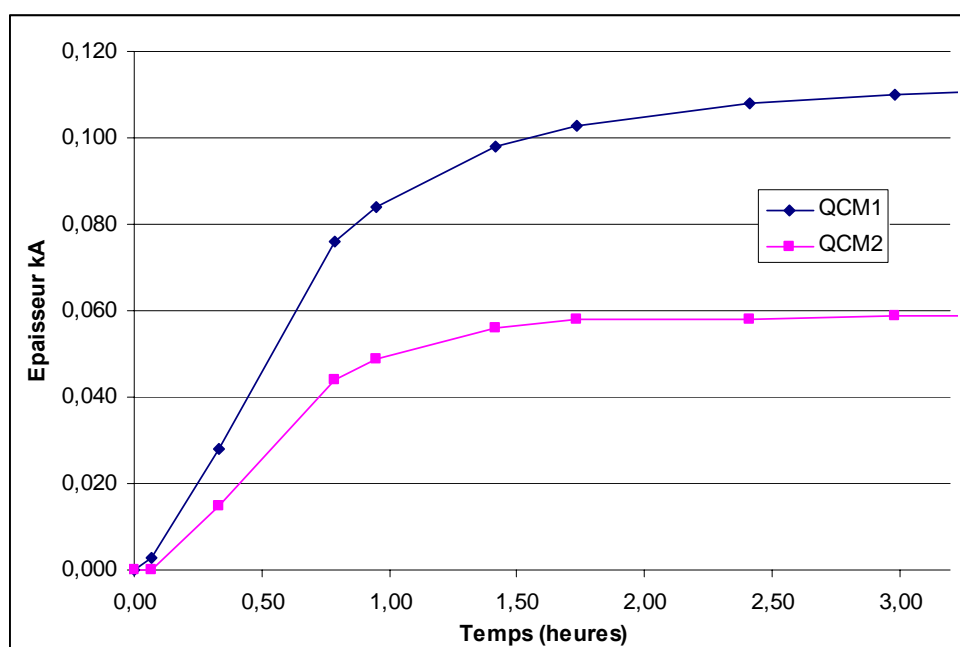
Ainsi, dans notre cas, il faut environ deux heures pour que la température et donc la dérive de fréquence se stabilisent. Si on entame alors une érosion, la température n'évolue pas

sensiblement (évolution inférieure à un degré) donc on peut considérer que la dérive observée sans érosion est du même ordre de grandeur que celle qui a lieu pendant une érosion.

Après 90min, les variations d'épaisseur mesurées ne dépassent déjà pas quelques Angströms/heure alors que lors d'une mesure d'érosion d'un métal (argent ou or), on érode au minimum quelques Angströms/minute (jusqu'à 20Å/s). Les effets de la température sont donc négligeables devant ceux de l'érosion.

Par ailleurs, la Figure C-24 confirme bien qu'il existe une relation entre la température du quartz et la dérive thermique. Mais comme nos mesures le montrent, cette relation dépend du cristal de quartz étudié. En effet, l'influence de la température sur la fréquence de résonance du quartz dépend de sa coupe. Or cette coupe n'est pas rigoureusement identique d'un cristal de quartz à l'autre.

On remarque également qu'un cyclage en température permet de suivre approximativement la même courbe lors de plusieurs échauffements. On observe toutefois un léger décalage entre les différents cycles dû à la désorption de contaminants à haute température.



**Figure C-23 : Variation de la mesure de l'épaisseur créée par la température en fonction du temps pour deux balances à quartz.**

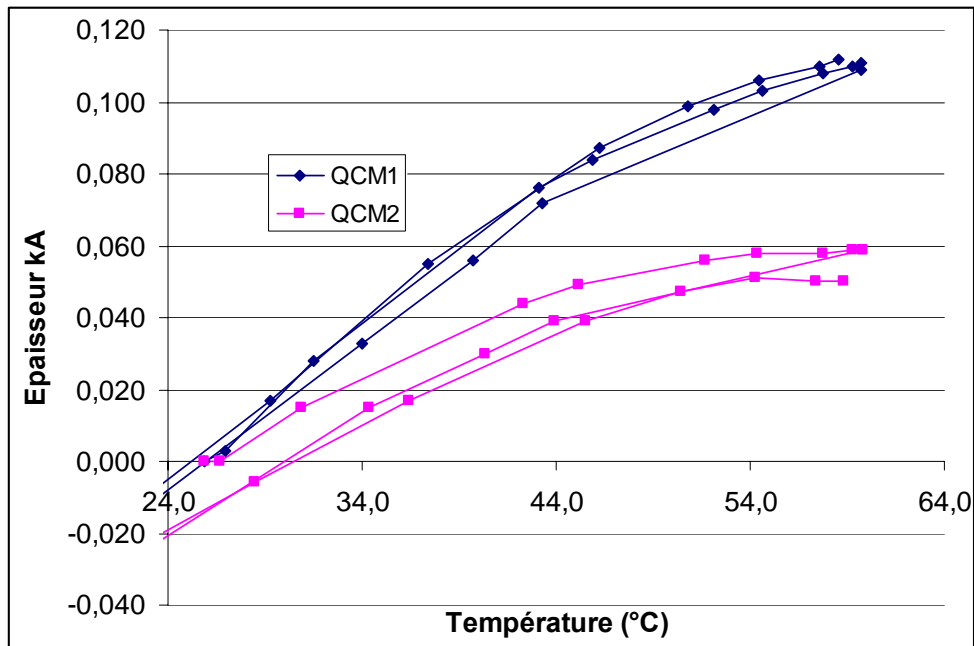


Figure C-24 : Effet de la température sur l'épaisseur mesurée par des QCM

### C.IV.1.5. Conclusion

Nous avons mesuré l'effet de la température sur la mesure d'érosion. Dans le cas d'une faible érosion, il est préférable de laisser chauffer la QCM avant d'effectuer des mesures d'érosion, mais en général, l'effet thermique (au maximum  $1.5 \text{ \AA}/\text{min}$ ) est négligeable devant la vitesse d'érosion du matériau.

Nous avons aussi mis en évidence le fait que les quartz ne sont pas équivalents. Ainsi, vers  $60^\circ\text{C}$  les effets de température sont négligeables pour la QCM2 alors qu'en toute rigueur, il faudrait encore tenir compte des variations pour la QCM1.

## C.IV.2. Protocole expérimental de mesure du taux d'érosion

### C.IV.2.1. Montage

La mesure du taux d'érosion nécessite une mesure de vitesse d'érosion  $\dot{m}$  effectuée par une QCM couverte du matériau à étudier et une mesure de la densité de flux d'ions incidents,  $J$  effectuée avec une sonde de Langmuir plane. Or nous avons vu précédemment (§-C.III) que des neutres énergétiques participent également à l'érosion. Ainsi, il est nécessaire de mesurer la proportion d'érosion due aux ions  $\tau_{\text{ion}}$  grâce au Détecteur d'Erosion par les Neutres (DEN) décrit au paragraphe §-C.III.2.2.

Les trois sondes nécessaires à la mesure du taux d'érosion doivent être installées au même endroit dans l'enceinte puisque l'on a vu que le faisceau n'est pas uniforme. En pratique elles sont placées sur un passage tournant dans l'axe de la source permettant de positionner successivement les trois sondes au même endroit.

### C.IV.2.2. Calcul du taux d'érosion

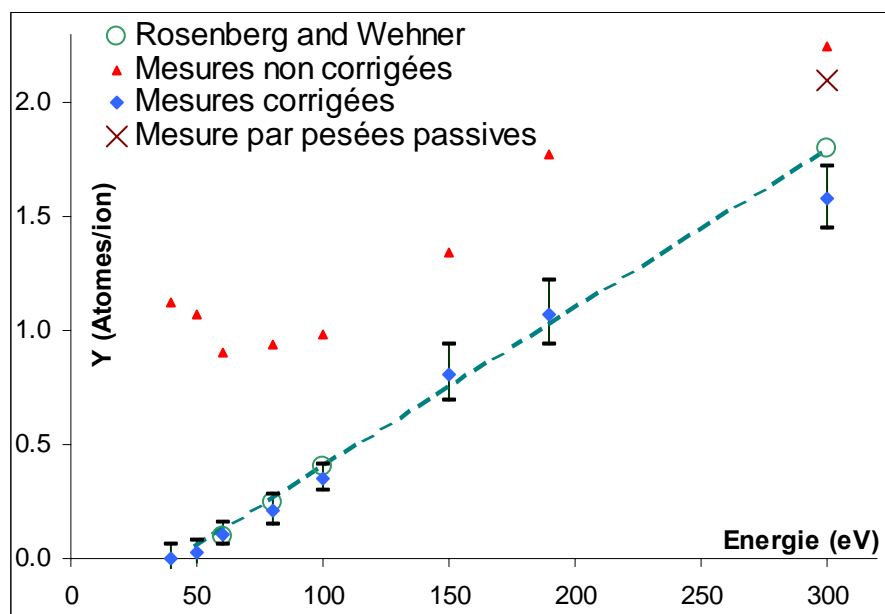
La mesure du taux d'érosion  $Y$  se calcule pour un corps simple de masse molaire  $M$  par la formule

$$Y(\text{atome/ion}) = \frac{\dot{m}}{A_m N_a M J} \tau_{ion}$$

où  $\dot{m}$  est la vitesse de perte de masse de dépôt,  $A_m$  la surface d'érosion,  $N_a$  le nombre d'Avogadro,  $q$  la charge des ions et  $J$  la densité de courant déterminée par une sonde de Langmuir ( $A.m^{-2}$ ). La fraction de l'érosion due aux ions est notée  $\tau_{ions}$  et est déterminée par le DEN.

### C.IV.2.3. Mesure du taux d'érosion à incidence normale

Les connecteurs en argent des générateurs solaires sont particulièrement susceptibles d'être érodés par les ions des propulseurs plasmiques. Nous avons donc effectué la mesure du taux d'érosion d'un dépôt d'argent sur QCM à incidence normale en fonction de l'énergie des ions  $Xe^+$ . La Figure C-25 en expose les résultats expérimentaux. Nous présentons la mesure telle qu'elle aurait été si on n'avait pas tenu compte des neutres énergétiques et après correction effectuée grâce au DEN. Comme référence, nous avons repris les résultats de Rosenberg et al.<sup>29</sup>. Enfin, à titre d'information, nous avons également indiqué une mesure effectuée avant cette thèse par pesées de cibles massives au moyen d'une balance de précision avant et après érosion.



**Figure C-25 : Mesure de l'érosion de l'argent à basse énergie par QCM en corrigeant les mesures grâce au DEN**

On peut alors observer que la correction effectuée grâce au Détecteur de l'Erosion par les Neutres est primordiale. En particulier à basse énergie, les neutres prennent un poids croissant, à tel point qu'on observe artificiellement une croissance du taux d'érosion pour les faibles énergies. Ce résultat bien sûr n'a aucun sens physique.

On observe également que la mesure non corrigée à 300eV correspond à la mesure passive effectuée par pesées.

La correction des mesures par le facteur  $\tau_{ions}$  mesuré par le DEN permet de retrouver des données de la littérature. Nous laissons apparaître la barre d'erreur sur la Figure C-25.

Cette barre d'erreur décroît avec le temps de mesure de l'érosion. Ainsi le but premier de notre mesure n'étant pas de produire des données expérimentales, mais plutôt de valider la mesure par QCM, nous avons effectué nos mesures rapidement. Mais une meilleure précision peut être obtenue facilement en augmentant le temps d'acquisition.

La mesure du taux d'érosion en fonction de l'énergie peut donc aisément être effectuée au moyen de QCM. On peut ainsi étudier des taux d'érosion bas pour les basses énergie, alors que ces mesures étaient délicates par pesées passives. Toutefois, l'utilisation du DEN s'est révélée être indispensable en particulier à basse énergie.

*Remarque* : La production de neutres sur les grilles rend le faisceau de neutres très peu reproductible, dans la mesure où elle dépend de la qualité de l'alignement des grilles, de la tension d'accélération et éventuellement d'autres paramètres. Ainsi en présence de neutres produits par collision sur les grilles, il semble impossible de prévoir leur effet. La seule solution est alors de mesurer leur effet, avec le DEN dans notre cas. Kolasinski<sup>51</sup> effectue également une mesure d'érosion en absence d'ions pour estimer l'effet des neutres. Blandino et al.<sup>50</sup> au contraire ne considère que des neutres d'échange de charge et déduit leurs effets par le calcul.

On peut également citer des cas où visiblement les neutres énergétiques ont perturbé la mesure<sup>18</sup> sans que leur présence n'ait été diagnostiquée.

#### **C.IV.2.4. Mesure du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence**

##### **C.IV.2.4.1. Protocole**

Nous avons étudié le taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence. Dans ce cas, nous inclinons simplement la QCM avec son dépôt. Contrairement à la mesure à incidence normale, l'utilisation du DEN devient compliquée dès qu'une incidence non nulle est étudiée. Ainsi, nous appliquons les recommandations de la conclusion du chapitre §-C.III. C'est à dire que nous fixons la tension d'accélération à 50eV et réglons le courant total de façon à minimiser le courant d'accélération. Dans ce cas, on peut assimiler le faisceau de neutres érodants à un faisceau d'ions dans la mesure où ils ont la même énergie que ces derniers.

Par ailleurs, afin de ne pas être perturbés par les variations locales du flux de neutres, nous effectuons toutes nos mesures à la même position. Pour cela, nous utilisons le montage décrit à la Figure C-26. Ce montage permet d'effectuer les mesures pour des angles d'incidence différents à la même position dans l'enceinte. Ainsi, on peut se passer de la mesure du courant et mesurer les variations relatives du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence. Le flux de particules érodantes (ions et neutres)  $\varphi(\theta)$  pour l'angle  $\theta$  est donc  $\varphi(0^\circ) \cdot \cos(\theta)$ .

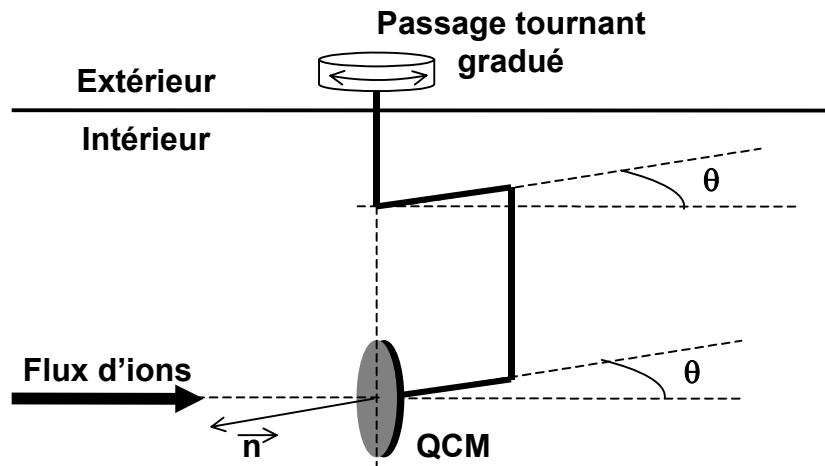


Figure C-26 : Montage pour mesurer l'influence de l'angle d'incidence sur le taux d'érosion

#### C.IV.2.4.2. Validation

Dans ces conditions, nous avons mesuré l'érosion relative en fonction de l'angle dans le cas du cuivre par des ions  $Xe^+$  à 550eV. On peut alors comparer nos résultats aux mesures expérimentales d'Oeschner<sup>30</sup>. Ces résultats sont présentés sur la Figure C-27. On peut alors observer que nous obtenons des résultats proches de ceux de la littérature. Seules les mesures à fortes incidences diffèrent légèrement. En effet, nous mesurons une décroissance plus rapide que celle mesurée par Oeschner. On peut d'ailleurs rappeler que le fit de Yamamura (§-B.IV.2.2) prévoit également une décroissance plus rapide que celle mesurée par Oeschner pour les fortes incidences.

Par ailleurs, nous verrons à la Partie E qu'une rugosité peut se développer sous incidence rasante et ainsi modifier le taux d'érosion. Notre mesure étant particulièrement rapide, ces phénomènes sont peu probables.

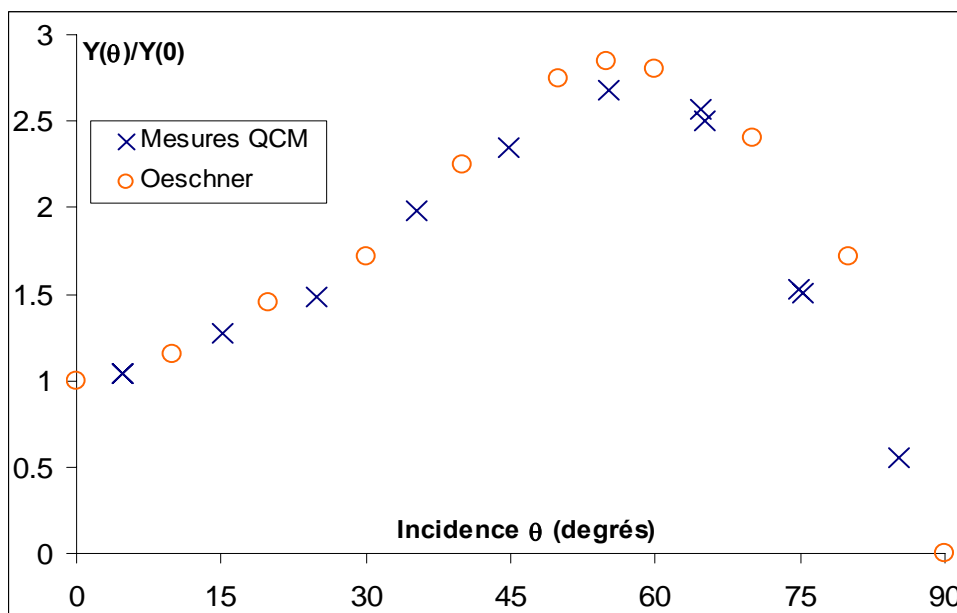


Figure C-27 : Taux d'érosion du cuivre en fonction de l'angle d'incidence normé en  $0^\circ$  pour le bombardement par des ions  $Xe^+$  à 550eV

### C.IV.2.4.3. Mesures sur l'argent

Si le Cuivre nous a permis de vérifier la validité de la mesure par QCM, ce n'est pas un matériau intéressant dans le cadre des effets de jet de la propulsion plasmique. C'est pourquoi nous nous sommes intéressés à l'argent, utilisé sur les générateurs solaires. Nous pouvons ainsi voir sur la Figure C-28 l'évolution du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence dans le cas de l'argent bombardé par des ions  $Xe^+$  à 300eV et 600eV. On peut alors observer que dans le cas de l'argent, les variations du taux d'érosion en fonction de l'angle sont faibles. Cela est dû à la masse élevée de l'argent qui augmente la probabilité de rebonds des ions  $Xe^+$  à forte incidence. Par ailleurs, on peut observer que l'angle de taux d'érosion maximum croît avec l'énergie des ions. Toutefois, cette évolution est légère.

Cette observation valide l'hypothèse que les neutres perturbent peu la forme de la courbe du taux d'érosion en fonction de l'angle. On peut donc assimiler le flux de neutres à un flux d'ions.

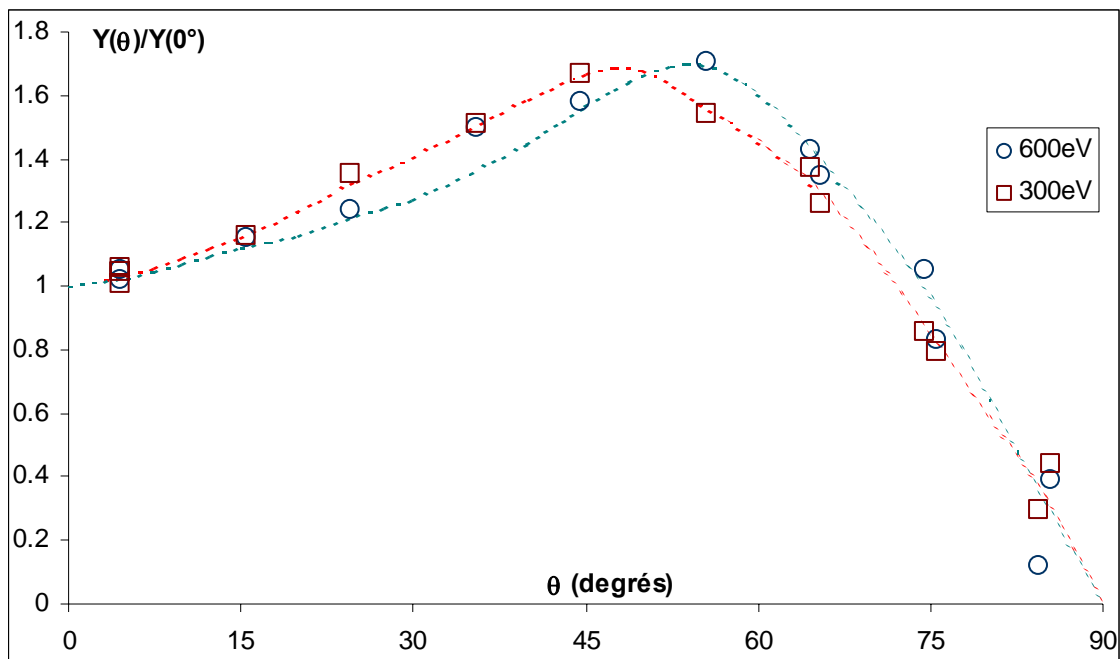


Figure C-28 : Taux d'érosion de l'argent en fonction de l'angle d'incidence normé en  $0^\circ$  pour deux énergies d'ions  $Xe^+$  (300eV et 600eV)

### C.IV.3. Conclusion

Nous avons vu comment nous avons utilisé le principe des microbalances à quartz pour étudier la pulvérisation ionique. Nous observons en effet l'érosion d'un dépôt sur la face avant de la QCM. Pour cela nous avons dû mettre au point un support pour les cristaux de quartz adaptés à l'érosion ionique. Nous avons vérifié expérimentalement que ce système couplé au détecteur de l'érosion par les neutres permet de retrouver les taux d'érosion à incidence normale de la littérature. L'utilisation du détecteur d'érosion par les neutres nous a permis de montrer que plus on travaille à basse énergie plus la prise en compte des neutres est importante.



Le suivi d'érosion par QCM nous a également permis d'étudier le taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence. Dans ce cas, nous avons utilisé un dispositif astucieux permettant de s'affranchir de la mesure de courant et des problèmes liés aux neutres. Nous obtenons ainsi la mesure des variations relatives de taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence. Ces mesures ont été validées dans le cas du cuivre bombardé par du Xénon à 550eV.

## **C.V. Emission et Contamination**

### **C.V.1. Introduction**

Jusque là nous avons étudié l'érosion des matériaux cibles. Mais dans certains cas, l'érosion elle-même n'est pas un problème majeur. Par exemple, l'érosion des matériaux de face arrière d'un panneau solaire risque peu de dégrader ses performances. Par contre les produits d'érosion peuvent se redéposer sur le satellite. Ce phénomène est connu sous le terme de contamination. Elle modifie les propriétés de surface des matériaux atteints. Ainsi, les conséquences peuvent être par exemple le masquage d'une optique par un dépôt opaque, un dépôt conducteur sur un isolant électrique, la modification des propriétés thermo-optiques du satellite et bien d'autres encore.

Il est donc nécessaire de bien connaître la contamination. Cette dernière est un phénomène global qui fait intervenir la direction d'émission des produits d'érosion ainsi que le coefficient de collage de ces derniers sur la cible de contamination.

- La direction d'émission dépend uniquement de la cible d'érosion et des caractéristiques du flux d'ions érodants.

- Le coefficient de collage par contre fait a priori intervenir la cible de contamination (nature, état de surface, température, incidence) et les propriétés du flux des contaminants, c'est à dire leur nature (atomes, fragments de molécules...). Les propriétés du flux de contaminants dépendent de l'érosion.

Les données expérimentales d'émission pure sont rares. En effet, dans bien des cas, la direction d'émission est souvent mesurée par contamination en supposant explicitement ou implicitement que le coefficient de collage est égal à 1.

L'émission à proprement parler peut être étudiée par spectroscopie de masse<sup>59</sup> ou par LIF<sup>60</sup>.

Dans cette partie nous allons étudier des techniques expérimentales de mesure d'émission par spectrométrie de masse et de contamination sur microbalance à quartz. L'intérêt de comparer ces deux mesures est d'étudier le phénomène de collage, en particulier dans le cas des produits d'érosion de polymères. Dans ce cas, on peut s'attendre à des directions d'émission différentes, ainsi que des coefficients de collage différents pour les différents produits d'émission. Dans cette partie, nous nous contentons du cas de l'aluminium, dans le but d'étudier la validité des deux systèmes de mesure. L'idée de comparer émission et contamination n'a pas été poussée à son terme dans la mesure où nous avons été confrontés à des problèmes expérimentaux dans le cas de la mesure de l'émission par spectrométrie de masse.

*Remarque* : Avant d'entamer la description de l'étude de l'émission et de la contamination, il est nécessaire de préciser les conventions liées aux angles. L'angle d'incidence est toujours défini par rapport à la normale à la cible. On définit le plan incident comme étant le plan incluant la normale à la cible et la direction des ions incidents. Dans ce plan incident, l'émission est définie par l'angle d'émission mesuré par rapport à la normale comme décrit par la Figure C-29. Hors du plan incident, la direction sera décrite au cas par cas.

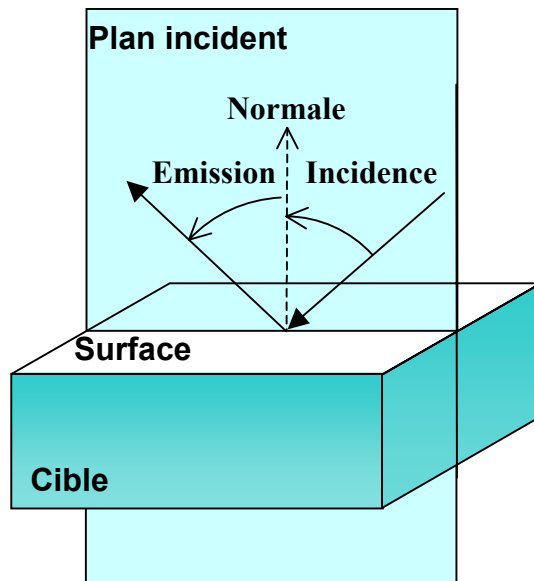


Figure C-29 : Convention d'orientation des angles

## C.V.2. Etude de l'émission par spectrométrie de masse

### C.V.2.1. Utilisation de la spectrométrie de masse

Nous avons équipé notre installation expérimentale IDEFIXe d'un spectromètre de masse. Afin de pouvoir étudier l'émission, nous lui avons donné un degré de liberté grâce à un soufflet métallique souple. Ce montage est décrit par la Figure C-30. On y voit deux degrés de liberté obtenus par les angles  $\alpha$  et  $\beta$ .

Une description beaucoup plus détaillée de l'utilisation du spectromètre de masse peut être retrouvée dans l'Annexe b.

Les mesures effectuées sont directives, c'est à dire que l'on n'étudie que les particules émises de la cible d'érosion vers le spectromètre de masse. Pour cela, nous utilisons un système basé sur un Diaphragme et un Obturateur décrit dans l'Annexe b.

Le signal étudié est celui des neutres. En effet, il existe également un faisceau notamment produit par échange de charge dans l'enceinte. Ces ions sont, sauf contre indication, supprimés au moyen d'une filtration par une grille polarisée.

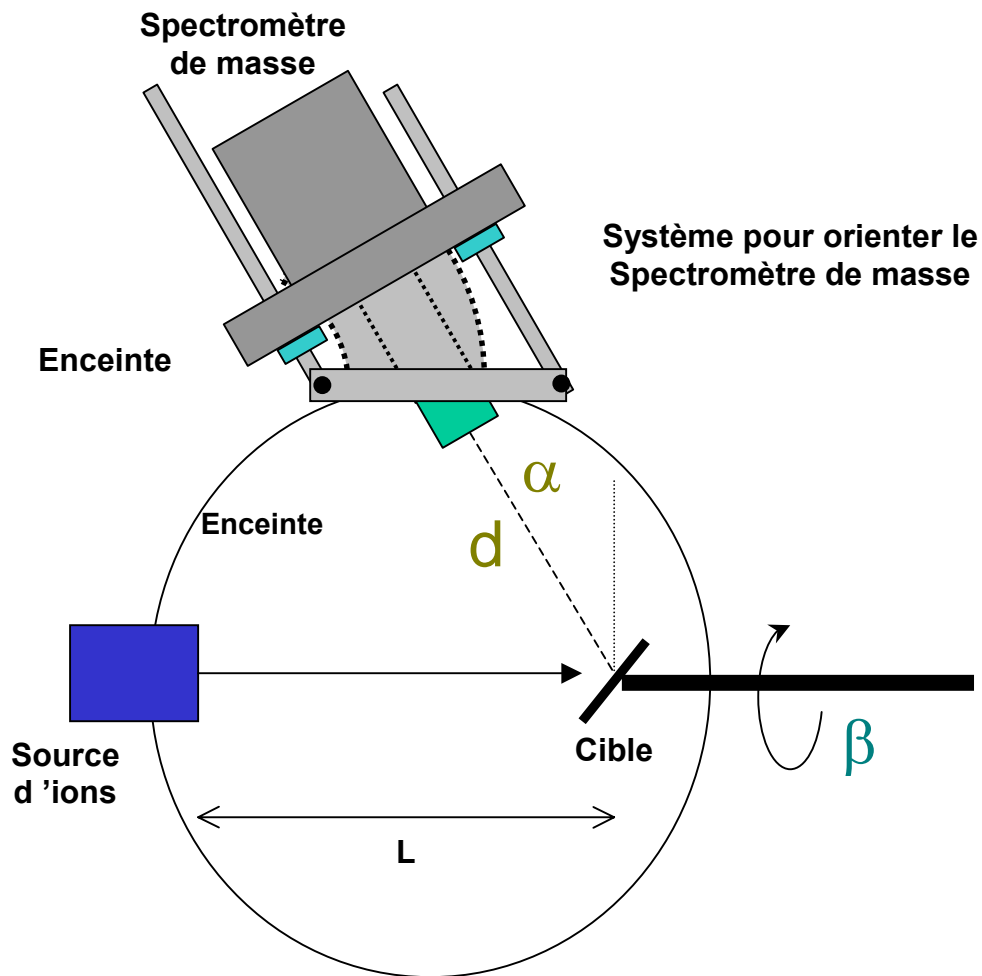


Figure C-30 : Représentation schématique du montage du spectromètre de masse sur IDEFIXe

## C.V.2.2. Construction d'un lobe d'émission

### C.V.2.2.1. Cible d'érosion

Le but de l'utilisation de la spectrométrie de masse est d'étudier des polymères, mais dans un premier temps nous avons étudié l'aluminium. Il a l'avantage d'être facile d'emploi, d'avoir un taux d'érosion supérieur à celui des polymères, et d'être conducteur. Il peut donc être utilisé comme sonde de Langmuir. Ainsi, même s'il n'offre pas de grands intérêts pour l'application sur satellite, les premiers essais de création de lobe d'émission ont été effectués dans le cas de l'aluminium.

Un échantillon de 60mm x 60mm avec une incidence de 45° a été soumis à l'érosion d'un flux d'ions  $Xe^+$  de façon à pouvoir mesurer l'émission dans différentes directions. Pour chaque position, on a fait varier le courant d'ions sur l'échantillon de façon à vérifier la linéarité entre l'émission et le courant d'ions incidents.

### C.V.2.2.2. Calcul de l'émission

L'émission  $E$ , pour des angles  $\alpha$  et  $\beta$  (voir Figure C-30) donnés, est calculée sur une échelle en unités arbitraire :

$$E(\alpha, \beta) = A \cdot \frac{CPS_{SM}}{I} d^2(\alpha)$$

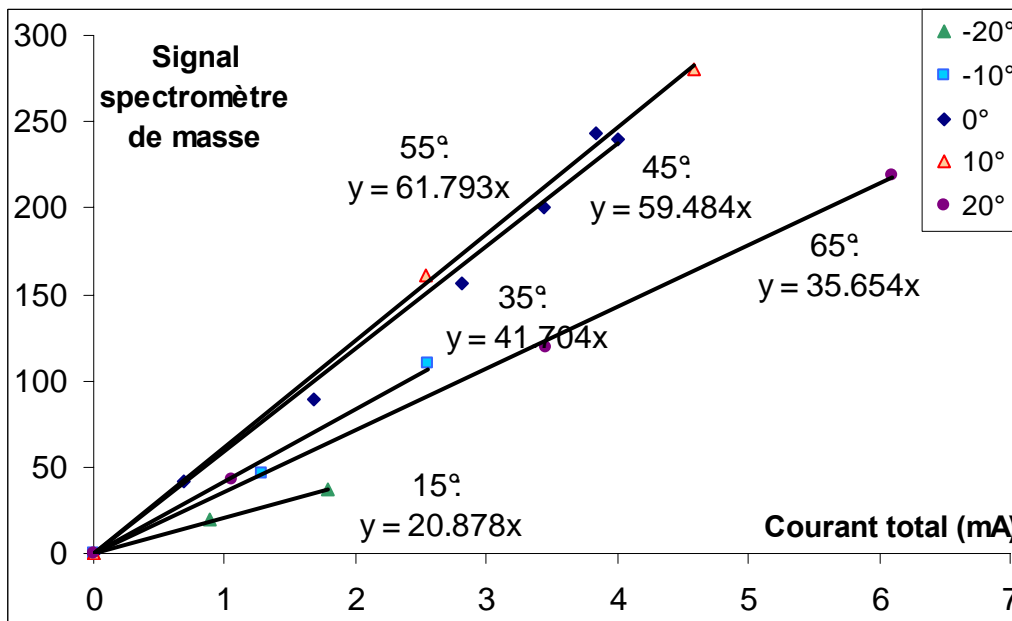
$A$  étant une constante arbitraire,  $CPS_{sm}$  étant le signal mesuré par le spectromètre de masse (Coups par seconde),  $I$  le courant d'ions reçus par la cible et  $d$  la distance entre la cible d'érosion et le spectromètre de masse. On remarque que la distance entre la cible et le spectromètre de masse n'est pas fonction de l'angle  $\beta$ .

### C.V.2.2.3. Réglages de source

L'étude a été effectuée sur une cible d'aluminium de  $36\text{cm}^2$  bombardée avec des ions  $\text{Xe}^+$  à  $600\text{eV}$  sous incidence  $45^\circ$ . Cette énergie élevée a plusieurs avantages. Le taux d'érosion étant plus important qu'à  $300\text{eV}$ , on obtient un signal plus important. De plus, en travaillant à  $600\text{eV}$ , on a plus de libertés pour régler la source d'ions (Annexe a.).

### C.V.2.2.4. Résultats

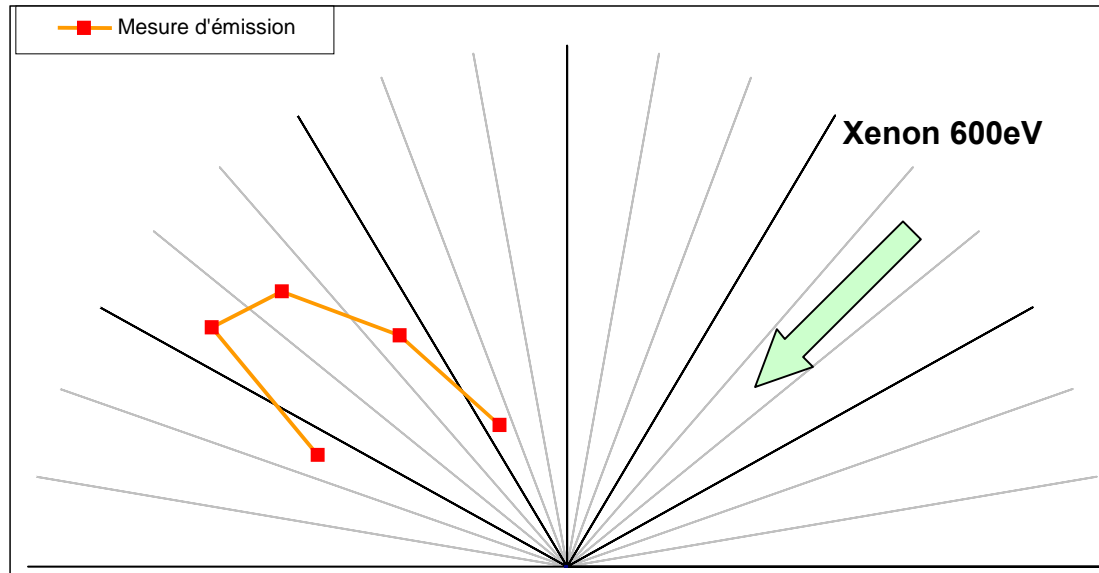
Pour une même direction, le signal reçu par le spectromètre de masse (masse 27) est mesuré pour plusieurs courants d'ions reçus par la cible. La Figure C-31 présente alors des mesures pour plusieurs directions d'émission, chaque direction étant étudiée pour plusieurs flux d'ions. On peut alors observer une relative linéarité entre le signal d'émission et le courant d'ions reçu par la cible. Ceci est cohérent avec un taux d'érosion indépendant du courant. Cela traduit aussi le fait que le spectromètre de masse a une réponse linéaire.



**Figure C-31 : Linéarité entre l'émission et le courant d'ions érodants dans plusieurs directions**

Cette linéarité est observée pour chaque direction d'émission. On peut alors tracer le lobe d'émission représenté à la Figure C-32. La valeur d'émission dans chaque direction est alors la pente de la courbe correspondante de la Figure C-31. On obtient alors un lobe d'émission relative (la mesure au spectromètre de masse est relative) qui est fin et présentant une émission assez rasante.

Malheureusement on ne dispose pas d'information sur l'émission dans la direction de la source d'ions à cause des contraintes géométriques de l'installation expérimentale. Pourtant, il s'agit de la direction qui nous intéresse le plus dans la mesure ou les risques de contamination sont en direction du satellite.



**Figure C-32 : Lobe d'émission mesuré par spectrométrie de masse pour l'aluminium sous bombardement par du xénon à 600eV et d'incidence 45°**

Toutefois, les mesures expérimentales peuvent a priori en complément avec un outil de modélisation permettre d'extrapoler l'importance de l'émission dans la direction de la source.

### **C.V.2.3. Discussion**

#### **C.V.2.3.1. Comparaison de plusieurs techniques**

Les mesures observées en émission peuvent être comparées à des mesures obtenues en mesurant la contamination au moyen d'une microbalance à quartz dans les mêmes conditions. Pour cela, nous avons placé une QCM 1.5cm sous l'ouverture du spectromètre de masse. Nous avons ainsi pu mesurer la contamination due à l'aluminium redéposé sur la QCM, ainsi que l'émission mesurée par le spectromètre de masse. En pratique, ces deux mesures n'ont pas été effectuées simultanément puisque le diaphragme nécessaire à la mesure d'émission empêche la mesure de contamination. Ainsi, la mesure de contamination a été réalisée en absence de diaphragme. Dans ce cas, le signal de fond qui correspond principalement à la contamination produite par l'érosion de l'enceinte a été déterminé en orientant la cible à l'opposé de la microbalance.

En outre, nous avons effectué une mesure de l'émission prévue par CSiPI. Les trois lobes obtenus par mesure de contamination et par spectrométrie de masse ainsi que par la simulation sont présentés sur la Figure C-32. Les lobes présentés ont été mis à la même échelle artificiellement dans la mesure où la mesure d'émission est une mesure relative. On peut alors observer que si la contamination et la simulation sont cohérentes, la mesure d'émission par spectrométrie de masse au contraire produit un lobe différent.

Nous verrons par la suite que la simulation donne de bons résultats dans le cas de l'émission d'une cible d'aluminium (§-C.V.4.3). On peut donc soupçonner qu'un problème expérimental perturbe la mesure par spectrométrie de masse.

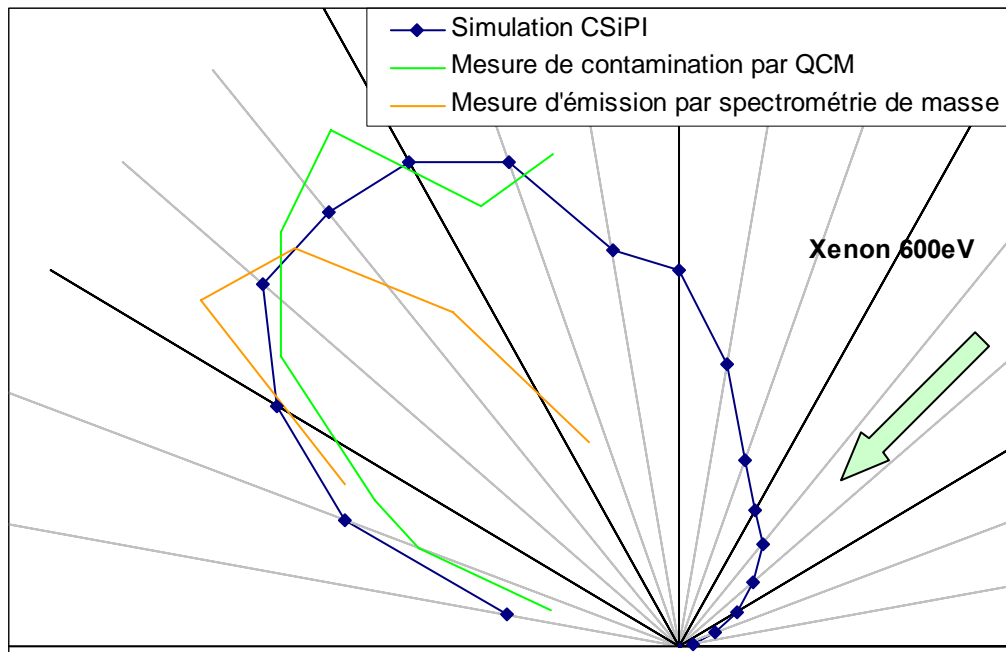


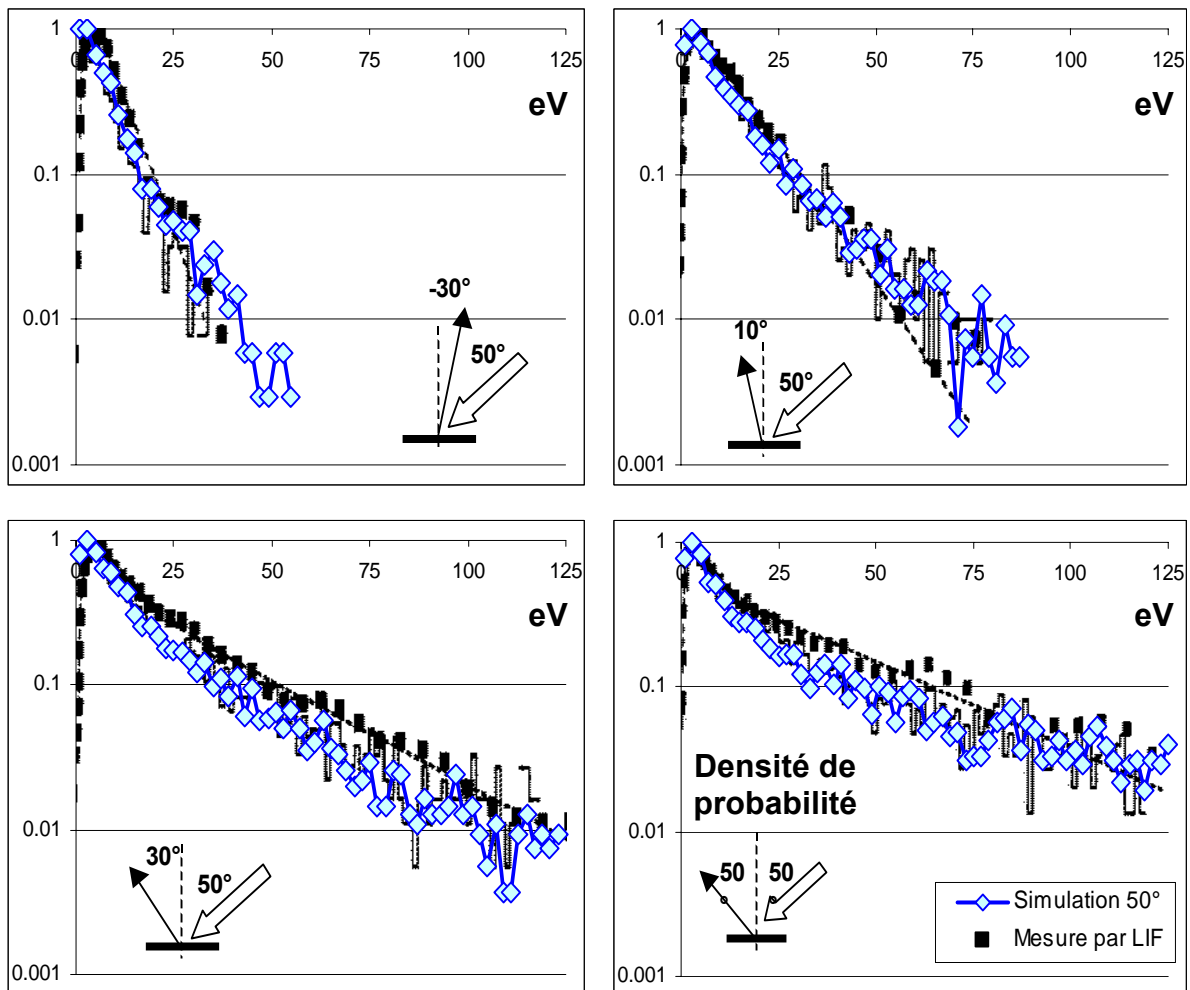
Figure C-33 : Lobe d'émission mesuré pour l'aluminium érodé par du xénon à 600eV

### C.V.2.3.2. Hétérogénéité énergétique de l'émission

Ces résultats peuvent être expliqués par une réponse du spectromètre de masse dépendante de l'énergie des particules étudiées. En effet, des mesures complémentaires qui seront exposées au §-C.V.2.3.3 montrent que la réponse du spectromètre de masse favorise les particules de haute énergie. Ainsi, si l'énergie des particules émises dépend de la direction d'émission, on aboutit à une distorsion du lobe d'émission.

La littérature présente par exemple avec les travaux de Goehlich et al.<sup>60</sup> des résultats expérimentaux ainsi que de simulation abondants dans ce sens. Nous avons reproduit par la simulation avec CSiPI les expériences de Goehlich et al.<sup>60</sup> et nous retrouvons des résultats très similaires. Ces résultats sont présentés par la Figure C-34. On y observe le spectre d'énergie (densité de population normée en fonction de l'énergie) des particules émises dans différentes directions suite à l'érosion produite par de l'Argon à 500eV sous incidence 50°. Les courbes bleues correspondent à nos simulations et se superposent très bien avec les mesures expérimentales obtenues par LIF (carrés noirs) et encore mieux avec les simulations obtenues par TRIM.SP (ligne noire).

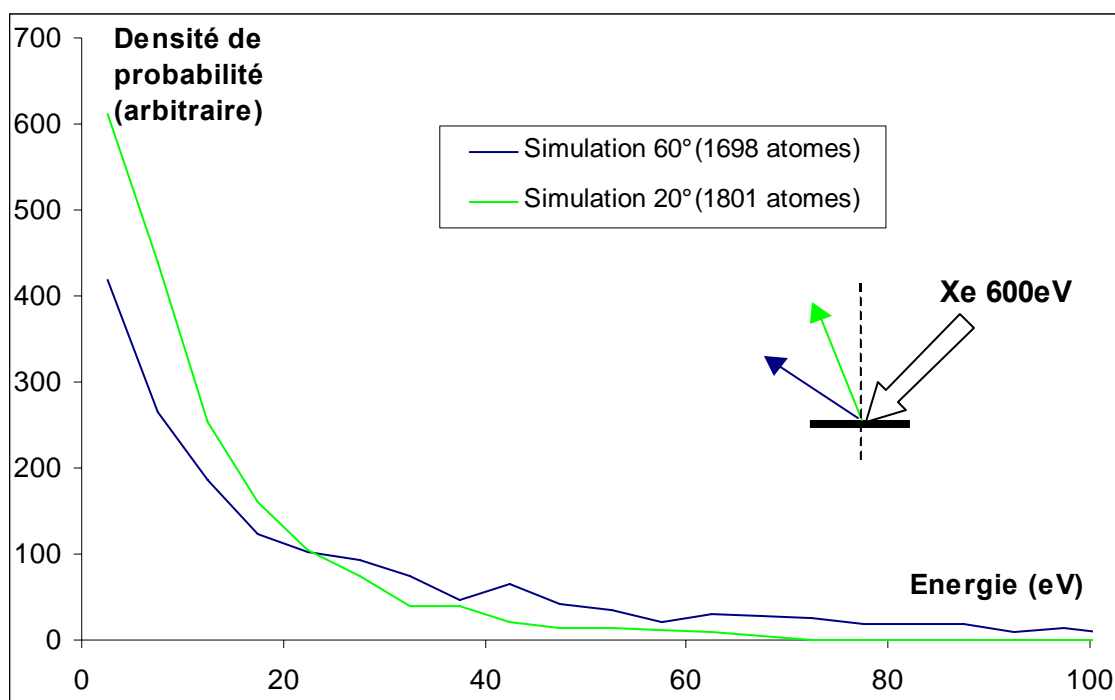
Ainsi, on observe expérimentalement et par la simulation que plus la direction étudiée se fait selon un angle grand, plus le faisceau de particules est énergétique. Ce genre de comportement sera étudié dans la Partie D.



**Figure C-34 : Spectre d'énergie des particules érodées par bombardement ionique de l'Argon à 500eV sous incidence 50°. Différentes d'énergies en fonction de la direction d'émission.**

Ces mesures valident le spectre d'énergie directionnel prédit par CSiPI. Nous pouvons donc simuler en toute confiance le spectre directionnel dans le cas qui nous intéresse, c'est à dire l'émission d'aluminium après érosion par des ions Xénon d'énergie 600eV et d'incidence 45°. Nous avons étudié les directions d'émission 20° et 60° qui présentent des émissions simulées équivalentes (en quantité) alors que la mesure par spectrométrie de masse fournit un signal supérieur à 60° qu'à 20°. La simulation présentée sur la Figure C-35 montre que les spectres dans les deux directions étudiées sont différents. Ainsi, malgré une émission globale légèrement supérieure à 20° qu'à 60° (1801 atomes contre 1698), au-dessus de 23eV, l'émission à 60° dépasse celle à 20°.





**Figure C-35 : Spectre d'énergie mesuré dans les directions 20 et 60° pour l'aluminium bombardé par du xénon à 600eV sous 45°**

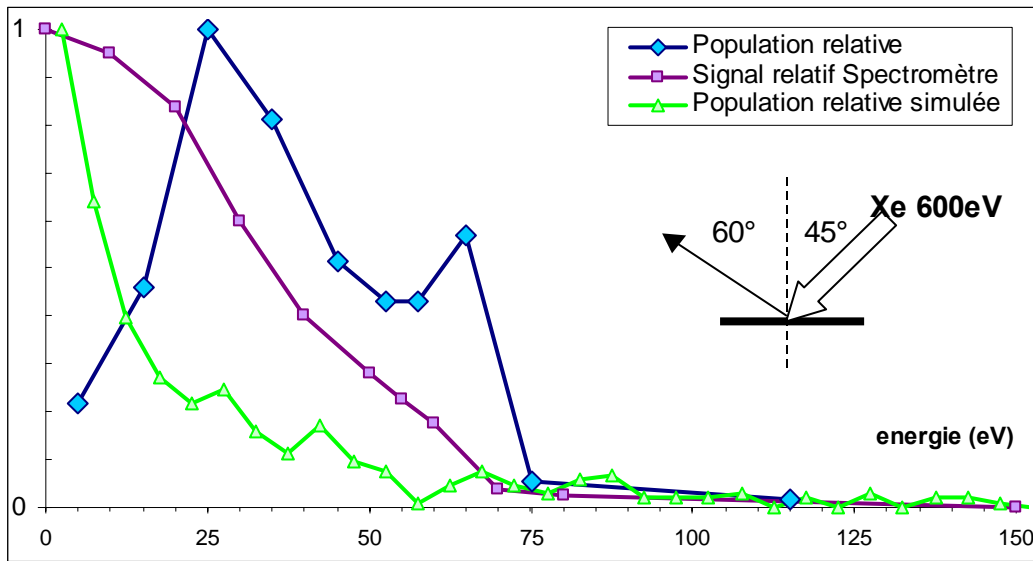
L'idée que nous allons étudier est que le lobe d'émission mesuré par spectrométrie de masse présente une distorsion car la fonction de transfert du spectromètre de masse favorise les fortes énergies par rapport aux faibles. Malheureusement, notre spectromètre de masse n'est pas équipé d'un filtre en énergie. Nous allons donc étudier la réponse du spectromètre de masse en fonction de l'énergie par une méthode détournée. En effet, il est possible d'étudier simplement l'énergie des ions produits par échange de charge dans l'enceinte. On peut utiliser pour cela le système de grilles polarisées placé en tête du spectromètre de masse présenté dans l'Annexe b. Le signal du spectromètre de masse varie en fonction de la population énergétique filtrée. On obtient ainsi une information sur le coefficient de transfert du spectromètre de masse pour les ions.

### **C.V.2.3.3. Mesure de l'énergie du faisceau d'ions produit par échange de charge**

On peut voir en Annexe b. que les échanges de charge dans l'enceinte produisent des ions. En règle générale, ces ions faussent les mesures, ils sont donc éliminés au moyen d'un filtre électrostatique. Nous avons utilisé ce filtre électrostatique pour analyser l'énergie des ions produits par échange de charge. Pour cela, l'ionisation propre du spectromètre de masse a été débranchée de telle sorte que le signal mesuré par le spectromètre correspond uniquement au signal produit par les ions.

Cette expérience a été effectuée en érodant de l'aluminium à incidence 45° par du xénon à 600eV. La mesure a été effectuée dans la direction d'émission 60°. Dans ces conditions, la Figure C-36 présente la mesure directe au spectromètre de masse en fonction de la tension appliquée à la grille, ainsi que la dérivée de cette courbe qui correspond à la population d'ions à une énergie donnée, et enfin le résultat de la simulation par CSiPI. Toutes ces courbes sont normées par rapport à leur maximum.

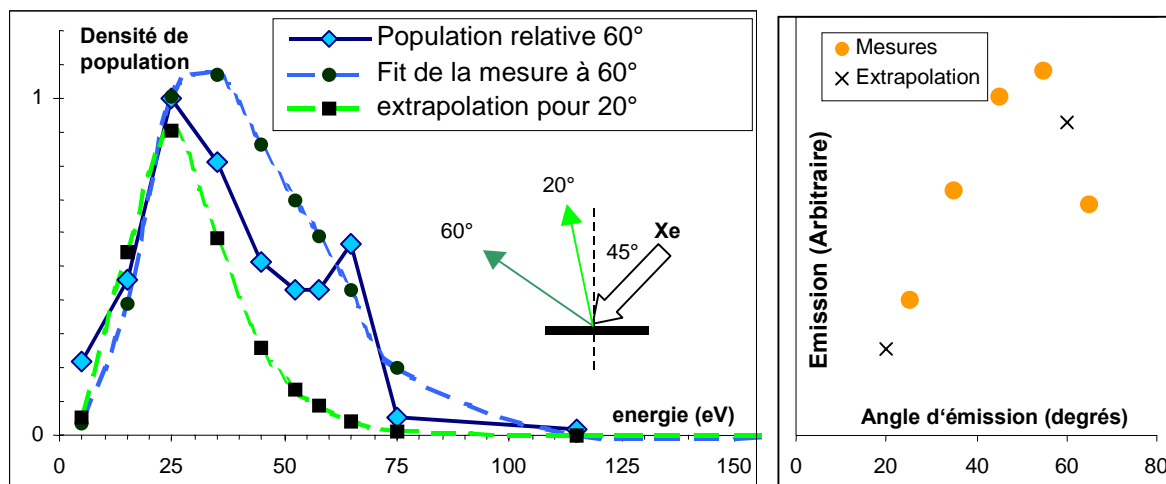
On observe alors que les répartitions de population simulée et mesurée sont très différentes. La simulation a un maximum inférieur à 5eV, alors que la mesure fournit un maximum à 25eV.



**Figure C-36 : Répartition de l'énergie des particules érodées mesurée par spectrométrie de masse et obtenue par la simulation**

Comme cela vient d'être vu, la simulation a été validée sur des données de la littérature et donne donc des résultats de grande confiance. La différence entre la mesure et la simulation nous permet donc de conclure que la réponse du spectromètre de masse dépend donc fortement de l'énergie des ions.

Ainsi, les mesures expérimentales à 60° et la simulation permettent de déterminer une fonction de transfert du spectromètre de masse en fonction de l'énergie des particules étudiées. En pratique, pour déterminer la fonction de transfert, nous avons lissé les mesures expérimentales en proposant un fit simple. En utilisant cette fonction de transfert et la simulation du spectre d'énergie dans la direction 20°, on peut alors prévoir la réponse du spectromètre de masse dans cette direction. La Figure C-37 montre ces calculs. On peut y observer le spectre expérimental et le fit proposé pour la direction d'émission 60°.



**Figure C-37 : Fit du spectre d'énergie d'émission à 60° et extrapolation à la direction d'émission 20° (gauche). Emission totale à 20° et 60° (droite)**

En utilisant la fonction de transfert déterminée sur la base de l'émission à 60°, et la population simulée à 20°, nous proposons une réponse prévue par la mesure par spectrométrie de masse dans la direction 20°. Par intégration, on peut alors calculer que la mesure au spectromètre serait deux fois plus faible à 20° qu'à 60°. Cet écart est inférieur à l'écart mesuré qui est plus proche de 3 à 4. Toutefois, étant donné la complexité de ces mesures, on peut tout de même considérer qualitativement que la réponse en fonction de l'énergie du spectromètre de masse permet d'expliquer la distorsion du lobe d'émission.

*Remarque :* En première approximation, la probabilité d'ionisation dans l'enceinte est proportionnelle au temps de résidence dans le faisceau d'ion et donc inversement proportionnelle à la vitesse des particules. On est confronté au même phénomène pour l'ionisation des neutres par le spectromètre de masse. Ainsi, la fonction de transfert en fonction de l'énergie mesurée pour les ions en absence d'ionisation en tête de spectromètre de masse est a priori semblable à celle pour les neutres en tenant compte de l'ionisation en tête de spectromètre de masse.

#### **C.V.2.3.4. Conclusion**

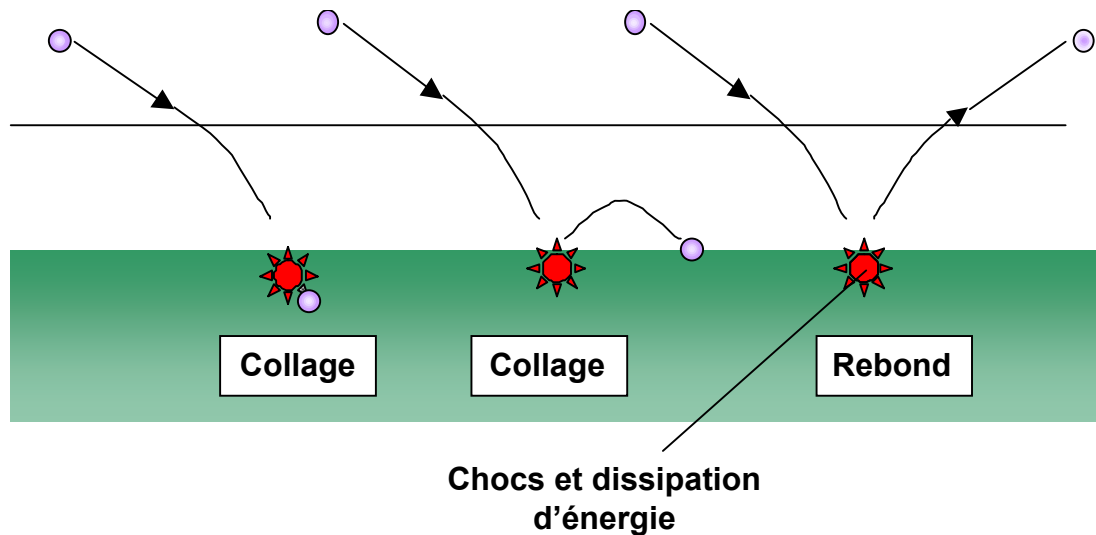
On a montré que les spectres énergétiques sont différents dans les différentes directions. Par ailleurs, l'étude des ions d'échange de charge nous a permis de montrer que la réponse du spectromètre de masse dépend sensiblement de l'énergie des ions étudiés. Il serait donc intéressant, voire indispensable de s'équiper d'un spectromètre de masse filtré en énergie ou d'optimiser les réglages du spectromètre de masse de façon à augmenter la détection à basse énergie.

Le système de mesure que nous avons proposé pour étudier des lobes d'émission ne répond donc pas entièrement aux attentes. De plus le protocole de mesure proposé en Annexe b. est relativement lourd et fait intervenir un grand nombre de corrections qui diminue la fiabilité de la mesure. La spectrométrie de masse telle que nous l'avons utilisée ne permet donc pas de produire des lobes d'émission fiables.

### **C.V.3. Etude du coefficient de collage**

#### **C.V.3.1. Description du phénomène de collage**

Le collage des molécules vient de l'existence d'un potentiel d'attraction en surface des matériaux. On considère les contaminants qui se dirigent vers la cible de contamination avec une certaine énergie cinétique. En s'approchant de la cible, ils sont accélérés à cause du potentiel d'interaction attractif (énergie de surface). Le contaminant transfère alors une partie de son énergie à la cible lors de collisions élastiques. Suite à ces interactions, il peut être implanté à faible profondeur ou rebondi vers l'extérieur de la cible de contamination. Dans ce cas, soit il lui reste suffisamment d'énergie pour échapper au potentiel d'attraction et il ne contamine pas la cible, soit son énergie cinétique normale à la cible est trop faible et l'atome est collecté en surface, il y a alors collage en surface. Dans certains cas, les atomes ou molécules en surface peuvent également réagir chimiquement les uns avec les autres. La Figure C-38 permet d'illustrer dans quelles conditions le collage intervient.



**Figure C-38 : Scénarios possibles lors de la contamination**

Nous allons maintenant étudier les paramètres influents sur la contamination.

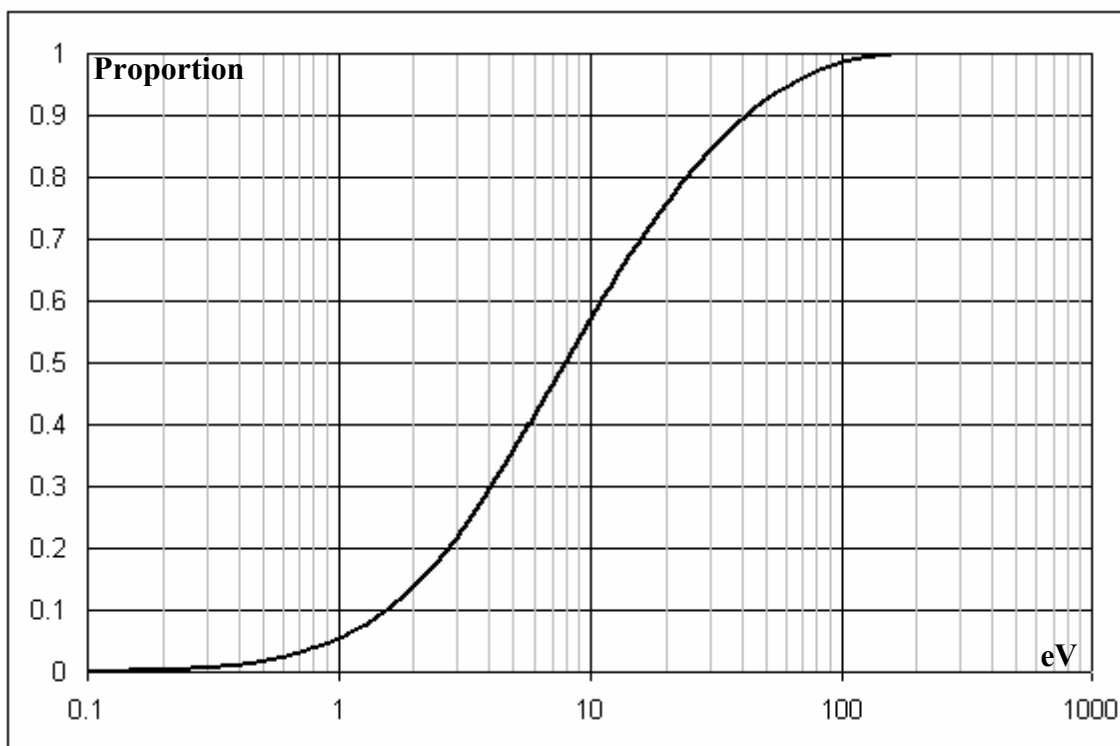
### **C.V.3.2. Paramètres influents sur le paramètre de collage**

#### **C.V.3.2.1. Effet de l'énergie**

On comprend aisément que le coefficient de collage ou probabilité de collage dépend de l'énergie de l'atome incident. Un atome d'énergie nulle a un coefficient de collage égal à un puisqu'il ne peut pas acquérir une énergie cinétique normale à la cible égale à l'énergie de surface. Au contraire un atome énergétique aura d'autant plus de chance de conserver assez d'énergie pour échapper à l'attraction de la cible que son énergie initiale est élevée.

De façon générale, l'énergie des contaminants est assez faible. Nous avons étudié cette énergie par simulation au moyen de CSiPI dans le cas de l'aluminium érodé par du Xénon à 600eV sous incidence 45°. Ainsi, la Figure C-39 montre la répartition des énergies calculée dans ce cas. On peut donc voir que 50% des atomes d'aluminium érodés ont une énergie inférieure à 8eV, et 90% ont une énergie inférieure à 40eV.

En réalité, on l'a déjà vu, le spectre d'énergie des particules érodées dépend fortement de la direction étudiée. Ainsi, pour les directions d'émission rasantes, le coefficient de collage risque d'être faible, alors que pour les angles négatifs, il restera certainement proche de 1.



**Figure C-39 : Population des particules érodées d'une cible d'aluminium par Xénon 600eV sous incidence 45°.**

#### **C.V.3.2.2. Effet de la température**

Ce raisonnement toutefois n'est correct qu'à 0°K. En effet, dans le cas contraire, l'agitation thermique transfère de l'énergie aux atomes. Ainsi on comprend aisément que le coefficient de collage est plus élevé à basse température qu'à haute température.

#### **C.V.3.2.3. Effet de l'angle d'incidence**

Plus l'incidence est rasante, plus la déviation minimale pour que le contaminant acquière un mouvement vers l'extérieur de la cible est faible. De plus, en augmentant l'angle d'incidence, on augmente la probabilité d'interactions (chocs) avec la cible avant même que le contaminant n'ait pénétré la cible. Ces interactions lui transfèrent toujours une quantité de mouvement vers l'extérieur de la cible. Ainsi la probabilité pour qu'un contaminant acquière une énergie cinétique normale à la cible supérieure à l'énergie de surface croît avec l'angle d'incidence. Ainsi c'est à incidence normale que le coefficient de collage est le plus élevé.

#### **C.V.3.2.4. Effet du substrat**

Le coefficient de collage dépend des interactions entre le contaminant et le substrat. Si ces interactions sont fortes, le collage sera élevé et inversement. Cette interaction a une influence par exemple sur la morphologie du dépôt. Si l'interaction est faible, une diffusion de surface est possible et permet la condensation du contaminant en gouttelettes. Si au contraire l'interaction est forte, on obtient rapidement une monocouche puis une croissance plane du dépôt.

Si le coefficient de collage n'est pas nul, on dépose initialement le contaminant sur le substrat, puis sur le dépôt. On aboutit donc à l'étude du dépôt d'un matériau sur lui-même.

Cela simplifie l'étude dans la mesure où on a plus facilement accès à l'énergie de surface qui peut alors être prise en première approximation comme l'énergie de sublimation (pour les métaux ou les solides moléculaires)

Pour des expériences de contamination courtes où le nombre de monocouches déposées est faible, on ne peut pas considérer un coefficient de collage unique dans la mesure où on passe d'une surface de dépôt qui est la cible de contamination à une surface de dépôt qui devient de la même nature que le contaminant. Ainsi, des études de Desrousseaux et al.<sup>61</sup> sur le coefficient de collage de l'argent et l'or sur MgO illustrent ce phénomène avec un coefficient de collage variant de 0 à 1 durant la contamination. Ces études montrent également qu'en toute rigueur on ne peut pas parler de monocouches dans la mesure où la contamination se fait initialement par nucléation, c'est à dire un recouvrement non homogène de la surface.

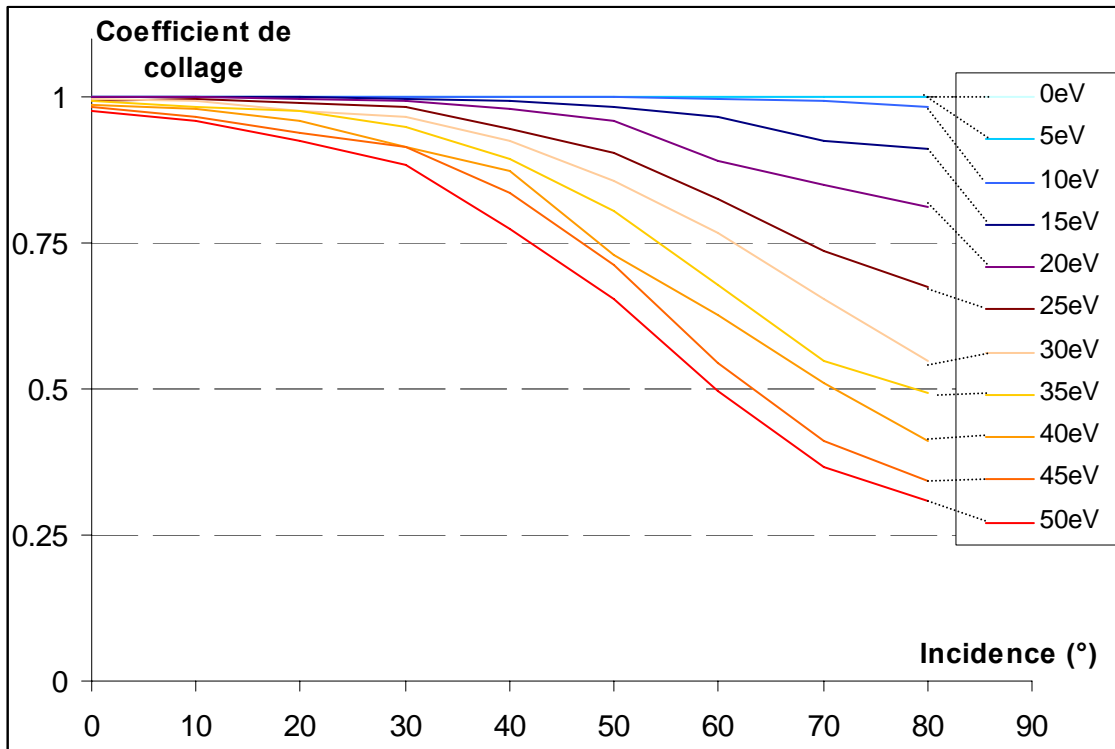
### **C.V.3.3. Etude du coefficient de collage par simulation**

Nous avons étudié le coefficient de collage de l'aluminium sur l'aluminium en fonction de l'énergie des contaminants incidents et de l'angle d'incidence avec le code CSiPI. Ce calcul tient compte de la déviation et l'accélération du contaminant approchant la cible due à l'énergie de surface (prise à 3.7eV). On tient également compte de l'érosion de la cible de contamination qui est supposée être une épaisseur de contaminants. Nous avons effectué cette étude pour des angles d'incidence entre 0 et 80° et des énergies entre 0 et 50eV, soit 95% de la population des contaminants produits dans l'exemple présenté à la Figure C-39.

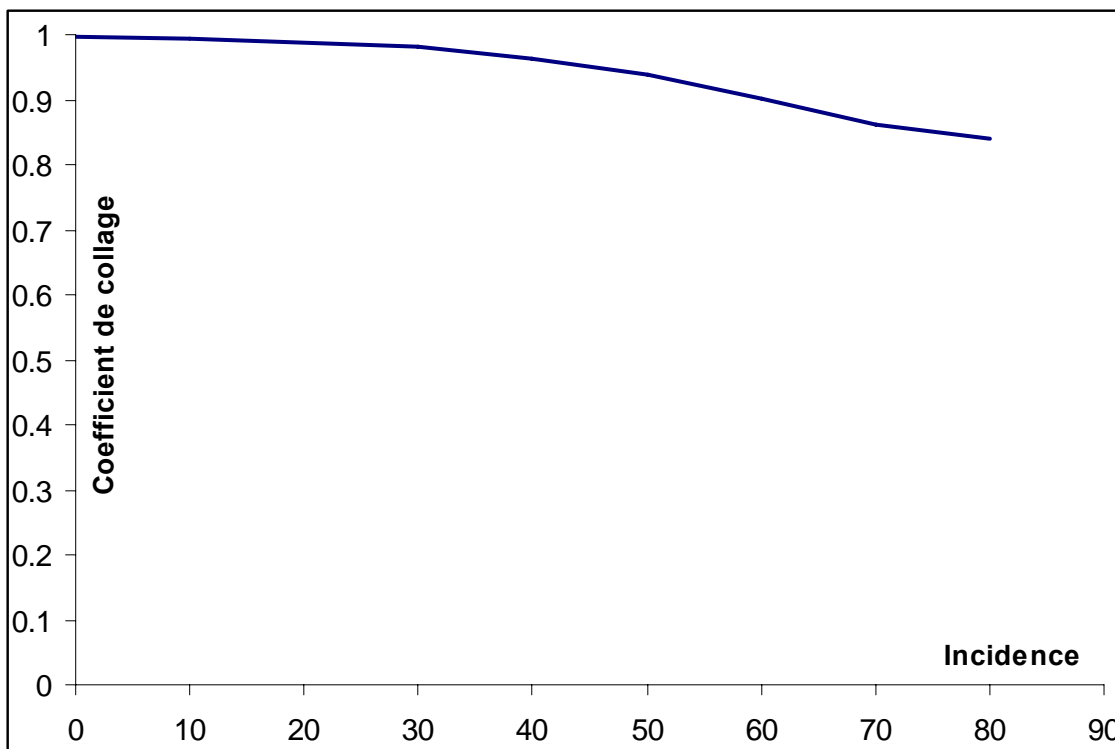
Les résultats présentés sur la Figure C-40 ont essentiellement une valeur qualitative dans la mesure où les interactions ne sont pas très bien modélisées par l'approximation des collisions binaires pour les faibles énergies considérées. Toutefois, on observe bien que le coefficient de collage décroît avec l'énergie des atomes incidents et avec leur angle d'incidence. Ces résultats qualitatifs sont confirmés par des expériences<sup>62</sup>. On atteint même un taux de collage relativement faible de l'ordre de 0.3 à 50eV sous incidence 80°.

Jusqu'à 10eV, le coefficient de collage peut être considéré comme égal à 1 quel que soit l'angle d'incidence. De même, il peut être considéré égal à 1 à toutes les énergies étudiées à incidence normale. En réalité, c'est le taux d'érosion qui fait diminuer le coefficient de collage à partir de cette énergie.

La Figure C-41 indique le coefficient de collage global calculé en considérant la répartition de population présentée sur la Figure C-39. Dans ce cas, on peut considérer que le coefficient de collage est de 1 à incidence normale et chute à 0.84 à incidence 80°. Il s'agit là d'une valeur moyenne. En pratique, on peut s'attendre à ce que ce coefficient de collage soit plus faible pour les émissions rasantes.



**Figure C-40 : Coefficient de collage de l'aluminium sur l'aluminium simulé par CSiPI, en fonction de l'énergie et l'angle d'incidence des contaminants**



**Figure C-41 : Simulation du coefficient de collage global de l'aluminium obtenu par pulvérisation ionique à 45° par du Xénon à 600eV sur l'aluminium**

### **C.V.3.4. Conclusion**

On peut conclure de cette étude que dans le cas de l'aluminium la contamination à incidence normale se confond avec l'émission. Ceci se produit a priori dans le cas des métaux pour lesquels la cohésion des matériaux est obtenue par des interactions non directionnelles à distance. Ainsi, l'énergie de surface est élevée. Au contraire, la littérature montre que ce coefficient de collage n'atteint pas 1 même à incidence normale dans le cas de la contamination par du graphite produit par pulvérisation ionique<sup>38</sup>.

Pour les métaux, l'énergie de surface permet de capter les contaminants trop peu énergétiques pour échapper à la cible de contamination.

Par contre les simulations effectuées montrent que l'incidence a un effet sur le coefficient de collage et donc également sur la contamination. On peut ainsi obtenir des coefficients de collage inférieurs à 1 même pour les métaux.

### **C.V.4. Mesure expérimentale de la contamination**

La mesure de la contamination se fait en exposant une surface aux produits d'érosion. Si on veut identifier contamination et émission, il faut prendre quelques précautions. Il faut que les cibles de contamination soient normales à la direction d'émission des contaminants, et il faut que le contaminant aie un fort coefficient de collage (c'est le cas des métaux).

La quantité de contaminant peut alors être mesurée par diverses techniques. On peut citer entre autre la pesée<sup>63,64</sup>, la profilométrie<sup>50</sup>, des mesures pas élipsométrie<sup>37</sup> ou encore par RBS<sup>18,65,66</sup>.

Dans le meilleur des cas, la mesure est faite en temps réel, ce qui permet de tenir compte de la variation de coefficient de collage entre la cible de contamination initiale et la cible recouverte de contaminant.

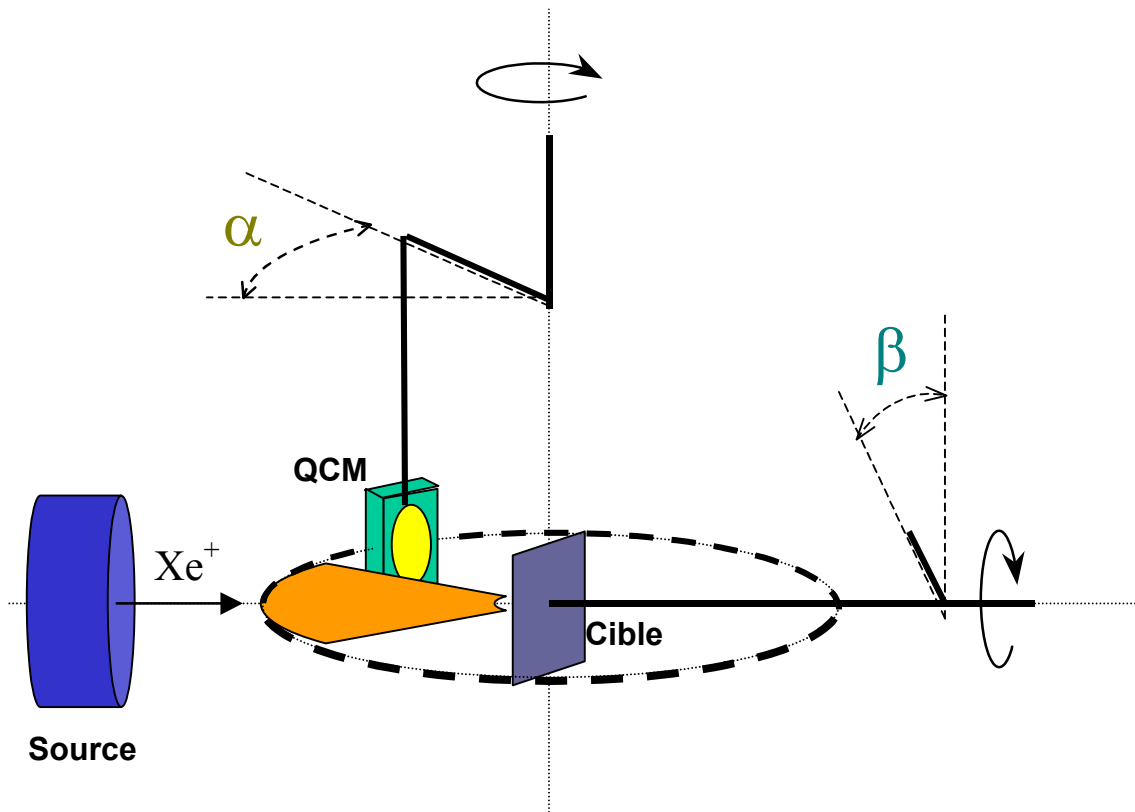
Il est préférable de pouvoir effectuer les mesures au sein de l'enceinte pour éviter de déplacer les échantillons. En effet, la cohésion du dépôt n'est pas forcément idéale et ce dernier risque de s'éliminer lors d'une remise à la pression atmosphérique. Le pire des cas serait une exposition à l'air qui risque de déposer des contaminants organiques, ou de provoquer l'absorption d'humidité. Une réaction avec l'air (oxygène, azote, eau) est également possible.

Pour toutes ces raisons, nous avons décidé de mesurer la contamination par pesées au moyen de micro balances à Quartz.

#### **C.V.4.1. Montage**

Cette technique a déjà été utilisée par Williams<sup>63,64</sup>. Notre montage s'en inspirant est décrit par la Figure C-42.





**Figure C-42 : Montage expérimental permettant de mesurer les lobes de contamination par pesée par QCM**

Notre montage expérimental est donc constitué d'une cible et d'une QCM regardant la cible. Pour construire la totalité du lobe d'émission, nous avons besoin de deux degrés de liberté.

Le premier est un mouvement circulaire de la QCM autour d'un axe passant par la cible (mesuré par l'angle  $\alpha$ ). Le second est la rotation de la cible sur un axe traversant la source (mesuré par l'angle  $\beta$ ). Toutefois, nous n'avons pas accès à la totalité du lobe d'émission. En pratique, la QCM ne peut pas se situer entre la source d'ions et la cible d'érosion. Par ailleurs, il faut prendre garde à ne pas exposer la QCM au faisceau d'ions. Pour cela, on dispose des protections entre cette dernière et la source d'ions.

La contamination est un phénomène lent. Ainsi pour accélérer les mesures, on a tout intérêt à augmenter l'érosion donc à rapprocher la cible de la source. On a ainsi également l'avantage de limiter la contamination par le fond de l'enceinte. En pratique, on travaille avec une cible placée à 12.5cm de la source et une QCM à 58mm de la cible d'érosion. Par contre, la QCM se trouvant proche de la source, elle est chauffée par le rayonnement du filament neutraliseur. On atteint des températures de l'ordre de 100°C. La mesure de la fréquence propre d'oscillation du quartz devient alors très sensible à de légères variations de température. On doit donc réguler la QCM en température. Le système le plus simple est de chauffer la QCM avec un contrôle en température de façon à travailler à température constante. Pour cela, nous utilisons des résistances chauffantes (1Watt de chauffage au maximum, la déperdition de chaleur s'effectue par conduction thermique). Toutefois, nous envisageons un refroidissement pour travailler autour de 60°C qui est la température de plus grande stabilité de la fréquence de la QCM. Enfin, la température a certainement une influence sur le dépôt de certains produits, il serait donc avantageux de pouvoir choisir cette température.

### C.V.4.2. Résultats expérimentaux

Nous nous sommes particulièrement intéressés à l'influence de l'angle  $\alpha$  sur la vitesse de dépôt. Cette mesure a été effectuée dans le cas de l'érosion d'aluminium sous incidence  $30^\circ$ . La mesure a été effectuée pour différentes énergies d'érosion. Pendant ces expériences, la cible d'érosion n'a pas été équipée d'une sonde de courant. Ainsi on ne peut produire que des données relatives de la contamination en fonction de la direction d'émission. Par ailleurs, quand ces expériences ont été effectuées, la présence des neutres énergétiques était mal connue. La mesure à 600eV a été effectuée avec une très faible tension d'accélération de telle façon que cette mesure n'est pas faussée par les neutres énergétiques. Au contraire le lobe d'émission produit à 100eV est perturbé par l'érosion due à des neutres plus énergétiques dont l'énergie peut atteindre 600eV a priori.

Les lobes d'émission mesurés lors du bombardement ionique d'aluminium par du Xénon à 100, 300 et 600eV sous incidence  $30^\circ$  sont représentés à une échelle arbitraire sur la Figure C-43.

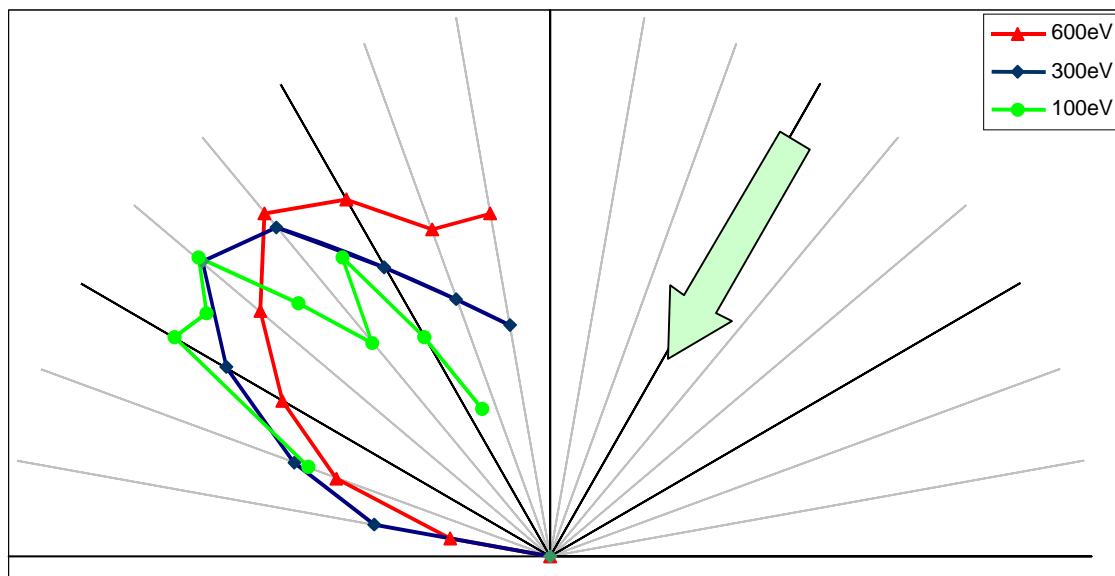


Figure C-43 : Lobes de contamination normalisés : aluminium érodé par des ions  $\text{Xe}^+$  sous incidence  $30^\circ$

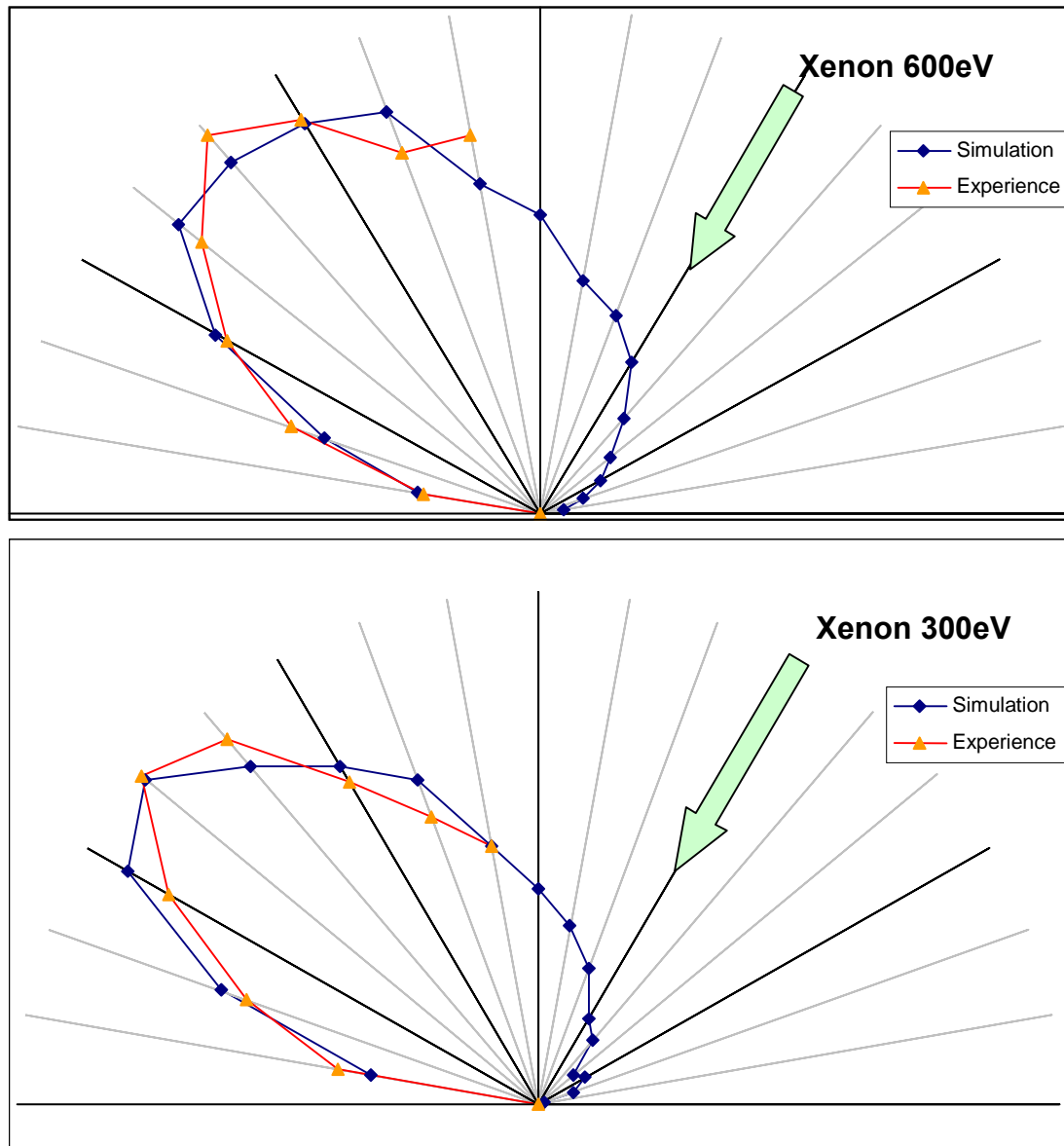
On observe ainsi expérimentalement que l'émission n'est ni normale à la cible d'érosion, ni dans une direction de type spéculaire. On observe au contraire une émission rasante. D'ailleurs, plus l'énergie des ions incidents est faible plus le lobe d'émission est rasant. On pourrait s'attendre en continuant à augmenter l'énergie des ions à observer une émission normale en cosinus comme le prévoit la théorie linéaire des cascades de Sigmund<sup>25</sup>. Mais dans ce domaine d'énergie, la cascade n'est pas aléatoire puisque l'érosion est principalement régie par les premières collisions. Ces concepts seront étudiés dans la Partie D.

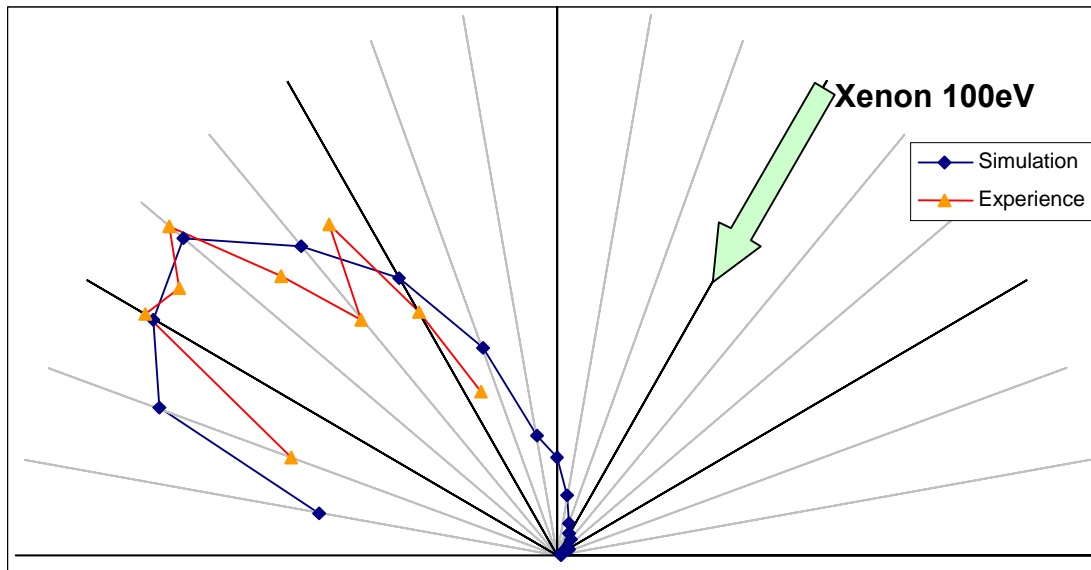
On remarque que le lobe d'émission à 100eV est fortement bruité. Ceci est dû à la lenteur de la contamination et à la mauvaise qualité de la régulation en température. L'obtention d'un meilleur signal nécessite de travailler dans une plage de température où la fréquence de résonance du cristal de quartz est stable. On pourrait ainsi obtenir des mesures

beaucoup plus précises. Une autre solution pour améliorer la précision est évidemment d'augmenter le courant d'ions  $Xe^+$  ou d'allonger la durée de l'expérience.

### C.V.4.3. Simulation de l'émission

Nous avons effectué la simulation de l'érosion de l'Aluminium par le xénon sous incidence  $30^\circ$  avec CSiPI. Cette mesure a été réalisée pour des énergies de 100, 300 et 600eV. Les résultats de la simulation présentés aux graphiques de la Figure C-44 montrent une excellente corrélation entre l'expérience et la simulation.





**Figure C-44 : Mesures et simulations des lobes d'émission lors du bombardement ionique de cibles d'aluminium par du Xénon à 100, 300 et 600eV sous incidence 30°**

On a alors une complémentarité entre l'expérience et la simulation. En effet, l'expérience confirme la simulation alors que la simulation donne accès aux valeurs qui ne peuvent pas être obtenues par l'expérience. On rappelle par exemple que la mesure dans la direction de la source, direction la plus importante est impossible expérimentalement.

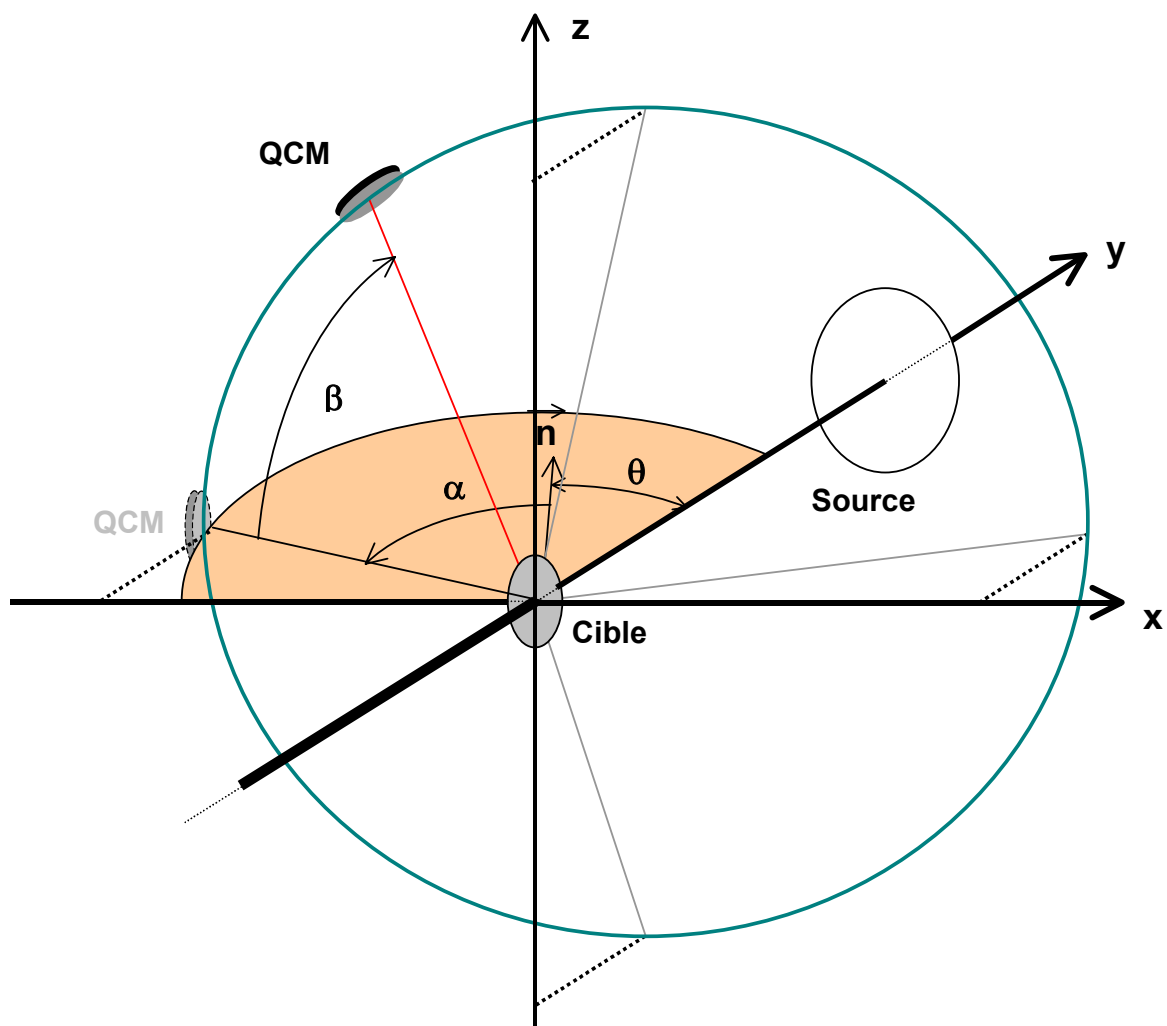
#### **C.V.4.4. Lobe d'émission 3D**

Si à incidence normale l'émission dans le plan suffit à décrire l'émission, dans le cas d'une érosion à incidence non nulle, le lobe d'émission se définit en trois dimensions. Ainsi, pour l'expérience d'érosion à 300eV, dans le plan décrit par la normale à la cible et la direction des ions incidents, nous avons vu que le maximum d'émission mesuré se situe pour l'angle  $-50^\circ$ .

Nous avons alors placé la QCM dans ce plan à l'angle  $\alpha = -50^\circ$ . Nous avons ensuite fait varier l'angle  $\beta$ . En toute rigueur, en faisant varier  $\beta$ , on ne décrit pas l'émission dans un plan mais selon la surface d'un cône passant par la cible et décrit par l'angle d'émission dans le plan  $\alpha$ . Toutefois pour le cas particulier pour lequel  $(\theta - \alpha)$  est égal à  $90^\circ$ , ce cône devient un plan ( $\theta$  est l'angle d'incidence).

Notre logiciel de simulation calcule les lobes dans des plans, ainsi pour  $\alpha$  fixe, on peut déterminer le lobe dans le plan contenant l'axe  $Oz$  et la QCM pour l'angle  $\alpha$  étudié et  $\beta = 0$ . Les lobes étudiés expérimentalement et par simulation ne correspondent donc que quand  $(\theta - \alpha)$  est égal à  $90^\circ$ .

Pour le cas que nous étudions,  $(\theta - \alpha)$  est égal à  $80^\circ$ . La différence entre les deux résultats est donc faible, surtout pour les faibles valeurs de  $\beta$ . On considère donc que l'on peut comparer la mesure et la simulation sans faire de grande erreur. La Figure C-45 permet de visualiser la différence entre ces deux résultats.



**Figure C-45 : Cône de mesure expérimentale de la contamination**

La Figure C-46 nous montre les résultats de la simulation et de l'expérience dans le plan (ou assimilé comme tel) passant par la cible et la direction décrite par l'angle  $\alpha=50^\circ$ . On observe alors que la simulation et la mesure sont extrêmement proches.

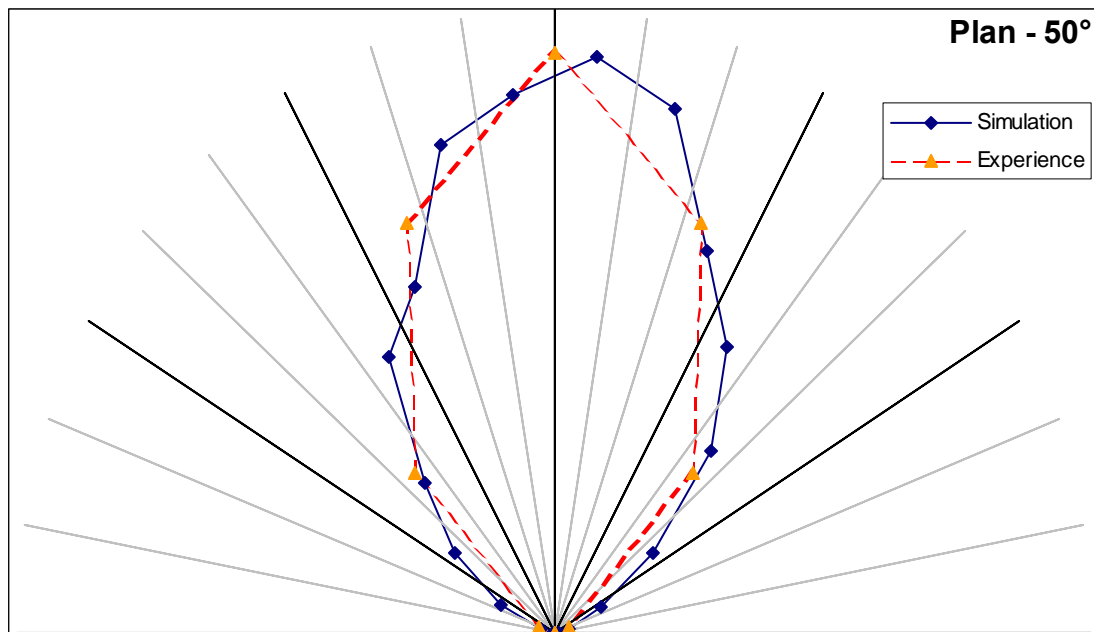


Figure C-46 : Lobe d'émission hors du plan d'incidence pour  $\alpha=50^\circ$  et  $\beta$  variable

### C.V.5. Conclusion

La contamination est un risque potentiel important causé par les effets de jets de la propulsion plasmique. Nous avons vu qu'il fallait faire attention à distinguer contamination et émission qui diffèrent à cause du coefficient de collage. Toutefois, nous avons montré que ces deux phénomènes se rejoignent dans le cas des métaux pour une contamination à incidence normale. Toutefois, nous avons également vu que même dans le cas des métaux le coefficient de collage s'éloigne de 1 pour les incidences rasantes.

Nous avons mis au point un système expérimental de mesure de l'érosion basé sur la prise de masse d'une QCM exposée à un flux de contaminants. Le but premier de cette étude était de mettre en évidence la faisabilité de la mesure de contamination par QCM. Malgré sa grande simplicité, ce montage a fourni des résultats expérimentaux, montrant la possibilité de construire une partie du lobe de contamination en trois dimensions dans le cas de la contamination par l'aluminium. Cette mesure est effectuée en temps réel. Ainsi tous les problèmes liés à l'exposition des échantillons à l'air sont résolus. De plus, on mesure une vitesse de contamination instantanée (mais très bruitée) et non pas une moyenne sur tout le temps de l'expérience.

Toutefois, le mauvais contrôle de la température de la QCM a diminué la précision des mesures que nous avons effectuées, de telle façon que les mesures de contamination effectuées à basse énergie sont bruitées. Ce problème peut être résolu en utilisant un système de régulation de température plus performant et permettant de travailler dans une gamme de température de plus grande stabilité de la QCM. A cause du grand nombre d'aspects de la pulvérisation ionique à étudier, nous avons décidé de ne pas approfondir l'étude de la contamination par QCM. Toutefois les résultats obtenus sont déjà très prometteurs, et pourront servir de base pour des études ultérieures.

Nous avons également étudié l'émission par simulation. Les résultats obtenus sont extrêmement proches des résultats expérimentaux. La simulation produit un lobe d'émission

complet en trois dimensions. Dans la mesure où les résultats simulés sont confirmés par l'expérience, on peut utiliser les résultats simulés dans des directions non étudiées expérimentalement avec une bonne confiance.

Malheureusement, la mesure d'émission n'a pas donné d'aussi bons résultats que la contamination. Nous nous sommes aperçus, un peu tard que notre mesure d'émission est fortement dépendante du spectre d'énergie des particules étudiées. Dans l'état actuel de notre installation, la mesure d'émission par spectrométrie de masse ne permet pas de produire des lobes d'émission.

## **C.VI. Conclusion**

L'installation IDEFIXe est dédiée à l'étude expérimentale des phénomènes d'érosion et de contamination qui risquent de limiter la durée de vie des satellites équipés de propulsion plasmique. Durant la thèse, nous avons amélioré les techniques de mesures. La principale avancée est d'être passé d'une mesure passive par pesées avant et après érosion à des techniques de mesure en temps réel pendant la pulvérisation ionique.

En effet, nous avons mis au point une technique de mesure d'érosion par QCM. Cette technique nous a également permis d'étudier les performances de notre installation expérimentale. Nous avons en particulier mis en évidence l'existence d'un faisceau de neutres énergétiques qui participent à l'érosion. Une réflexion sur le fonctionnement de la source d'ions appuyée par des mesures expérimentales nous a permis de caractériser ces neutres, d'identifier leur origine et de déterminer une stratégie pour limiter leurs effets.

Ces neutres expliquent des résultats aberrants qui avaient été observés avant cette thèse. Grâce à la résolution de ce problème expérimental, nous avons pu effectuer des mesures de taux d'érosion à incidence normale pour diverses énergies, et pour diverses incidences. Nous avons alors obtenu des résultats qui correspondent à la littérature. On a ainsi pu valider notre technique et notre protocole pour la mesure des taux d'érosion. Grâce à la grande sensibilité des QCM, on est maintenant capable d'effectuer des mesures d'érosion à basse énergie.

Nous avons également étudié l'émission et la contamination de façon dynamique. La contamination a donné de très bons résultats que l'on a pu corrélérer à des simulations obtenues par CSiPI. Par contre l'étude de l'émission a été beaucoup moins fructueuse.

Nous disposons donc d'outils expérimentaux et de protocoles permettant d'étudier l'érosion due au bombardement ionique par des ions  $Xe^+$  énergétiques et la contamination induite par les produits d'érosion.



# Partie D. Utilisation de la simulation numérique pour étudier l'émission

## D.I. Introduction

On a déjà vu dans les chapitres précédents que les simulations du taux d'érosion obtenues avec CSUPI (Code de Simulation de la Pulvérisation Ionique) fournissent des résultats très satisfaisants, notamment dans le cas de l'argent, du cuivre et du molybdène. On a également vu que l'on retrouve par la simulation des lobes d'émission de produits d'érosion obtenus expérimentalement, ou encore le spectre en énergie des particules érodées. Toutes ces bonnes corrélations entre les simulations et les données expérimentales laissent à penser que le modèle sur lequel est basé notre code reproduit bien la physique de la pulvérisation ionique dans le cas des métaux.

Ainsi, la validité de notre outil de simulation numérique ayant été vérifiée, nous avons entrepris une étude des différents paramètres influant sur l'érosion ionique et surtout sur l'émission. En effet, si pour le taux d'érosion la littérature fournit des lois théoriques, empiriques ou semi-empiriques (§-B.IV), la prévision de la direction d'émission ne peut pas être effectuée de façon simple. La seule loi valable que l'on trouve dans la littérature est une émission en cosinus issue de la théorie linéaire des cascades et qui n'est valable que pour une érosion à haute énergie. Parmi les rares études visant à comprendre la direction d'émission, on peut tout de même citer Stepanova et al.<sup>67</sup>.

Cette partie a pour but de mieux comprendre les raisons physiques qui expliquent la forme des lobes d'émission des produits d'érosion. Les paramètres que nous allons étudier sont le potentiel de surface qui est le paramètre le plus influant à basse énergie, l'énergie et l'incidence des ions incidents, ainsi que la nature de la cible. Enfin, nous réfléchirons sur la taille de la cascade de collisions engendrant l'émission à basse énergie.

Pour cette étude, nous nous sommes basés sur le bombardement ionique de l'aluminium (énergie de liaison nulle et énergie de surface de 3.7eV) par des ions Xe<sup>+</sup> à 300eV sous incidence 30°. Si d'autres conditions sont étudiées, cela sera précisé.

## D.II. Effet de l'énergie de surface sur l'émission

Un des paramètres clés régissant la forme des lobes d'émission est l'énergie de surface. Cette énergie de surface dévie les particules arrachées à la cible et réduit leur énergie. Ainsi toute discussion sur la direction d'émission doit prendre en compte l'émission en

l'absence d'énergie de surface et l'effet de cette énergie de surface. L'émission en l'absence d'énergie de surface est régie par la cascade de collisions alors que l'énergie de surface modifie ce lobe en déviant les trajectoires et en supprimant les particules de plus basse énergie.

### D.II.1. Lobes d'émission pour différentes énergies de surface

Nous avons simulé l'érosion d'une cible d'aluminium par du Xénon 300eV sous incidence 30°. Nous avons fixé l'énergie de liaison à 0eV, alors que nous avons simulé l'émission pour plusieurs valeurs de l'énergie de surface comprises entre 1eV et 15eV. Le graphique de la Figure D-1 montre les lobes d'émission obtenus pour ces différentes énergies de surface. Ces lobes ne sont pas représentés à la même échelle. En effet, plus l'énergie de surface est faible plus l'émission est importante, comme le confirme la Figure D-2 qui présente le taux d'érosion pour les six énergies de surface étudiées. Les lobes de la Figure D-1 sont représentés de façon à pouvoir aisément comparer leurs formes.

On s'aperçoit alors que le lobe d'émission dépend fortement de l'énergie de surface. En effet plus l'énergie de surface est élevée, plus le lobe d'émission est rasant.

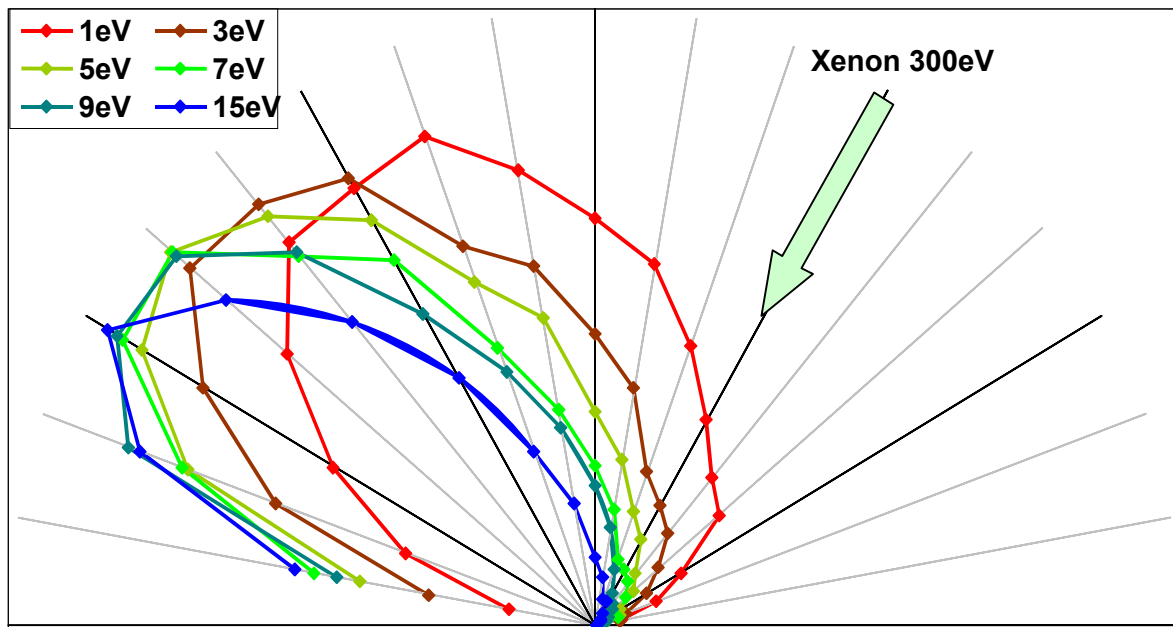
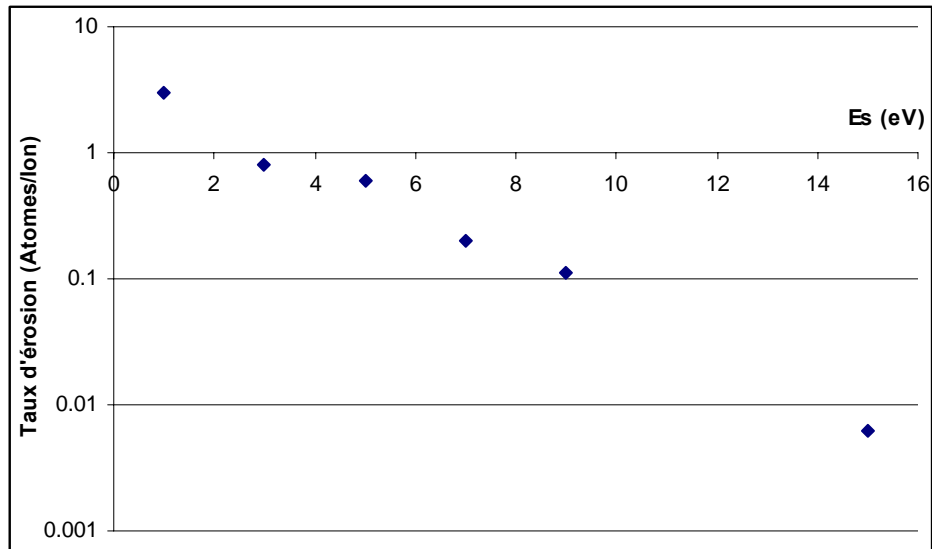


Figure D-1 : Lobes d'émission de l'aluminium dans le plan d'incidence. Influence de l'énergie de surface



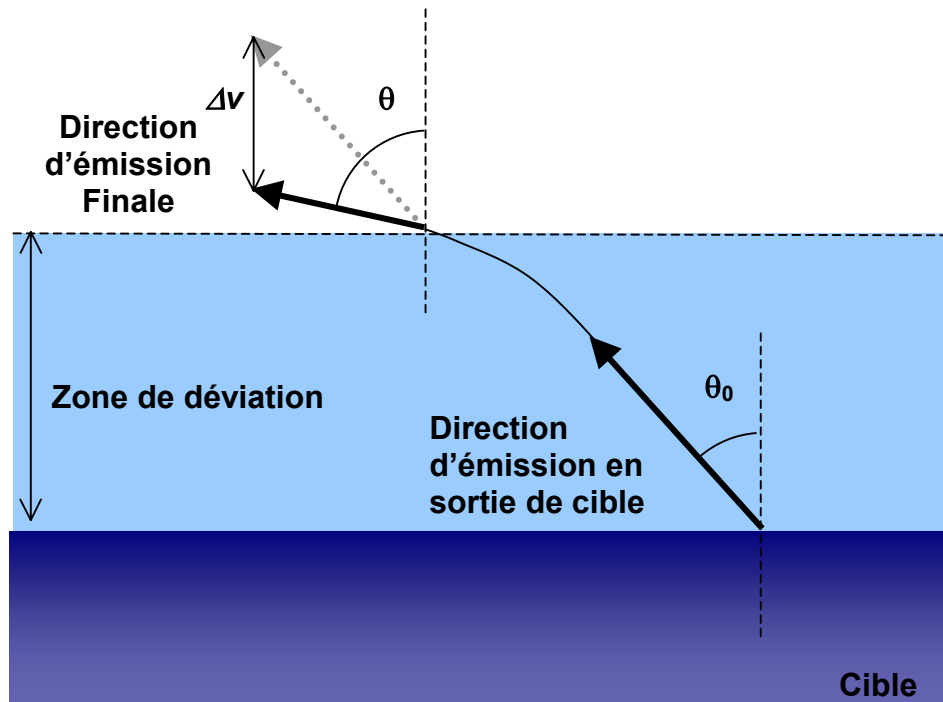
**Figure D-2 : Taux d'érosion de l'aluminium ( $\text{Xe}^+$  300eV,  $30^\circ$ ) en fonction de l'énergie de surface**

Pour mieux comprendre ce phénomène, nous avons étudié les effets de l'énergie de surface en détail. Pour cela nous avons distingué l'effet de déviation et l'effet de filtration en énergie.

### **D.II.2. Déviation d'un lobe monoénergétique due au potentiel de surface**

On rappelle que la déviation en surface d'un atome d'énergie  $E_0$  est due à une perte d'énergie cinétique égale à l'énergie de surface  $E_S$  dans la direction normale à la cible d'érosion (voir Figure D-3). Ainsi, si la direction d'émission en sortie de cible est repérée par l'angle  $\theta_0$ , l'émission finale sera repérée par l'angle  $\theta$  de telle façon que:

$$\sin \theta = \sin \theta_0 \sqrt{\frac{E_0}{E_0 - E_S}}$$



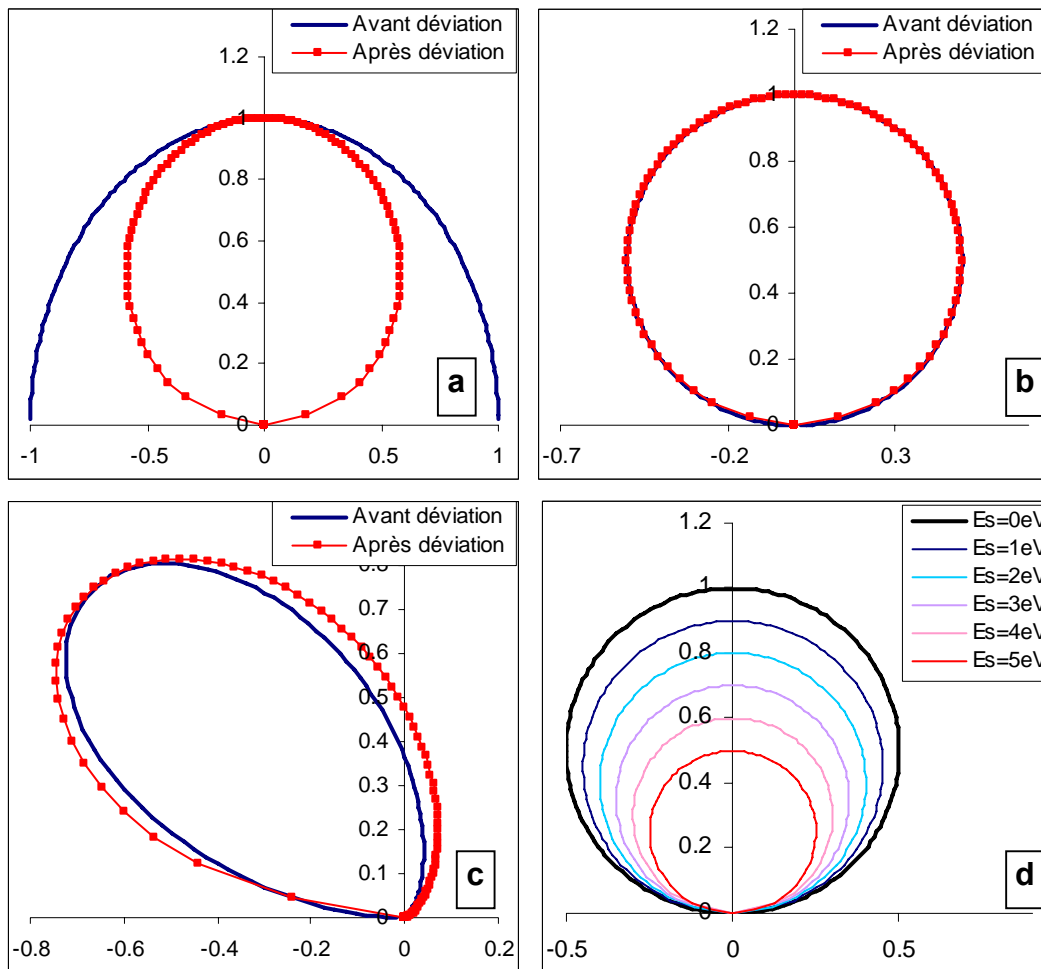
**Figure D-3 : Déviation et perte d'énergie lors du franchissement de la barrière de potentiel de surface**

Nous avons étudié cette déviation pour une émission monoénergétique d'atomes. Il s'agit d'un cas totalement virtuel pour lequel l'énergie des particules est fixée arbitrairement à 10eV alors qu'un potentiel de surface de 5eV est imposé. Les graphiques *a*, *b*, *c* et *d* de la Figure D-4 montrent plusieurs lobes d'émission arbitraires avant et après la déviation imposée par le potentiel de surface.

Le graphique *a* présente le cas d'une émission uniforme. Les lobes ont été normés pour favoriser l'étude de la forme sur celle de la taille des lobes d'émission. Comme on pouvait s'y attendre les angles les plus rasants perdent en intensité car ils subissent plus fortement les effets du potentiel de surface.

Le graphique *b* montre les lobes normés avant et après déviation pour une émission en cosinus. On rappelle que l'émission en cosinus est celle prévue par la théorie linéaire des cascades quand la cascade de collisions est assez développée pour produire une répartition des moments cinétiques homogène dans la cible. Dans ce cas, on observe que la forme générale du lobe d'émission n'est pas perturbée par la déviation induite par le potentiel de surface. Si la forme n'est pas altérée, l'émission totale par contre est diminuée, et ce d'autant plus que le potentiel de surface est élevé. En effet les atomes les plus rasants ne peuvent pas échapper à la cible. Ce phénomène est montré par le graphique *d* pour lequel tous les lobes sont à la même échelle. Ces lobes représentent l'émission en fonction du potentiel de surface. Le lobe représenté pour une énergie de surface nulle correspond au lobe avant déviation.

Le graphique *c* montre le cas d'un lobe présentant une direction d'émission privilégiée. On peut observer que pour un lobe directionnel monoénergétique, le potentiel de surface ne modifie pas la direction principale d'émission. Par ailleurs, le lobe est légèrement élargi.



**Figure D-4 : Déformation du lobe d'émission due au potentiel de surface pour plusieurs lois d'émission arbitraires avant déviation**

Les phénomènes que nous venons d'observer sur des cas théoriques à flux monoénergétique de particules ne correspondent pas du tout à ceux observés lors de simulations sur l'aluminium présentées à la Figure D-1. On voit en effet que l'effet de déviation sur la forme du lobe d'émission est très léger, alors que les simulations prévoient un lobe devenant de plus en plus rasant. Cela s'explique par le fait que l'émission est loin d'être monoénergétique, ceci a déjà été observé expérimentalement dans la partie précédente (§-C.V.3.2).

Afin d'illustrer ce phénomène, nous avons simulé l'émission de l'aluminium provoquée par l'érosion par des ions  $Xe^+$  à 300eV sous incidence  $30^\circ$ . Pour cette simulation, nous avons considéré un potentiel de surface de 1eV qui sert de filtre en énergie, mais nous n'avons pas effectué la déviation due à ce potentiel. Cela nous permet d'étudier la forme des lobes d'émission avant déviation par le potentiel de surface. Dans ces conditions, le graphique de la Figure D-5 montre les lobes d'émission pour différentes populations d'énergie : en dessous de 1eV, de 1 à 2eV, de 2 à 5eV, de 5 à 10eV, de 10 à 20eV, de 20 à 50eV et pour plus de 50eV. On observe alors qu'à très basse énergie, le lobe d'émission est presque symétrique et se rapproche d'une émission en cosinus. Par contre, plus l'énergie est importante, plus le lobe est directionnel et rasant. La Figure D-5 présente la forme des lobes pour chaque tranche d'énergie. Les lobes ne sont pas représentés à la même échelle. En réalité, plus l'énergie est faible, plus la population est importante. De façon pratique, la forme représentée est moins lisse à haute énergie à cause du nombre limité d'atomes, et donc à une mauvaise statistique.

Ainsi, a priori, la forme irrégulière du lobe d'émission d'atomes d'énergie supérieure 50eV n'est pas représentative de la réalité.

L'étude des lobes en fonction de l'énergie explique que le lobe d'émission totale devienne de plus en plus rasant quand on augmente l'énergie de surface. En effet, avec une forte énergie de surface, les atomes de faible énergie sont éliminés, et le poids des atomes de forte énergie croît. On tend donc vers un lobe d'émission rasant.

Toutefois les lobes d'émission ne peuvent pas être complètement rasants. Cela vient du fait qu'un atome sorti de la cible peut toujours interagir à distance avec les atomes de cette dernière. Or plus la trajectoire d'un atome est rasante, plus la probabilité de ce genre de collision est grande. Or après une collision avec un atome de la cible, la direction de l'atome devient moins rasante. Ce phénomène est d'autant plus important que la densité atomique de la cible est grande et que la section efficace de collision est grande.

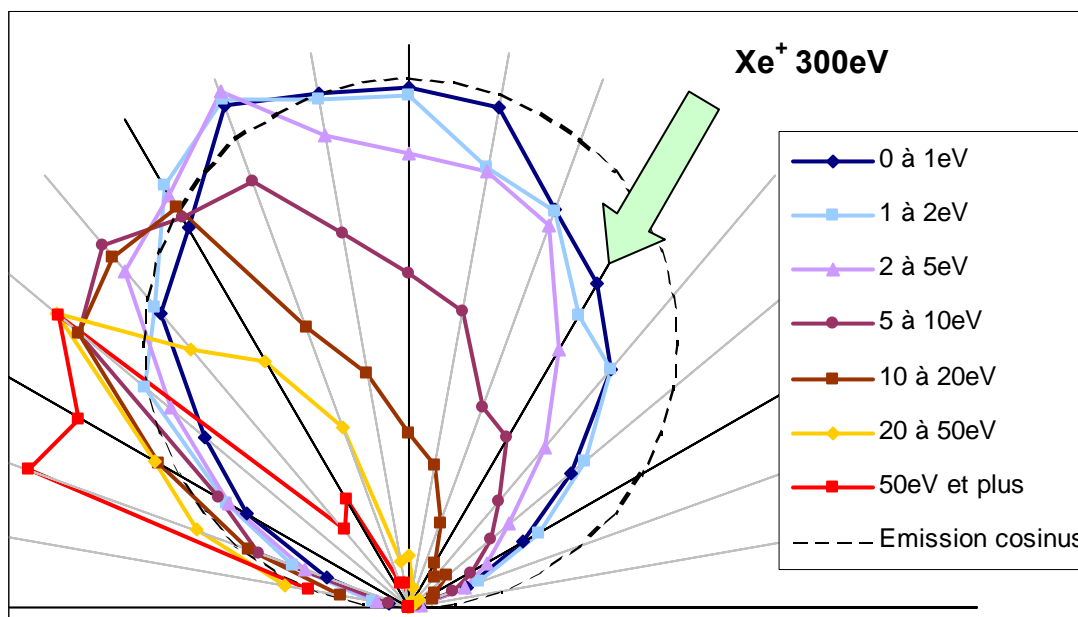


Figure D-5 : Lobes d'émission des différentes populations d'énergie

### D.II.3. Origine de l'hétérogénéité des énergies des atomes érodés

La sortie de la cible d'un atome nécessite de transformer une quantité de mouvement initialement orientée vers le centre de la cible (l'ion incident) en une quantité de mouvement orientée vers la surface (un atome émis). Cette inversion de quantité de mouvement se fait lors des collisions. Or toute collision engendre un partage d'énergie entre la particule incidente et la particule heurtée. Or plus la déviation est importante, plus la perte d'énergie est importante. Ainsi on comprend aisément que les particules énergétiques se trouvent dans la direction qui nécessite le minimum de déviation, soit la direction rasante. Nous verrons à la fin de cette partie (§-D.VII) que ce raisonnement est parfois un peu simpliste dans la mesure où le nombre de collisions est limité.

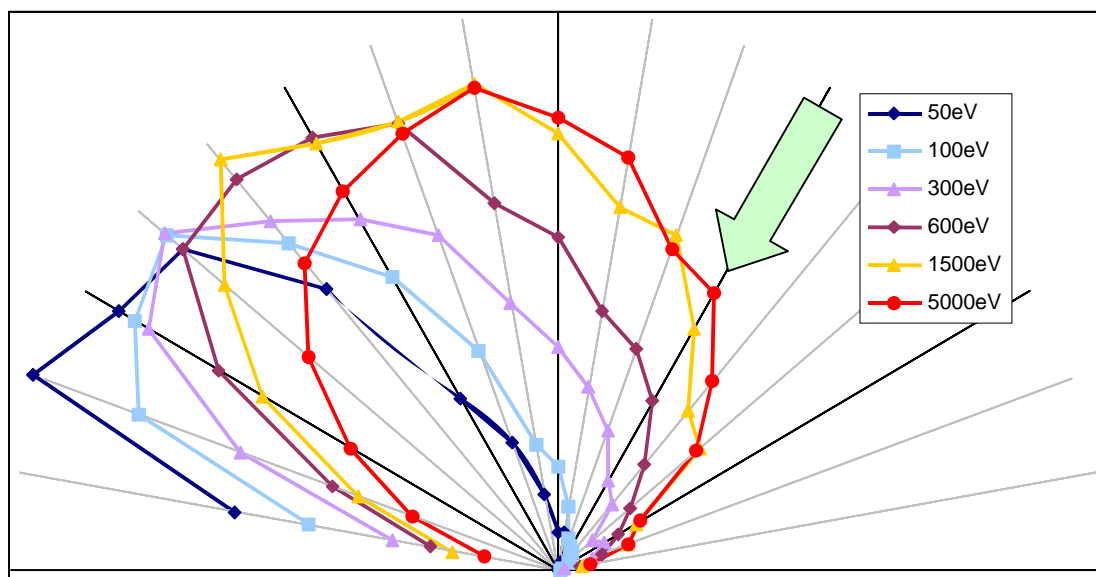
Au contraire, les atomes déplacés dans la cible perdent de l'énergie à chaque choc. Après un grand nombre de chocs, leur direction est aléatoire et leur énergie faible. Cela explique que l'émission d'atomes de basse énergie suive une loi en cosinus. Pour être précis, on obtiendrait une émission en cosinus si les interactions avec des atomes de la cible existaient uniquement à l'intérieur de la cible. Or comme on l'a déjà précisé pour les atomes

rasants, les collisions qui interviennent à l'extérieur de la cible favorisent l'émission vers la normale à la cible.

### **D.III. Effet de l'énergie des ions incidents**

La direction du lobe d'émission dépend également de l'énergie des ions érodants. On a vu précédemment qu'en présence d'un potentiel de surface, les populations de particules érodées les moins énergétiques ne sont pas émises. Ainsi, seuls les atomes les plus énergétiques sont émis. Plus l'énergie des ions incidents est faible plus l'énergie des atomes en mouvement dans la cible est faible également. Ainsi, la quantité d'atomes piégés par le potentiel de surface croît quand l'énergie des ions incidents décroît. Alors, plus l'énergie des ions incidents est faible, plus on favorise les directions d'émission les plus énergétiques, soit les émissions rasantes.

Pour vérifier ce comportement, nous avons simulé avec CSiPI les lobes d'émission produits par le bombardement de l'aluminium sous incidence  $30^\circ$  par des ions  $Xe^+$  d'énergies variables entre 50eV et 5000eV. La Figure D-6 présente les résultats des simulations. Comme dans les cas précédents, les lobes ne sont pas à la même échelle. Ils sont représentés de façon à comparer aisément leurs formes. On observe comme cela avait été prévu que quand l'énergie des ions incidents augmente, on tend vers un lobe de type cosinus. Alors que quand l'énergie des ions érodants est faible, on ne conserve que les atomes plus énergétiques qui sont émis de façon rasante.



**Figure D-6 : Forme du lobe d'émission de l'aluminium ( $Xe^+$   $30^\circ$ ) en fonction de l'énergie des ions érodants**

On rappelle que ce comportement avait également été vérifié expérimentalement à la partie §-C.V.2.3.2.

Pour information, la Figure D-7 indique les taux d'érosion calculés pour chaque énergie étudiée.

Cette étude valide l'idée que la forme des lobes d'émission dépend de la filtration en énergie imposée par le potentiel de surface. Evidemment, le taux d'érosion croît avec l'énergie des ions incidents.

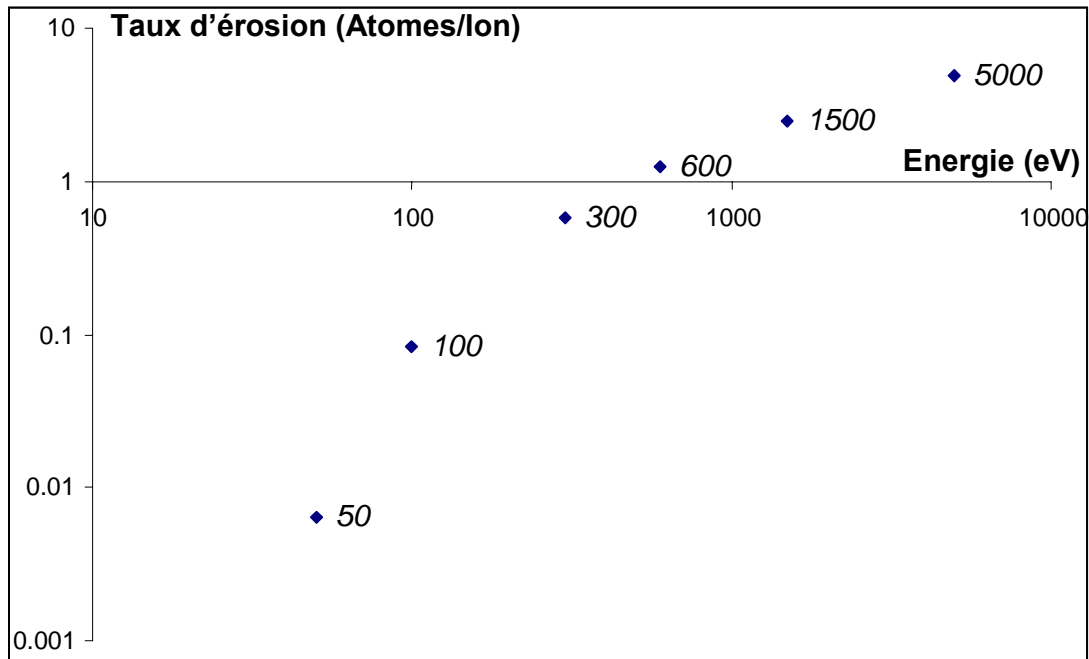


Figure D-7 Taux d'érosion de l'aluminium ( $\text{Xe}^+$   $30^\circ$ ) en fonction de l'énergie des ions érodants

## D.IV. Effet de l'angle d'incidence des ions érodants

### D.IV.1. Simulations des lobes d'émission

Nous avons simulé l'érosion de l'aluminium par du Xénon à 300eV sous plusieurs incidences. Comme précédemment, nous avons fixé l'énergie de liaison à 0eV et l'énergie de surface à 3.7eV. Les résultats de cette simulation sont représentés par les trois graphiques de la Figure D-8. Le graphique *a* présente les lobes d'émission à la même échelle. Le graphique *b* présente un détail du graphique *a* dans la zone d'émission située dans la direction du faisceau des ions érodants. En effet, cette direction est la plus importante dans le cas de la contamination sur satellite. Le graphique *c* enfin permet de mieux comparer la forme générale des lobes d'émission, pour cela ils sont représentés à une échelle arbitraire.

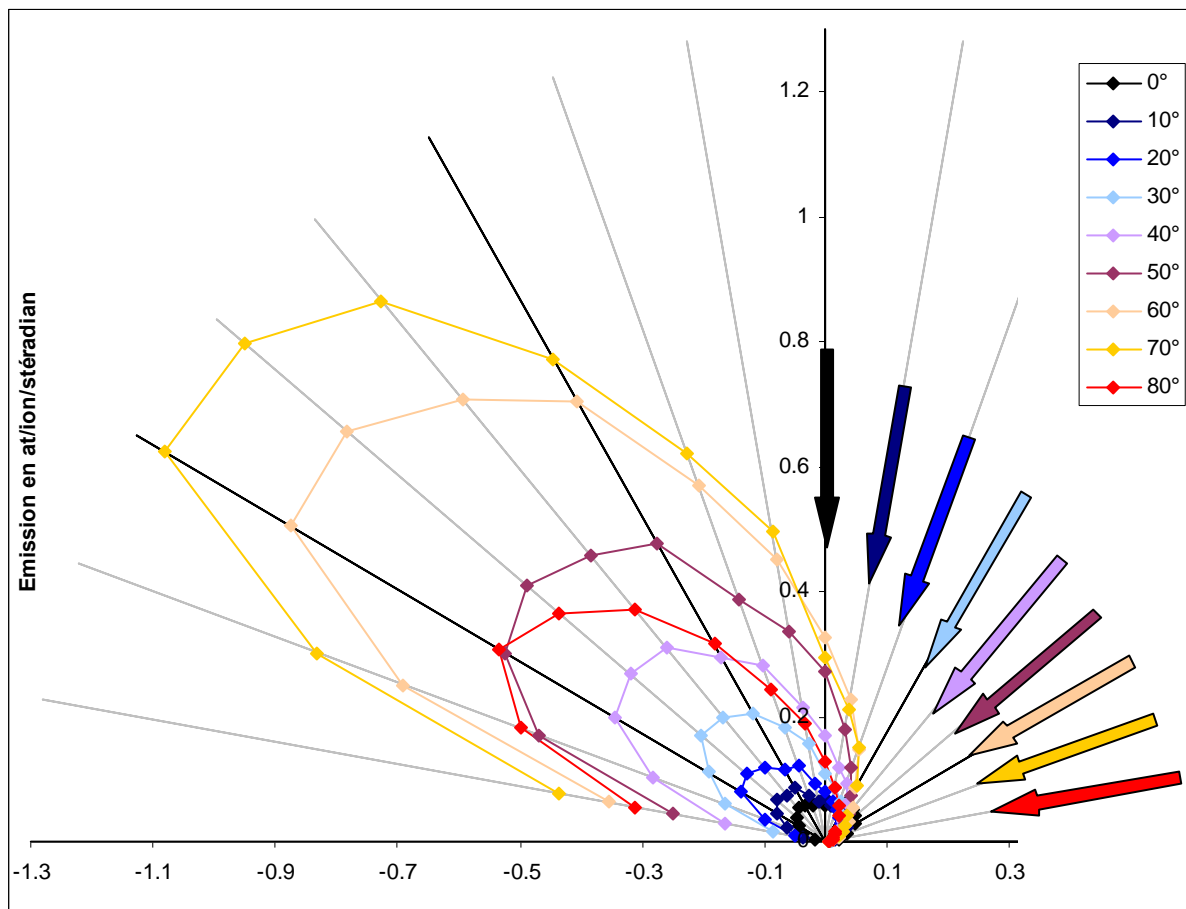
Le graphique *a* permet ainsi d'observer que l'émission totale croît avec l'angle d'incidence jusqu'à  $70^\circ$ , puis diminue pour l'incidence  $80^\circ$ . C'est un phénomène connu, qui veut que le taux d'érosion croisse avec l'angle d'incidence car la déviation totale nécessaire à l'érosion d'atomes diminue avec l'angle d'incidence.

Le graphique *b* nous permet de voir que bien que l'émission globale augmente avec l'angle d'incidence, l'émission rasante du côté des ions érodants diminue, or cette direction est la direction de contamination des satellites. En particulier la Figure D-9 présente l'émission dans la direction du faisceau d'ions incidents. Cette émission est à peu près stable pour les faibles angles d'incidence puis décroît fortement pour les fortes incidences. Cette émission correspond à une déviation de  $180^\circ$  de la quantité de mouvement. Ainsi, a priori, l'émission pour ce retournement de la quantité de mouvement serait la même quel que soit l'angle d'incidence en absence d'effets de surface. Or le potentiel de surface a plus d'effet sur les atomes rasants que sur ceux dont la trajectoire est normale à la cible. Par ailleurs, les

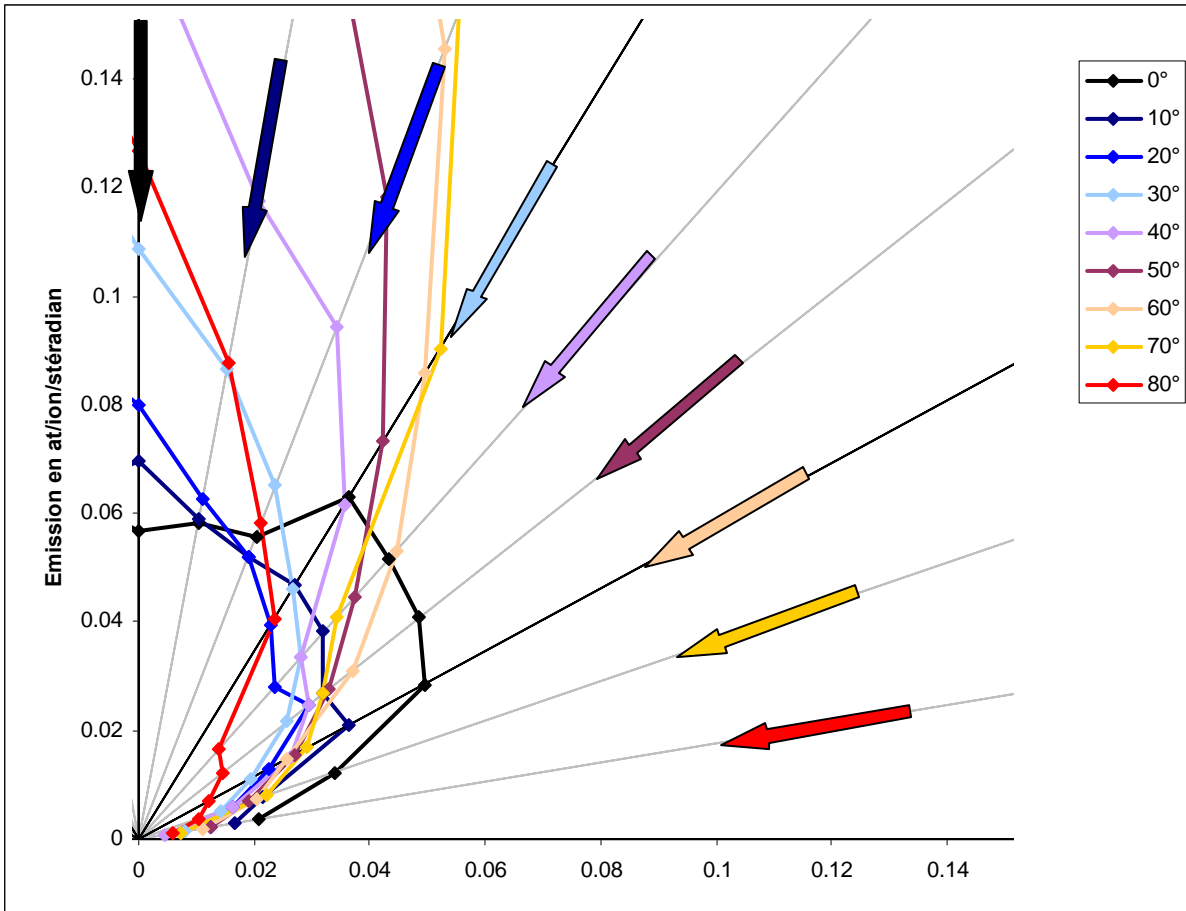


rebonds d'ions sur la surface sont plus importants à incidence rasante qu'à incidence normale. Ces deux phénomènes de surface expliquent la décroissance de l'émission dans la direction des ions incidents. On ne peut donc pas faire le raccourci qui consisterait à considérer que plus le taux d'érosion est important plus la contamination est importante.

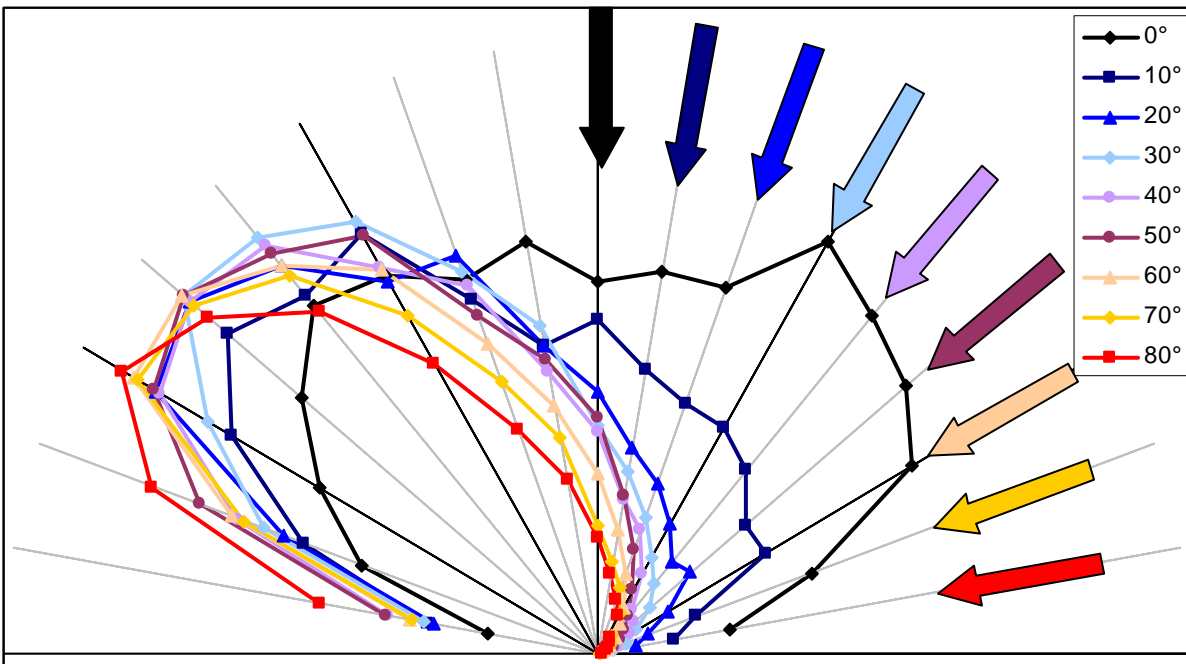
Le graphique c représente les formes des différents lobes (échelle arbitraire). On voit alors que pour une incidence de  $0^\circ$ , on a deux maximums pour les angles positifs et négatifs d'émission compris entre  $30^\circ$  et  $40^\circ$ . Puis pour des incidences de  $20^\circ$  à  $70^\circ$  les lobes sont très proches, avec un maximum d'émission autour de  $50^\circ$ . Cet angle a tout de même tendance à augmenter légèrement avec l'incidence. On observe également que le lobe d'émission tend à s'affiner avec une plus grande incidence des ions érodants. Ces effets sont bien plus marqués pour l'incidence  $80^\circ$  qui présente un maximum d'émission vers  $60^\circ$ . Le lobe d'émission pour l'incidence  $10^\circ$  est intermédiaire entre le lobe d'émission à  $0^\circ$  et les lobes d'émission entre  $20^\circ$  et  $60^\circ$ . On est donc loin d'une émission de type spéculaire comme on a pu le lire parfois dans la littérature<sup>21</sup>. Le fait que les lobes sont de plus en plus rasants quand l'émission augmente laisse à penser que le potentiel de surface joue un rôle de plus en plus important quand l'incidence augmente. Or plus l'angle d'incidence est important plus la probabilité de chocs à l'extérieur de la cible est importante. Ces chocs se traduisent également par une augmentation de l'énergie rebondie quand l'angle d'incidence croît. Or les chocs hors de la cible diminuent l'énergie de l'ion incident et donc l'énergie de la cascade de collisions. Ce sont par ailleurs des chocs qui ont une faible probabilité d'engendrer une érosion dans la mesure où l'énergie transmise aux atomes est orientée vers l'intérieur de la cible, comme le montre la Figure D-10.



a. Lobes d'émission, taille réelle



b. Lobes d'émission dans la direction du flux d'ions incidents



c. Comparaison de la forme des lobes

Figure D-8 : Emission ( $\text{Xe}^+$  300eV) en fonction de l'angle d'incidence des ions érodants

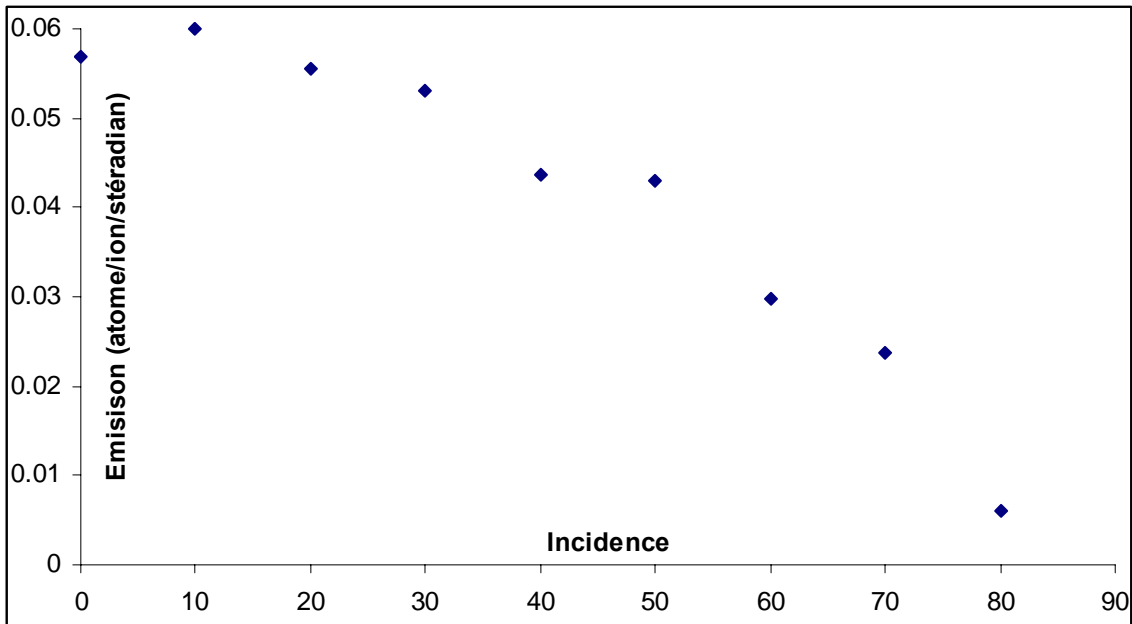


Figure D-9 : Emission dans la direction du faisceau d'ion incident

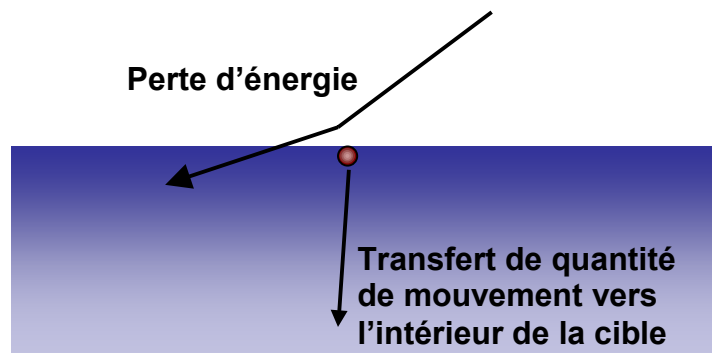


Figure D-10 : Perte d'énergie lors de l'entrée dans la cible, et déplacement d'un atome vers le cœur de la cible

## D.IV.2. Conclusion

Une modification de l'angle d'incidence induit une plus grande modification du taux d'érosion que de la direction d'émission. En effet, la direction d'émission reste pratiquement identique pour tous les angles d'incidence à l'exception des cas extrêmes que sont l'incidence normale et l'incidence très rasante. Ce résultat est surprenant dans la mesure où la déviation totale de la quantité de mouvement nécessaire pour émettre des atomes décroît quand l'angle d'incidence augmente. On devrait donc s'attendre à un lobe de moins en moins rasant quand l'angle d'incidence augmente.

Or on observe le contraire. Ainsi, on peut supposer que quand on augmente l'angle d'incidence, les interactions de l'ion avec la cible avant qu'il ne la pénètre diminuent son énergie. Alors on peut considérer que cette perte d'énergie compense la plus grande facilité de provoquer de l'émission à grande incidence.

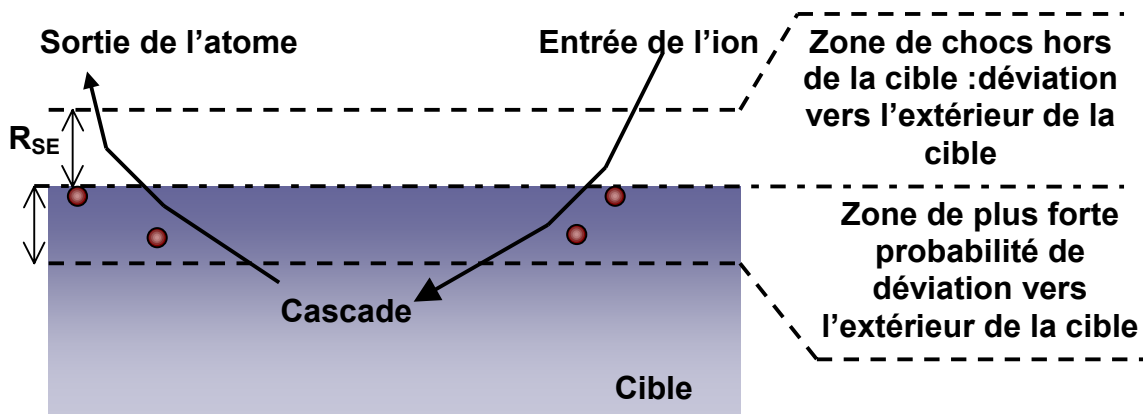
## D.V. Effets de la cible

Plusieurs paramètres de la cible ont une influence sur l'émission. Il y a évidemment les énergies de surface et de liaison. La nature des atomes (masse et numéro atomique) quant à eux influent sur les sections efficaces de collision et sur le transfert d'énergie entre l'ion et les atomes de la cible, donc sur le taux d'érosion et la direction d'émission. Un autre paramètre plus surprenant est la densité de la cible.

### D.V.1. Description des effets de la densité de la cible sur l'érosion

Si la densité de la cible ne modifie pas la cascade de collisions à l'intérieur de la cible à un facteur multiplicatif de taille près, elle modifie l'approche de l'ion qui peut effectuer des chocs avant d'entrer dans la cible ainsi que la sortie des atomes érodés qui entrent également en collision après être sortis de la cible. Ainsi, l'influence de la densité de la cible sur le taux d'érosion est la superposition de deux effets de surfaces : l'entrée de l'ion et la sortie des atomes érodés.

La Figure D-11 schématise ces effets de surface qui ont lieu sur une épaisseur d'un rayon de section efficace ( $R_{SE}$ ) hors de la cible, et un rayon de section efficace à l'intérieur de la cible. Par soucis de clarté, on s'attachera essentiellement aux chocs hors de la cible.



**Figure D-11 : Influence de la surface sur l'entrée des ions dans la cible et de la sortie des atomes**

Pour une densité supposée nulle, on n'observe plus d'interactions de surface. On prendra donc le taux d'érosion correspondant à une densité nulle comme référence égale à 1. Pour une densité non nulle, à cause de l'interaction des ions entrants avec la surface de la cible, l'érosion est augmentée ou diminuée par rapport à une cible de densité nulle. On peut alors définir un coefficient multiplicatif de l'érosion  $\alpha_{\text{entrée}}$  traduisant le seul effet des interactions de surface dues à l'entrée des ions. De la même façon, on peut définir un coefficient  $\alpha_{\text{sortie}}$  traduisant le seul effet des interactions de surface dues à la sortie des atomes érodés. Ainsi, le taux d'érosion  $Y$  en fonction de la densité de cible  $d$  peut être décrit par la relation suivante :

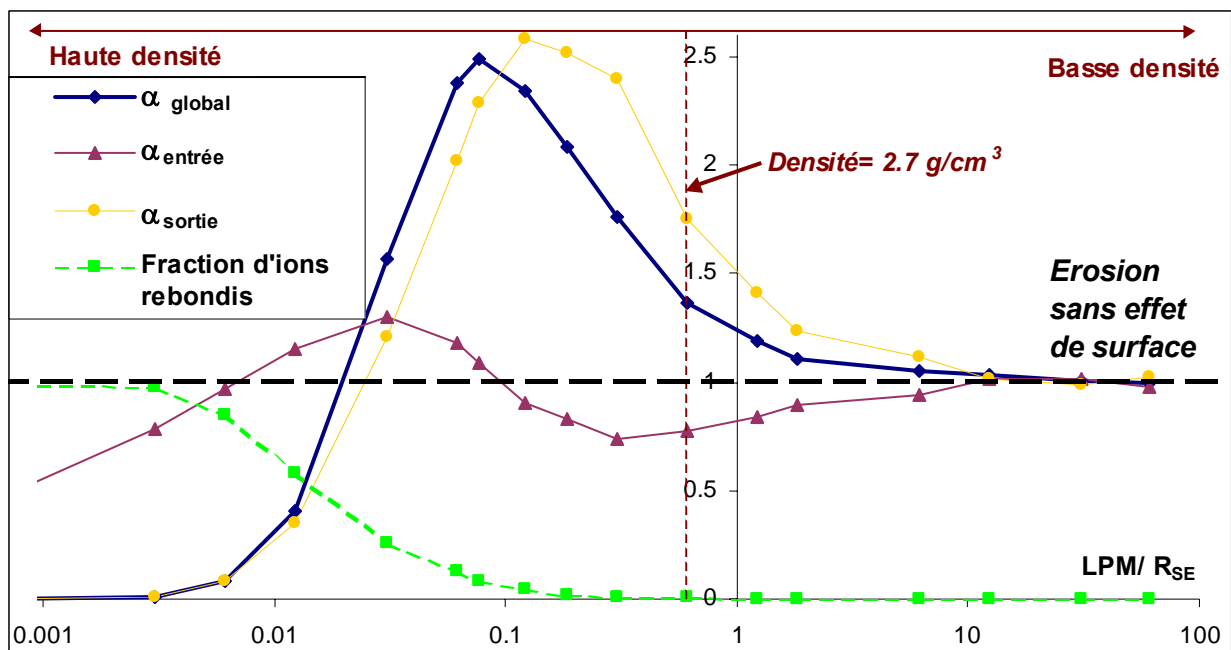
$$Y(d) = Y(d=0) \cdot \alpha_{\text{entrée}}(d) \cdot \alpha_{\text{sortie}}(d) = Y(d=0) \cdot \alpha_{\text{global}}(d)$$

Nous avons simulé ces effets dans le cas d'une cible d'aluminium bombardée par des ions  $\text{Xe}^+$  à 300eV sous incidence  $30^\circ$ . La Figure D-12 montre les effets global  $\alpha_{\text{global}}$ , d'entrée des ions  $\alpha_{\text{entrée}}$  et de sortie des atomes  $\alpha_{\text{sortie}}$  obtenus par la simulation. Ces effets sont

représentés en fonction du rapport entre le libre parcours moyen ( $LPM$ ) de l'ion  $Xe^+$  dans l'aluminium et le rayon de section efficace de collision ( $R_{SE}$ ) entre le Xénon à 300eV et l'aluminium. Plus le rapport  $LPM/R_{SE}$  est élevé, plus la probabilité d'observer un choc en surface est faible. On rappelle que le libre parcours moyen est inversement proportionnel à la densité du matériau. La gamme de libre parcours moyen et donc de densités étudiées n'a pas de sens physique, toutefois cette étude permet de comprendre l'influence de la surface.

L'effet de la surface sur la pulvérisation ionique est considéré comme nul quand la densité de la cible tend vers zéro. En effet dans ce cas, la probabilité de chocs hors de la cible tend vers zéro. Ainsi l'effet multiplicatif global de surface se confond avec le taux d'érosion normé par sa valeur prise à densité nulle.

On observe alors sur la Figure D-12 que le taux d'érosion croît puis décroît lorsque la densité augmente, et donc quand le libre parcours moyen diminue. Il s'agit d'un effet global qui doit être décomposé pour être interprété. Nous allons donc étudier l'effet multiplicatif d'entrée des ions et l'effet multiplicatif de sortie des atomes séparément.



**Figure D-12 : Effets de la densité de la cible sur le taux d'érosion. Effet global, effet de l'entrée des ions et effet de la sortie des atomes de la cible**

### D.V.2. Entrée des ions dans la cible

De façon générale, on peut dire que plus la cible est dense, plus le nombre d'interactions avant l'entrée de l'ion dans la cible est grand. Pour de très faibles densités, et donc des libres parcours moyens très grands devant le rayon de la section efficace de collision, l'ion n'interagit pas ou très peu avec la cible avant de la pénétrer. Ainsi le taux d'érosion tend vers une constante quand la densité diminue. Pour des densités très élevées et donc pour un libre parcours moyen petit devant le rayon de la section efficace de collision, un très grand nombre d'interactions entre l'ion et les atomes de la cible intervient avant que l'ion ne pénètre la cible. En outre, plus le libre parcours moyen sera faible, plus ces interactions seront faibles car elles s'effectuent à distance. Ainsi pour les très fortes densités, l'ion est réfléchi et transmet de l'énergie à la cible en ne transférant que de petites quantités de

mouvement lors de chacun des nombreux chocs. Le taux d'érosion tend donc vers zéro quand la densité tend vers l'infini.

Pour les densités intermédiaires, quelques interactions qui dévient la trajectoire de l'ion incident interviennent et augmentent son angle d'incidence en diminuant son énergie. Ces deux effets sont contradictoires puisqu'une augmentation de l'angle d'incidence augmente le taux d'érosion alors que la diminution de l'énergie diminue le taux d'érosion. L'effet qui l'emporte dépend du coût énergétique de la déviation.

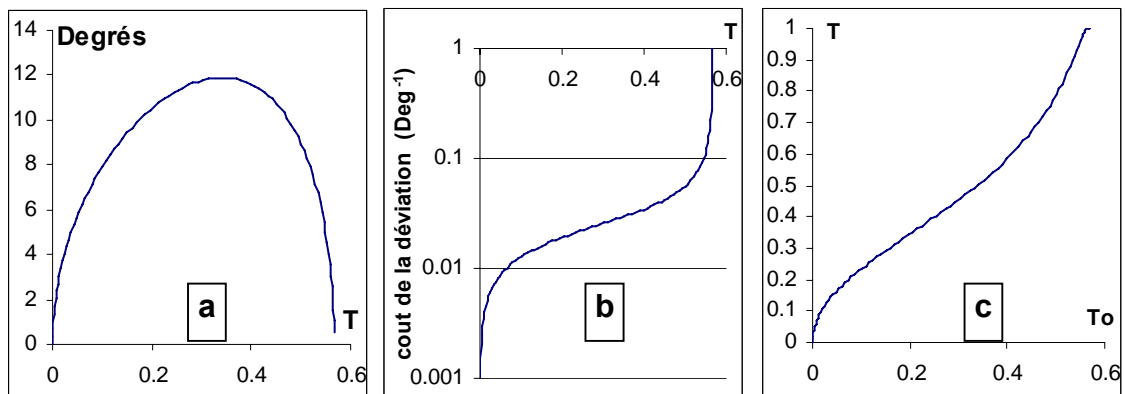
La Figure D-13 présente trois graphiques basés sur l'étude des collisions binaires (§-B.VI.1) montrant comment on peut dévier un atome en consommant un minimum d'énergie.

Le graphique *a* de la Figure D-13 représente la déviation d'un atome de xénon lors d'une collision avec un atome d'aluminium en fonction de la fraction d'énergie  $T$  qu'il lui cède. On y observe de façon évidente qu'il existe un transfert d'énergie qui produit une déviation maximale. Ainsi au-delà de ce maximum, le coût énergétique de la déviation croit de façon évidente.

Le graphique *b* montre que ceci se vérifie pour n'importe quelle valeur du transfert : plus le transfert d'énergie  $T$  est faible, plus il est efficace pour dévier l'ion incident.

Le graphique *c* montre le transfert d'énergie total nécessaire pour dévier l'ion incident de  $20^\circ$  en n'effectuant que des collisions d'un taux de transfert d'énergie  $T_0$ . Quand  $T_0$  est faible, on peut dévier l'ion pratiquement sans diminuer son énergie, alors que toute l'énergie est dissipée lorsqu'on effectue des collisions à forte interaction.

Or il se trouve que les faibles interactions sont les seules possibles lorsque l'ion approche la cible à une distance légèrement inférieure au rayon de la section efficace de collision. Donc dans le cas d'une très forte densité un grand nombre de collisions dévient l'ion au début de son approche de la cible sans diminuer sensiblement son énergie. Si la déviation est très grande, il y a un rebond. En diminuant légèrement la densité et donc le nombre de collisions, on produit une érosion à incidence plus grande donc on augmente le taux d'érosion.



**Figure D-13 : Coût énergétique de la déviation de trajectoire des atomes heurtés :**

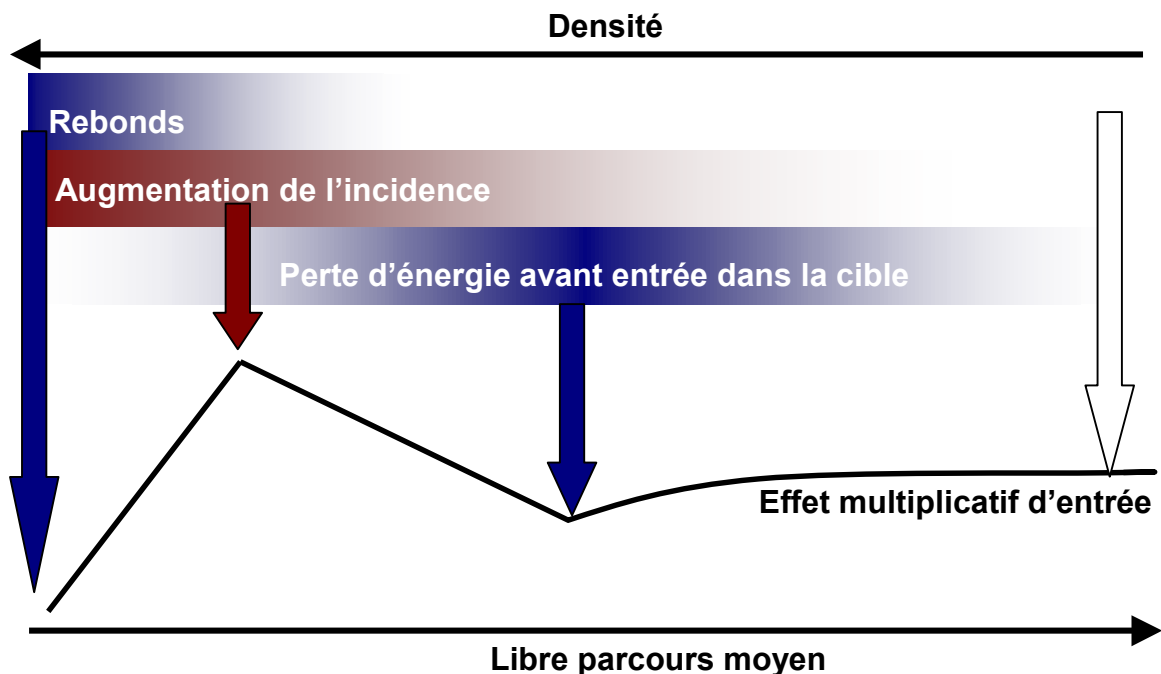
**a) déviation d'un atome de Xénon entré en collision avec un atome d'aluminium en fonction de l'énergie transférée. b) Coût de la déviation. c) Energie dépensée pour dévier un Xénon de  $20^\circ$  par des chocs unitaires de transfert  $T_0$**

En diminuant la densité de la cible, on augmente la probabilité pour que les chocs soient peu efficaces. Ces chocs sont d'autant plus inefficaces qu'ils mettent en mouvement des atomes vers le cœur de la cible. Or on a vu que les particules érodées sont issues des chocs transformant une quantité de mouvement dirigée vers l'intérieur en une quantité de mouvement dirigée vers l'extérieur de la cible. Il existe donc un maximum d'effet

multiplicatif d'entrée quand la perte d'énergie due aux chocs l'emporte sur l'effet de la déviation des ions (qui accroît le taux d'érosion).

Mais puisque l'effet des chocs hors de la cible diminue quand la densité diminue, il existe une densité critique pour laquelle la limitation du taux d'érosion due aux chocs coûteux en énergie engendre un minimum de l'effet multiplicatif d'entrée. Au-delà de ce seuil, les chocs étant rares, l'effet limitant sur le taux d'érosion diminue. L'effet multiplicatif d'entrée croît alors jusqu'à la valeur de 1 pour une densité de cible tendant vers 0. On peut prévoir que ce minimum d'effet multiplicatif d'entrée ne doit pas exister pour une incidence de 0° puisque l'ion incident a déjà une quantité de mouvement dirigée vers l'intérieur de la cible. Dans ce cas, les chocs avec les atomes de la cible ne peuvent que favoriser le retournement de la direction de la quantité de mouvement. A contrario, ce minimum doit être plus marqué pour les incidences plus rasantes.

La Figure D-14 résume et schématise les effets de la densité de la cible sur l'entrée de l'ion dans la cible et les conséquences sur le taux d'érosion.



**Figure D-14 : Représentation schématique des phénomènes influant sur les variations d'érosion dues à l'entrée d'ions (effet multiplicatif d'entrée)**

### D.V.3. Effet de la sortie des atomes érodés

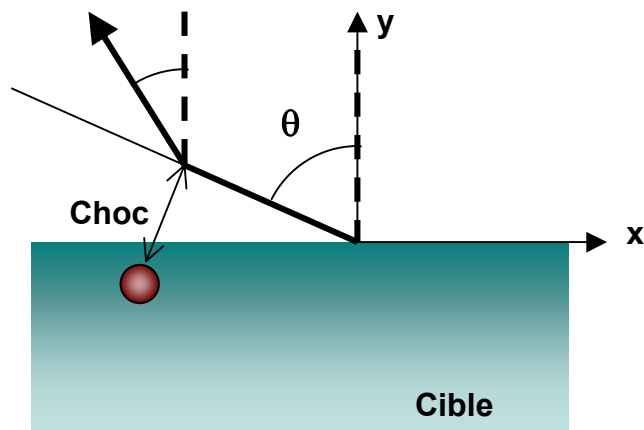
La courbe décrivant les évolutions de l'effet multiplicatif de sortie sur le taux d'érosion a été obtenue à partir de l'effet global et de l'effet de l'entrée des ions, tous deux obtenus par simulation avec CSiPI.

$$\alpha_{\text{sortie}}(d) = \alpha_{\text{global}}(d) / \alpha_{\text{entrée}}(d)$$

On observe que c'est cet effet de sortie qui régit principalement l'effet global sur le taux d'érosion. L'effet des chocs hors de la cible des atomes érodés tend à diminuer l'émission pour les fortes densités. Au contraire il tend à l'augmenter pour les densités

moyennes, et comme prévu, il n'y a pas d'effet à faible densité. En effet, à faible densité, il n'y a plus de collisions hors de la cible donc plus d'effet.

L'origine de ces effets est le même que pour les ions incidents. Cette fois-ci, c'est en sortie de cible que des interactions vont entraîner un changement de direction des atomes. La nouvelle direction est alors plus proche de la normale à l'échantillon (voir Figure D-15). Ces collisions provoquent également une perte d'énergie totale. Toutefois, du fait de la déviation, on peut observer selon les cas, une augmentation ou une diminution de la composante de la vitesse normale à la surface. Or seuls les atomes avec une énergie normale à la surface suffisante pour échapper au potentiel de surface peuvent quitter la cible. Ainsi, si les collisions hors de la cible augmentent la vitesse selon la composante normale à la cible, le taux d'érosion est augmenté. Et inversement, si cette vitesse est diminuée le taux d'érosion l'est également.



**Figure D-15 : Déviation des atomes érodés à la sortie de la cible**

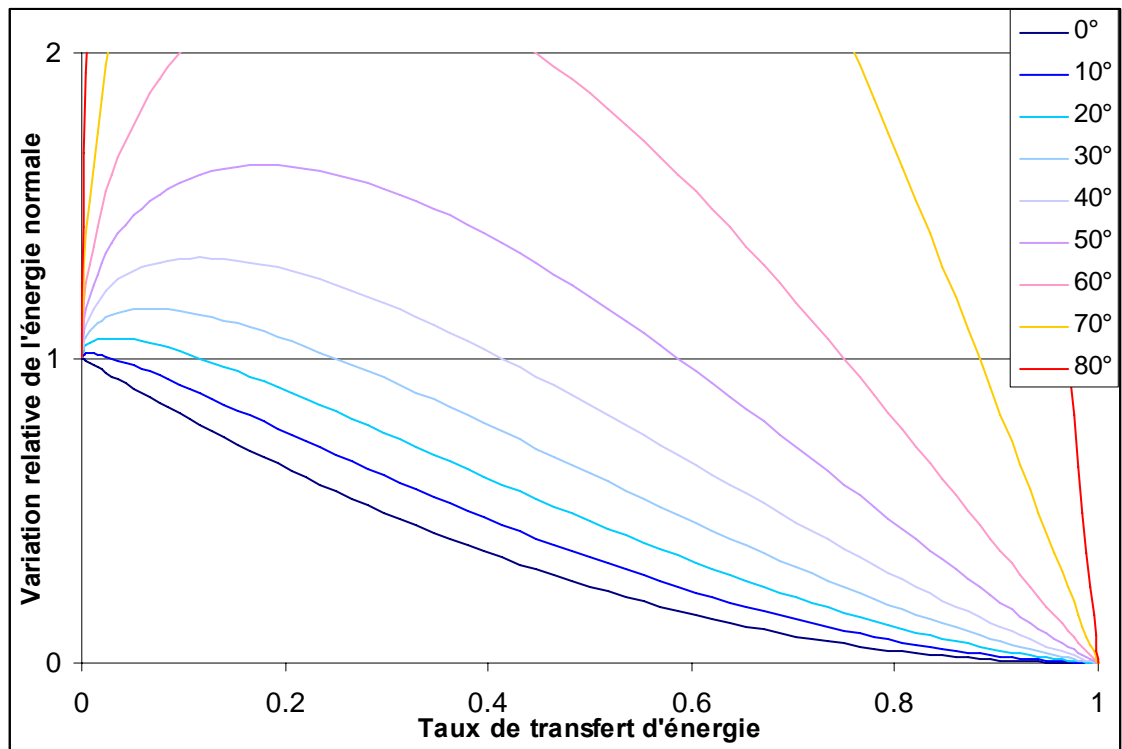
On peut définir une énergie normale  $E_y$  qui doit dépasser l'énergie de surface pour qu'un atome quitte la cible. Cette énergie normale est définie par les équations suivantes :

$$E = 1/2mv^2 = 1/2 \cdot mv_x^2 + 1/2 \cdot mv_y^2$$

$$E = E_x + E_y, \text{ avec } E_x = E \sin^2 \theta \text{ et } E_y = E \cos^2 \theta$$

Le critère d'émission est donc  $E_y > E_s$ . Nous avons donc étudié la variation de  $E_y$  en fonction de l'angle d'émission initial  $\theta$  avant un choc hors de la cible et de l'énergie transférée pendant ce choc. La Figure D-16 montre l'augmentation ou la diminution de  $E_y$  suite à une collision. On peut alors observer que pour chaque angle initial  $\theta$ , il existe un taux de transfert d'énergie critique au-delà duquel on diminue l'énergie normale  $E_y$ . Plus l'angle initial  $\theta$  est grand, plus ce transfert critique est grand. Donc de façon générale, les chocs à forte interaction tendent à limiter l'érosion alors que ceux à faible interaction l'augmentent. La probabilité de perte d'énergie décroît quand l'angle initial  $\theta$  augmente.





**Figure D-16 : Effet d'un choc hors de la cible sur la composante normale à la cible de l'énergie cinétique en fonction de l'intensité de l'interaction**

Il faut pondérer ces résultats par la probabilité de collision hors de la cible qui varie avec la tangente de l'angle  $\theta$ . En effet, le parcours ( $L_c$ ) hors de la cible pouvant entraîner un choc est le produit du rayon de section efficace  $R_{SE}$  par la tangente de l'angle  $\theta$  (voir Figure D-17).

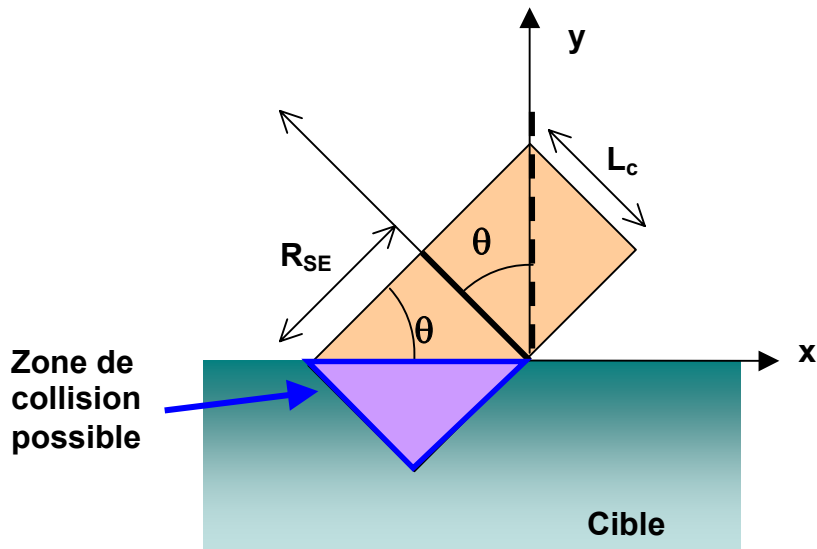
$$L_c = R_{SE} \cdot \tan(\theta)$$

De plus la probabilité d'un choc à faible interaction est supérieure à celui d'un choc à forte interaction puisque au fur et à mesure que l'ion l'éloigne de la cible, les chocs à courte distance (interaction forte) sont rendus impossibles.

Ainsi, les chocs les plus probables sont ceux qui accroissent le taux d'érosion. On observe donc un accroissement du taux d'érosion en sortie de cible dû aux effets de surface.

Toutefois, si le libre parcours moyen est très court par rapport au rayon de section efficace, la probabilité pour qu'un choc à fort transfert d'énergie intervienne croit fortement. Ainsi, pour les très fortes densités, l'atome érodé perd toute son énergie lors des chocs hors de la cible.

On explique ainsi les résultats obtenus par la simulation et représentés sur la Figure D-12.



**Figure D-17 : Cause de la plus forte probabilité de d'interactions faibles avec les atomes de la cible**

#### **D.V.4.Effets de la densité de la cible sur l'émission**

Les effets de surface ne se limitent pas au taux d'érosion. Ils influent également fortement sur les lobes d'émission. En effet, nous avons vu que les chocs à la sortie de la cible tendent à rapprocher le vecteur vitesse des atomes érodés de la normale à la cible. La Figure D-18 montre la forme des lobes d'émission pour des densités variant sur deux décades. En diminuant la densité par rapport à la densité réelle de l'aluminium, on observe peu de variations sur la direction du lobe d'émission. Cela signifie que pour une densité de  $2.7 \text{ g/cm}^3$  les chocs hors de la cible sont peu nombreux. Par contre si on augmente la densité d'un facteur 10 on diminue le libre parcours moyen par dix et on augmente le nombre de collisions à l'extérieur de la cible par à peu près le même nombre. Le lobe d'émission est alors remonté vers la normale à la cible.

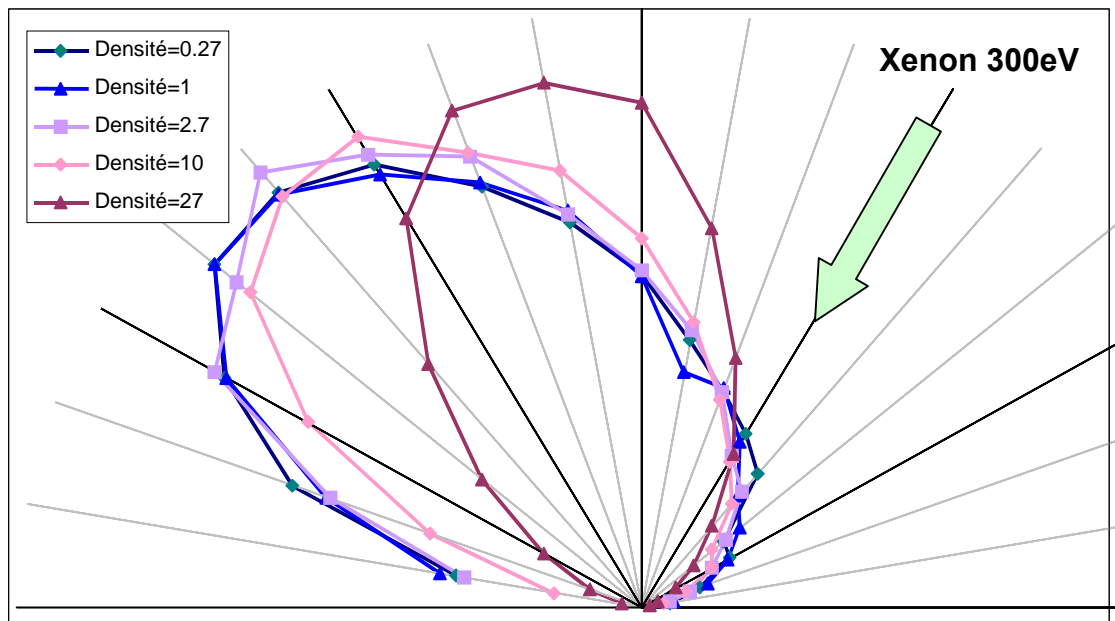


Figure D-18 : Lobes d'émission de l'aluminium bombardé par des ions  $Xe^+$  à 300eV sous incidence  $30^\circ$  pour différentes densités

### D.V.5. Conclusion

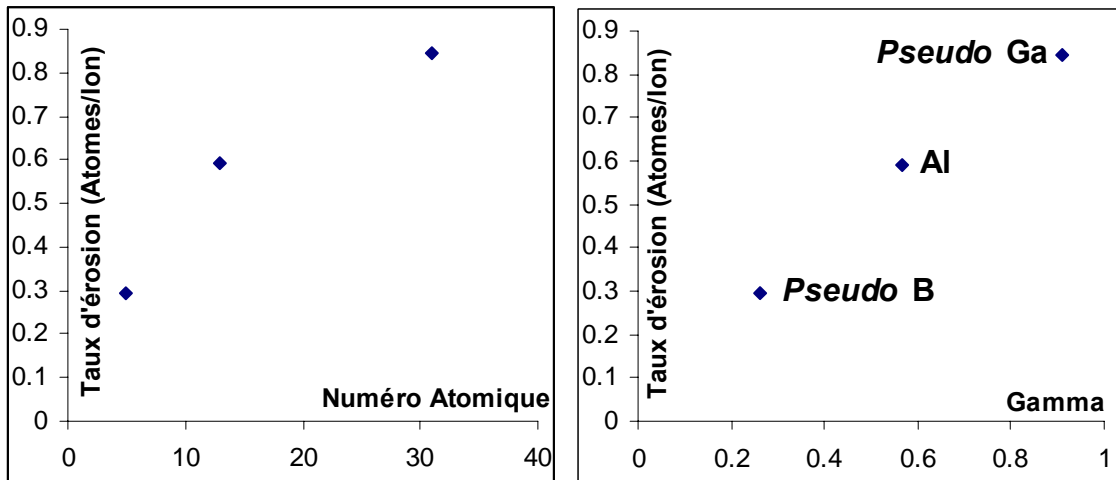
La densité qui semble être un paramètre anodin a en réalité une grande influence sur le taux d'érosion dans la mesure où les chocs hors de la cible en entrée et en sortie de cible influent fortement sur l'émission. L'effet se produit sur le taux d'érosion ainsi que sur les lobes d'émission. Toutefois, les variations de densité que nous avons envisagées ne correspondent pas à une réalité physique. Ainsi l'étude des effets de la densité nous a surtout permis de mettre en évidence les effets de surface qui jouent un très grand rôle sur le taux d'érosion et la direction d'émission.

### D.VI. Effet de l'atome érodé

Nous avons étudié l'effet du numéro atomique et de la masse molaire sur l'érosion et l'émission. Pour cela nous avons simulé l'érosion par le xénon à 300eV sous  $30^\circ$  d'incidence sur des cibles dont les propriétés sont celles de l'aluminium (énergies de surface et de liaison ainsi que la densité), mais dont nous avons modifié les numéros atomiques  $Z$  et les masses molaires  $M$ . Les couples  $(Z, M)$  étudiés sont  $(5, 10)$ ,  $(13, 27)$  et  $(31, 70)$  qui correspondent au bore (que l'on note « *Pseudo B* »), à l'aluminium (Al) et au gallium (que l'on note « *Pseudo Ga* »). On rappelle que le bore, l'aluminium et le gallium se situent sur la même colonne de la classification périodique des éléments.

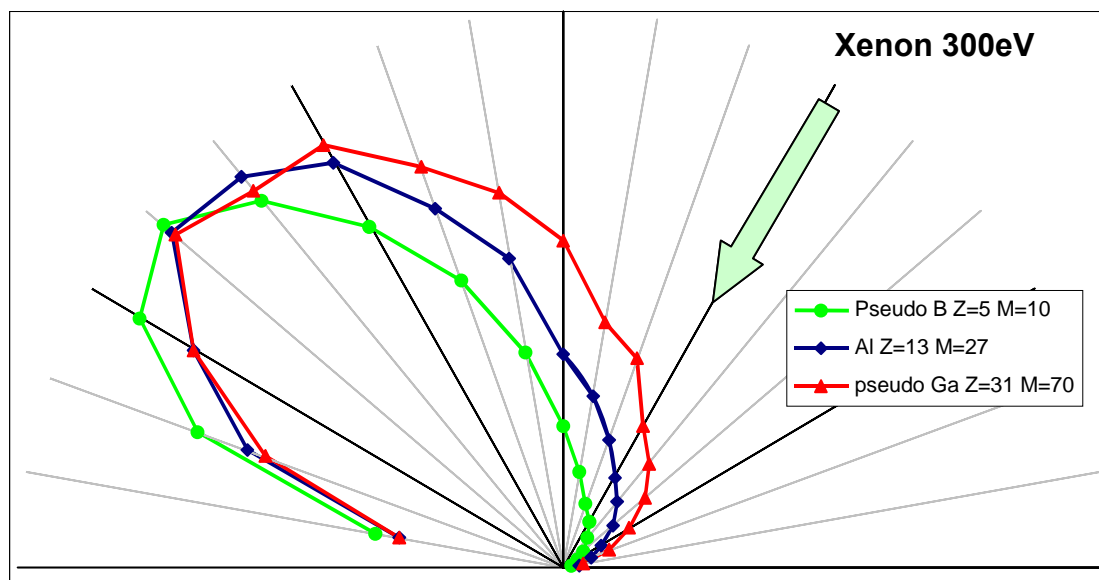
La Figure D-19 montre que le taux d'érosion croît sensiblement avec le numéro atomique. Nous attribuons ces variations à la valeur de  $\gamma$  (graphique b) qui correspond au maximum d'énergie qu'un atome de xénon peut transmettre à l'atome étudié. En effet, l'énergie des ions dans la cible est liée à l'énergie que le xénon va leur fournir. Une faible valeur de  $\gamma$  signifie que le xénon va fournir son énergie moins efficacement sur un plus grand nombre de chocs que pour une forte valeur de  $\gamma$ . Donc l'énergie des atomes en mouvement dans la cible est une fonction a priori proportionnelle à  $\gamma$ . Or on l'a déjà évoqué, plus les

particules sont énergétiques, moins elles sont sensibles au potentiel de surface, donc plus le taux d'érosion est élevé.



**Figure D-19 : Taux d'érosion par le  $Xe^+$  à 300eV sous incidence  $30^\circ$  de trois matériaux différents : *Pseudo B*, Al et *Pseudo Ga* ne différant que par leurs numéros atomiques et leurs masses ; Relation entre le taux d'érosion et le paramètre  $\gamma$**

L'effet est également visible sur le lobe d'émission : les atomes les moins énergétiques tendent à déplacer le lobe vers une émission normale à la surface. Donc plus la cascade est énergétique, plus l'émission se rapproche d'une émission de type cosinus. C'est ce qu'on observe à la Figure D-20. Ainsi l'augmentation de  $\gamma$  équivaut à une augmentation de l'énergie des ions incidents.



**Figure D-20 : Lobes d'émission relatifs du bombardement par des ions  $Xe^+$  à 300eV sous incidence  $30^\circ$  de trois matériaux différents : *Pseudo B*, Al et *Pseudo Ga* ne différant que par leurs numéros atomiques et leurs masses**

## D.VII. Etude des cascades de collisions

Dans certains cas, un nombre limité de chocs suffit à produire une émission. Nous pensons qu'à basse énergie les cascades contenant un nombre limité de chocs dirigent l'érosion car l'énergie n'est pas dispersée dans un grand nombre de collisions. Le nombre minimum de collisions est une collision unique. Par conséquent nous nous sommes intéressés à l'émission produite par une unique collision. Toutefois, pour des incidences se rapprochant de la normale à la cible, un nombre plus grand de collisions est nécessaire pour provoquer de l'émission. Dans ces cas, nous nous sommes intéressés aux plus simples parcours permettant de provoquer de l'érosion.

### D.VII.1. **Création du lobe d'émission produit par une unique collision**

#### D.VII.1.1. Probabilité de déviation lors d'un choc

Dans un premier temps nous avons étudié la probabilité de déviation de l'atome d'aluminium heurté par un ion Xénon à 300eV en utilisant le potentiel d'interaction décrit au §-B.VI.2. Il apparaît à la Figure D-21, présentant la probabilité de déviation en fonction de l'angle de déviation que les forts angles de déviation sont fortement privilégiés par rapport aux faibles. Par contre l'énergie transférée décroît avec les fortes déviations et est maximale pour une déviation nulle et vaut alors  $\gamma$  (voir §-B.VI.1). La Figure D-22 montre cette variation d'énergie transférée en fonction de la déviation de l'atome.

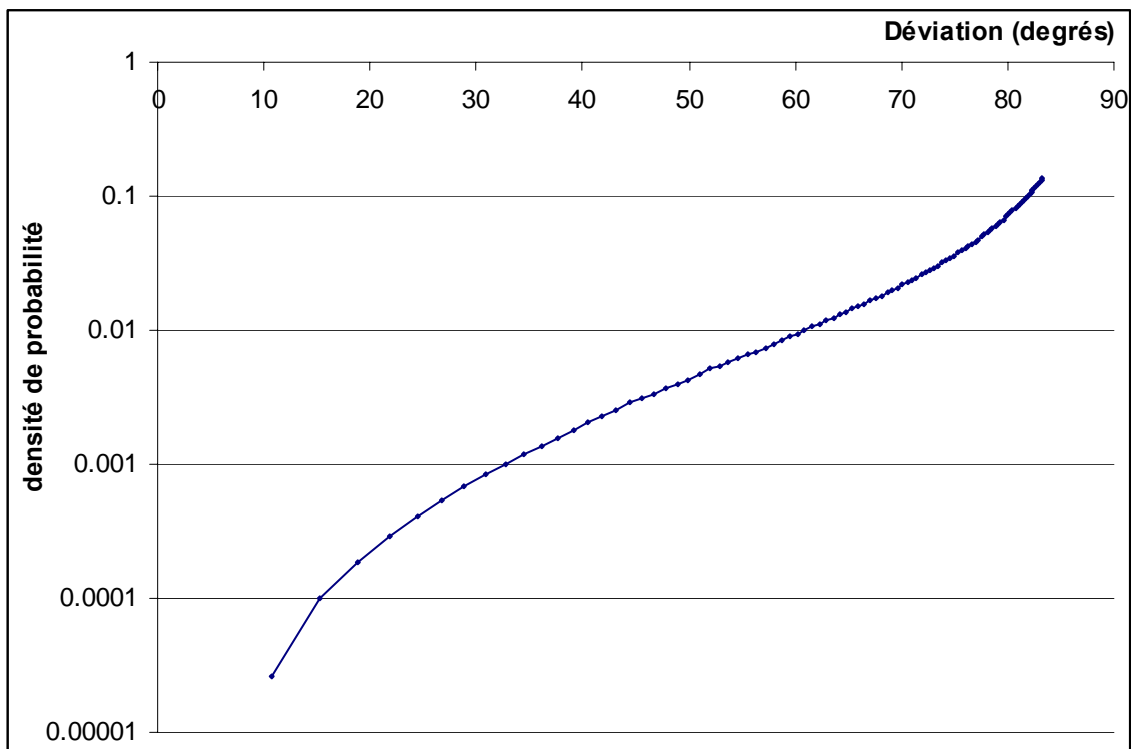
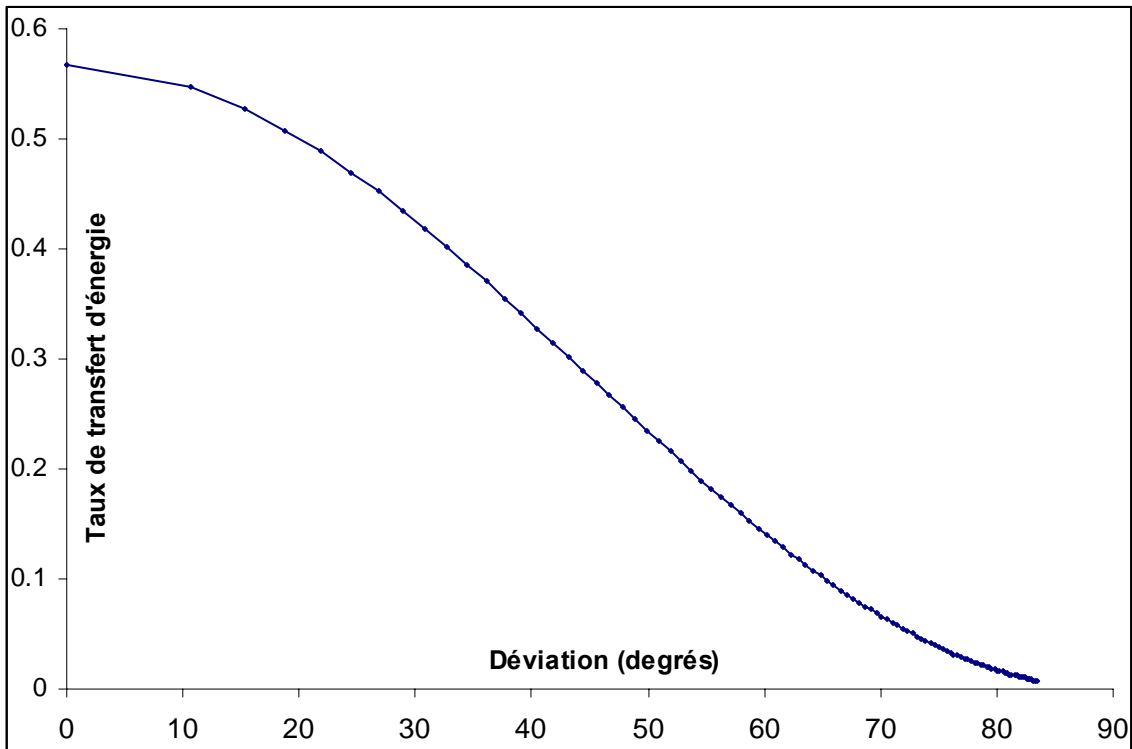


Figure D-21 : Densité de probabilité ( $dP/d\theta$ ) de déviation d'un atome d'aluminium lors d'un choc avec un atome de xénon à 300eV en fonction de la déviation  $\theta$



**Figure D-22 : Proportion de l'énergie transférée à un atome d'aluminium heurté par un ion Xe<sup>+</sup> à 300eV en fonction de sa déviation**

Si on étudie une cascade de collisions réduite à un unique choc, l'atome quitte la cible avec l'angle produit par le choc. On ne s'intéresse ici qu'au lobe d'émission dans le plan d'incidence. Dans ce cas, l'angle par rapport à la normale est la somme de l'angle d'incidence et de l'angle de déviation.

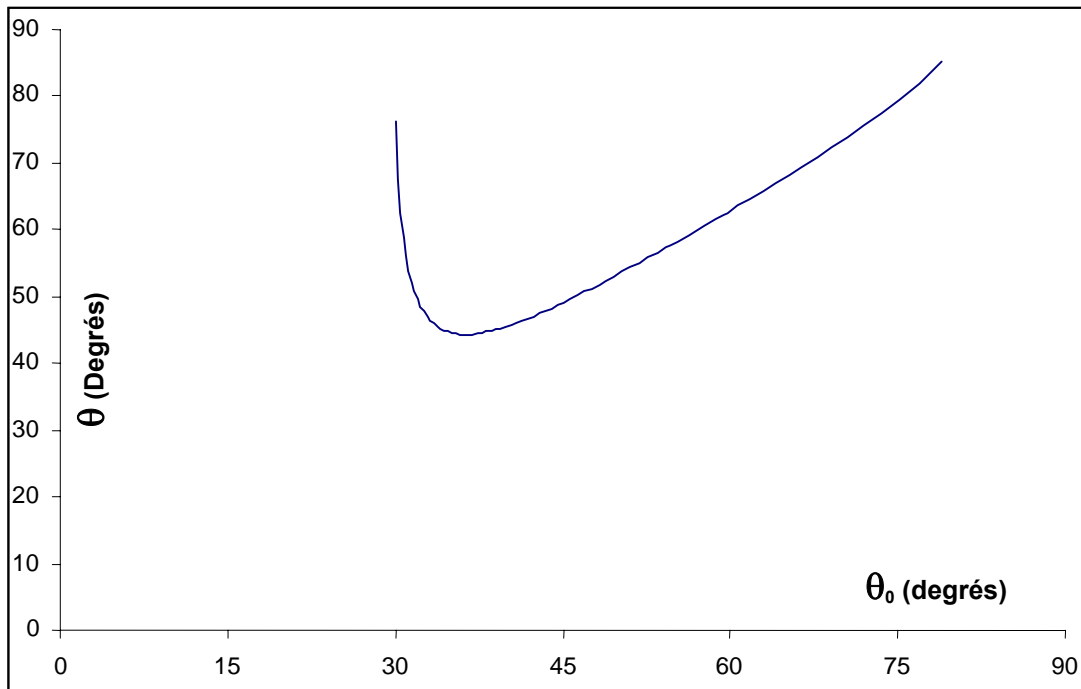
### **D.VII.1.2. Déviation des atomes par le potentiel de surface**

En quittant la surface les atomes sont déviés à cause du potentiel de surface. Nous avons calculé dans le cas d'un bombardement d'aluminium par du Xénon à 300eV sous 70° d'incidence la direction d'émission après déflexion due au potentiel de surface. Cette direction finale après déflexion est notée  $\theta$ . La Figure D-23 montre la direction d'émission  $\theta$  après déflexion en fonction de la direction d'émission avant déflexion  $\theta_0$ . On s'aperçoit alors qu'il existe un angle d'émission minimum  $\theta_{min}$ .

Dans ce cas, l'amplitude en angle maximale théorique d'émission en absence d'un potentiel de surface est entre 20° (déviatiion de 90° lors du choc) et 90° (déviatiion de 20° lors du choc). Or pour les fortes déviations donc les faibles angles d'émission, l'énergie des atomes d'aluminium émis est très faible. Ces atomes n'ont pas assez d'énergie pour franchir le potentiel de surface et être effectivement émis. Pour des déviations légèrement plus faibles, l'énergie est plus importante. Quand cette énergie est égale à l'énergie de surface, l'émission s'effectue à un angle de 90° qui diminue quand l'énergie continue à augmenter.

A contrario, les atomes les plus énergétiques sont émis avant déviation dans la direction 90°. Mais leur vitesse normale à la cible est nulle. Ils ne peuvent donc pas échapper au potentiel de surface. Ainsi les deux angles extrêmes d'émission avant déflexion 20° et 90° ne produisent pas d'émission respectivement par manque d'énergie totale et manque d'énergie

normale à la cible. On atteint ainsi un angle minimum  $\theta_{min}$  d'émission après déviation par le potentiel de surface pour l'optimum entre un faible angle et une forte énergie avant déviation.



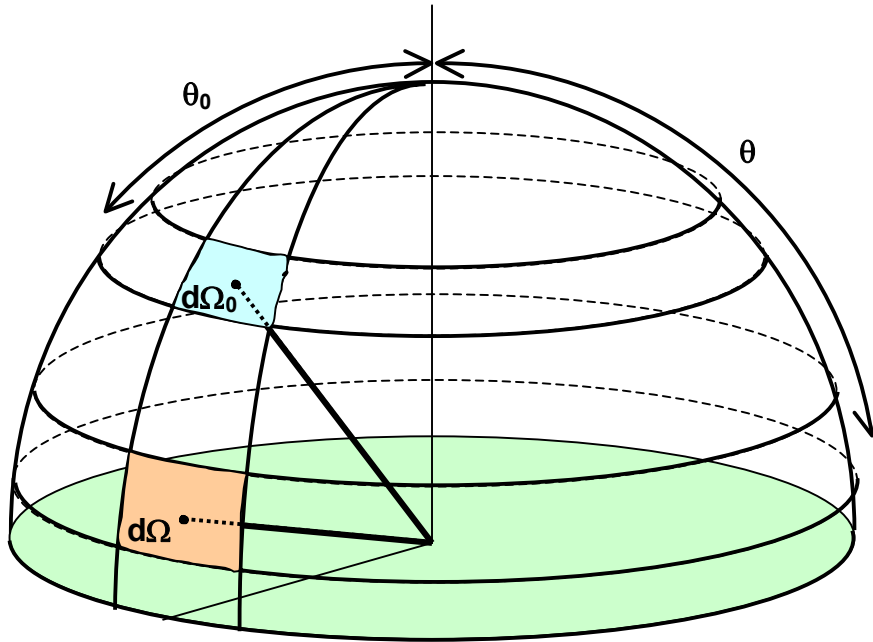
**Figure D-23 : Direction finale d'émission d'un atome émis dans la direction  $\theta_0$  par la collision avec un ion  $Xe^+$  (300eV, incidence  $70^\circ$ ) et déviés dans la direction  $\theta$  par le potentiel de surface**

### **D.VII.1.3. Modification de la densité de flux par le potentiel de surface**

A la sortie de la cible, la déflexion provoque une variation de la densité de flux du faisceau d'atomes considéré. Ainsi sur la Figure D-24, un faisceau d'atomes érodés selon la direction  $\theta_0$  traverse un angle solide  $d\Omega_0$  avant sa déviation. Après la déviation, il traverse l'angle solide  $d\Omega$ . Ainsi, suite à la déviation, la densité de flux est divisée par le rapport des

angles solide  $\rho$ , tel que 
$$\rho = \frac{d\Omega}{d\Omega_0} = \frac{\sin \theta \cdot d\theta}{\sin \theta_0 \cdot d\theta_0}$$

En toute rigueur, la dilution est la valeur absolue de  $\rho$ , mais nous verrons par la suite que la valeur algébrique fournit une information supplémentaire.



**Figure D-24 : Déviation des atomes par le potentiel de surface, et modification de la densité du flux d'atomes**

$$\text{or } \sin \theta = \sin \theta_0 \sqrt{\frac{E}{E - E_s}} \text{ et } \frac{d \sin \theta}{d \theta_0} = \cos \theta \cdot \frac{d \theta}{d \theta_0} \text{ soit } \rho = \cos^{-1} \theta \cdot \sqrt{\frac{E}{E - E_s}} \cdot \frac{d \sin \theta}{d \theta_0}$$

On aboutit alors à la relation:

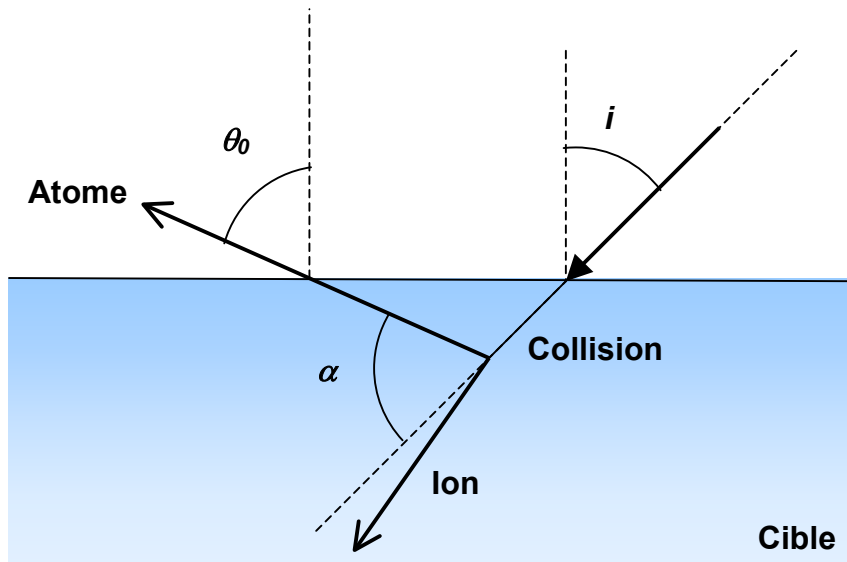
$$\rho = \left( \cos \theta_0 \sqrt{\frac{E}{E - E_s}} - 1/2 \frac{E_s \sin \theta_0}{(E - E_s)^2} \frac{dE}{d \theta_0} \right) \cos^{-1} \theta$$

Dans le cas d'un choc unique, l'atome érodé a une énergie  $E$  telle que :

$E = \gamma \cos^2 \alpha$ , où  $\alpha$  est la déflexion par rapport à la trajectoire de l'ion incident d'incidence  $i$  comme décrit par la Figure D-25. Cette relation a déjà été évoquée au paragraphe §-B.VI.1

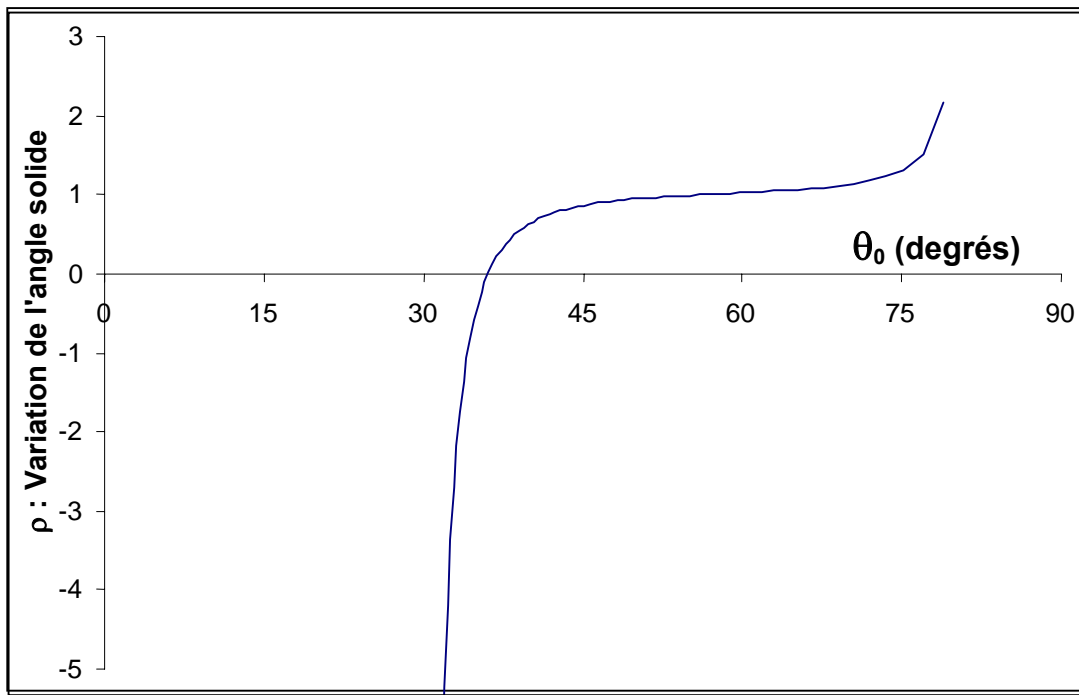
$$\text{Alors } \frac{dE}{d \theta_0} = 2\gamma \sin(2\alpha)$$





**Figure D-25 : Description des angles lors de l'émission produite par une collision unique**

La formule permettant de calculer  $\rho$  contient un terme qui est la différence d'un terme en  $\cos(\theta_0)$  et d'un terme en  $\sin(\theta_0)$ . Donc  $\rho$  peut s'annuler. Nous avons tracé  $\rho$  en fonction de l'angle  $\theta_0$  pour une incidence  $i$  de  $70^\circ$  d'ions  $Xe^+$  à  $300\text{eV}$ . Cette courbe est présentée à la Figure D-26. On observe effectivement l'existence d'un angle  $\theta_0$  annulant  $\rho$ . Cet angle est  $\theta_{min}$ . En effet, une valeur de  $\rho$  négative traduit le fait que quand  $\theta_0$  croît,  $\theta$  décroît, alors que quand  $\rho$  est positif, ces deux angles évoluent dans le même sens. On observe qu'au-dessus de  $\theta_{min}$ ,  $\rho$  est proche de 1 car les atomes considérés sont relativement énergétiques et sont donc peu déviés par le potentiel de surface (à l'exception des émissions très rasantes). Par contre en dessous le faisceau est fortement dilué.



**Figure D-26 : Variation de la densité d'émission due à la déviation par le potentiel de surface**

#### D.VII.1.4. Direction privilégiée d'émission

Une valeur nulle de  $\rho$  correspond à une concentration infinie du flux d'atomes émis. Ainsi, la densité de flux tend vers l'infini quand la direction d'émission tend vers  $\theta_{min}$ . La Figure D-27 représente l'émission calculée par un seul choc en fonction de l'angle d'émission. On peut observer que pour les angles d'émission supérieurs à  $\theta_{min}$ , on a deux populations de particules: celles à basse énergie ( $\rho$  négatif) et celles à plus haute énergie ( $\rho$  positif). Dans ce cas, l'émission due à la population à haute énergie est supérieure d'un facteur proche de 2 par rapport à la population à faible énergie.

*Remarque:* L'idée d'une densité de particules infinie peut paraître dérangement. Toutefois, si on intègre cette densité sur un angle solide aussi petit soit-il, on aboutit toujours à un nombre de particules fini. De la même façon, le rapport entre le nombre d'atomes traversant l'angle solide et la valeur de l'angle solide est toujours fini si on considère un angle solide non nul.

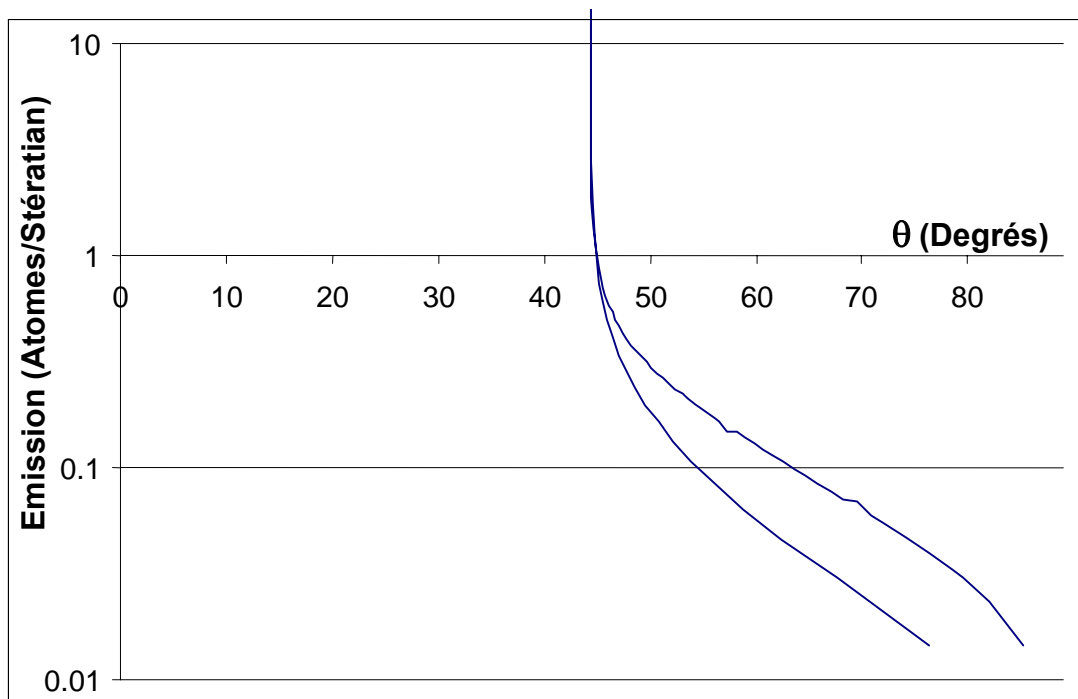
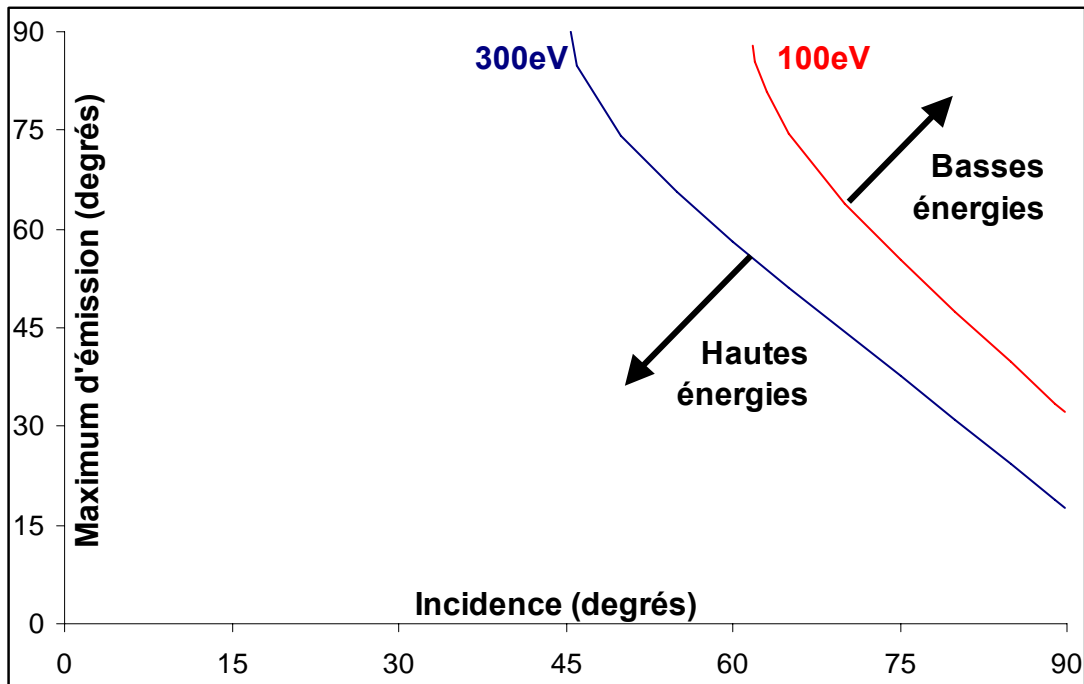


Figure D-27 : Densité de flux d'émission produit par un choc unique

#### D.VII.1.5. Position de l'angle d'émission maximale par une collision

La position de l'angle d'émission maximale  $\theta_{min}$  (qui est également l'angle minimum d'émission) dépend de l'angle d'incidence. Ainsi, pour les incidences inférieures à  $45^\circ$ , il est impossible de provoquer de l'émission en un seul choc à 300eV. A partir de cette incidence critique, on peut produire de l'érosion rasante en un seul choc. Plus l'angle d'incidence est élevé plus la direction principale d'émission se trouve proche de la normale à la cible. L'évolution de la direction principale d'émission est présentée par la Figure D-28 dans le cas de bombardement d'une cible d'aluminium par du Xénon à 300eV et 100eV. Plus l'énergie des ions est basse, plus l'énergie des atomes déplacés l'est et plus les atomes sont déviés par le potentiel de surface. Par conséquent  $\theta_{min}$  grandit (de plus en plus rasant) à basse énergie.



**Figure D-28 : Position de l'angle d'émission maximale en fonction des ions érodants (incidence et énergie)**

#### **D.VII.1.6. Lobes d'émission**

Les lobes d'émission présentés dans les Partie C et Partie D ne permettent pas d'observer l'influence de cette direction privilégiée correspondant à un choc unique. Nous interprétons cette observation par les effets de la surface présentés dans cette partie au chapitre §-D.V.4. En effet, l'existence d'un pic dû à un choc unique ne peut exister que dans le cas d'incidences suffisamment rasantes (Figure D-28). Dans ce cas les effets de la surface sont grands. Afin d'observer l'influence du pic unique, nous avons simulé le lobe d'émission pour une cible hypothétique d'aluminium dont on aurait divisé la densité par 1000. Ainsi les effets de surface sont divisés d'autant et seront donc supposés nuls.

La Figure D-29 montre le lobe d'émission simulé avec CSiPI pour une densité considérée nulle, lors du bombardement d'aluminium par du Xénon à 300eV sous incidence 80°. La direction correspondant à l'émission à un choc  $\theta_{min}$  est indiquée par une flèche bleue. On observe alors que  $\theta_{min}$  semble être le plus petit angle d'émission significative. Toutefois ce n'est pas le pic d'émission très marqué correspondant à un unique choc que l'on pouvait attendre qui est observé. En réalité, comme cela est illustré par la Figure D-30, il peut y avoir plusieurs *premiers chocs* si on considère tous les chocs entre un atome de la cible et l'ion. En effet, l'ion  $Xe^+$  après son premier choc est peu dévié et cède une fraction limitée de son énergie. Il peut donc encore atteindre et entrer en collision avec un atome de la cible comme s'il s'agissait du premier choc. Ce deuxième choc a une autre direction privilégiée d'émission différente de la première. Cette seconde direction d'émission privilégiée dépend du nouvel angle d'incidence de l'ion et de sa nouvelle énergie. Après un premier choc, l'angle d'incidence de l'ion a la même probabilité d'être augmenté ou diminué ce qui tend respectivement à diminuer ou augmenter l'angle d'émission privilégiée. Cette déviation a une grande probabilité d'être très faible car le xénon est bien plus lourd que l'aluminium (§-B.VII.1.2). Par contre quelle que soit la direction de déviation lors du premier choc, l'énergie

de l'ion est diminuée, ce qui augmente l'angle d'émission privilégiée. Les seconds chocs engendrent une multitude de directions privilégiées généralement plus faibles que celle du premier choc. Ceci explique en partie que l'angle  $\theta_{min}$  calculé pour un choc corresponde au minimum de l'émission significative.

De plus, les atomes déplacés peuvent entrer en collision légère avec d'autres atomes de la cible. Cela a pour conséquence d'élargir le pic d'émission. Mais lors de ces collisions, les atomes perdent une partie de leur énergie. Ainsi ils sont déviés plus fortement par le potentiel de surface, ce qui tend à augmenter l'angle d'émission.

Enfin, des émissions faisant intervenir une cascade de collisions plus importantes sont également possibles.

On observe sur la Figure D-29 que lorsque l'on diminue l'énergie des ions, le lobe d'émission est bien plus sensible au premier choc. On n'observe pratiquement plus d'émission pour les angles inférieurs à l'angle  $\theta_{min}$ . On observe également, grâce au lobe d'émission à 300eV pour une cible d'aluminium de densité  $2.7\text{g/cm}^3$  que la densité a une influence considérable sur la forme du lobe d'émission. Cela vient du fait que les ions entrent en collision avant de pénétrer dans la cible. Ces collisions ont peu de chance de provoquer de l'érosion (§-D.V.2). Ainsi quand ils pénètrent effectivement dans la cible, ils ont déjà perdu une bonne partie de leur énergie. Cela explique que le lobe à 300eV avec une densité de 2.7 ressemble plus au lobe d'émission à 100eV avec densité nulle qu'à celui à 300eV et densité nulle.

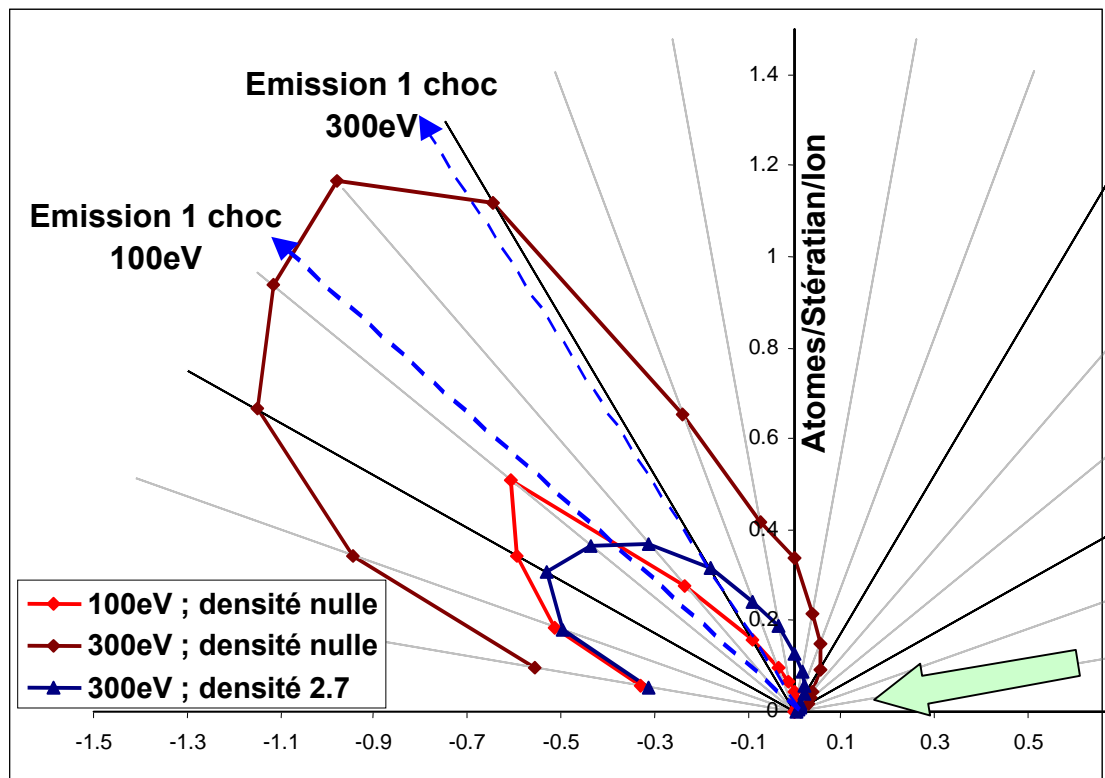


Figure D-29 : Lobes d'émission pour des cibles d'aluminium normale ou de densité quasi nulle bombardées par des ions  $\text{Xe}^+$  à 300eV et 100eV

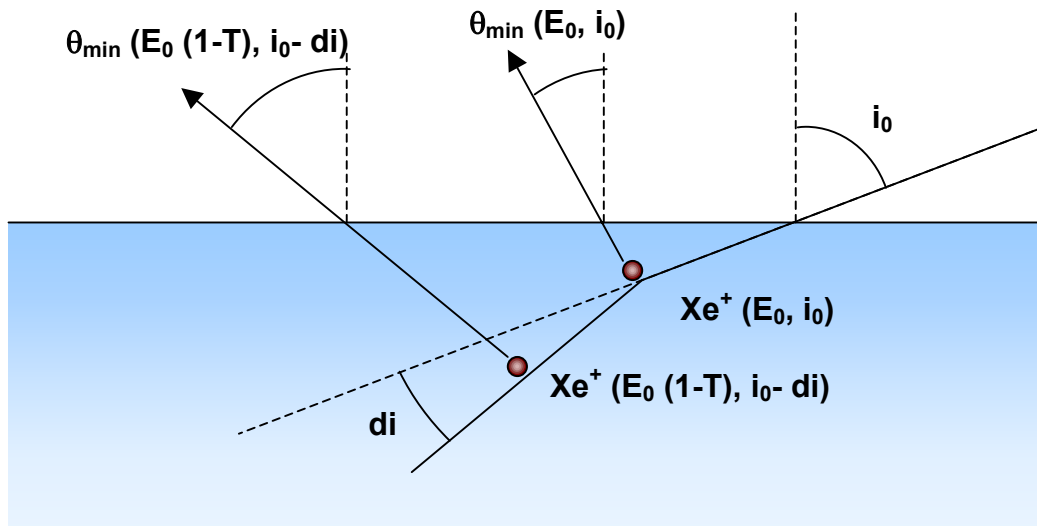


Figure D-30 : Possibilité d'émissions en un choc avec un ion dévié

### D.VII.1.7. Conclusion

Nous avons vu que si on ne considère qu'une seule et unique collision, on aboutit à un lobe d'émission très fin et tel que la direction principale d'émission croît avec l'angle d'incidence et l'énergie des ions incidents. En réalité, le poids de cette émission ne devient prépondérant que pour les basses énergies. Cette étude nous a permis de mettre en évidence une fois encore l'influence considérable des effets de surface sur le lobe d'émission.

## D.VII.2. Cas des collisions multiples

L'idée de considérer le minimum de collisions vient du fait que plus le nombre de collisions est important, plus la probabilité pour un atome d'échapper à la cible est faible. En effet, à chaque choc, de l'énergie est partagée entre l'atome incident et l'atome déplacé. Ce raisonnement est correct statistiquement, mais on a déjà vu au paragraphe §-D.V.3 de cette partie que pour une même déviation, un choc est moins efficace qu'une multitude de chocs transférant une faible énergie. Pour résumer, les cascades pouvant émettre les atomes les plus énergétiques sont des cascades de faible probabilité puisqu'elles s'effectuent sur un grand nombre de collisions et inversement.

Ce raisonnement est encore plus valable si on considère une énergie de liaison non nulle. En effet dans ce cas, les déviations économiques sont uniquement celles déviant légèrement l'atome incident puisque les collisions déviant peu l'atome mis en mouvement consomment tout de même l'énergie de liaison.

### D.VII.2.1. Emission en deux chocs sous incidence nulle

Nous souhaitons comprendre la forme du lobe d'émission sous bombardement normal. En effet, un bombardement à incidence normale ne peut pas provoquer d'émission en un seul choc. Nous devons donc envisager un second choc. Le premier atome d'aluminium mis en mouvement par l'ion a une énergie  $E$  et un angle d'incidence  $\alpha$  qu'il a reçu lors du choc avec l'ion (voir Figure D-31). On se ramène alors au cas de la collision à un choc entre le premier

atome d'aluminium et celui qu'il va heurter. A l'atome en déplacement dans la cible  $Al(E, \alpha)$  correspond un angle d'émission maximale  $\theta_{min}$ . Cet angle peut être déterminé en utilisant le graphique de la Figure D-32 basé sur le même principe que la Figure D-28 mais dans le cas d'une collision entre deux atomes d'aluminium. Toutefois, on néglige ainsi l'angle azimutal  $\varphi$  qui fait que les collisions ne se situent pas toujours dans le plan incident. Ainsi pour construire le lobe dans un plan, il ne faut tenir compte que des angles azimutaux se compensant. Si la cascade ne s'effectue pas dans le plan, pour les mêmes angles de collision qu'une collision dans le plan, l'émission sera plus rasante. Ainsi, à chaque angle azimutal  $\varphi$  de la première collision correspond un angle d'émission maximale plus petit que pour un angle azimutal nul. Ainsi, pour chaque valeur de  $\alpha$ , il existe un lobe d'émission mettant en œuvre un second choc qui a pour angle minimum  $\theta_{min}(E, \alpha)$ .

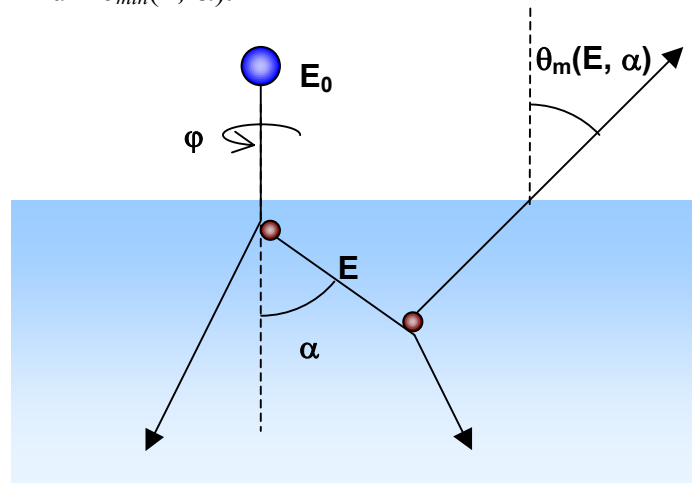


Figure D-31 : Emission principale en deux chocs

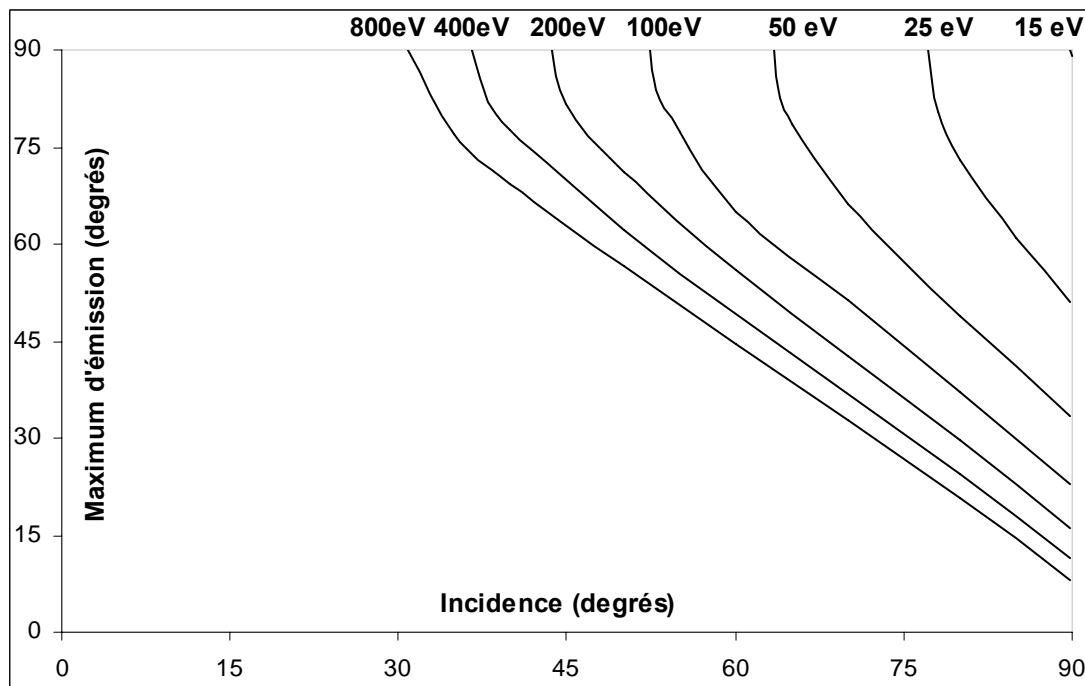


Figure D-32 : Détermination de l'angle d'émission maximale (ordonnée) en fonction de l'incidence (abscisse) et de l'énergie (ligne de niveau) lors d'un choc Al-Al

On a vu en étudiant les collisions à un choc qu'à basse énergie l'émission due au premier choc détermine la forme du lobe d'émission (dans le cas où on annule la densité). Ainsi à basse énergie sous incidence normale, l'émission à deux chocs doit être dirigée par les seconds chocs. On s'attend donc à une émission étant la superposition des directions privilégiées correspondant aux couples  $(E, \alpha)$  produits par la première collision. Or plus  $E$  est grand, plus  $\alpha$  est petit. Ces deux paramètres s'opposent pour déterminer la direction privilégiée d'émission.

Toutefois, plus la déviation de l'atome lors du premier choc est grande plus son énergie est faible. Ainsi nous nous sommes aperçus que lors du bombardement d'aluminium par du xénon à 300eV, les atomes les plus déviés par le premier choc ne sont plus assez énergétiques pour produire de l'érosion, et inversement les ions les plus énergétiques ne sont pas assez déviés pour produire de l'érosion. Ainsi il est nécessaire de considérer plus de deux chocs pour étudier l'érosion de l'aluminium par du xénon à 300eV sous incidence normale. Dans ce raisonnement on ne tient pas compte des collisions de l'ion  $Xe^+$  avec un second atome. En effet, ce genre de choc ne permet pas une grande déviation, alors qu'il peut diminuer sensiblement l'énergie de l'ion.

*Remarque :* A l'intérieur d'une cible, les collisions sont effectuées entre deux atomes identiques. Ainsi, en absence d'énergie de liaison il y a équivalence vis à vis de la déviation et de l'énergie entre un choc transférant une fraction d'énergie  $T$  ou  $1-T$ . En effet, l'atome cible et le projectile jouent des rôles symétriques (voir Figure D-33). Ainsi par simplicité on ne considère que le déplacement de l'atome mis en mouvement par la collision.

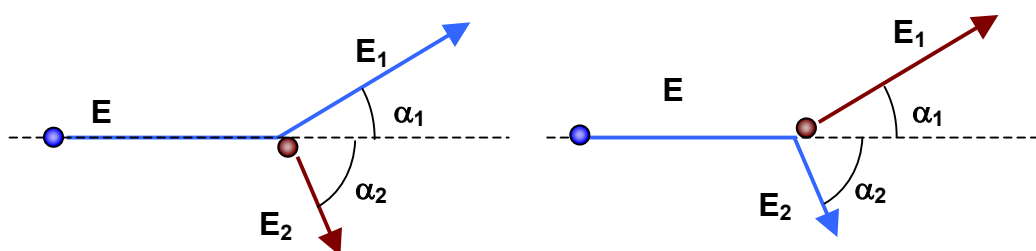


Figure D-33 : Equivalence entre une collision transférant une fraction d'énergie  $T$  et  $1-T$

## **D.VII.2.2. Emission plusieurs chocs sous incidence nulle**

### **D.VII.2.2.1. Cascade la plus économique**

L'impossibilité d'érosion à deux chocs dans le cas d'une incidence normale traduit l'antagonisme entre la forte probabilité des trajectoires simples et le coût énergétique élevé des fortes déviations nécessaires à ces trajectoires simples. A contrario les trajectoires longues avec faibles transferts d'énergie sont efficace énergiquement, mais peu probables. Plus une trajectoire fait intervenir de collisions, plus il est improbable que toutes les collisions soient efficaces pour produire de l'érosion.

Dans ce paragraphe, nous étudions la trajectoire idéale permettant en un nombre donné de collisions de produire une déviation maximale.

Si on considère plusieurs chocs, les parcours les plus économiques sont ceux qui se situent dans le plan d'incidence. Considérons alors deux chocs dans le plan provoquant deux déviations successives. Soit  $\alpha$  l'angle moyen des deux déviations de telle façon que les deux déviations étudiées soient  $\alpha+\delta$  et  $\alpha-\delta$ .

L'énergie transférée par ces deux chocs successifs est :

$$T = E_0 \cos^2(\alpha + \delta) \cdot \cos^2(\alpha - \delta)$$

$$T = \frac{E_0}{4} (\cos(2\delta) + \cos(2\alpha))^2$$

$$\frac{dT}{d\delta} = -E_0 \sin(2\delta) (\cos(2\delta) + \cos(2\alpha))$$

Ainsi le transfert maximum est atteint quand  $\delta$  est nul. En généralisant à  $n$  chocs, on aboutit à la conclusion que la cascade qui permet de dévier des atomes d'un angle total  $\omega$  en  $n$  chocs tout en conservant le maximum d'énergie est celle qui se produit dans le plan d'incidence, avec une déviation d'angle  $\omega/n$  lors de chaque choc.

#### **D.VII.2.2.2. Cas de l'érosion de l'aluminium à incidence normale**

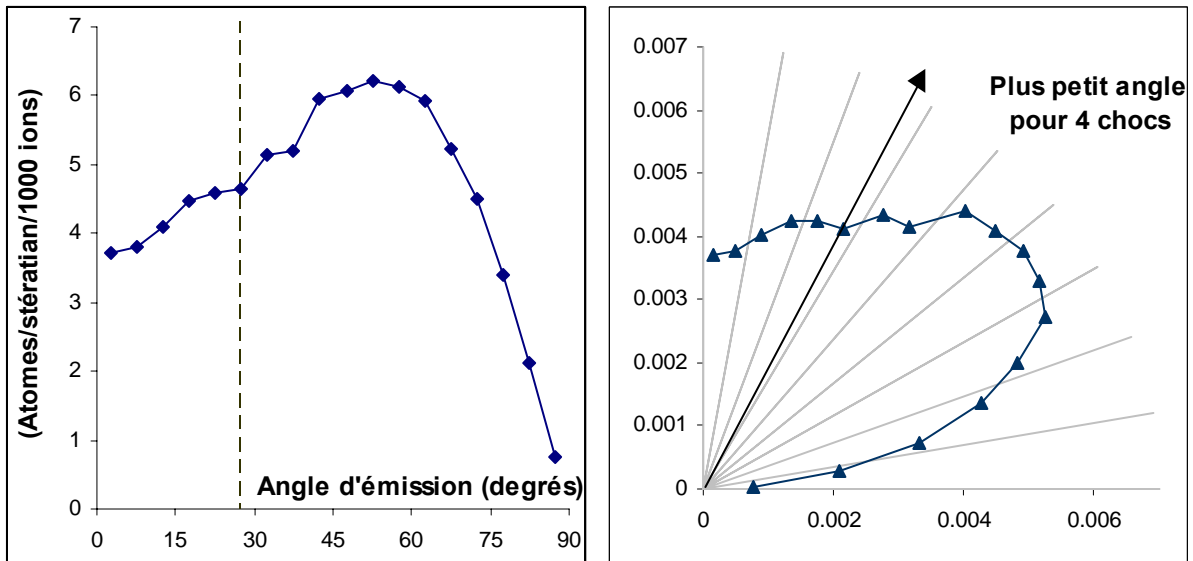
Plus l'énergie des ions incidents est faible, plus la forme du lobe d'émission s'éloigne d'une émission en cosinus. Cela vient du fait que seul un nombre restreint de trajectoires permet de produire de l'érosion. Mais plus l'énergie des ions est faible plus le nombre de chocs mis en jeu pour provoquer de l'érosion est grand. Or plus une trajectoire fait intervenir de collisions, moins elle est probable.

Notre idée est que la direction principale d'émission dépend fortement de la plus petite cascade pouvant provoquer de l'érosion. Pour des raisons de simplicité, nous avons étudié l'érosion de l'aluminium par lui-même. Nous avons également supposé que les sections efficaces différentielles de collision sont indépendantes de l'énergie. Nous avons alors étudié l'érosion de l'aluminium par l'aluminium à 50eV.

Nous avons alors déterminé que l'on peut provoquer de l'émission dans toutes les directions à partir de 5 collisions, et que 4 collisions permettent de produire de l'émission au delà de  $27^\circ$ . Enfin, on ne peut pas produire d'émission avec seulement 3 collisions. Toutefois, dans ce cas la direction  $27^\circ$  ne peut pas correspondre au maximum d'émission comme cela était le cas lors d'un choc unique. En effet, cette direction correspond à une cascade de 4 collisions effectuées dans un même plan, selon l'angle optimum de  $43^\circ$  à chaque déviation. Ce genre de collision est fortement improbable. Les trajectoires provoquant une émission légèrement supérieure à  $27^\circ$  sont d'autant plus nombreuses que l'émission s'éloigne de l'angle critique  $27^\circ$ . Ainsi le maximum d'érosion se situe pour une direction d'émission supérieure à  $27^\circ$ .

Certes, la simulation avec CSiPI présentée à la Figure D-34 vérifie cette prévision, mais elle ne permet pas de déterminer la direction principale d'émission. De plus le lobe présenté est calculé en absence de densité. En réalité, plus l'énergie de la cascade est faible, plus elle est longue et donc complexe à incidence normale. La meilleure approche pour l'étudier est l'étude statistique, ce qu'effectue un code de type Monte-Carlo comme CSiPI. Ainsi, si l'étude d'un nombre limité de collisions permet de comprendre les phénomènes mis en jeu lors de l'érosion normale à basse énergie, elle permet d'expliquer la forme globale en double lobe d'émission (pour les angles positifs et négatifs) sans pouvoir déterminer la direction principale d'émission.





**Figure D-34 : Emission d'aluminium simulée par CSiPI par un bombardement d'ions  $Al^+$  à 50eV sous incidence normale**

### D.VII.3. Conclusion

L'étude des trajectoires des atomes lors d'une cascade de collisions nous a permis de mettre en évidence le fait que les cascades les plus simples sont celles qui à basse énergie influent le plus fortement sur l'émission. Ainsi, pour les forts angles d'incidence, et à basse énergie, le lobe d'émission est fortement déterminé par l'émission produite par un seul choc.

Toutefois, pour les incidences proches de la normale, il n'existe pas de cascade simple à basse énergie. Ainsi, il est très difficile de prévoir la direction principale d'émission. On peut toutefois expliquer la forme aplatie de l'émission.

On a vu également que les effets de surface ont une très grande influence sur le lobe d'émission. Ainsi, même dans les cas les plus favorables (incidence rasante et basse énergie), la détermination précise de la direction du lobe d'émission est impossible en raisonnant sur un nombre limité de chocs.

Ainsi, on met en évidence l'intérêt d'un outil comme CSiPI. Toutefois, les effets de surface sont tellement importants dans certaines conditions (basse énergie, incidence rasante), qu'ils nécessitent une modélisation très performante. Ainsi, c'est la qualité de la description des phénomènes de surface qui fait la précision de la prévision des lobes d'émission.

## **D.VIII. Conclusion**

Le code de simulation CSiPI ayant été validé par comparaison avec certaines expériences dans le cas de métaux, nous l'avons utilisé pour étudier l'influence de plusieurs paramètres sur les lobes d'émissions. De façon générale, on retient que c'est le spectre en énergie des particules érodées qui détermine la direction privilégiée d'émission à cause de l'effet de filtration en énergie produit par le potentiel de surface. Ainsi, plus l'énergie des atomes dans la cascade de collisions est faible, plus l'émission est sélective en énergie et est rasante par rapport à la cible. Au contraire, plus l'énergie des atomes dans la cascade de collisions est élevée, moins l'émission est sélective. On se rapproche donc d'une émission probabiliste qui conduit à un lobe en cosinus.

En effet les émissions rasantes nécessitent une déviation minimale de la quantité de mouvement initiale donc une perte d'énergie limitée lors de la cascade de collisions. Toutefois il faut également tenir compte du fait que le nombre de collisions menant à de l'érosion peut être limité. Dans ce cas des directions d'émission privilégiées apparaissent.

Nous avons également vu que les interactions à la surface de la cible jouent un grand rôle sur le taux d'érosion et la direction d'émission. Les effets de la surface font intervenir un grand nombre de phénomènes parfois antagonistes. Par conséquent, les effets de la surface sont difficiles à prévoir de façon simple.

Cette étude a permis de comprendre les raisons physiques qui expliquent la direction des lobes d'émission. Ainsi on peut estimer qualitativement sans calcul l'évolution d'un lobe d'émission quand un paramètre est modifié. Toutefois la prévision a priori d'un lobe d'émission semble très compliquée. Cela renforce l'intérêt d'un code comme CSiPI qui a démontré sur quelques exemples ses capacités à déterminer un lobe d'émission fidèle à l'expérience.

# Partie E. Pulvérisation de cibles réelles

## E.I. Introduction

Nous avons vu jusque là des études de la pulvérisation ionique de cibles idéales. C'est à dire que nos cibles étaient constituées d'un unique composant et qu'elles étaient parfaitement lisses. Or les cibles réelles diffèrent de ces cibles idéales par plusieurs aspects. Ainsi, nous n'avons pas étudié le cas de cibles rugueuses, le cas de cible non monoatomique, ni les cibles à liaison covalente. Par ailleurs, une cible d'érosion ne peut pas être considérée comme immuable dans la mesure où elle peut être modifiée par le bombardement ionique. L'aspect dynamique de l'érosion est donc d'une grande importance.

Dans cette partie, nous allons étudier les effets de la rugosité sur la pulvérisation ionique. En effet, comme nous allons le voir, une cible rugueuse n'a pas le même taux d'érosion, n'a pas la même dépendance en angle de l'érosion, et n'a pas la même émission qu'un échantillon idéalement lisse. La rugosité est donc un problème pour la mesure de taux d'érosion puisque certaines données expérimentales d'érosion sont publiées sans que l'état de surface soit mentionné. Ainsi on peut aboutir à des taux d'érosion différents qui traduisent en réalité une différence d'état de surface des échantillons.

Nous verrons ensuite que la rugosité n'est pas une donnée intrinsèque d'un matériau. En effet, l'érosion ionique fait évoluer l'état de surface des cibles d'érosion. Nous verrons que dans certains cas, cette rugosité tend à s'accroître. Nous avons étudié l'évolution de la rugosité en nous basant sur une étude expérimentale et une approche théorique. On essayera d'expliquer les processus entraînant la formation de la rugosité.

Finalement, nous verrons que la pulvérisation modifie la nature de la cible. Ces modifications peuvent être d'ordre chimique (nature des fonctions chimiques) et, ou stœchiométrique, avec comme cas particulier la modification de la cible due à l'implantation d'ions. Toutes ces modifications de la cible sont susceptibles de modifier la pulvérisation ionique.

*Remarque* : Dans cette partie, nous allons beaucoup traiter de la rugosité des cibles d'érosion. La rugosité fait apparaître localement des incidences différentes de l'incidence globale du faisceau d'ions sur la cible. Ainsi, quand on traitera de la rugosité, on utilisera l'adjectif « local » pour traiter des facettes et global pour traiter de la cible prise au niveau macroscopique, en ne tenant pas compte de sa rugosité.

## **E.II. Effet de la rugosité sur le taux d'érosion**

La présence d'une rugosité fait apparaître localement des angles d'incidence différents de l'angle global entre le faisceau d'ions et l'échantillon étudié. Ainsi lorsque l'on mesure le taux d'érosion d'un échantillon, ce taux d'érosion dépend de la rugosité et plus particulièrement des pentes formées par cette rugosité. Dans ce chapitre, nous verrons comment on peut modéliser l'effet de la rugosité sur l'érosion. Nous verrons également des mesures expérimentales mettant en évidence cet effet de la rugosité sur le taux d'érosion, et en particulier sur la dépendance en fonction de l'angle d'incidence global sur le taux d'érosion.

### **E.II.1. Hypothèses**

Nous avons étudié numériquement les effets de la rugosité sur le taux d'érosion, en considérant les incidences locales et en leur appliquant la valeur du taux d'érosion pour l'angle correspondant. Certaines hypothèses restrictives sont nécessaires.

- La taille caractéristique de la rugosité est beaucoup plus grande que la taille des cascades de collisions. Dans le cas contraire, on ne peut pas parler d'angle d'incidence local. Puisque nous étudions de l'érosion ionique à basse énergie, les cascades de collisions sont très restreintes. Cette hypothèse est donc facile à vérifier. Dans le cas contraire, il faudrait tenir compte des cascades de collisions dans leur intégralité. Makeev et al.<sup>68</sup>, a entrepris ce genre d'étude.

- L'épaisseur érodée n'est pas grande devant la taille de la rugosité. Dans le cas contraire, la rugosité risque d'évoluer sensiblement entre le début et la fin de l'érosion.

- La redéposition des produits d'érosion est négligeable. Cette hypothèse est tout à fait raisonnable pour une rugosité dont les angles sont faibles. Pour une rugosité plus marquée, la redéposition devrait être prise en compte, mais elle est complexe à modéliser. Parmi les rares publications tenant compte de la redéposition, on peut tout de même citer Küstner et al.<sup>69</sup> qui a mesuré et simulé l'érosion d'une cible rugueuse de béryllium par des ions légers. Toutefois, la loi d'émission utilisée suit une dépendance en cosinus de l'angle d'émission.

### **E.II.2. Description de la surface**

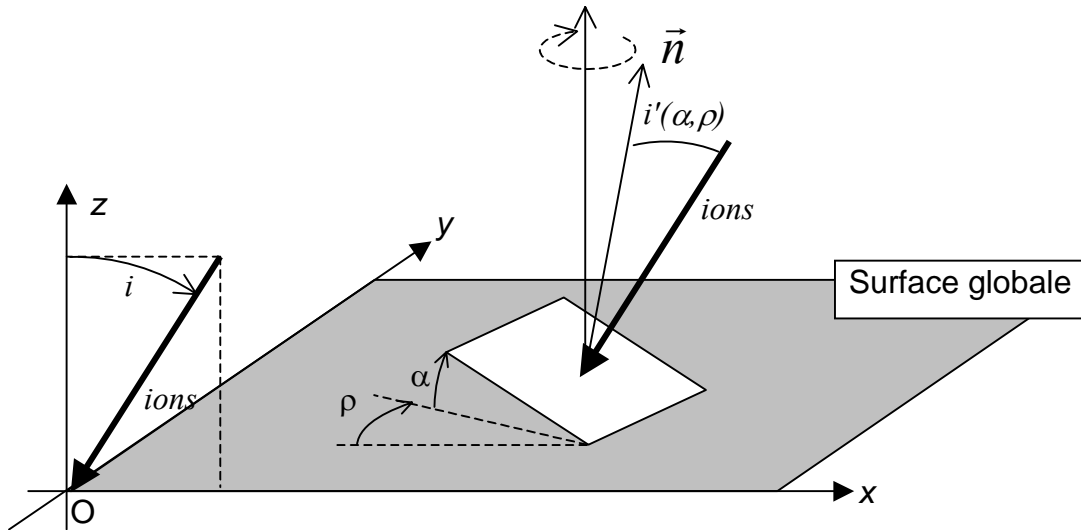
Pour étudier les effets de la rugosité, nous considérons une surface globalement plane mais constituée d'une infinité de facettes faisant toutes le même angle  $\alpha$  avec la surface globale. L'orientation de ces facettes est aléatoire et est repérée par un angle de rotation  $\rho$  autour de l'axe  $Oz$  normal à la surface globale (voir Figure E-1).

Le faisceau d'ions est dirigé selon une direction faisant un angle  $i$  avec  $Oz$  dans le plan  $xOz$  (angle d'incidence avec la surface globale). L'angle d'incidence local sur la facette d'inclinaison  $\alpha$  et d'orientation  $\rho$  est noté  $i'(\alpha, \rho)$ . Cet angle est également l'angle formé par la normale à la facette étudiée  $\vec{n}$  et la direction des ions repérée par le vecteur  $\vec{i}$  (vecteur normé).

Alors,

$$\cos i'(\alpha, \rho) = -\vec{n} \cdot \vec{i} \text{ avec } \vec{n} = \begin{pmatrix} \sin \alpha \cdot \cos \rho \\ \sin \alpha \cdot \sin \rho \\ \cos \alpha \end{pmatrix} \text{ et } \vec{i} = \begin{pmatrix} -\sin i \\ 0 \\ -\cos i \end{pmatrix}$$

$$\cos i'(\alpha, \rho) = \sin \alpha \cdot \cos \rho \cdot \sin i + \cos \alpha \cdot \cos i$$



**Figure E-1 : Description de l'angle d'incidence local et global des ions sur une surface rugueuse**

### E.II.3. Calcul du taux d'érosion global

Le taux d'érosion global noté  $Y_G$  pour une surface rugueuse peut alors être calculé à partir de la fonction angulaire du taux d'érosion  $Y(i)$  pour des surfaces rigoureusement planes.

$$Y_G(i, \alpha) = \frac{1}{\cos i} \int_0^{2\pi} \frac{Y(i') \cdot \cos(i')}{2\pi} d\rho$$

L'intégrale correspond à l'érosion que subit une surface globale formée de facettes faisant un angle  $\alpha$  avec la surface globale en tenant compte des orientations équiprobables pour toutes les valeurs de l'orientation  $\rho$ . Le terme  $\cos^{-1} i$  correspond au flux d'ions reçu par la surface globale.

### E.II.4. Résultats numériques

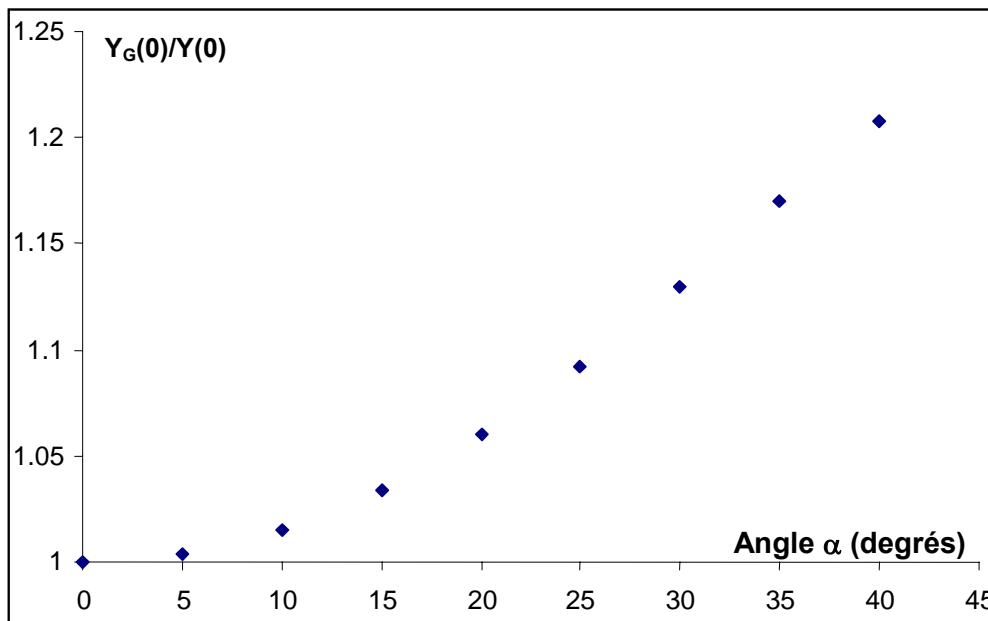
Nous étudie l'effet de la rugosité en nous basant sur une formule de taux d'érosion en fonction l'angle d'incidence suivant la formule de Yamamura<sup>31</sup>.

$\frac{Y(i)}{Y(0)} = (\cos i)^{-f} \exp[f(\cos i)^{-f} \cos i_{opt}]$  où  $Y(i)$  est le taux d'érosion à l'angle d'incidence  $i$ . Les paramètres  $f$  et  $i_{opt}$  (angle de plus fort taux d'érosion) sont les deux paramètres de fit.

Pour notre étude, nous avons pris arbitrairement  $f=4$  et  $i_{opt}=60^\circ$ . La cible étudiée est donc un matériau virtuel et un ion virtuel pour lesquels on choisit la loi d'érosion en fonction de l'angle d'incidence pour des surfaces parfaitement planes de façon arbitraire.

#### **E.II.4.1. Incidence normale**

A incidence normale, on observe alors sur la Figure E-2 un effet de la rugosité sur le taux d'érosion. Plus l'échantillon est rugueux plus le taux d'érosion à incidence normale est élevé. En effet, dans ce cas, toutes les facettes voient le même angle d'incidence local qui est l'angle  $\alpha$ . A incidence normale, le taux d'érosion pour un angle de rugosité  $\alpha$  est le taux d'érosion d'une surface lisse pour l'angle d'incidence égal à  $\alpha$ .

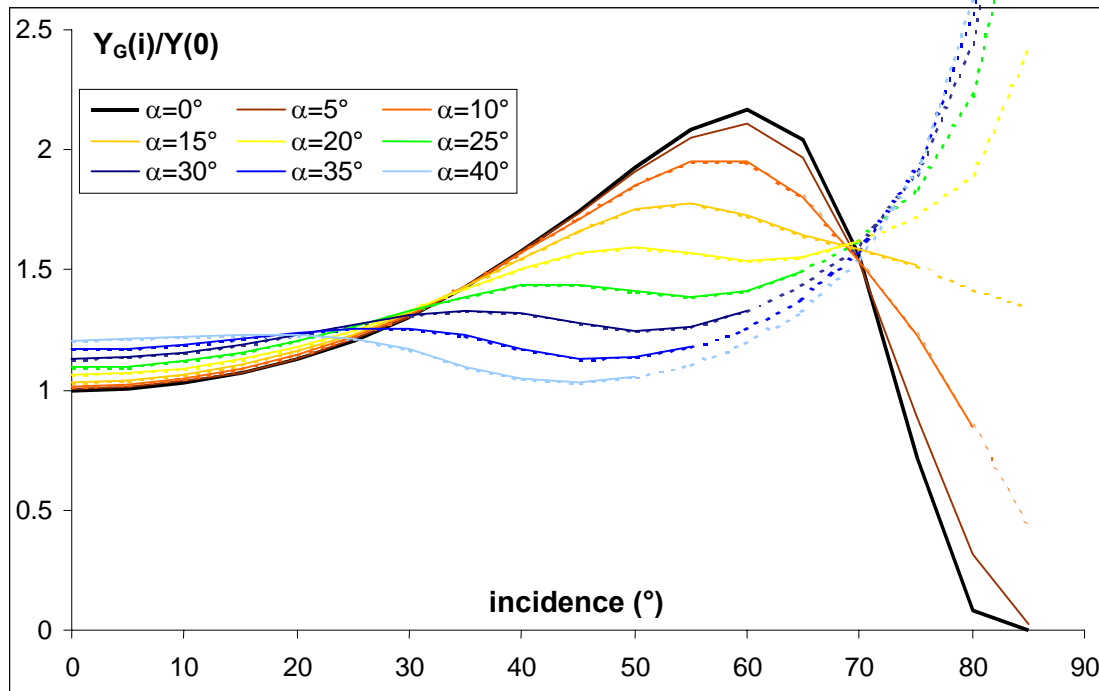


**Figure E-2 : Taux d'érosion relatif simulé pour des rugosités formées d'angles  $\alpha$**

#### **E.II.4.2. Incidence non nulle**

La Figure E-3 montre les variations du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence pour différents angles  $\alpha$ . Quand la somme de la rugosité et de l'incidence dépassent  $90^\circ$ , certaines surfaces ne peuvent pas être atteintes par les ions. Il apparaît également un phénomène d'ombrage. On entend par là qu'une partie de la surface cache d'autres parties de la surface. La Figure E-3 ne tient pas compte de ce phénomène, c'est pourquoi quand la somme des angles de l'incidence et de la rugosité dépasse  $90^\circ$ , les courbes sont tracées en pointillés, car sans sens physique. Nous verrons par la suite comment on peut tenir compte de l'ombrage (§-E.II.5).

A incidence nulle, on retrouve l'augmentation de l'érosion déjà observée. A incidence non nulle, on observe au contraire une diminution du taux d'érosion maximum pour l'angle  $i_{opt}$ . Globalement la rugosité tend à limiter les effets de l'angle d'incidence sur le taux d'érosion en le diminuant là où il est le plus fort et en l'augmentant là où il est le plus faible. Ce comportement est compréhensible dans la mesure où la rugosité fait apparaître une large gamme d'incidences locales. On aboutit donc à un lissage de la courbe d'érosion en fonction de l'angle d'incidence.

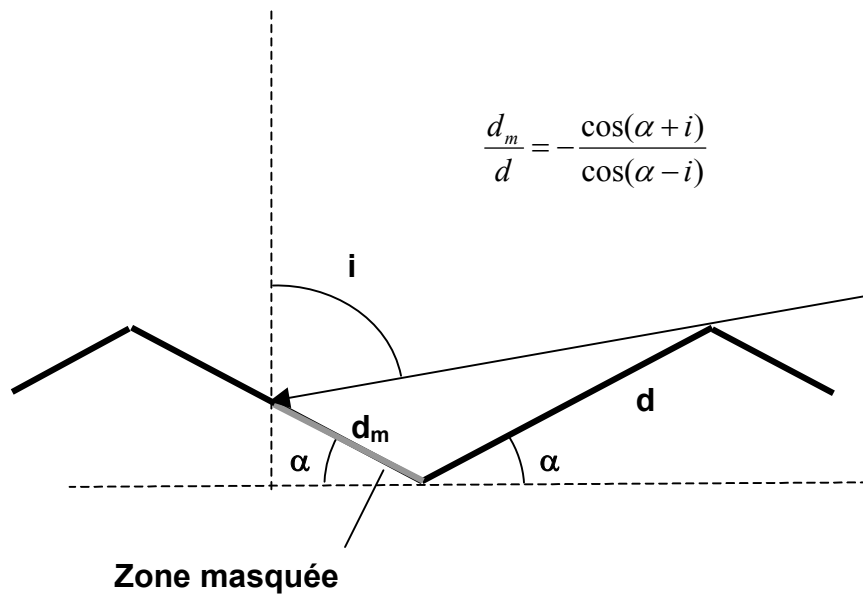


**Figure E-3 : Courbes du taux d'érosion en fonction de l'incidence simulée pour plusieurs angles de rugosités  $\alpha$**

On rappelle que ces simulations correspondent à des cibles hypothétiques qui seraient formées de facettes présentant toutes la même inclinaison  $\alpha$  avec la surface globale. On pourrait toutefois également étudier des surfaces réelles en prenant une moyenne des taux d'érosion pour différents types de facettes et en pondérant cette moyenne par l'abondance des différents angles de facette.

### **E.II.5. Effet du masquage (ou ombrage)**

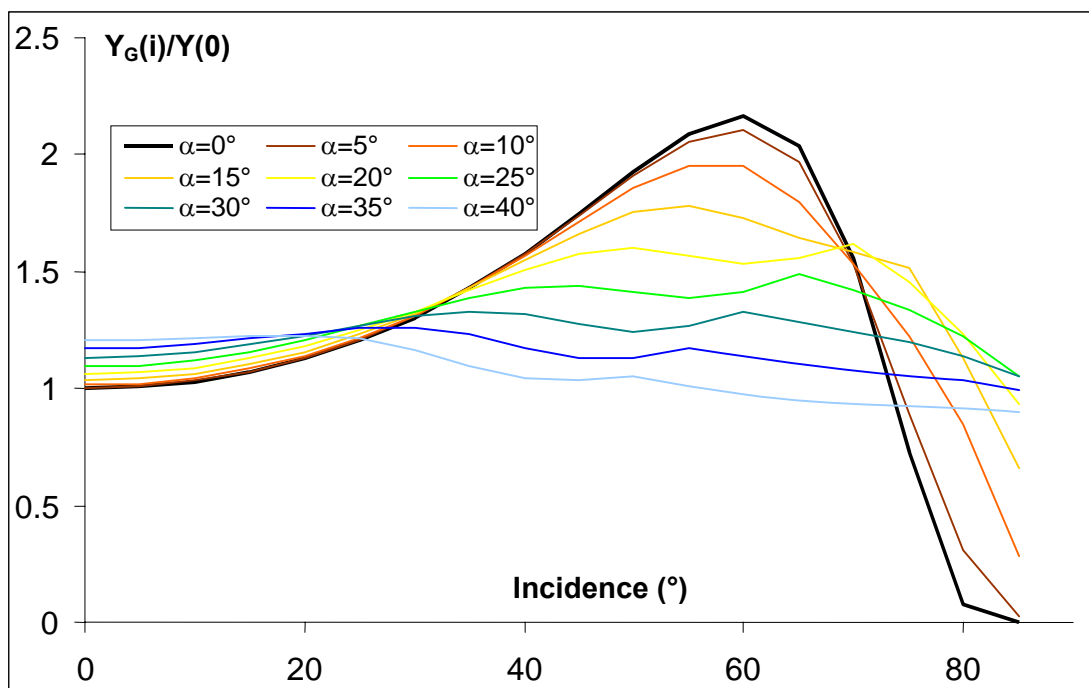
Nous avons vu que l'on obtenait des résultats aberrants pour les grandes incidences à cause du phénomène de masquage. La surface masquée est difficile à estimer. La description 2D du phénomène d'ombrage proposée au schéma de la Figure E-4 permet une estimation approximative. On considère alors le cas simple d'une rugosité en deux dimensions pour laquelle les facettes sont de même taille et ont alternativement des directions opposées. On peut ainsi calculer la fraction de facette masquée.



**Figure E-4 : Modélisation du masquage en 2 dimensions**

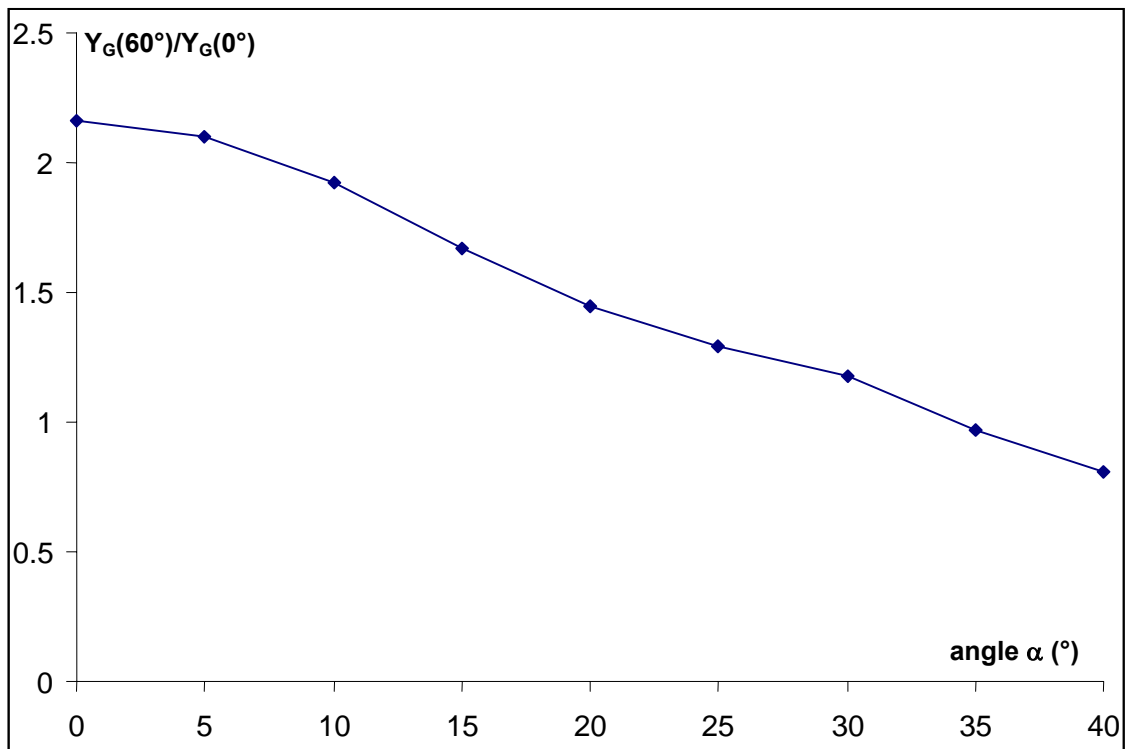
La Figure E-5 propose une estimation du taux d'érosion global pour des surfaces rugueuses en utilisant la modélisation simple du masquage présentée ci-dessus. On observe alors que le profil du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence tend à s'aplatir quand la rugosité est prononcée. Ainsi, le taux d'érosion à l'angle d'érosion maximale  $i_{opt}$  diminue fortement pour les fortes rugosités. On peut observer ce phénomène sur la Figure E-6.

Dans le cas que nous avons étudié, l'effet de la rugosité peut être considéré comme négligeable jusqu'à  $5^\circ$ .



**Figure E-5 : Courbes du taux d'érosion en fonction de l'incidence simulée pour plusieurs angles de rugosités  $\alpha$ , en tenant compte des ombrages**





**Figure E-6 : Evolution du rapport entre le taux d'érosion à incidence normale et celui pour une incidence de 60°**

Remarque : Ici, nous avons présenté un calcul analytique de la modification de la fonction  $Y(\theta)$  par la rugosité. Mais nous avons également adapté CSiPI au calcul des effets de la rugosité. On obtient alors les mêmes effets que ceux présentés dans ce paragraphe. Par ailleurs, d'autres modélisations de la rugosité ont déjà été entreprises sur la base d'un code Monte Carlo. Ainsi, Kenmotsu et al.<sup>70</sup> introduit une description fractale de la rugosité qu'il utilise avec ACAT<sup>32</sup>. Il obtient alors comme nous une diminution des variations de taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence pour des surfaces rugueuses. Par contre, de façon surprenante, il n'observe pas d'accroissement du taux d'érosion à incidence normale. Sur certains cas, il observe même une diminution.

Remarque : La description de l'enchaînement des facettes que nous avons considéré est parfaitement aléatoire, on aboutit alors à des problèmes pour déterminer le masquage. Par contre on pourrait citer la description de Stepanova et al.<sup>71</sup> qui définit la surface en 2 dimensions par la répétition de deux facettes. On peut ainsi déterminer les ombrages. Elle a alors étudié expérimentalement des surfaces préalablement travaillées de façon à leur imposer une rugosité contrôlée. On retrouve alors expérimentalement les tendances que nous avons observées par la simulation.

### **E.II.6. Observation expérimentale**

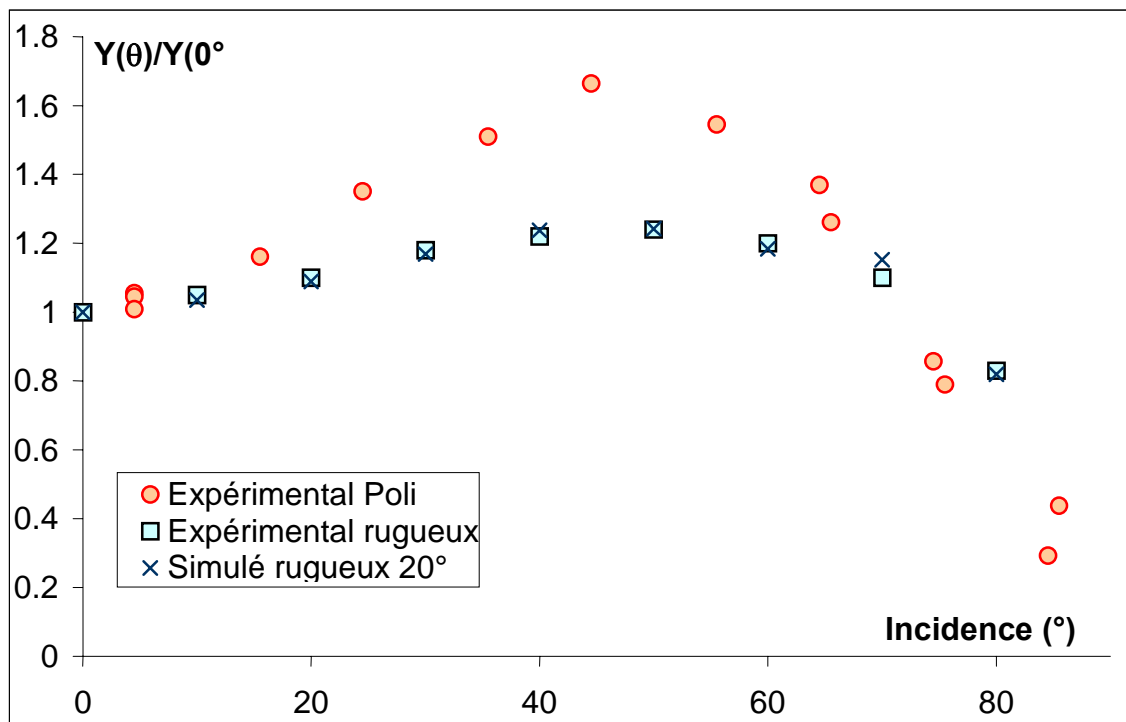
Expérimentalement, nous avons effectivement observé un effet important de la rugosité sur le taux d'érosion en fonction de l'angle. Nous avons mesuré le taux d'érosion de l'argent en fonction de l'angle d'incidence pour un échantillon rugueux et un échantillon poli miroir.

L'échantillon rugueux est obtenu par dépôt direct d'argent sur le cristal de quartz rugueux. Pour l'échantillon poli, un dépôt de cuivre de quelques microns a préalablement été déposé sur le cristal de quartz. Ce dépôt a été poli par de la poudre de diamant et de l'alumine submicronique. La couche d'argent a été ensuite déposée par évaporation sur le cuivre poli.

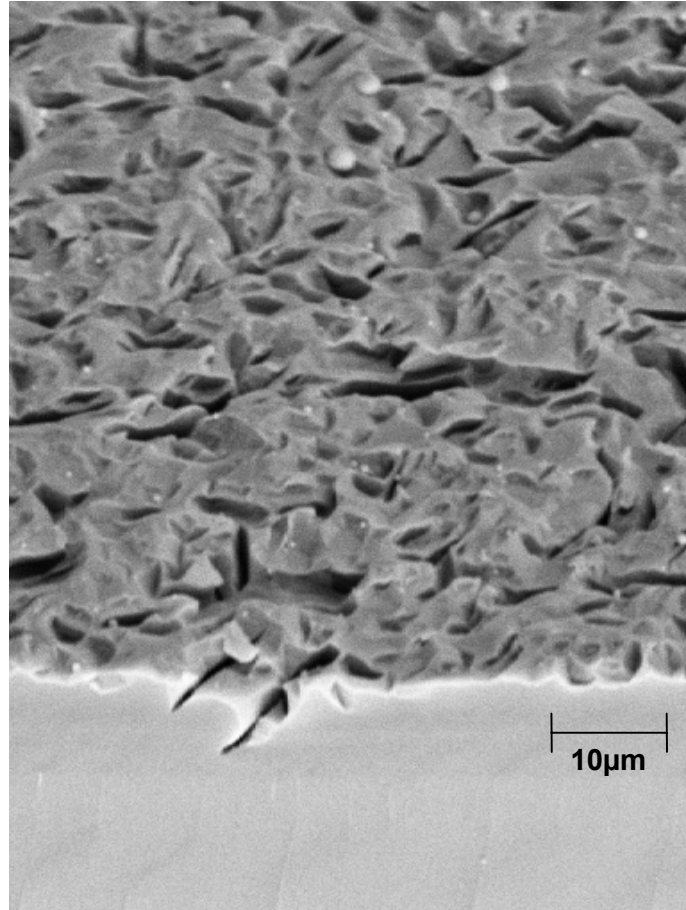
On observe comme attendu un profil de la fonction du taux d'érosion en fonction de l'angle bien plus plat dans le cas d'un échantillon rugueux. Cette dépendance est présentée à la Figure E-7. L'état de surface de la surface rugueuse a été observé au microscope électronique à balayage. Un cliché est présenté par la Figure E-8. Nous ne disposons que de clichés vus de dessus de la cible polie. La surface étudiée au MEB semble alors parfaitement plane.

La modélisation présentée précédemment basée sur des facettes orientées aléatoirement a été appliquée en prenant la mesure du taux d'érosion d'échantillons polis comme courbe de référence pour la valeur du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence. Dans ce cas, pour la simulation nous avons considéré des facettes faisant un angle de  $20^\circ$  avec la surface globale. C'est l'angle qui correspond le mieux aux mesures expérimentales. En effet, l'analyse de clichés MEB ne permet pas une bonne mesure des angles, nous nous sommes donc contentés de l'angle produisant les meilleurs résultats. On obtient alors une excellente corrélation entre le taux d'érosion de la surface rugueuse prévue et mesurée expérimentalement.

Cette bonne corrélation confirme de façon qualitative que malgré sa grande simplicité notre modélisation de la rugosité permet d'étudier l'influence de la rugosité sur le taux d'érosion.



**Figure E-7 : Taux d'érosion de l'argent lisse et rugueux (mesuré et simulé avec des angles de facettes de  $20^\circ$  par rapport à la surface globale) sous bombardement par du Xénon à 300eV**



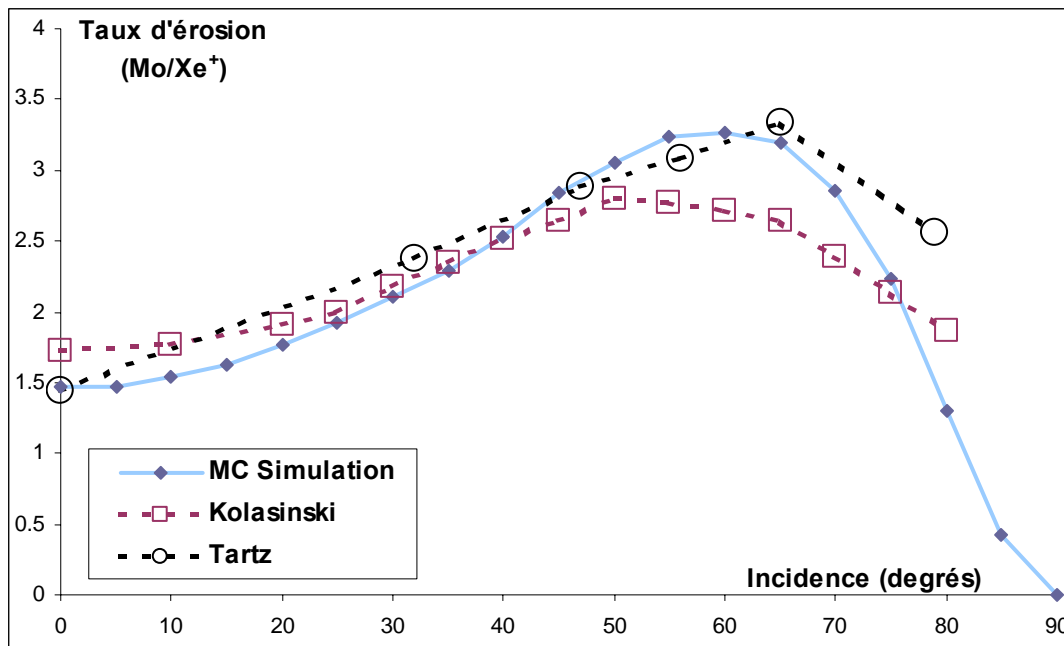
**Figure E-8 : Vue au microscope électronique à balayage de la surface rugueuse érodée**

### **E.II.7. Littérature et rugosité**

Nous avons vu que la rugosité influe fortement sur le taux d'érosion global mesuré sur un échantillon réel. Ainsi, on trouve, par exemple dans la littérature deux mesures du taux d'érosion du molybdène en fonction de l'angle d'incidence.

Ces mesures sont effectuées par érosion de molybdène par des ions  $Xe^+$  à 1000eV. Les mesures de Kolasinski<sup>51</sup> sont effectuées avec du molybdène en couche mince sur une QCM (non polie), celles de Tartz et al<sup>72</sup> sont effectuées avec des échantillons massifs. Les résultats sont assez différents. On peut les comparer sur la Figure E-9. Pour information, nous présentons également les résultats d'une simulation obtenue par CSiPI. On observe alors une relativement bonne corrélation entre les mesures de Tartz et al. et la simulation. Par contre les mesures de Kolasinski présentent un profil sensiblement plus plat. Ce profil plus plat est caractéristique de l'érosion d'une surface rugueuse.

L'utilisation de la littérature est donc très sensible à la connaissance de l'état de surface des échantillons étudiés.



**Figure E-9 : Taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence selon deux sources de la littérature et selon la simulation par CSiPI**

De façon générale, toute cible réelle peut être considérée comme rugueuse, ainsi, les études de Cheney et al.<sup>73</sup> sur le cuivre bombardé par des ions Xe<sup>+</sup> à 30keV montrent que la qualité du polissage influe sur la mesure du taux d'érosion à incidence très rasante.

*Remarque :* La rugosité permet également d'expliquer les relativement faibles variations de taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence pour le graphite. En effet, Tartz et al.<sup>72</sup> mesurent des variations de 1 à 3 entre le maximum d'érosion et le minimum sur leurs échantillons extrêmement rugueux de graphite. Au contraire, la simulation (difficile à cause des données d'entrées inconnues pour le graphite) prévoit des variations de 1 à 10 environ. Ainsi, pour étudier l'érosion de graphite qui est constamment rugueux à cause de sa porosité, la simulation d'une cible idéale par CSiPI produit des résultats aberrants.

### E.II.8. Conclusion

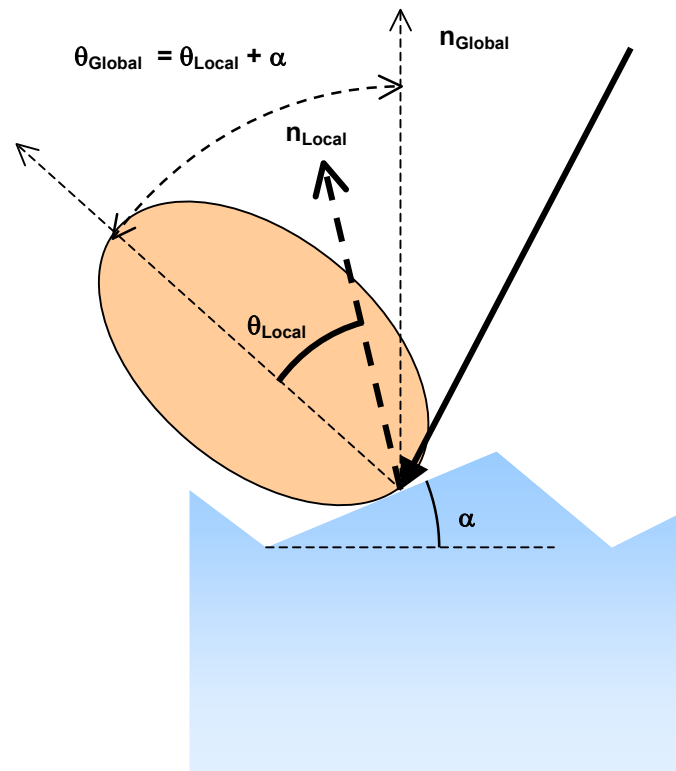
On a vu par le modèle et par l'expérience que la rugosité a une influence très importante sur le taux d'érosion. Cet effet apparaît principalement pour les incidences élevées. Plus la cible est rugueuse, plus l'influence de l'angle d'incidence sur le taux d'érosion est faible. Dans cette partie on a modélisé la rugosité de façon extrêmement simple, toutefois l'expérience montre que cette modélisation permet de reproduire des observations expérimentales. Toutefois ce modèle néglige la possibilité de redéposition des produits d'érosion à cause de la rugosité.

Nous avons vu également qu'il faut prendre garde aux conditions expérimentales quand on utilise des données de la littérature. La rugosité a une importance telle qu'on ne peut pas utiliser de mesures de la littérature si on ne connaît pas l'état de surface des cibles érodées.

## E.III. Effet de la rugosité sur le lobe d'émission

### E.III.1. Direction de l'émission issue des facettes de la rugosité

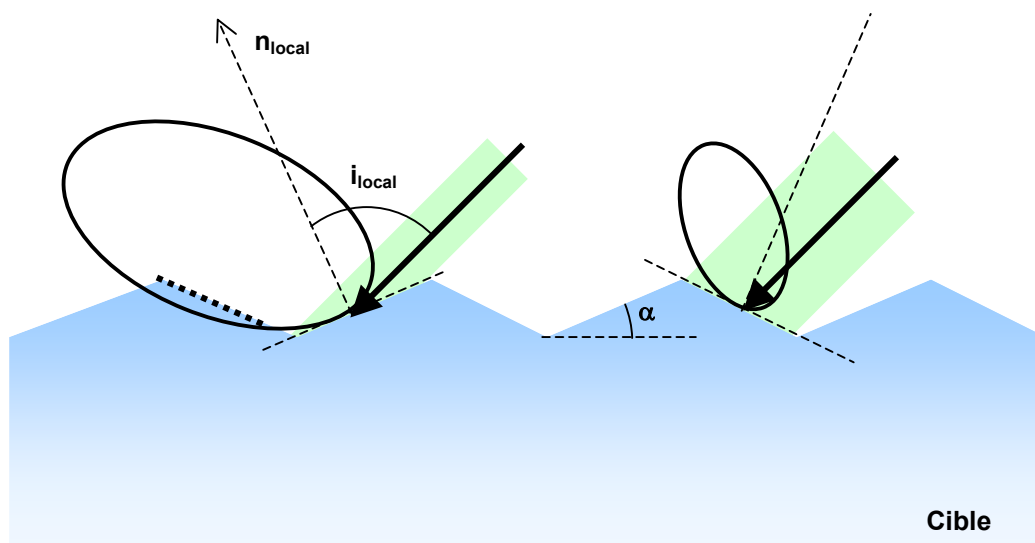
Comme nous l'avons vu pour l'étude du taux d'érosion, en présence de rugosité, l'angle local est différent de l'angle global. Ainsi le lobe d'émission est la superposition de tous les lobes locaux formés par l'érosion des facettes locales vues par le faisceau d'ions incidents. A chaque incidence locale correspond une direction principale d'émission. La Figure E-10 montre que cet angle d'émission privilégiée est la somme de la direction principale d'émission  $\theta_{Local}$  dans le repère de la facette, et l'angle  $\alpha$  que fait la facette avec la surface globale.



**Figure E-10 : Lobe d'émission local sur une facette de la rugosité**

Ainsi, certaines facettes présentent une incidence supérieure à l'incidence globale et provoquent une émission plus rasante que pour une surface lisse, alors que d'autres facettes d'incidence inférieure provoquent une émission dans une direction plus normale que pour une surface lisse. Toutes ces facettes n'ont pas la même probabilité d'être atteintes, cette probabilité est proportionnelle au cosinus de l'incidence locale ( $i_{Local}$ ). Ainsi, l'émission pour chaque facette est proportionnelle au produit du taux d'érosion correspondant à cet angle multiplié par le cosinus de l'angle (voir Figure E-11).

On remarque sur la Figure E-11 que dans le cas de l'érosion d'une facette d'incidence accrue par rapport à l'incidence globale, une partie parfois importante des produits d'érosion risque d'atteindre la rugosité voisine. Alors les produits d'érosion peuvent selon les cas se déposer ou rebondir. Les rebonds sont favorisés par l'incidence rasante (§-D.V.2). Si on ne tient pas compte de ce phénomène, on surestime l'émission dans les directions rasantes.

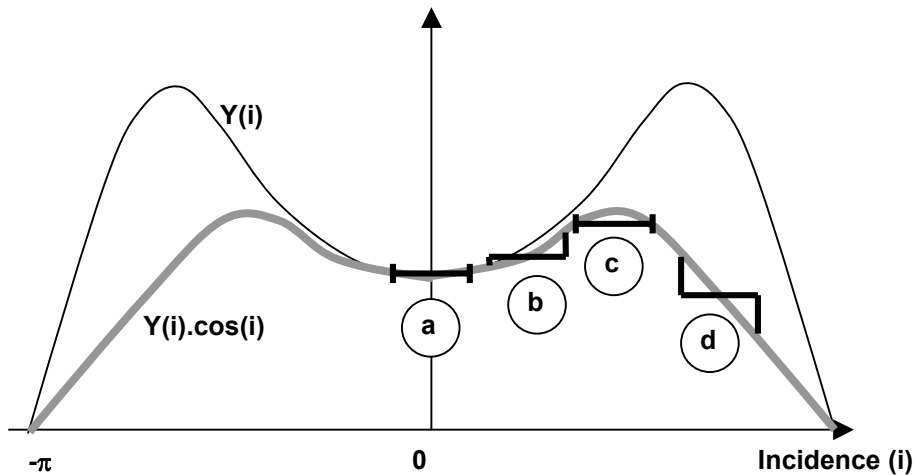


**Figure E-11 : Dépendance du flux d'ions en fonction de l'incidence locale et probabilité accrue de contamination de la facette voisine de la rugosité due à l'érosion d'une facette de plus forte incidence locale**

### **E.III.2. Effet de l'angle d'incidence sur le lobe d'émission**

En fonction de l'angle d'incidence sur la surface globale, les différentes facettes n'ont pas le même poids dans l'émission. La Figure E-12 présente une courbe de taux d'érosion d'une surface lisse ( $Y$ ) en fonction de l'incidence  $i$ , ainsi que le poids de l'émission ( $Y \cdot \cos i$ ) d'une facette d'incidence  $i$ . On y distingue plusieurs cas notés **a**, **b**, **c** et **d** représentant l'érosion d'une surface rugueuse d'une rugosité donnée, mais pour des incidences globales différentes. L'amplitude des angles locaux correspondant à chaque cas est représentée par une barre horizontale. Le rapport entre l'émission due aux fortes incidences et celle due aux faibles incidences est différent dans ces 4 cas.

- Dans le cas **a**, la gamme des incidences inclut  $0^\circ$ . On verra ce cas par la suite, quand on traitera le cas particulier de l'érosion à incidence normale.
- Dans le cas **b**, toute la gamme d'incidence est de même signe, et les facettes de plus forte incidence locale ont le plus grand poids. Par conséquent le lobe d'émission est rasant.
- Dans le cas **c**, les facettes de plus forte incidence et celles de plus faible incidence ont un poids équivalent.
- Dans le cas **d**, les angles locaux de plus faible incidence ont la plus forte importance dans l'émission.



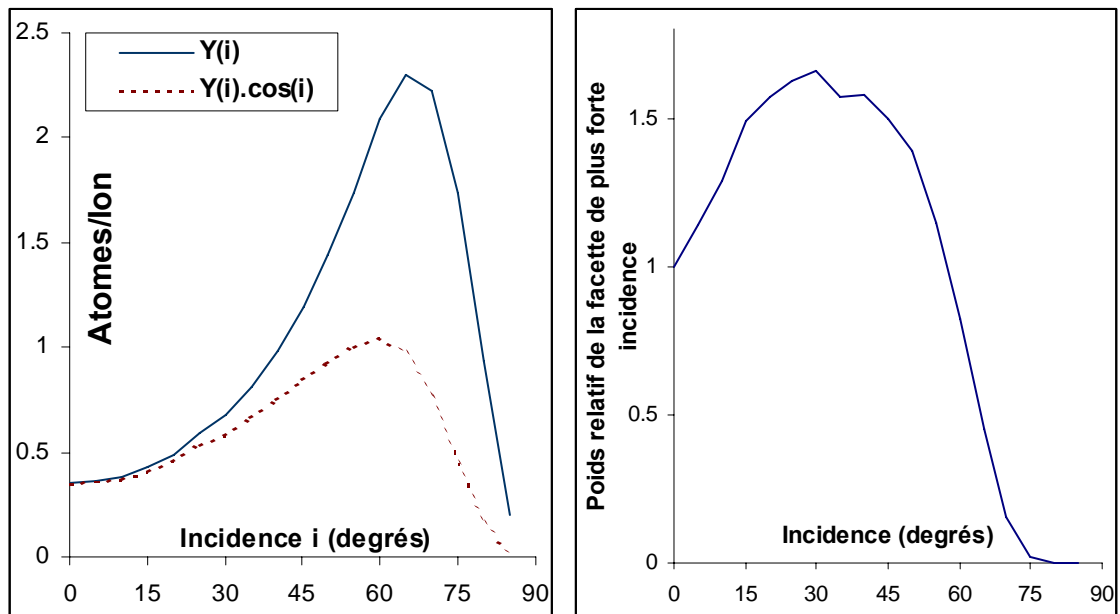
**Figure E-12 : Poids relatif ( $Y(i).\cos(i)$ ) des facettes de la rugosité en fonction de l'incidence globale  $i$**

Ainsi, à partir d'une certaine incidence, plus l'incidence globale est élevée, plus le poids relatif des incidences locales à lobe d'émission proche de la normale à la surface globale est grand, et inversement plus l'angle d'incidence global est faible plus le poids relatif des fortes incidences globales donc à lobe d'émission rasant est important. Donc la direction d'émission principale en présence d'une rugosité se déplace d'un lobe rasant à un lobe proche de la normale à la surface globale de la cible.

Pour illustrer ces résultats, on a estimé par CSiPI le taux d'érosion de l'aluminium bombardé par des ions  $Xe^+$  à 300eV en fonction de l'angle d'incidence. On en a déduit le poids pour l'émission des différentes facettes en fonction de l'incidence locale. Ces résultats sont présentés à la Figure E-13 a. On a ensuite considéré une rugosité produite par des facettes d'angle  $10^\circ$  par rapport à la surface globale. Dans ce cas, la Figure E-13 b présente le rapport entre le poids des facettes de plus forte incidence et celles de plus faible incidence en fonction de l'incidence globale. On observe alors qu'à partir d'une incidence globale de  $30^\circ$ , le poids de l'émission rasante (forts angles d'incidence locaux) décroît rapidement. Cela doit se traduire par un redressement du lobe d'émission à partir d'une incidence globale de  $30^\circ$ .

Ce résultat est important car il est opposé au comportement que l'on observe pour une cible lisse.

Dans le cas d'une érosion à incidence normale, l'effet de la rugosité est particulièrement important. Si on considère la description de la rugosité faite dans le premier chapitre (§-E.II.1), chaque ion voit une incidence locale non nulle égale à l'angle de rugosité  $\alpha$ . L'angle d'émission est alors la somme de l'angle privilégié d'émission pour une incidence  $\alpha$ , plus la valeur de l'angle de rugosité  $\alpha$ . Ces deux termes croissent quand  $\alpha$  croit, donc plus un échantillon est rugueux, plus son émission est rasante. Cette étude qualitative sera confirmée au paragraphe suivant par la simulation avec CSiPI.



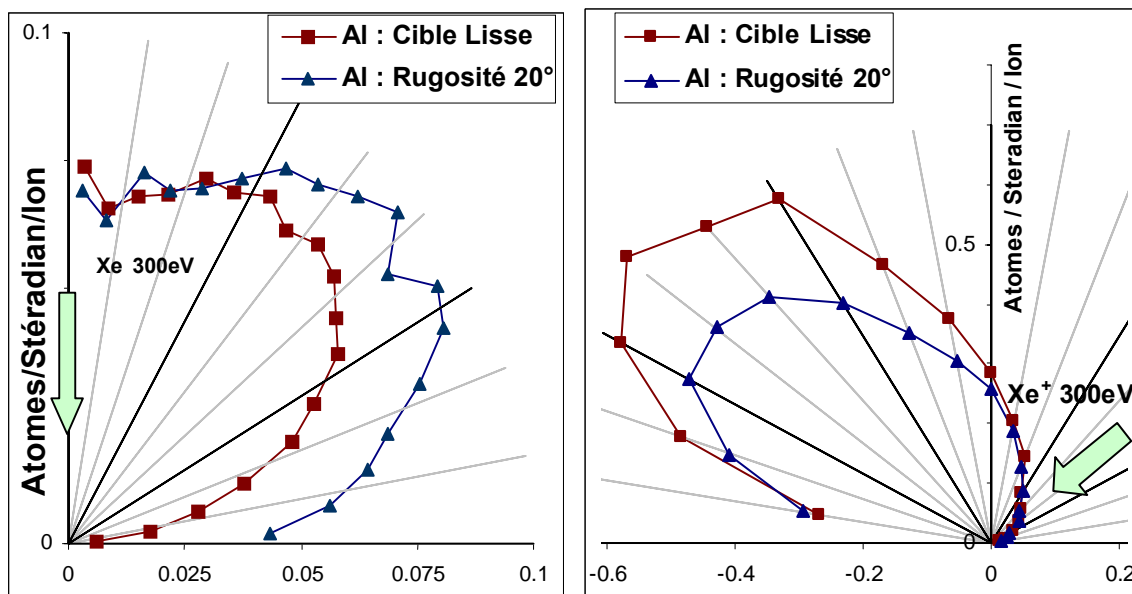
**Figure E-13 : Taux d'érosion et poids de l'émission des facettes en fonction de l'angle d'incidence ( $\text{Xe}^+$  300eV sur aluminium ) (gauche), et rapport entre l'émission due aux fortes incidences et celle due aux faibles incidences dans le cas d'une rugosité de  $10^\circ$  (droite)**

### **E.III.3. Etude de la rugosité sur l'émission par simulation**

Afin d'étudier l'influence de la rugosité sur les lobes d'émission, nous avons adapté le code CSiPI en modélisant la rugosité comme au §-E.II.2. Certes cette modélisation est simpliste, mais en entrant une fonction de répartition de la rugosité on peut étudier n'importe quelle rugosité.

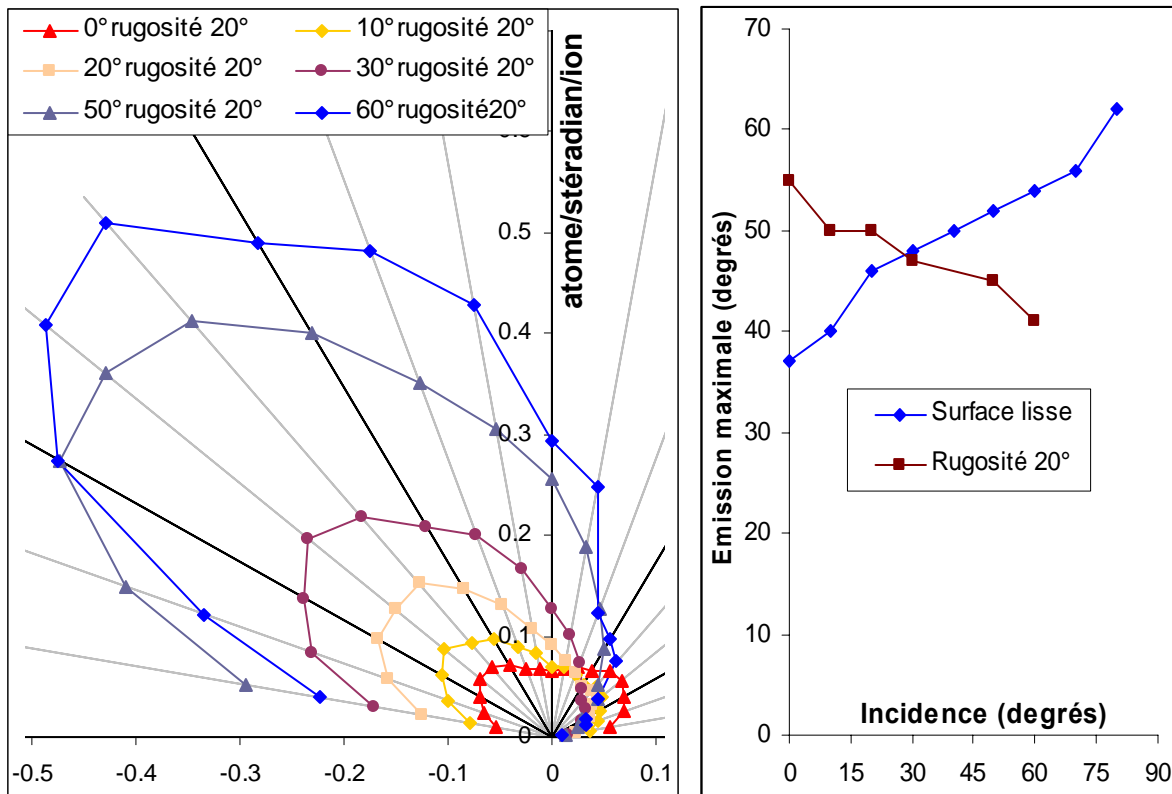
Globalement, le phénomène de contamination de la cible par l'érosion à un autre endroit de la cible n'est pas pris en compte. Seuls les atomes se dirigeant vers l'intérieur de la cible globale sont éliminés de l'émission. On risque donc de surestimer l'émission dans les directions rasantes. Les graphiques de la Figure E-14 montrent les résultats obtenus dans le cas de l'érosion par des ions  $\text{Xe}^+$  à 300eV de cibles lisses et rugueuses (angle de rugosité de  $20^\circ$ ) pour des incidences de 0 et  $50^\circ$ . On observe alors comme prévu que l'émission à  $0^\circ$  est plus importante pour la cible rugueuse et que l'émission est plus rasante. A  $50^\circ$ , la rugosité fait diminuer l'émission sans modifier de façon significative la direction principale d'émission.





**Figure E-14 : Lobes d'émission pour une cible d'aluminium lisse et rugueuse bombardée par du xénon à 300eV sous incidence 0° et 50°**

La simulation nous permet également de vérifier que comme cela était prévu, la rugosité provoque un redressement du lobe d'émission quand l'angle d'incidence augmente. Ce phénomène peut être observé avec la Figure E-15. Ces lobes sont à comparer avec ceux déjà présentés au paragraphe §-D.IV où on observait que plus l'angle d'incidence est élevé sur une surface lisse, plus l'angle d'émission est rasant. Cette observation est illustrée par le second graphique de la Figure E-15 qui représente la direction principale d'émission en fonction de l'angle d'incidence pour un cible lisse et une cible rugueuse.



**Figure E-15 : Lobes d'émission simulés pour une cible d'aluminium de rugosité 20° bombardée par des ions  $Xe^+$  d'énergie 300eV sous incidence variable (gauche). Evolution de l'angle d'émission principal en fonction de l'angle d'incidence pour une surface lisse et rugueuse (droite).**

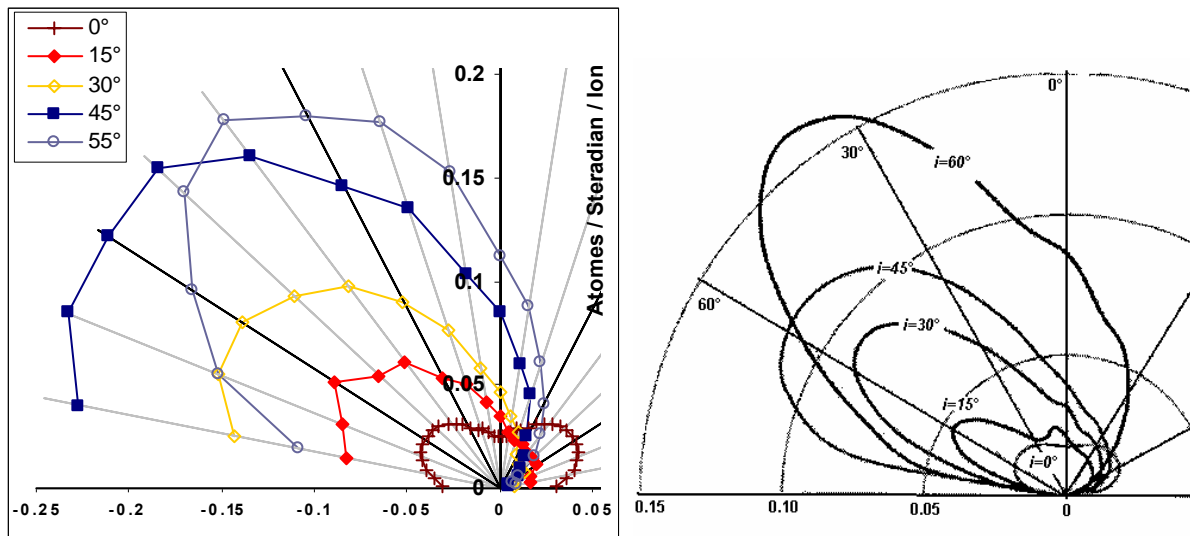
Ainsi, la prise en compte de la rugosité est d'une importance capitale pour prévoir l'évolution de l'émission en fonction de l'angle d'incidence. Dans ce cas la rugosité inverse le sens d'évolution de la direction principale d'émission. La rugosité est donc un paramètre très influant de la pulvérisation ionique.

#### E.III.4. Littérature et émission d'une surface rugueuse

Tout comme pour l'érosion, la littérature propose parfois des lobes d'émission sans que l'état de surface des cibles soit contrôlé. Des données de la littérature<sup>63,64</sup> sur l'érosion du graphite fournissent des mesures des lobes d'émission de surfaces rugueuses. Les lobes d'émission expérimentaux sont présentés à la Figure E-16 dans le cas d'une cible rugueuse de graphite bombardée par des ions  $Xe^+$  à 500eV sous diverses incidences. Ces lobes sont obtenus par contamination sur une QCM selon le même principe celui que nous avons présenté au chapitre §-C.V.4.1. Toutefois, cette technique ne traduit pas l'émission mais la contamination dans la mesure où le coefficient de collage est inférieur à 1 pour le carbone. D'ailleurs, ce coefficient de collage dépend certainement de la direction étudiée dans la mesure ou l'énergie des produits d'érosion dépend de la direction étudiée.

Nous avons simulé l'érosion du graphite avec CSiPI, en prenant comme paramètre une énergie de liaison de 15eV, une énergie de surface de 1.5eV et un angle de rugosité  $\alpha=30^\circ$ . En effet, les échantillons de graphite étudiés par Williams sont particulièrement rugueux.

La Figure E-16 permet de comparer les mesures de Williams et nos simulations. En réalité, nous ne disposons pas des mesures brutes de Williams, mais uniquement d'un fit. Le fit utilisé peut faire apparaître artificiellement des irrégularités d'émission au voisinage de  $0^\circ$ .



**Figure E-16 : Lobes d'émission simulés (gauche) et mesurés<sup>64</sup> (droite) pour le bombardement d'une surface rugueuse de graphite par des ions  $Xe^+$  à 500eV**

Nous ne nous attardons pas sur l'aspect quantitatif puisque nous ne modélisons pas assez finement les énergies de surface et liaison, et dans la mesure où notre description de la rugosité (§-E.II.2) est très grossière. Par ailleurs, nous sommes conscients de surestimer l'émission rasante par la simulation étant donné que nous ignorons une grande partie de la contamination possible d'une facette de la rugosité sur une autre. Enfin, comme cela a déjà été évoqué, les mesures de Williams sont des mesures de contamination et non pas d'émission. Or l'émission est supérieure à la contamination.

Malgré toutes les précautions que nous venons de prendre, on peut tout de même observer que la simulation fournit des lobes d'émission proches en forme de ceux mesurés expérimentalement. En particulier, les lobes d'émission à incidence nulle ont des formes très semblables. Pour les autres incidences, l'émission rasante est trop élevée, mais ce phénomène était prévu. Les directions principales d'émission sont bien prévues. On observe également par la simulation comme par l'expérience le redressement du lobe d'émission pour des incidences élevées.

Toutefois, nous ne retrouvons pas les bons rapports entre la taille du lobe d'émission du lobe pour incidence  $55^\circ$  ( $60^\circ$  pour Williams) et  $45^\circ$ . Toutefois, si dans le cas d'une érosion à 500eV Williams trouve un lobe d'émission bien supérieur pour  $60^\circ$  que pour  $45^\circ$ , ces deux lobes sont équivalents en tailles aux énergies 300eV (le lobe à  $45^\circ$  est alors légèrement supérieur à celui à  $60^\circ$ ) et 750eV (le lobe à  $45^\circ$  est alors légèrement inférieur à celui à  $60^\circ$ ). Cette différence entre la simulation et l'expérience ne doit donc pas obligatoirement être attribuée à une mauvaise modélisation par CSiPI.

### E.III.5. Conclusion

Nous avons vu que la rugosité influe fortement sur les lobes d'émission. Un raisonnement qualitatif nous a permis de prévoir des comportements que l'on a pu observer

par la simulation. Ces comportements se vérifient également dans certaines données de la littérature pour lesquelles l'érosion a été effectuée sur des surfaces rugueuses.

Ces comportements sont un aplatissement du lobe d'émission à incidence normale et un redressement du lobe d'émission quand l'angle d'incidence augmente lors de l'érosion d'une surface lisse.

Ainsi, comme c'était déjà le cas pour le taux d'érosion, l'émission est dépendante de la rugosité. Ainsi des données de la littérature ne peuvent être utilisées que si on connaît la rugosité des échantillons soumis au bombardement ionique.

## **E.IV. Evolution de la rugosité**

Nous avons vu dans les deux premiers chapitres de cette partie (§-E.II et §-E.III) que la rugosité d'un échantillon a une grande influence à la fois sur son taux d'érosion et sur la direction d'émission.

Nous avons également vu qu'en modélisant la rugosité, on arrive à prévoir son influence. Toutefois, dans l'optique d'une utilisation réelle de matériaux exposés à un bombardement ionique, il faut connaître la rugosité des matériaux pendant toute leur durée de vie. Or dans cette partie, nous allons voir que la rugosité d'une cible évolue au cours de son exposition à un bombardement d'ions énergétiques. Nous avons en effet mis en évidence expérimentalement la croissance d'une rugosité lors du bombardement ionique de Kapton par du xénon à 300eV sous incidence 60°. Cette croissance de rugosité a déjà été observée sur d'autres matériaux comme des semi-conducteurs<sup>74</sup>.

Dans cette partie, nous étudierons plusieurs hypothèses pouvant expliquer la formation d'une telle rugosité. Nous étudierons l'influence de la dépendance en angle du taux d'érosion, certains phénomènes provoquant une érosion privilégiée des concavités, ainsi que l'influence de la contamination de certaines facettes de la rugosité par les produits d'érosion issus d'autres facettes.

### **E.IV.1. Observations expérimentales**

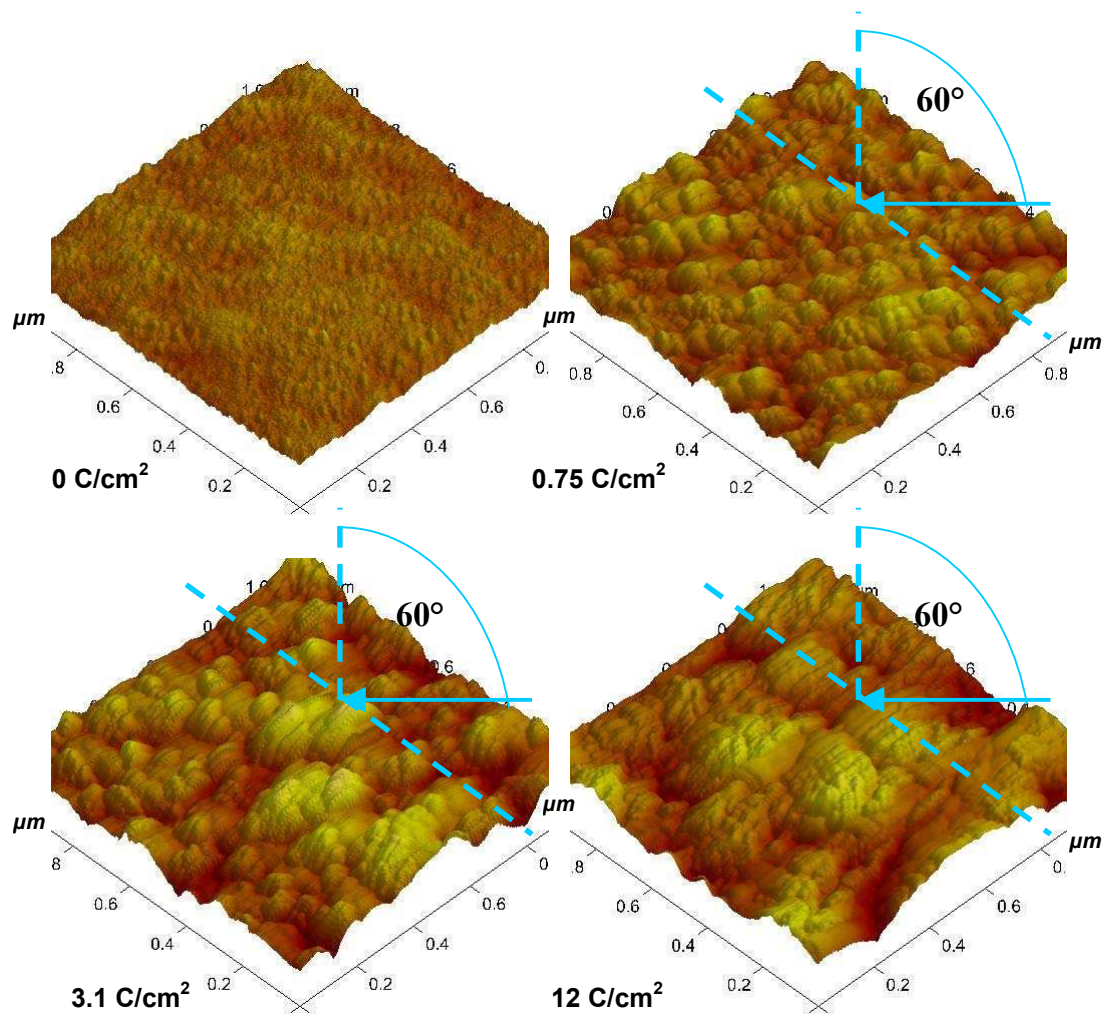
Nous avons soumis des échantillons de Kapton à de l'érosion sous incidence normale et sous incidence 60° par des ions xénon d'énergie 300eV. Nous avons observé qu'une érosion à incidence normale n'entraîne pas de variation de l'état de surface du Kapton. Nous ne nous attarderons donc pas sur ce cas. Par contre, avec une incidence de 60° on observe un accroissement de la rugosité. Ce phénomène avait déjà été étudié par Michael et al.<sup>75</sup> mais pour une énergie bien plus élevée de 6keV.

La Figure E-17 présente des mesures de topologie par AFM effectuées sur des échantillons de Kapton érodés par des ions Xe<sup>+</sup> à 300eV sous incidence 60° pour plusieurs fluences variant d'une fluence nulle pour la cible avant érosion à 12C/cm<sup>2</sup> qui correspond à une fluence supérieure à celle que l'on peut attendre sur un panneau solaire de satellite durant toute sa vie. On observe alors que des irrégularités de surface apparaissent avec une certaine périodicité. Ces irrégularités de surface ou rugosité tendent à croître en amplitude et périodicité avec la fluence.

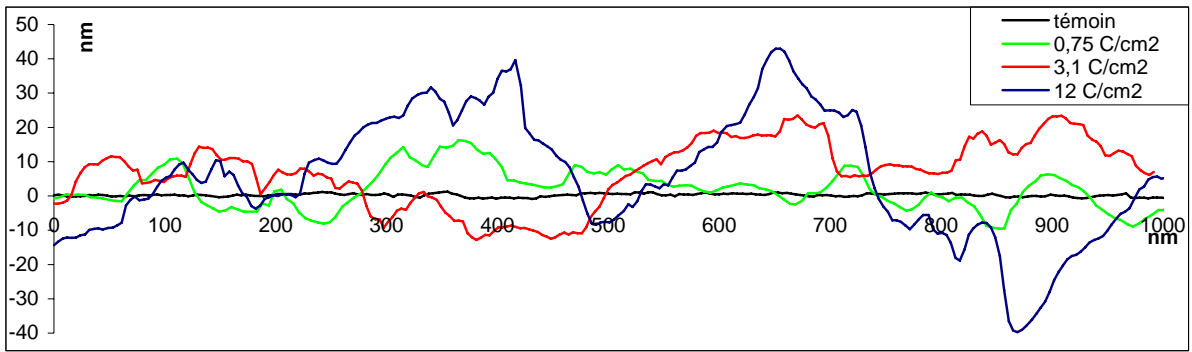
La Figure E-18 permet de mieux visualiser l'augmentation de la rugosité qui s'effectue à la fois en longueur d'onde et en amplitude, tandis que la Figure E-19 montre que cette augmentation de la rugosité s'accompagne d'une augmentation des angles rencontrés à la surface de la cible.

La rugosité peut être quantifiée par la rugosité RMS dont la mesure a été effectuée sur des topologies AFM pour différentes fluences. Les résultats des mesures de rugosité RMS sont représentée à la Figure E-20. On observe que la croissance est extrêmement rapide initialement et qu'elle ralentit ensuite.

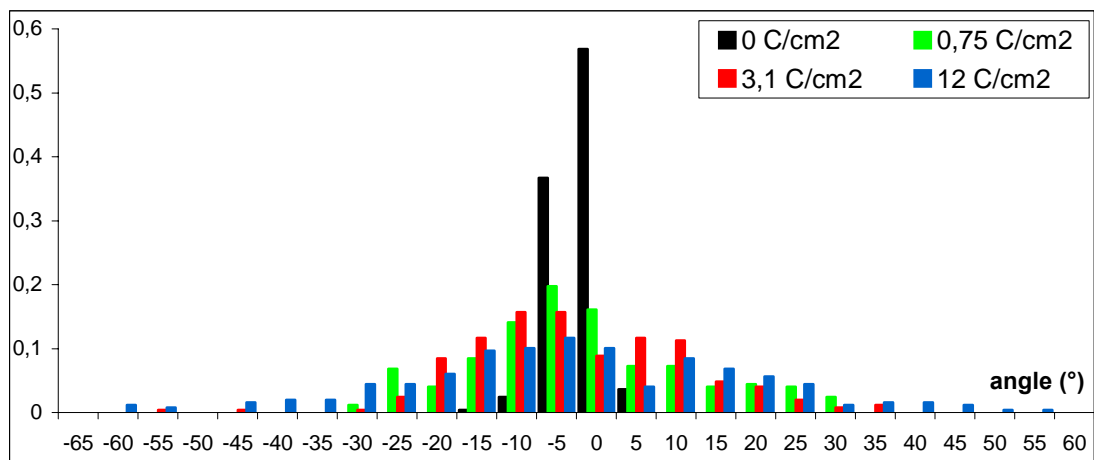
Les mesures AFM ont donc permis de mettre en évidence la croissance de rugosité d'échantillons de Kapton bombardés par des ions  $Xe^+$  à 300eV sous incidence  $60^\circ$ . Nous avons quantifié cette rugosité par des mesures RMS et observé qu'elle augmente par un accroissement des angles formés par les facettes avec la surface globale, ainsi que par une croissance de l'amplitude.



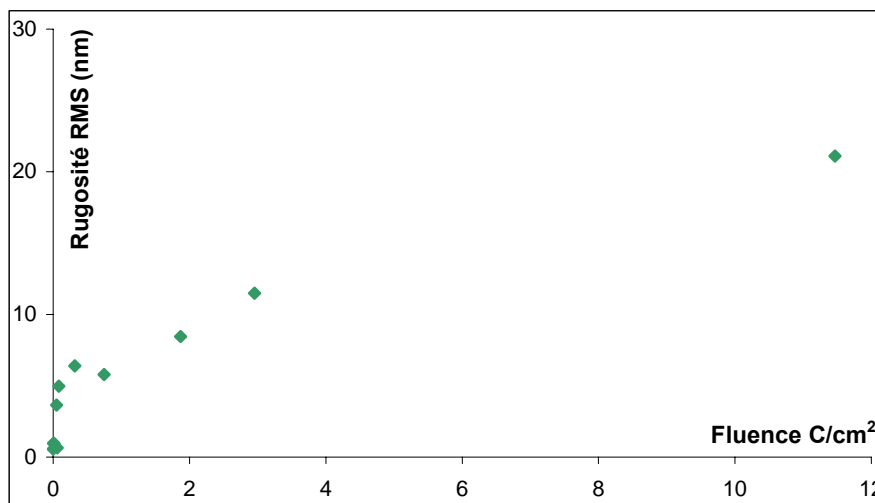
**Figure E-17 : Mesure par AFM de la surface du Kapton ( $1\mu\text{m}^2$ ) subissant une érosion d'incidence  $60^\circ$  pour diverses fluences**



**Figure E-18 : Profils de la surface après érosion**



**Figure E-19 : Répartition des angles à la surface après érosion**



**Figure E-20 : Evolution de la rugosité au cours de l'érosion suivie par AFM**

*Remarque :* Le Kapton est un matériau particulièrement adapté à l'étude des modifications de topologie sous bombardement ionique. En effet, le Kapton a un taux d'érosion très bas (§-E.V.2.1) de telle façon que des impuretés à sa surface influent peu sur la morphologie de

surface. Dans le cas contraire les impuretés limiteraient l'érosion et feraient apparaître des aspérités.

## E.IV.2. Etude théorique des surfaces stables

On a observé expérimentalement que des surfaces érodées ont un profil qui évolue à cause de l'érosion. Une cause évidente de l'évolution du profil de la surface est la différence de taux d'érosion pour des incidences différentes. On peut ainsi étudier de façon purement numérique l'évolution d'une surface en considérant les angles locaux et en attribuant une érosion fonction de l'angle d'incidence. Ce genre de calcul peut entraîner des problèmes de divergence. Nous avons donc préféré étudier dans cette partie l'évolution qualitative d'une surface en cherchant à déterminer les angles qui ont tendance à être privilégiés. Nous étudierons également la possibilité d'une croissance de la rugosité basée sur la simple hypothèse d'une différence de taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence.

Ce genre d'étude n'est valable que dans la mesure où on a le droit de considérer que le taux d'érosion est effectivement une fonction de l'angle d'incidence. Or ceci n'est vrai que si l'échelle considérée est supérieure à la taille de la cascade de collisions engendrée par un ion incident dans la cible. Dans le cas contraire, il faudrait tenir compte de tout l'environnement (de la taille de la cascade de collisions) de chaque point de la surface.

### E.IV.2.1. Systeme étudié

On s'intéresse à une surface (en 2D) d'un matériau de densité  $d$  érodé par un flux  $j$  d'ions. Cette surface est décrite par la Figure E-21.

La surface est définie par la fonction  $y = y(x, t)$ .  
 La pente locale est définie à un instant  $t$  par  $pente = dy/dx$   
 Le faisceau d'ions atteint localement la surface avec l'incidence  $\theta$  définie par  $\theta = \arctan(dy/dx)$   
 L'érosion peut alors être caractérisée par les grandeurs  $dl$  ou  $dy$  avec :

$$dl = -\frac{j}{d} Y(\theta) \cdot \cos(\theta) \cdot dt$$

$$dy = \frac{dl}{\cos(\theta)} = -\frac{j}{d} \cdot Y(\theta) \cdot dt$$

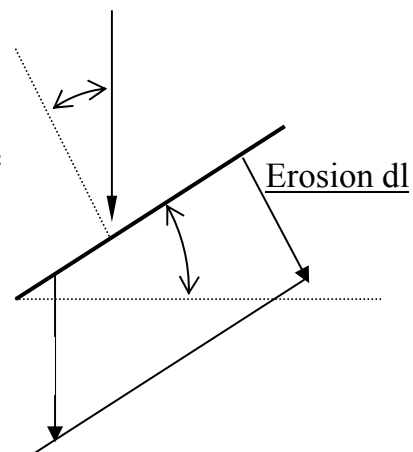


Figure E-21 : Description d'une surface

### E.IV.2.2. Evolution des angles

On peut alors calculer l'évolution dans le temps d'un angle à une abscisse  $x$  fixe.

$$\left(\frac{d \text{ pente}}{dt}\right)_x = \left(\frac{d^2 y}{dt \cdot dx}\right) = -\frac{j}{d} \cdot \frac{dY(\theta)}{dx} = -\frac{j}{d} \frac{dY}{d\theta} \frac{d\theta}{dx} = -\frac{j}{d} \frac{dY}{d\theta} \frac{d\left(\arctan\left(\frac{dy}{dx}\right)\right)}{dx}$$

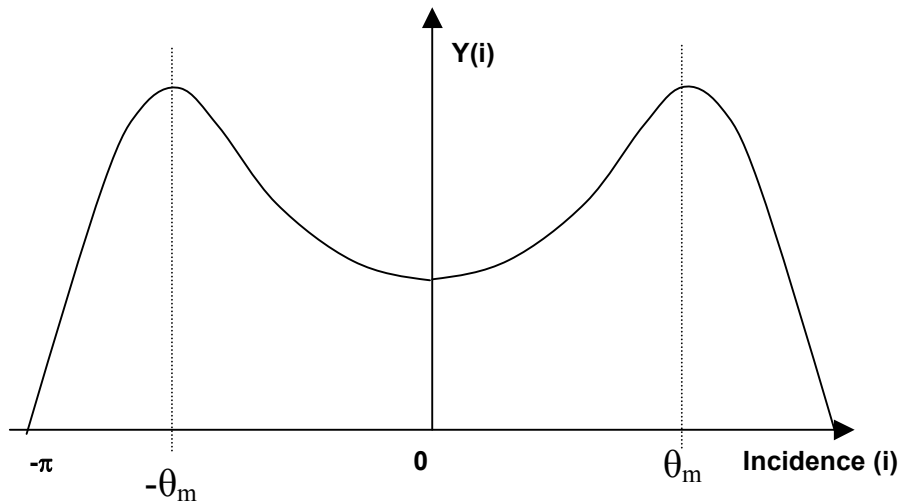
$$\left(\frac{d \text{ pente}}{dt}\right)_x = -\frac{j}{d} \frac{dY}{d\theta} \frac{d \text{ pente}}{dx} \frac{1}{1 + \text{pente}^2}$$

On peut aussi écrire :

$$\left(\frac{d \theta}{dt}\right)_x = -\frac{j}{d} \frac{dY}{d\theta} \frac{d \theta}{dx} \cos^2(\theta)$$

Ainsi la variation des angles locaux dans le temps est fonction de l'angle, du voisinage du point étudié et de la dépendance en angle du taux d'érosion.

Il existe deux incidences de signe opposé pour lesquelles le taux d'érosion est maximum :  $\theta_m$  et  $-\theta_m$ . Le taux d'érosion est nul en  $-90$  et  $90^\circ$  et a un minimum local en  $0^\circ$ . Ce type de comportement est représenté à la Figure E-22 par une courbe arbitraire.



**Figure E-22 : Forme caractéristique de la courbe du taux d'érosion en fonction de l'incidence**

On peut alors calculer l'évolution de la pente de la courbe  $y(x,t)$  dans le temps à l'abscisse  $x$  fixée en fonction de l'angle d'incidence et de la courbure locale. Le sens de l'évolution des angles est résumé par le tableau de la Figure E-23 où on distingue quatre domaines d'angles situés entre les angles particuliers  $0^\circ$ ,  $\theta_m$ ,  $-\theta_m$ ,  $90^\circ$  et  $-90^\circ$ , ainsi que deux domaines de courbures positive et négative ainsi que le cas particulier d'une courbure nulle. On peut donc y lire, en fonction de l'angle d'incidence  $\theta$  et de la variation de pente  $dpente/dx$  (ou  $d^2y/dx^2$ ), le sens de variation dans le temps de la pente à l'endroit considéré. Les angles sont pris en valeur algébrique. Ainsi l'augmentation d'un angle négatif correspond à la diminution de l'angle absolu.

Sur la Figure E-23 les angles sont représentés avec leur voisinage, afin de préciser la courbure. Ainsi, la flèche représentant une rotation de l'angle étudié indique dans quel sens il évolue dans le temps. Par exemple, pour  $d^2y/dx^2 < 0$  et un angle compris entre  $0^\circ$  et  $\theta_m$  l'angle tend à croître. On se rapproche ainsi de  $\theta_m$ .

Quant au code des couleurs, il traduit la stabilité des angles. En fond vert sont représentés les angles dits stables et en rouge les angles instables. On appelle un angle stable



un angle qui tend à s'étendre à son voisinage et un angle instable un angle qui tend vers un point anguleux.

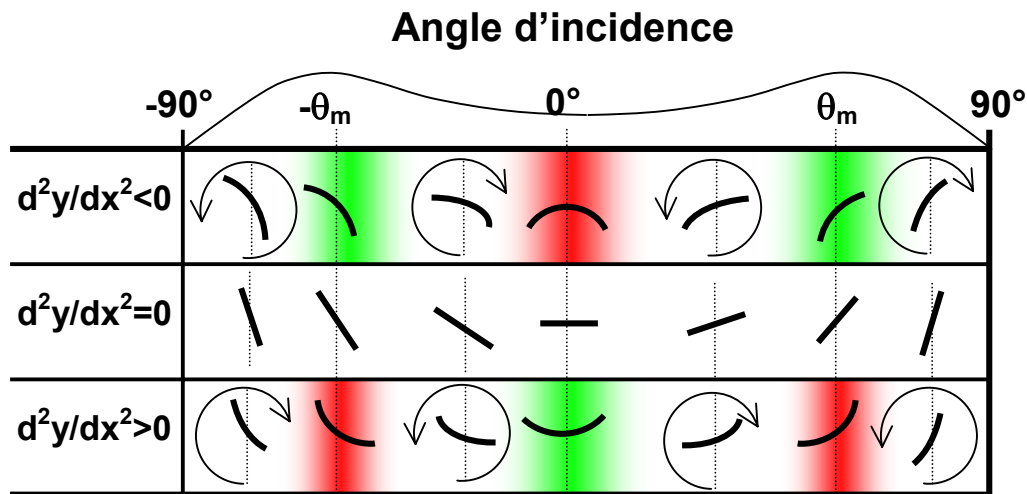


Figure E-23 : Evolution des angles dans le temps

### E.IV.2.3. Etude des points invariants

On appellera points invariants les points qui conservent leur angle dans le temps. Les points invariants sont définis par :

$$\left( \frac{d \text{pente}}{dt} \right)_x = - \frac{j}{d} \frac{dY}{d\theta} \frac{d \text{pente}}{dx} \frac{1}{1 + \text{pente}^2} = 0$$

On distingue ainsi deux catégories de points invariants :

- Ceux pour un angle déterminé, quel que soit le profil à leur voisinage
- Ceux résultant d'un profil particulier menant à  $d\text{pente}/dx=0$

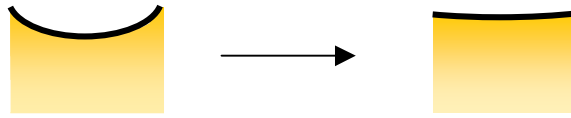
On qualifiera de stable un point invariant quand au voisinage d'un tel point les angles ont tendance à ce rapprocher de la valeur de ce point invariant. Dans le cas contraire, on parlera de point instable.

Quand  $d\text{pente}/dt$  s'annule, on obtient un point invariant. Ceci est vrai pour les trois angles  $0^\circ$ ,  $-\theta_m$  et  $\theta_m$  qui vérifient  $dY/d\theta=0$ . C'est également le cas quand  $\theta$  tend vers  $90^\circ$ , le terme en  $1/(1+\text{pente}^2)$  tend alors vers 0. Enfin, au niveau des points d'inflexion ou des surfaces planes, le terme  $d\text{pente}/dx$  annule  $d\text{pente}/dt$ .

#### E.IV.2.3.1. Creux et bosses : $\theta=0^\circ$

*Cas d'un creux :*

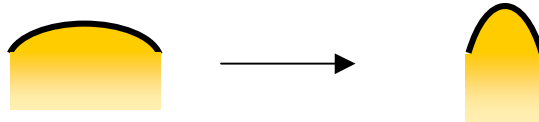
Au voisinage d'un point pour lequel  $\theta = 0$ ,  $d\text{pente}/dt$  tend vers 0. En s'éloignant de ce point sur un petit domaine, les angles négatifs croissent alors que les angles positifs décroissent. Ainsi  $d\text{pente}/dx$  tend vers 0 au voisinage des creux. On a donc tendance à former un profil horizontal au voisinage des creux comme le montre la Figure E-24 (on peut se reporter à la Figure E-23).



**Figure E-24 : Evolution d'un creux**

*Cas d'une bosse :*

Contrairement au cas précédent, les angles négatifs ont tendance à diminuer et les angles positifs à augmenter. On tend donc vers un point anguleux et la formation d'une pointe comme le montre la Figure E-25.

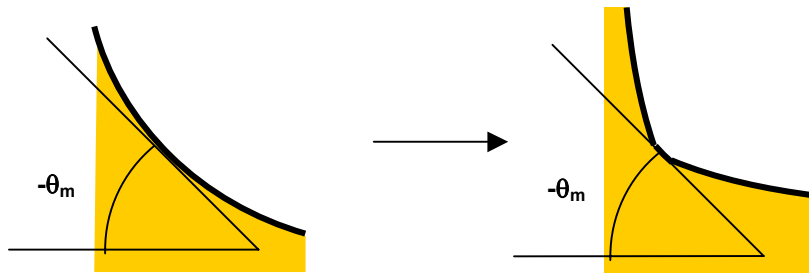


**Figure E-25 : Evolution d'une bosse**

### E.IV.2.3.2. Angle $\theta_m$

*Zone concave :*

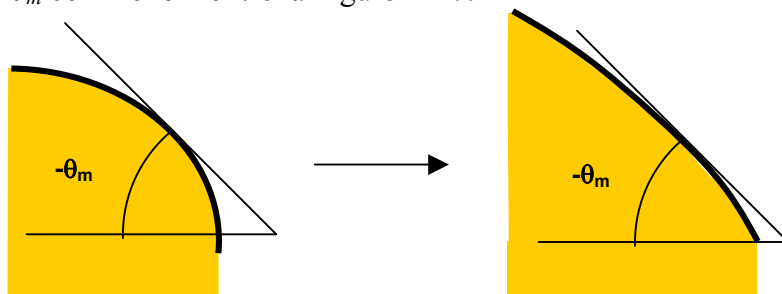
C'est quand  $\theta = \theta_m$  que l'érosion est maximale. Les angles plus forts en valeur absolue ont tendance à augmenter alors que les plus faibles diminuent. On a donc tendance à former un point anguleux comme le montre la Figure E-26.



**Figure E-26 : Evolution d'une cavité contenant l'angle  $\theta_m$**

*Zone convexe :*

On a le phénomène inverse : en valeur absolue, les angles supérieurs à  $\theta_m$  diminuent alors que les inférieurs augmentent. On a tendance à aplanir la surface et à tendre vers un segment d'angle  $\theta_m$  comme le montre la Figure E-27.



**Figure E-27 : Evolution d'une surface convexe contenant l'angle  $\theta_m$**

### E.IV.2.3.3. angle 90°

Evidemment une facette parallèle au jet d'ion ne reçoit pas d'ions, elle n'est donc pas érodée et reste donc stable et immobile.

### E.IV.2.3.4. $d^2y/dx^2 = 0$

Contrairement à ce qui a été vu pour les points d'angle  $-90^\circ$ ,  $-\theta_m$ ,  $0$ ,  $\theta_m$  et  $90^\circ$ , dans le cas des points pour lesquels  $d^2y/dx^2$  s'annule, c'est l'environnement du point et non pas son angle qui produit la stabilité. Toutefois, l'environnement n'étant pas stable, les points d'inflexions ne le restent pas. Donc la stabilité est virtuelle. Toutefois on peut considérer que sur un temps court ils se comportent comme de vrai points stables.

#### Points d'inflexion

Les points d'inflexion sont des points invariants puisque  $d^2y/dx^2 = 0$ . On note  $\theta_i$  l'angle au point d'inflexion.

On distingue plusieurs cas. En effet,  $\theta_i$  peut être plus grand ou plus petit que  $\theta_m$  et  $\theta_i$  est selon les cas soit un minimum local soit un maximum local. Dans tous les cas, on tend à former un point anguleux autour du point d'angle  $\theta_i$ . Un des segments tendant vers  $\theta_i$  et l'autre s'en éloignant. Tous les cas sont envisagés aux figures Figure E-28 et Figure E-29. La surface pleine correspond à la surface à un instant donné et la ligne rouge discontinue correspond au sens de l'évolution de la surface.

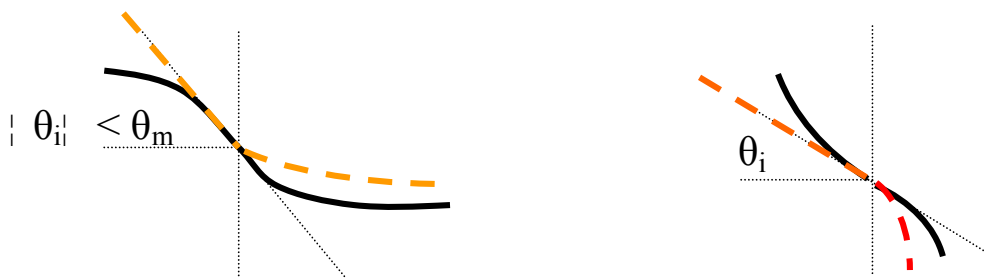


Figure E-28 : Evolution au voisinage d'un point d'inflexion  $|\theta_i| < \theta_m$

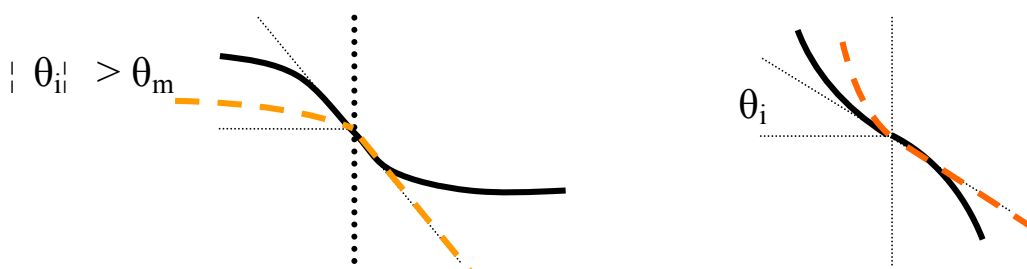


Figure E-29 : Evolution au voisinage d'un point d'inflexion  $|\theta_i| > \theta_m$

#### Segments :

Les surfaces planes vérifient également  $d^2y/dx^2 = 0$ , ce sont donc des surfaces stables. On remarque d'ailleurs que beaucoup de points invariants tendent à faire apparaître des segments à leur voisinage.

### E.IV.3. Etude théorique de l'évolution de surfaces

#### E.IV.3.1. Aspects qualitatifs : Creux, bosses et angle $\theta_m$

Nous nous plaçons maintenant à une échelle supérieure où on peut rencontrer plusieurs points invariants sur une même surface. On a déjà vu qu'au voisinage d'un creux, la surface tend vers un plan horizontal. Si les bords du creux atteignent  $-\theta_m$  ou  $\theta_m$ , on forme un point anguleux au voisinage de ces points.

Au voisinage d'une bosse au contraire, on a tendance à tendre vers une pointe de plus en plus pointue. Là encore, si les angles  $-\theta_m$  ou  $\theta_m$  sont rencontrés au voisinage de la bosse, il y apparaît un point anguleux. Ces comportements correspondent à des évolutions de surface observées expérimentalement (§-E.IV.1).



Figure E-30 : Evolutions d'une bosse et d'un creux rencontrant  $\theta_m$

Ainsi de façon générale, les résultats exposés au paragraphe §-E.IV.2 montrent qu'on tend à former des points anguleux et des segments, on tend à supprimer les bosses et à aplatir le fond des creux. On peut également prévoir que les angles  $\theta_m$  et  $0^\circ$  tendent à apparaître. Ces résultats sont qualitatifs et on verra par la suite que les points anguleux jouent un grand rôle sur l'évolution de la surface. Ces résultats décrivent les angles privilégiés mais ne décrivent pas la cinétique de l'évolution. C'est ce que nous allons voir au paragraphe suivant.

#### E.IV.3.2. Modélisation temporelle de l'évolution de surface

L'étude du sens d'évolution des pentes dans le temps donne des informations qualitatives sur le sens d'évolution des surfaces. Toutefois, on souhaiterait pouvoir prévoir précisément l'évolution des surfaces dans le temps.

Connaissant la fonction en angle du taux d'érosion, il est possible, a priori, par itérations d'érosions discrétisées de calculer l'évolution dans le temps d'une topologie. Or nous avons vu précédemment que l'on a tendance à former de points anguleux. Ces points sont difficilement gérés par un modèle itératif qui devient vite divergent au voisinage des points anguleux. Quelques tentatives de suivi de l'évolution par itération ont abouti à une divergence. Bien que ce problème soit certainement soluble, nous avons préféré une seconde approche.

En effet une autre approche a été entreprise par Barber et al.<sup>76</sup>. Dans ce modèle, on considère des facettes d'angle donné et on suit leur déplacement. Ces facettes sont purement géométriques (une valeur d'angle), mais pas physique : on ne suit pas la matière.

Ainsi Barber étudie la vitesse de déplacement (composantes  $v_x$  et  $v_y$ ) des facettes d'angle constant dans un repère à deux dimensions.

Ainsi la Figure E-31, montre comment on peut suivre la position d'une facette géométrique d'angle  $\theta$  au cours du temps.

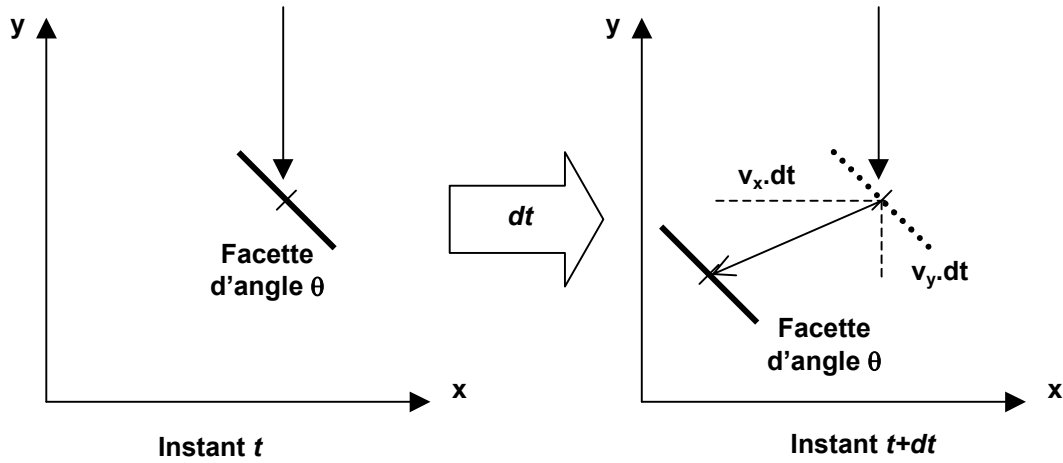


Figure E-31 : Suivi du déplacement des facettes selon Barber.

Les vitesses sont définies comme étant :

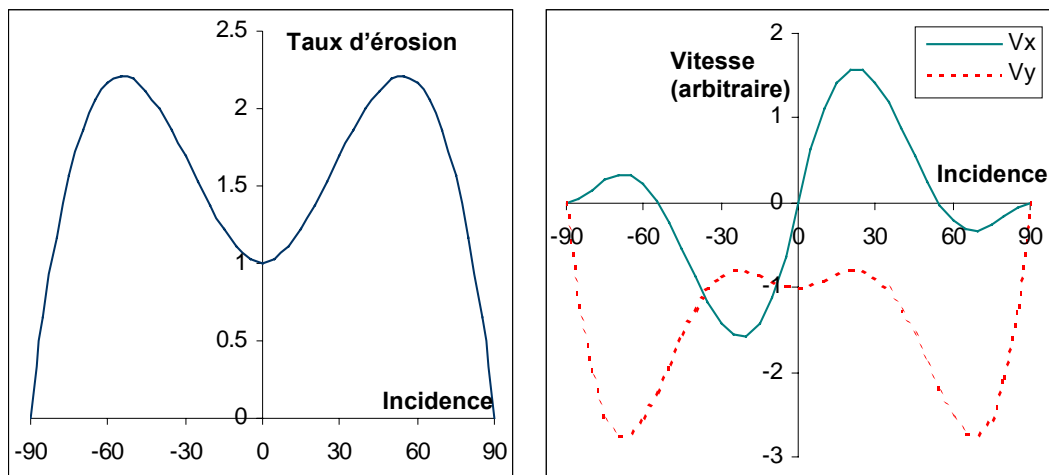
$$v_x = \frac{\left(\frac{d\theta}{dt}\right)_x}{\left(\frac{d\theta}{dx}\right)_t} \quad \text{et} \quad v_y = \frac{\left(\frac{d\theta}{dt}\right)_y}{\left(\frac{d\theta}{dy}\right)_t}$$

Ainsi, pour une érosion d'un matériau de densité  $d$  par une densité de flux  $J$  selon l'angle  $\theta$  avec un taux d'érosion  $Y(\theta)$ , on peut déterminer les deux composantes de la vitesse de déplacement d'une facette:

$$v_x = \frac{J}{d} \frac{dY}{d\theta} \cos^2 \theta$$

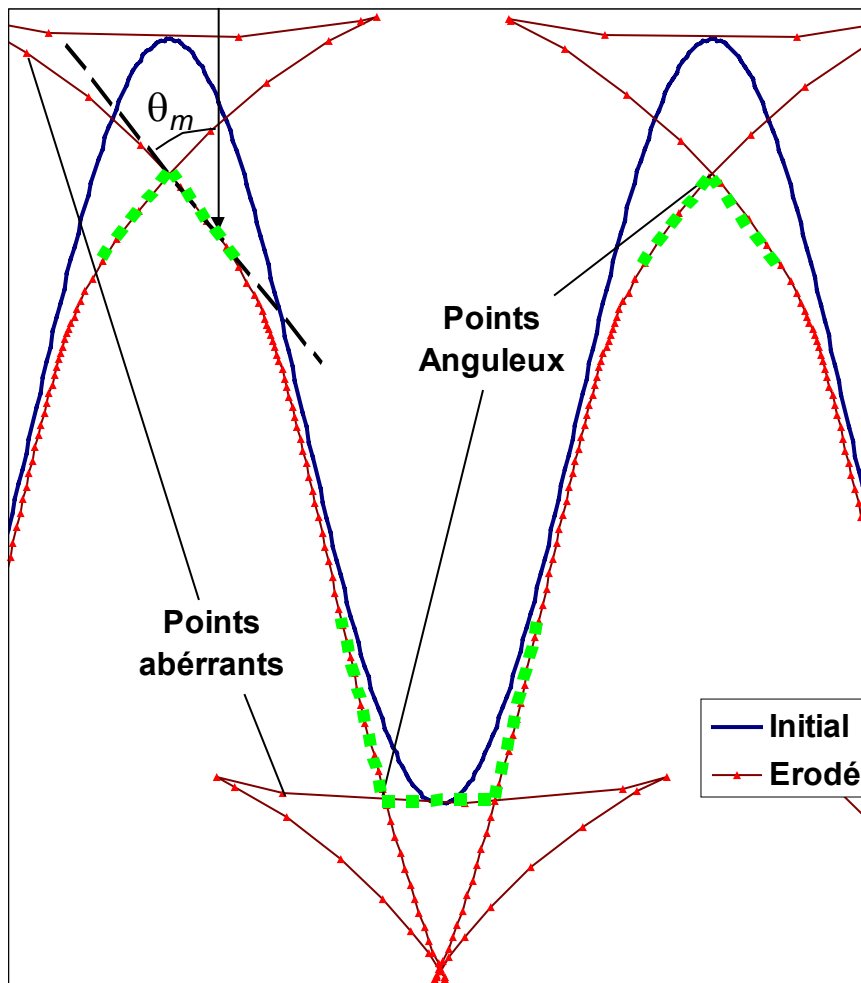
$$v_y = \frac{J}{d} \left( \frac{dY}{d\theta} \sin \theta \cos \theta - Y \right)$$

A titre d'exemple pour un taux d'érosion arbitraire décrit à la Figure E-32, on peut déduire les vitesses  $v_x$  et  $v_y$  des facettes conservant leur angle.



**Figure E-32 : Fonction du taux d'érosion en fonction de l'angle arbitraire et vitesses de déplacement des angles**

A partir d'une surface initiale, on peut donc calculer la surface à tout instant pendant l'érosion. La Figure E-33 montre l'évolution dans le temps d'une surface sinusoïdale. Une surface initiale sinusoïdale (traits pleins bleus) se transforme à cause de l'érosion en une nouvelle surface (trait fin avec points rouges). Cette seconde surface a été translaturée de l'équivalent de l'érosion à incidence normale, de telle façon que le point de pente nulle au fond du creux n'est pas déplacé. Des points aberrants sont créés quand des facettes passent derrière d'autres. Ces points ne doivent pas être considérés. Nous avons mis en évidence en pointillés les formes caractéristiques apparaissant. Comme prévu au paragraphe §-E.IV.3.1 on forme des surfaces qui tendent à s'aplanir et qui sont délimitées par des points anguleux. On retrouve les motifs prévus à la Figure E-30, ainsi que l'apparition de façon privilégiée des angles  $0^\circ$  et  $\theta_m$ .



**Figure E-33 : Evolution d'une sinusoïde prévue par le modèle de Barber**

On vérifie bien que les comportements prévus par un raisonnement qualitatif sont vérifiés par cette simulation. Cependant, ce modèle donne une surface finale à partir d'une surface initiale et du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence. Or, on ne connaît généralement pas cette fonction. Le raisonnement qualitatif au contraire permet de donner des résultats généraux. Ce sont donc deux approches complémentaires.

*Remarque :* L'étude des surface selon la méthode de Barber montre de façon évidente que la différence de taux d'érosion pour des incidences différentes ne permet pas de faire croître la rugosité en angles. En effet, à tout instant, on retrouve les angles du relief initial qui ne sont que déplacés. Certains angles peuvent être perdus, mais aucun ne peut être créé.

#### **E.IV.4. Evolution de la surface**

Les études qualitatives ainsi que les études par l'approche de Barber sont cohérentes et indiquent que l'on tend à former des points anguleux et des segments. Ainsi, la forme de la surface est régie par les évolutions au niveau des points anguleux.

On vient de voir que l'approche de Barber induit automatiquement que la rugosité ne peut pas croître en angle. On peut voir en Annexe c. que l'étude approfondie de l'évolution

des points anguleux prédit que la rugosité finit toujours par diminuer si on ne prend en compte que la fonction du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence.

*Remarque* : L'approche qualitative et l'approche selon Barber sont complémentaires. En effet, le raisonnement qualitatif est valable quelle que soit la surface initiale et la loi de variation du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence. Elle permet donc des démonstrations. Au contraire, le modèle de Barber nécessite une surface initiale et une loi de variation du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence. Il permet donc de visualiser l'évolution des surfaces et confirmer et quantifier les prévisions qualitatives. Par contre il ne produit pas de résultats universels : Il ne démontre pas.

Pour conclure, si on se contente d'expliquer l'évolution d'une surface par des variations de taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence, on aboutit aux conclusions suivantes :

- Les reliefs formés de bosses et de creux sont très instables (Annexe c.)
- On tend vers la formation de segments et de points anguleux
- On ne peut pas augmenter la rugosité
- Les angles privilégiés sont  $0^\circ$  et  $\theta_m$
- La rugosité finit toujours par disparaître

Ces conclusions contredisent en partie les observations expérimentales. En effet, on a observé dans certaines conditions une augmentation de la rugosité. En particulier dans le cas du Kapton érodé sous incidence  $60^\circ$ , on observe un accroissement de la rugosité. N'ayant pas à notre disposition une courbe précise du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence dans le cas du Kapton, il est difficile d'interpréter les profils d'érosion. On observe toutefois que l'angle  $0^\circ$  et un angle entre  $70$  et  $80^\circ$  semblent se former de façon privilégiée. Ce second angle pourrait être  $\theta_m$ .

Par contre, il est intéressant d'observer que la rugosité ne se développe pas dans le cas d'une érosion à incidence normale. Cela confirme les observations d'une forte instabilité de la rugosité à incidence normale.

Si la fonction  $Y(\theta)$  tend à limiter la rugosité (lentement dans certains cas) et que l'on observe tout de même une croissance de la rugosité, on peut supposer qu'il existe un autre phénomène moteur qui permet à la rugosité de croître. Ainsi dans le cas d'une érosion à incidence normale, la rugosité se traduisant automatiquement par des creux et des bosses : formes extrêmement instables, l'atténuation de rugosité due à la fonction  $Y(\theta)$  l'emporterait alors sur la force motrice.

#### **E.IV.5. Sources d'instabilité de la surface**

Le raisonnement sur le taux d'érosion en fonction de l'angle permet de prévoir les surfaces privilégiées, mais ne permet pas de prévoir la croissance de la rugosité. Pourtant l'apparition d'une rugosité est une réalité expérimentale. Il faut donc proposer une, voire plusieurs origines pour l'instabilité de la surface.

Ainsi nous verrons que la théorie de Bradley et Harper est une théorie reconnue et vérifiée qui permet d'expliquer la formation de rugosité au cours d'un bombardement ionique. Toutefois, cette théorie est basée sur l'hypothèse d'une cascade de collisions étendue. Or nous avons vu au chapitre §-D.VII.1.6 qu'à incidence oblique et à faible énergie, ce sont les premiers chocs qui régissent l'érosion.



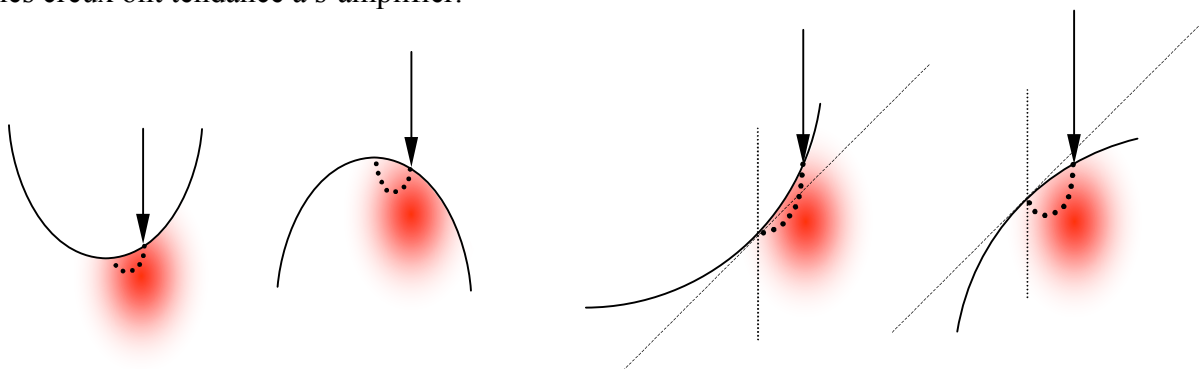
Nous avons alors proposé une autre interprétation basée sur les différences de concentrations d'ions implantés dans la cible en fonction de la courbure de la surface.

Enfin, par souci de simplicité, nous avons dans un premier temps émis l'hypothèse que les produits d'érosion ne recontaminent pas la cible. Cette hypothèse est très forte étant donné que les lobes d'émission peuvent être rasants à basse énergie (§-D.III). Nous allons voir que la contamination peut expliquer la formation de la rugosité.

*Remarque* : Il faut tout de même remarquer que les études qui ont été réalisées sur l'influence de la fonction  $Y(\theta)$  sur la rugosité ont été effectuées pour une surface parfaite. Ainsi, dans l'Annexe d. on considère au contraire des surfaces contenant des irrégularités. Alors dans certains cas particuliers, les irrégularités de la surface tendent à s'accumuler et accroître la rugosité. Toutefois, dans le cas général, ce phénomène ne semble pas expliquer de façon satisfaisante la croissance de la rugosité.

### **E.IV.5.1. Influence de la courbure**

Le raisonnement sur le taux d'érosion en fonction de l'angle permet de prévoir les surfaces privilégiées, mais permet difficilement de prévoir la croissance de la rugosité. Pourtant l'apparition d'une rugosité est un phénomène connu. Son apparition peut être expliquée de plusieurs façons. Pour cela, il ne faut pas simplement tenir compte de l'angle pour déduire l'érosion, mais également tenir compte de la courbure. En effet l'érosion n'est pas un phénomène ponctuel. La vitesse d'érosion en un point donné est la conséquence de matière arrachée à la cible en ce point à cause de cascades de collisions engendrées par des ions impactant la cible au voisinage de ce point. Pour étudier l'érosion, on ne peut donc pas se contenter de la forme de la surface au point étudié, mais il faut tenir compte de toute la zone voisine qui est susceptible de produire de l'érosion au point considéré. La théorie de Bradley et Harper<sup>77</sup> plus connue sous le nom de théorie BH permet alors d'expliquer la formation d'une rugosité formant des rides. En effet, dans un creux, le voisinage d'un point participe plus à son érosion que le voisinage d'un point situé dans sur bosse. De même dans le cas général (cela dépend en réalité de la forme de la cascade de collisions) l'érosion est plus importante dans les zones concaves que dans les zones convexes. La Figure E-34 illustre ce phénomène. Le domaine de la cascade de collisions engendrée par un ion au voisinage du point étudié (creux, bosse, concavité et convexité) est représenté en rouge, ainsi qu'une trajectoire d'ion (en pointillés) participant à l'érosion au point étudié. On voit alors que les trajectoires d'ions voisins du point étudié et participant à l'érosion sont plus probables pour les formes concaves. Il en résulte une différence d'érosion qui induit une instabilité puisque les creux ont tendance à s'amplifier.



**Figure E-34 : Participation à l'érosion par un ion au voisinage d'un creux, d'une bosse, d'une zone concave et d'une zone convexe.**

L'utilisation de cette théorie nécessite de bien connaître la forme de la cascade de collision au sein de la cible<sup>78</sup>. Un terme de diffusion de surface joue le rôle inverse et tend à lisser la surface. C'est cette diffusion qui permet d'expliquer la croissance en amplitude d'une rugosité sous forme de rides.

Cette théorie a été vérifiée sur de multiples exemples (sur le graphite<sup>79</sup>, sur le verre<sup>80</sup>, sur l'argent<sup>81</sup>) et elle est bien acceptée même si elle est toujours l'objet de perfectionnement<sup>78, 82</sup>.

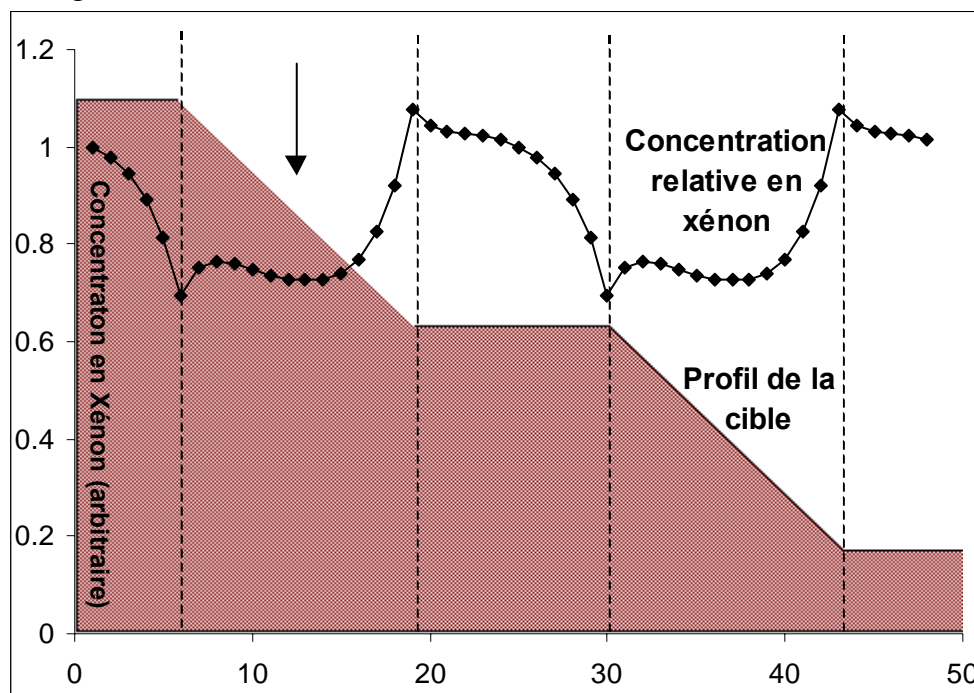
Toutefois la littérature précise également que cet effet de rugosité due à l'influence de la courbure sur le taux d'érosion n'est effective qu'au-delà de 500eV car en dessous les cascades de collisions ne sont pas assez développées<sup>82</sup>. De plus l'accroissement de la rugosité en amplitude fait apparaître un terme de diffusion de surface. Un tel terme n'existe a priori pas dans le cas d'un polymère puisque les liaisons sont covalentes.

### **E.IV.5.2. Effet de la concentration en xénon**

Des simulations par CSiPI ainsi que des expériences montrent que la concentration en xénon implanté influe sur le taux d'érosion. Ce sujet sera traité en détail dans le paragraphe §-E.V.2.3 à venir. Ainsi, plus la concentration en ions implantés est importante plus le taux d'érosion est important. Or des simulations qualitatives prenant en compte les phénomènes d'implantation et de diffusion des ions implantés montrent que dans le cas d'un matériau rugueux, des hétérogénéités de concentration en xénon implanté apparaissent en surface du matériau.

La Figure E-35 permet d'illustrer qualitativement ce phénomène dans le cas d'une incidence globale de 30° formée de facettes d'incidence 0° et 45° en présence de diffusion.

Ainsi les creux présentent une concentration en ions implantés accrue alors que les bosses présentent une plus faible concentration. Par conséquent, l'érosion est plus importante dans les creux et est plus faible au niveau des bosses. C'est donc un effet divergent qui tend à accroître la rugosité.



**Figure E-35 : Concentration en xénon en surface d'un échantillon rugueux (incidence 30°)**

Ce mécanisme peut donc produire une divergence de la rugosité. Toutefois, une étude approfondie serait nécessaire pour le confirmer.

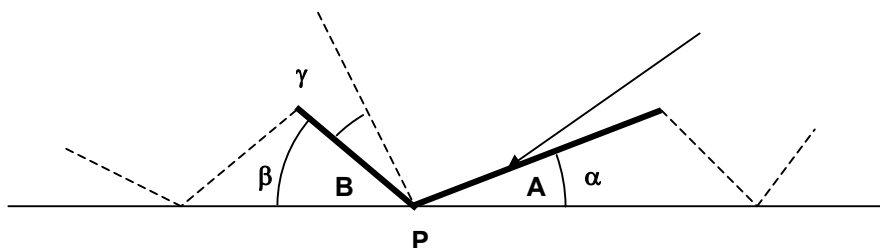
*Remarque :* Nous avons vu que la diffusion du xénon dans la cible est nécessaire pour expliquer une croissance de la rugosité. Or la littérature relate une croissance de la rugosité similaire dans le cas du bombardement ionique de métaux par du mercure à  $500\text{eV}^{21,83}$ . Dans ces cas, il est indispensable d'expliquer la croissance de la rugosité par un autre mécanisme.

### **E.IV.5.3. Effet de la contamination sur la rugosité**

Jusque là nous avons fait l'hypothèse que les produits d'érosion ne se déposent pas sur la rugosité. Or, plus une cible présente de la rugosité importante, plus la probabilité pour que des produits d'érosion atteignent une irrégularité de surface voisine est grande. Comme on l'a déjà évoqué (§-E.III.1), ce sont principalement les produits d'érosion issus des facettes provoquant une incidence locale supérieure à l'incidence locale qui sont susceptibles de provoquer de la contamination.

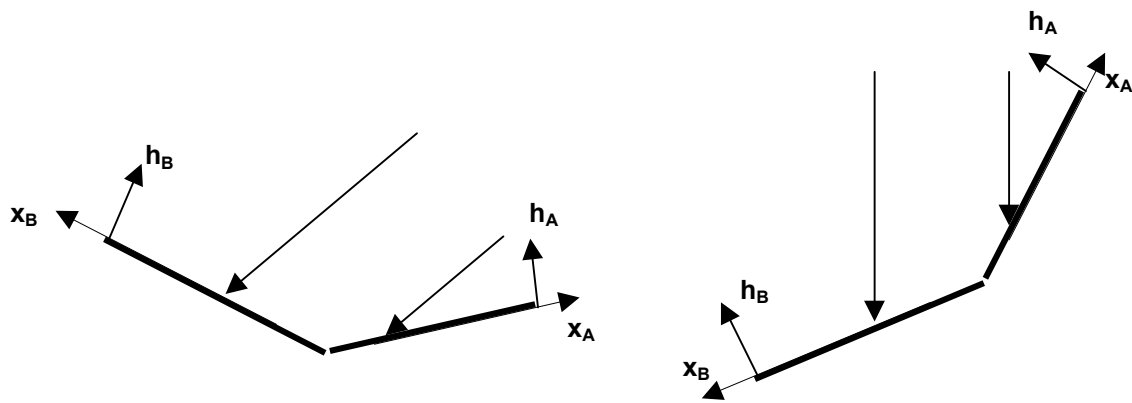
#### **E.IV.5.3.1. Croissance de la rugosité en angle**

Pour illustrer ce phénomène, nous pouvons considérer deux facettes successives de la rugosité, une de plus forte incidence que l'incidence globale notée A, et une de plus faible incidence notée B.



**Figure E-36 : Surface rugueuse ; description des angles**

L'érosion de la facette A peut se déposer sur la facette B. L'épaisseur de contamination  $dh_B$  (Figure E-37) en un temps  $dt$  dépend de la position  $x_B$  sur la facette B. Ainsi, à priori, si on considère une facette B initialement plane, la contamination a peu de chance de conserver la planéité de la facette. Cette planéité est conservée dans le cas simple où  $dh_B/x_B$  est constant sur toute la facette. On provoque alors une augmentation de l'angle  $\beta$ . Ce cas simple est qualitativement envisageable puisque l'émission tend vers zéro quand la direction d'émission tend vers  $90^\circ$  (à cause de l'énergie de surface et des chocs hors de la cible), par conséquent  $dh/dt(0) = 0$ . Quand l'angle diminue, l'émission croît jusqu'au maximum d'émission. De façon générale, on produit des angles locaux supérieurs à l'angle initial tant que  $dh/dt(x)$  est croissant.



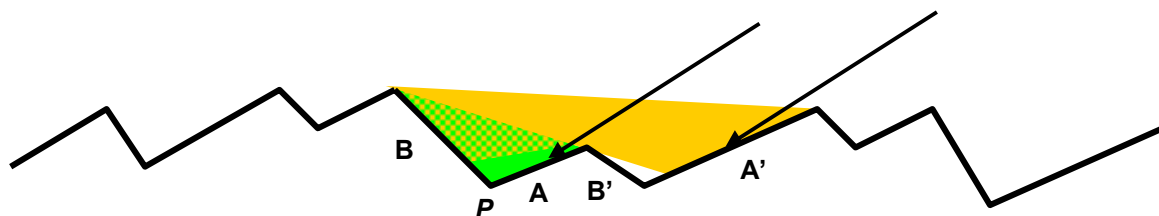
**Figure E-37 : Descriptions des surfaces de la rugosité se contaminant mutuellement**

Mais l'érosion est concurrente de la contamination. Or on l'a déjà vu, l'érosion favorise certains angles. Ainsi, l'augmentation de l'angle  $\beta$  se poursuit a priori jusqu'à l'angle d'incidence local stable de  $0^\circ$ .

La facette B contamine également la facette A, pour les mêmes raisons on tend donc a priori vers l'angle local de taux d'érosion maximum  $\theta_m$  pour la facette A.

#### **E.IV.5.3.2. Croissance en amplitude**

Nous venons de voir qualitativement que la contamination provoque un accroissement des angles de la rugosité. Mais expérimentalement nous observons également que la rugosité augmente en amplitude. Cette croissance de l'amplitude peut également s'expliquer par la contamination. En effet les aspérités de la cible les plus élevées collectent une plus grande quantité de contaminants puisqu'elles ne sont pas uniquement en regard avec les facettes voisines, mais également avec des facettes plus éloignées. Ainsi à la Figure E-38, on voit que la facette B reçoit des contaminants des facettes A et A' alors que la facette B' ne reçoit que des contaminants de A'. C'est un effet divergent qui fait que les plus grandes irrégularités de surface croissent plus vite que les plus faibles. De plus, concernant les facettes tendant vers une incidence normale, plus elles sont contaminées, plus leur angle croit vite donc plus leur taux d'érosion diminue. Il s'agit encore d'un phénomène divergent. La croissance de l'angle  $\beta$  est également favorisée par le fait que la contamination venant de facettes éloignées se fait préférentiellement sur les parties de la facette B éloignée du point P.



**Figure E-38 : Contamination de la facette B par A et A'**

### E.IV.5.3.3. Simulation de la contamination

Nous avons étudié la contamination dans le cas de deux facettes A et B comme défini à la Figure E-36. Pour cette étude, nous avons fixé l'incidence globale à  $60^\circ$ ,  $\alpha$  à  $10^\circ$  et  $\beta$  à  $40^\circ$ . Nous avons alors simulé le lobe d'émission dans le cas d'une cible de carbone de densité 1.4 (pour se rapprocher d'une cible de Kapton) érodée sous incidence  $70^\circ$  par des ions  $\text{Xe}^+$  à 300eV. Nous obtenons alors le lobe d'émission représenté à la Figure E-39.

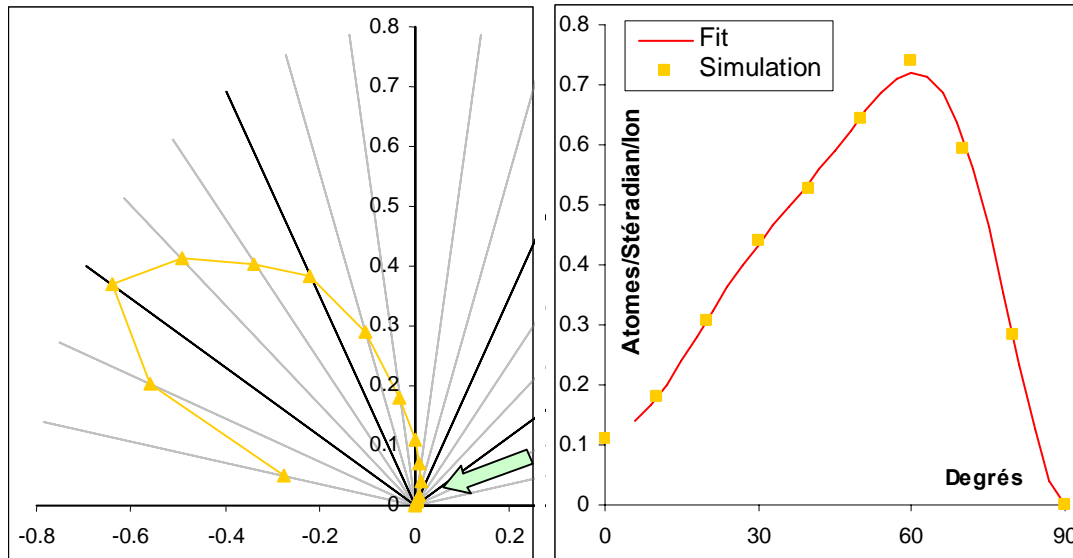
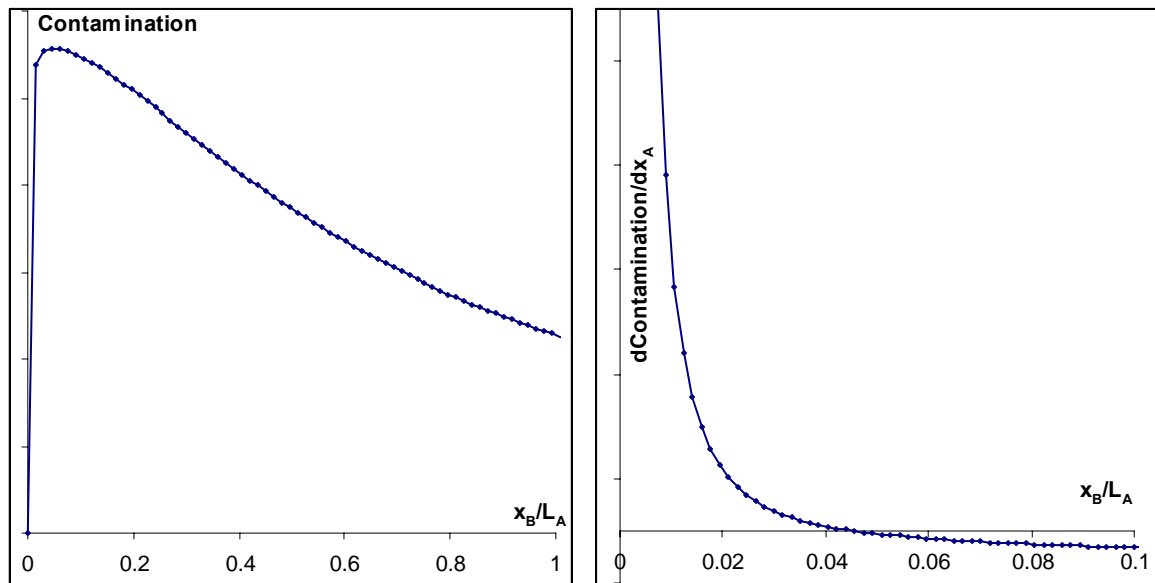


Figure E-39 : Lobe d'émission de carbone (densité 1.5) bombardé par du xénon à 300eV sous incidence  $70^\circ$

En utilisant cette fonction de contamination dans le plan, on a calculé l'épaisseur de contamination sur la facette B due à l'érosion de la facette A. Les résultats de ce calcul sont présentés à la Figure E-40. On y observe que la contamination est nulle au point P et qu'elle croît vite jusqu'à un maximum pour  $x_B$  critique tel que  $x_{critique} = 0.045L_A$ , où  $L_A$  est la longueur de la facette A. Cela veut dire que l'angle est augmenté au voisinage du point P puis diminue à partir de  $x_{critique}$ . On favorise donc l'accroissement de la rugosité en angle uniquement au voisinage du point P. On remarque que cette faible valeur de  $x_{critique}$  est exagérément faible à cause de l'utilisation d'un modèle 2D. Dans ce modèle, l'érosion de A proche du point P a un fort poids sur la contamination. Or ces points contaminent près du point P. Si on prend en considération les points de la facette A hors du plan d'incidence, on doit s'attendre à une augmentation de  $x_{critique}$ .



**Figure E-40 : Epaisseur de contamination sur la facette B et dérivée de la contamination par rapport à la position**

Dans le cas où la contamination peut provenir de facettes éloignées, la contamination pour les grandes valeurs de  $x_B/L_A$  est favorisée ce qui permettrait de produire un accroissement de l'angle sur une plus grande partie du segment B. Ainsi on peut faire augmenter la rugosité à la fois en angle et en amplitude.

#### **E.IV.5.3.4. Littérature**

La croissance de la rugosité dans la littérature est souvent observée et rarement expliquée. Mais en général elle est expliquée par la théorie BH qui nous l'avons déjà dit ne s'applique pas au cas que nous avons observé expérimentalement. Toutefois, on peut citer quelques références dans des conditions similaires aux nôtres. Ainsi Netcheva et al.<sup>84</sup> ont étudié le bombardement de polystyrène par du xénon (1 à 4keV), alors que Malherbe et al.<sup>85</sup> ont étudié le bombardement ionique de InP par de l'argon de 500 à 5000eV. Ces deux travaux, l'un avec une cible organique et l'autre avec une cible inorganique montrent une croissance de la rugosité plus rapide à basse énergie. Dans un autre papier, Malherbe et al.<sup>86</sup> indique pour le bombardement de InP par  $N_2^+$  que la vitesse de croissance de la rugosité ne correspond à la théorie BH.

Ces observations abondent dans le sens d'une croissance de la rugosité par autocontamination. En effet, les lobes d'émission à basse énergie sont plus rasants (§-D.III) et les produits d'érosion sont moins énergétiques. Alors la probabilité d'autocontamination est accrue donc la rugosité se développe plus rapidement.

#### **E.IV.5.3.5. Conclusion**

Nous avons vu que dans le cas de surfaces rugueuses, les produits d'érosion de certaines facettes de la rugosité sont susceptibles de se déposer sur d'autres facettes. Cette contamination peut a priori provoquer une augmentation des angles de la rugosité ainsi qu'une augmentation de la taille de la rugosité. En étudiant un cas particulier de contamination d'une facette de la surface par une facette voisine, nous nous sommes aperçus que l'augmentation

d'angle ne s'effectue que sur un faible domaine et explique donc difficilement la croissance de la rugosité.

Par contre la prise en compte de l'hétérogénéité de la rugosité permet très bien d'expliquer la croissance de la rugosité. En effet, dans ce cas, plus les aspérités sont hautes plus elles reçoivent une contamination par un grand nombre de facettes. On explique ainsi une croissance de la rugosité en angles et en taille.

Ainsi, la contamination des facettes de la surface par d'autres semble susceptible de provoquer l'évolution de la rugosité, mais une simulation tenant compte simultanément de la contamination et de l'érosion est nécessaire pour confirmer définitivement ce mécanisme de croissance de la rugosité par autocontamination.

## **E.IV.6. Conclusion**

Suite à des observations expérimentales de croissance de la rugosité d'échantillons de Kapton ayant subi un bombardement ionique par des ions  $\text{Xe}^+$  à 300eV sous incidence  $60^\circ$ , nous avons essayé d'expliquer cette croissance de la rugosité.

Un modèle simple ne tenant compte que de la relation entre érosion et angle d'incidence des ions ne permet pas à lui seul d'expliquer la croissance de la rugosité. Toutefois, il permet de prévoir l'évolution de surface élémentaire et de prévoir des angles privilégiés par l'érosion qui sont  $0^\circ$  et l'angle d'érosion maximale ainsi que  $90^\circ$ .

Nous avons toutefois montré qualitativement qu'il existait des phénomènes susceptibles d'expliquer une croissance de la rugosité. L'effet de l'implantation de xénon, et surtout la contamination de facettes de la rugosité par des facettes voisines semblent pouvoir expliquer la formation de la rugosité. Des simulations numériques détaillées sont nécessaires pour valider ces hypothèses.

## **E.V. Evolution de la cible durant la pulvérisation ionique**

Toute la difficulté d'étudier des cibles polyatomiques est que leur stoechiométrie est modifiée par la pulvérisation<sup>87</sup>. En effet certains atomes sont érodés préférentiellement par rapport à d'autres. Il en est de même pour la nature des liaisons chimiques dans la cible. En effet, l'érosion ionique provoque des ruptures de liaisons qui sont susceptibles de se recombinaison, modifiant ainsi la nature chimique de la surface<sup>88</sup>. Dans le cas du Kapton par exemple, on peut observer un fort enrichissement en carbone en surface<sup>89</sup>. Ainsi, les paramètres importants de l'érosion qui sont les énergies de liaison et de surface évoluent durant l'érosion ionique. Par conséquent l'érosion ionique devrait être étudiée de façon dynamique.

En réalité, même dans le cas de cibles monoatomiques, des ions sont implantés dans la cible. Comme nous le verrons, ces ions peuvent modifier considérablement la nature de la surface de la cible d'érosion et modifier les cascades de collisions. Par conséquent, le taux d'érosion et l'émission sont sensibles à l'implantation des ions.

En particulier, nous avons observé expérimentalement l'effet de l'implantation de xénon à 600eV dans le cas de l'érosion de Kapton sous incidence normale. Cette étude a été effectuée par mesures par spectrométrie de masse ainsi que par suivi de masse par microbalances.

### **E.V.1. Effet d'un échelon de courant : observations expérimentales**

Nous avons voulu étudier l'émission par spectrométrie de masse (Annexe b.) des produits d'érosion du Kapton soumis à un flux d'ions variable<sup>90</sup>. On rappelle que dans le cas de l'aluminium nous avons observé une réponse linéaire (§-C.V.2.2.4). Pour le Kapton nous avons étudié l'émission de la masse 24 dans la direction 75° avec le spectromètre de masse. La masse 24 a l'avantage de n'avoir pratiquement aucun signal autre que le signal émis directement dans la direction du spectromètre de masse. Ainsi le signal mesuré est quasi nul quand le diaphragme est obturé et le signal mesuré avec le diaphragme ouvert correspond pratiquement au signal dû aux molécules émises de la cible directement vers le spectromètre de masse (Annexe b).

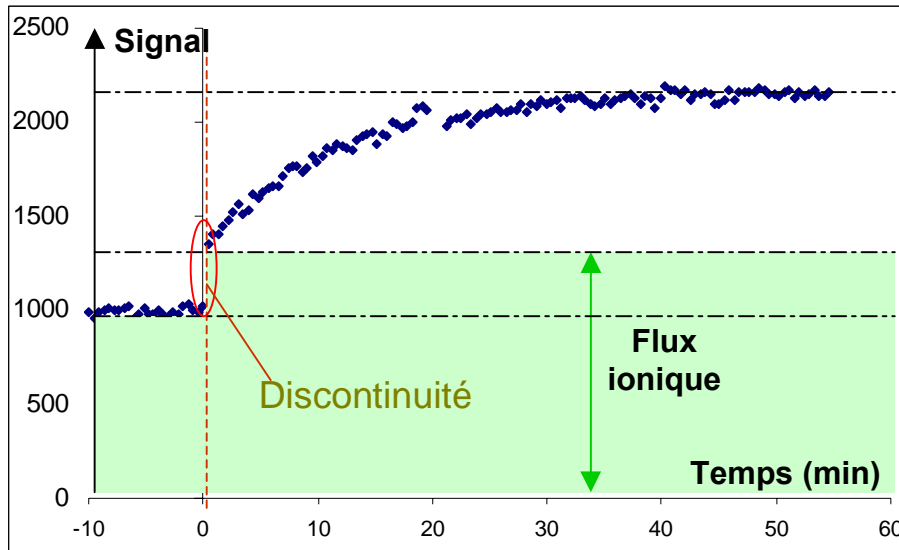
La masse 24 offre donc une meilleure lisibilité en temps réel des évolutions de l'émission. Toutefois, les résultats exposés sont la soustraction du signal avec le diaphragme ouvert moins le signal avec le diaphragme fermé.

Nous avons alors observé expérimentalement que la linéarité entre le flux d'ions reçu par la cible et le signal mesuré par le spectromètre de masse n'existe pas. Ce phénomène est mis en évidence par l'application d'un échelon de courant à la cible de Kapton et est illustré par la Figure E-41 qui montre le signal mesuré pour la masse 24 au cours du temps quand on applique un brusque échelon de courant.

En effet, à courant constant on observe un signal constant (début du graphique). Puis, au temps 0, on augmente brusquement le flux d'ions Xe<sup>+</sup> reçus par la cible, passant de 18.5 à 24μA/cm<sup>2</sup>. Instantanément le signal mesuré par le spectromètre de masse augmente dans les mêmes proportions que le courant et ensuite continue à croître pendant plusieurs minutes.

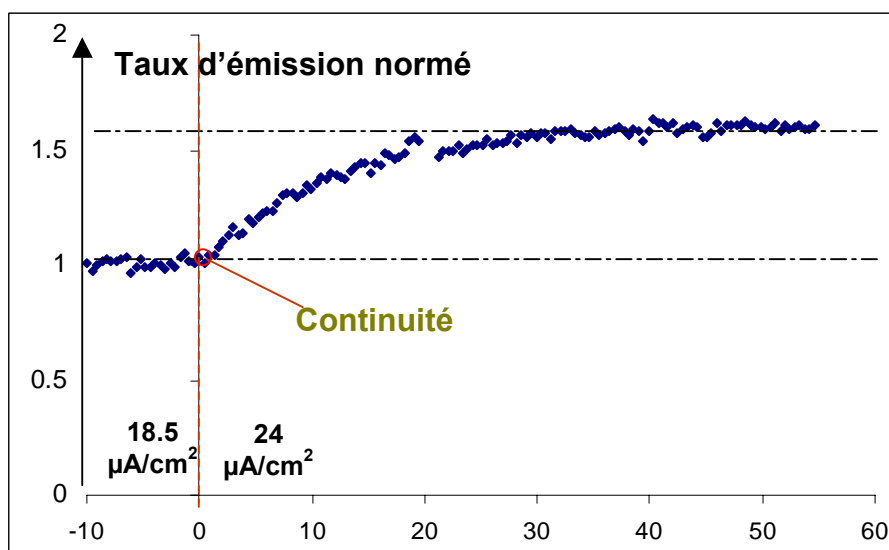


Quand on effectue une variation de courant dans le sens inverse, on a l'effet opposé : le signal décroît instantanément dans les mêmes proportions que le courant, puis retrouve lentement la valeur qu'il avait avant le créneau de courant.



**Figure E-41 : Effet d'un échelon de courant d'ions érodants sur le signal mesuré par spectrométrie de masse sur la masse 24**

Si on s'intéresse non plus au signal direct, mais au taux d'émission relatif représenté au cours du temps par la Figure E-42 (signal divisé par le courant d'ions et normé à 1 pour le courant initial), on s'aperçoit que le taux d'émission dépend du flux d'ions érodants. Le taux d'émission est le produit du taux d'érosion et de la fonction d'émission. Ainsi une variation du taux d'émission traduit soit une variation du taux d'érosion, soit une variation de la fonction d'émission soit les deux. Du fait des très fortes variations de taux d'émission mesurées, il semble très probable que le taux d'érosion ne reste pas fixe. Des expériences complémentaires doivent le confirmer.



**Figure E-42 : Taux d'émission relatif de la masse 24 suite à un échelon de courant**

On observe une continuité dans le taux d'émission cette continuité laisse penser que les variations de taux d'émission sont liées à des variations des propriétés de la cible (qui sont continues) et non pas à un simple effet de flux (qui serait immédiat).

L'expérience du créneau de courant a été réalisée pour divers flux de  $Xe^+$ . On observe alors que le taux d'émission dépend fortement du flux d'ions érodants. A faible courant, le taux d'émission semble tendre vers 0 alors qu'à partir de  $40\mu A/cm^2$ , on semble atteindre un pallier. La Figure E-43 montre les résultats bruts de l'émission pour plusieurs marches de courant successives (le flux d'ions est indiqué en  $\mu A/cm^2$  pour chaque série). La Figure E-44 présente les taux d'émission correspondant aux mesures de la série présentée à la Figure E-43 (losanges bleus foncés) et complétés par une seconde série. Nous avons obtenu d'autre part des résultats similaires avec la masse 12.

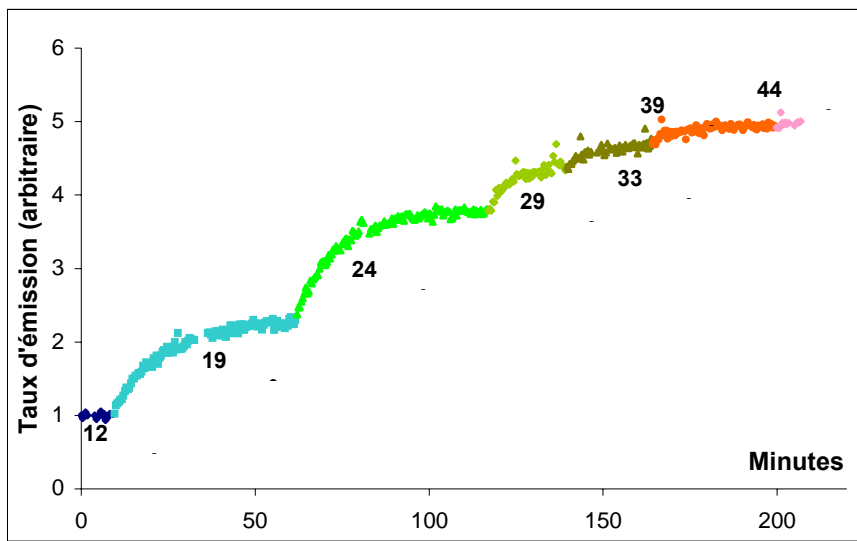


Figure E-43 : Taux d'émission mesuré suite à différents échelons de courant

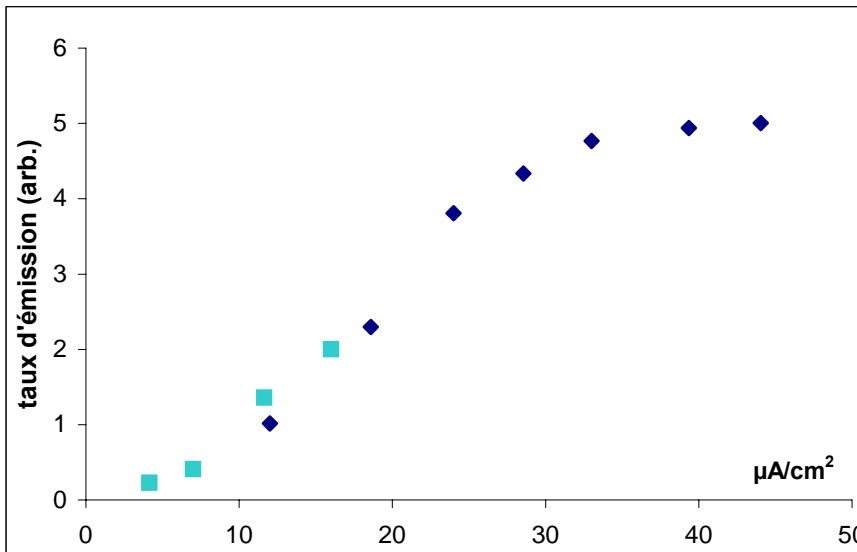


Figure E-44 : Taux d'émission en fonction du courant

On observe des variations de taux d'émission très importantes. En effet ce dernier chute pratiquement à 0 pour un flux nul. A priori, on ne peut pas déterminer si ce taux d'émission est due à une variation du taux d'érosion ou à une variation de la forme du lobe d'émission.

Ce genre d'observations est cohérent par rapport à des simulations numériques d'Eckstein<sup>91</sup> ou Zuhr<sup>92</sup> avec TRIDYN et des expérimentations<sup>59</sup> étudiant l'influence de l'implantation d'ions lourds dans des cibles légères. On remarque tout de même que l'expérience et la simulation qui tout deux prévoient un accroissement de la pulvérisation ionique pendant l'implantation d'ions lourds (W) dans une cible légère (C) ne produisent pas rigoureusement des résultats identiques.

Par la suite nous allons nous intéresser à l'interprétation de ces résultats.

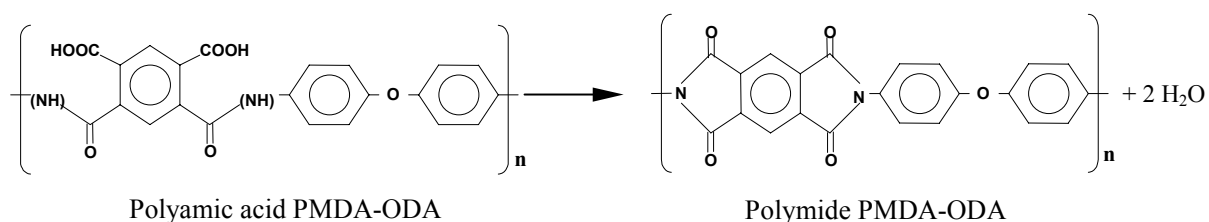
## E.V.2. Interprétations

Nous interprétons ces résultats comme la conséquence de l'influence du xénon implanté sur la cible. En effet, le taux d'érosion d'un matériau dépend de certains paramètres tels la masse, le numéro atomique, l'énergie de liaison des atomes de la cible, ainsi que la barrière de potentiel de surface. Au fur et à mesure de l'érosion, des ions xénon s'implantent dans la cible. Le matériau cible se modifie en s'enrichissant en xénon. On explique alors la continuité du taux d'érosion puisque la quantité de xénon implanté est continue.

### E.V.2.1. Mise en évidence de l'implantation du xénon dans le Kapton

L'implantation de xénon dans la cible de Kapton durant un bombardement ionique peut être mise en évidence en suivant l'érosion d'un dépôt de Kapton sur QCM. Pour cela on utilise le montage décrit au §-C.IV.1.3. Mais dans ce cas, le dépôt est un film de polyimide de la même formule que le Kapton.

Pour cela on dépose sur la microbalance à quartz un film d'un prépolymère par spin coating que l'on déshydrate par traitement thermique<sup>93</sup> comme indiqué par la Figure E-45.

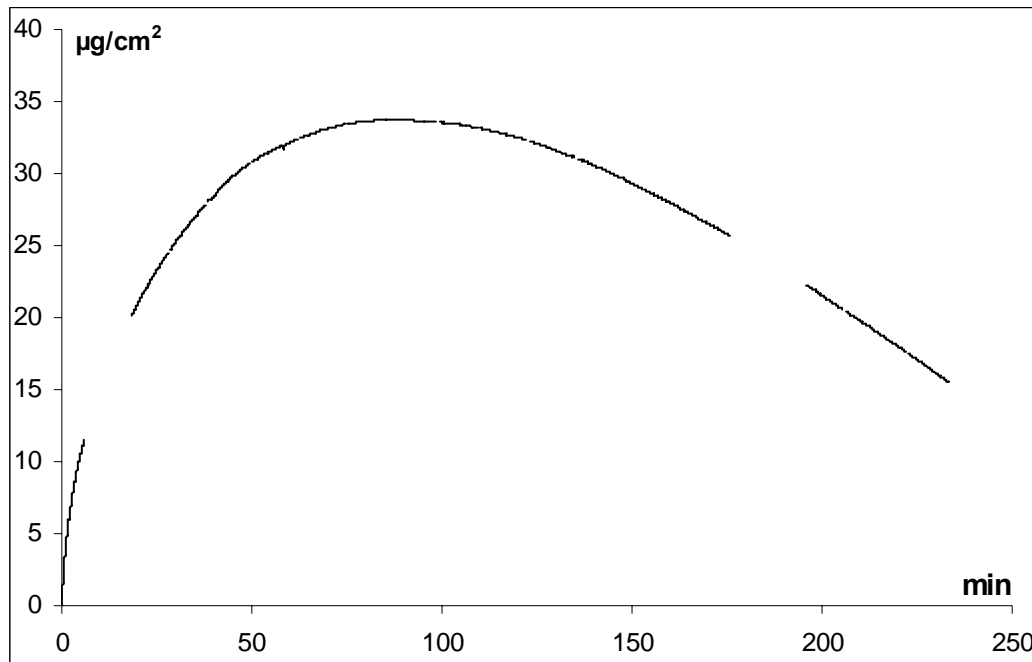


**Figure E-45 : Formation de Polyimide PMDA-ODA (de même nature que le Kapton) à partir d'acide Polyamic PMDA-ODA**

La Figure E-46 permet d'observer la masse du dépôt de polyimide soumis à un bombardement ionique de  $70\mu\text{A}/\text{cm}^2$  de  $\text{Xe}^+$  à 600eV . On observe alors initialement une prise de masse de plus en plus lente. Puis la masse se stabilise et décroît. Nous interprétons la prise de masse comme une implantation de xénon dans le film de polymère. Du fait de l'implantation de xénon, la cible s'enrichit en xénon. On atteint ainsi un régime permanent

pour lequel la quantité de xénon implanté est constante. Nous reviendrons en détail sur la concentration d'équilibre en xénon, mais on peut d'ores et déjà considérer que l'érosion du xénon par le xénon et sa désorption (autorisée par de la diffusion) sont les phénomènes qui permettent une stabilisation de la quantité de xénon implanté.

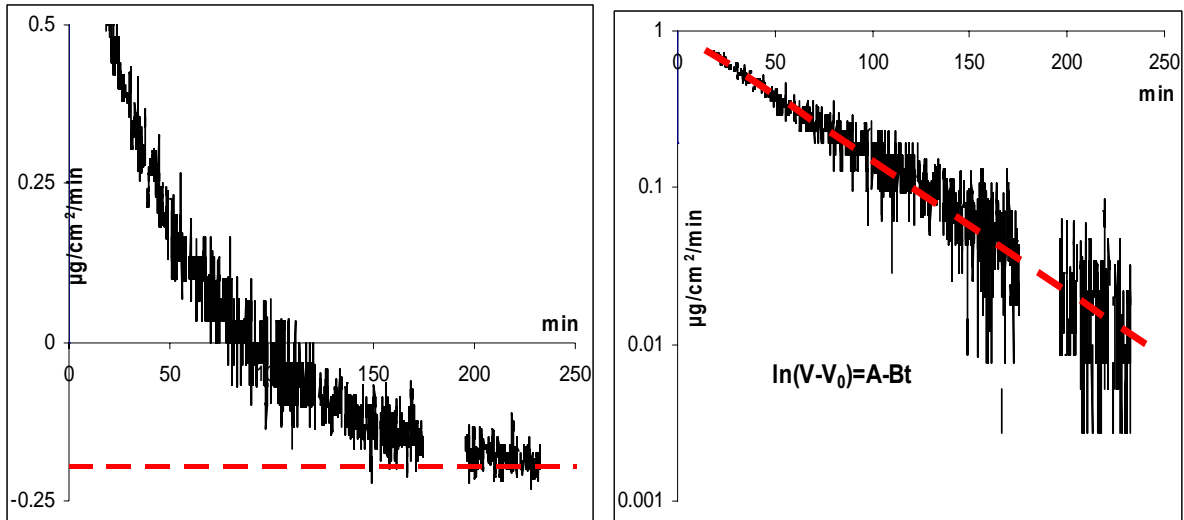
Quand la quantité de xénon implantée est constante, on n'observe plus que l'érosion de la cible de Kapton. Cela explique que la variation de masse devienne négative au bout d'un certain temps.



**Figure E-46 : Masse d'une cible de Polyimide déposée sur une QCM et exposée au bombardement ionique de  $70\mu\text{A}/\text{cm}^2$  d'ion  $\text{Xe}^+$  à  $600\text{eV}$**

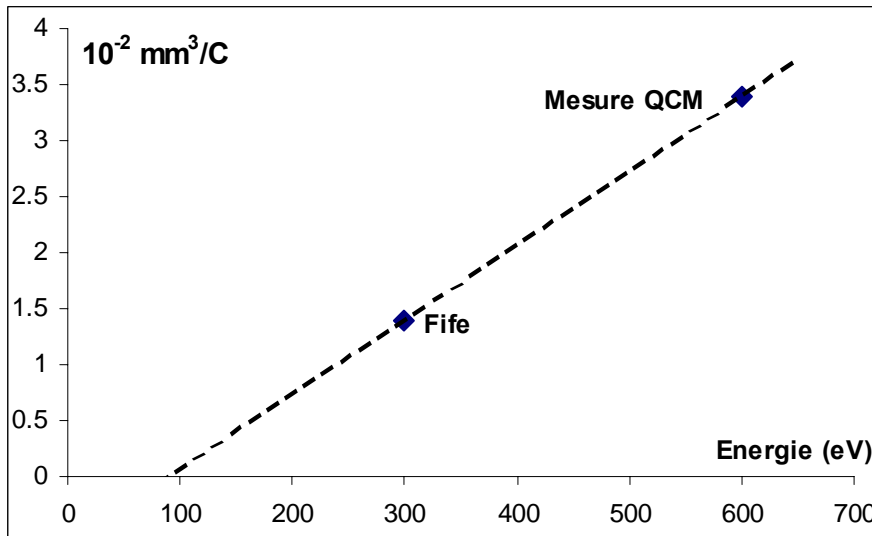
*Remarque :* La masse implantée est considérable et correspond à environ 100nm de Xénon liquide. Cette épaisseur est à comparer à une profondeur de pénétration de quelques nanomètres. Cette forte prise de masse laisse penser que le xénon diffuse à l'intérieur de la cible durant le bombardement ionique.

A priori, on peut tirer de cette mesure de masse le taux d'érosion du Kapton. Toutefois, la vitesse d'érosion du Kapton ne peut être déterminée que quand on s'est assuré que la quantité de xénon implanté s'est totalement stabilisé. Ainsi, la Figure E-47 montre que la vitesse d'érosion mesurée est très lente pour se stabiliser. Toutefois, un traitement mathématique permet en supposant que la décroissance de la vitesse d'érosion  $V$  est logarithmique, d'extrapoler la vitesse d'érosion du Kapton  $V_0$ .



**Figure E-47 : Vitesse d'érosion du Kapton exposé au bombardement ionique de  $70\mu\text{A}/\text{cm}^2$  d'ion  $\text{Xe}^+$  à 600eV, et traitement mathématique de la vitesse d'érosion**

Dans ce cas on extrapole donc la vitesse d'érosion du Kapton à  $0.195\mu\text{g}/\text{cm}^2/\text{min}$ , qui correspond à un taux d'érosion de  $3.4 \cdot 10^{-2} \text{ mm}^3/\text{C}$ . Ce résultat est à comparer sur la Figure E-48 au taux d'érosion de la littérature<sup>15</sup> de  $1.4 \cdot 10^{-2} \text{ mm}^3/\text{C}$  à 300eV. Ces deux résultats sont cohérents l'un par rapport à l'autre.



**Figure E-48 : Taux d'érosion du Kapton mesuré par QCM à 600eV et taux d'érosion de la littérature à 300eV**

*Remarque 1 :* Pour la mesure du taux d'érosion, nous n'avons pas utilisé le détecteur d'érosion par les neutres (§-C.III.2.2). En effet, nous avons suivi toutes les recommandations qui permettent de limiter sensiblement l'influence des neutres énergétiques sur l'érosion (§-C.III.5). Par ailleurs, on avait remarqué que l'influence des neutres était d'autant plus faible que l'énergie étudiée est grande (§-C.IV.2.3).

*Remarque 2 :* L'implantation de Xénon dans la cible d'érosion rend la mesure d'érosion bien plus lente que dans le cas de l'érosion des métaux.

### **E.V.2.2. Influence du xénon implanté sur les cascades de collisions**

L'effet du Xénon est d'autant plus sensible qu'un choc xénon-xénon est très différent du choc d'un xénon avec un atome de carbone, azote, oxygène ou hydrogène. En effet, la théorie de la collision entre deux corps (§-B.VI.1) montre qu'un atome léger ne peut provoquer que de très légères inflexions sur la trajectoire d'atomes lourds. L'angle maximum de déviation lors de la collision d'un atome de masse  $M_2$  sur un atome de masse  $M_1$  ( $M_2 > M_1$ ) vaut :

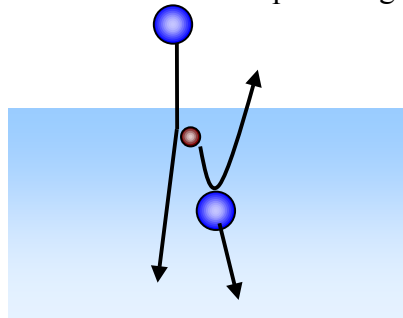
$$\theta_{\max} = \arctan\left(\frac{M_1 M_2 \sin(\arccos(-M_2/M_1))}{M_1^2 - M_2^2}\right)$$

Alors que le transfert maximum d'énergie  $\gamma$  vaut:

$$\gamma = 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}$$

Ainsi dans le cas du Kapton, le carbone qui est l'atome le plus abondant dévie un ion Xénon de  $5,5^\circ$  au maximum. C'est pourquoi la trajectoire d'un ion de xénon dans du Kapton est très peu déviée. De plus, le xénon ne peut transmettre que 36% de son énergie au maximum lors de chaque choc. Un atome de xénon peut dévier un ion xénon jusqu'à  $90^\circ$  avec un transfert d'énergie de 100%.

De la même façon, le choc d'un atome de carbone en mouvement sur un atome de Xénon est très différent de celui d'un atome de carbone sur un atome de carbone. En particulier, les chocs carbone sur xénon permettent des rebonds qui permettent d'augmenter sensiblement le taux d'érosion puisqu'ils permettent de provoquer de l'érosion en deux chocs à fort transfert d'énergie. Ce phénomène est illustré par la Figure E-49.



**Figure E-49 : Rebond de carbone sur du xénon**

En absence de xénon déjà implanté, un atome de xénon s'implantant dans le Kapton a une trajectoire quasi rectiligne car il est peu dévié par chaque choc. Il transfère donc de la quantité de mouvement aux atomes avec lesquels il entre en collision principalement vers l'intérieur de la cible. De plus il transfère peu d'énergie. Donc la probabilité de donner à un atome suffisamment d'énergie vers l'extérieur de la cible est limitée.

Par contre, dès que du xénon est implanté, il y a possibilité de grands changements de directions de l'ion incident lors de chocs avec un xénon implanté. Donc la probabilité de transférer de la quantité de mouvement vers l'extérieur croît avec l'implantation de xénon.

Ce phénomène est illustré par des trajectoires simulées au moyen de TRIM. La Figure E-50 montre deux trajectoires calculées par TRIM d'ions xénon dans une cible de Kapton vierge et dans une cible de Kapton dans lequel du xénon a déjà été implanté.

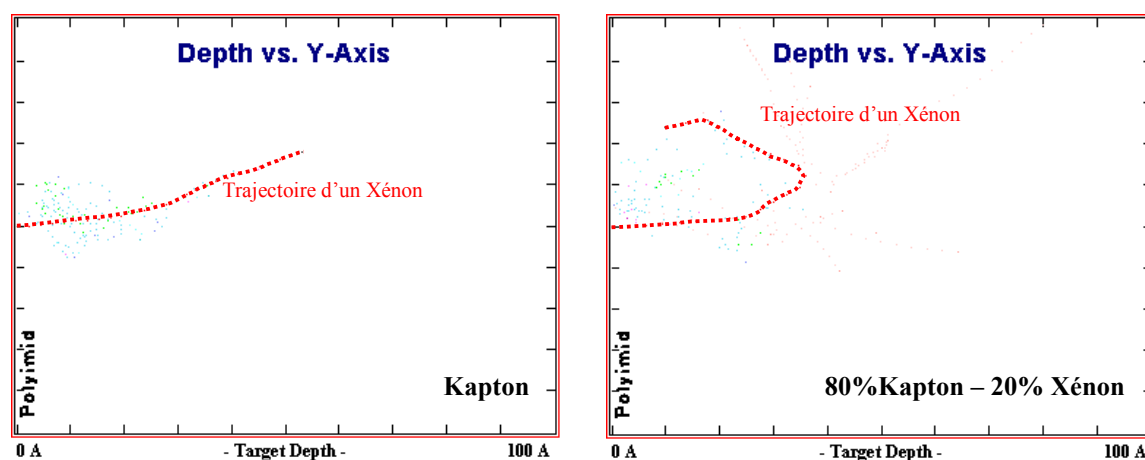


Figure E-50 : Simulation d'une cascade de collisions dans un Kapton sans implantation et avec implantation de xénon (20% en volume).

### E.V.2.3. Calcul de l'influence du xénon implanté sur le taux d'érosion

Nous avons vu qualitativement que l'implantation de xénon influe sur le taux d'érosion. L'étude de cette influence avec CSiPI est difficile à effectuer sur le Kapton dans la mesure où il s'agit d'un matériau polyatomique. Nous avons donc simulé le taux d'érosion d'une cible composée de carbone et de xénon implanté de façon uniforme dans la cible, et avons alors étudié le taux d'érosion en fonction de la concentration en xénon. Nous avons effectué ce calcul en attribuant au carbone une énergie de liaison de 15eV et avons étudié plusieurs énergies de surface  $E_s$  (1.5eV, 1eV et 0.5eV).

On observe alors avec la Figure E-51 que pour des proportions de xénon implanté faibles, le taux d'érosion croît avec l'implantation de xénon. Il décroît ensuite car plus on a de xénon dans la cible, moins il reste de carbone à éroder. On observe que l'énergie de surface a une influence assez faible sur le taux d'érosion.

En pratique, les concentrations élevées en xénon ne peuvent pas être atteintes car au fur et à mesure que la concentration en xénon croît, le taux d'érosion du xénon croît également. On ne peut donc pas dépasser une concentration critique en xénon produisant un taux d'érosion du xénon supérieur à 1. Nous avons donc étudié la concentration en xénon qui produit un taux d'érosion de 1. Là encore, ce calcul nécessite la connaissance de l'énergie de surface du Xénon dans la cible, c'est à dire dans une cible carbonée. La littérature fournit quelques énergies d'adsorption du xénon sur des structures carbonées ;. Ces énergies varient de 0.16eV pour le graphite<sup>94</sup> à 0.24 ou 0.28eV pour des structures carbonées plus complexes<sup>95</sup>. Par analogie avec l'érosion des métaux, nous considérons que l'énergie de surface du xénon est son énergie d'adsorption.

Nous avons alors étudié le taux d'érosion du xénon dans une cible de graphite bombardée par des ions xénon à 600eV sous incidence normale. On obtient alors un taux d'érosion de 1 pour une concentration de l'ordre de 16% atomique comme le montre la Figure E-52. Nous avons effectué ce calcul pour plusieurs énergies, et on observe que plus cette énergie est faible, plus la concentration critique est faible. Toutefois ces variations sont assez lentes, par conséquent l'erreur en prenant une énergie de surface de 0.16 est probablement

faible. On observe également que l'angle d'incidence fait varier considérablement cette concentration critique.

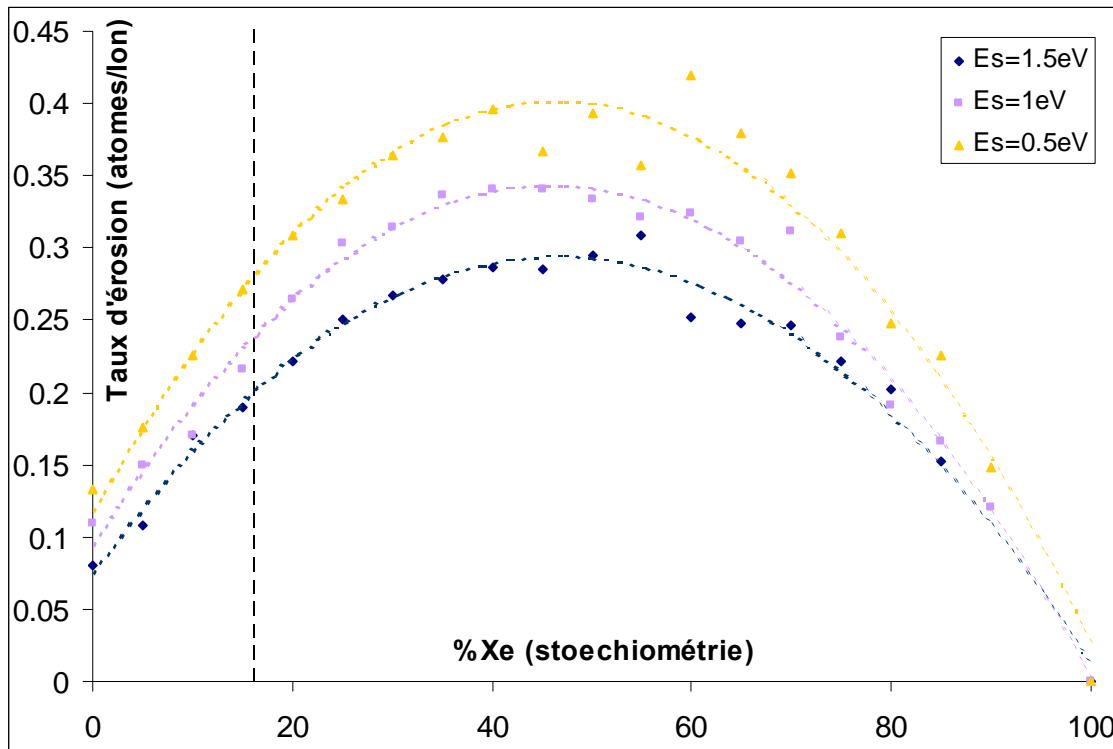


Figure E-51 : Taux d'érosion d'une cible de carbone contenant du xénon implanté

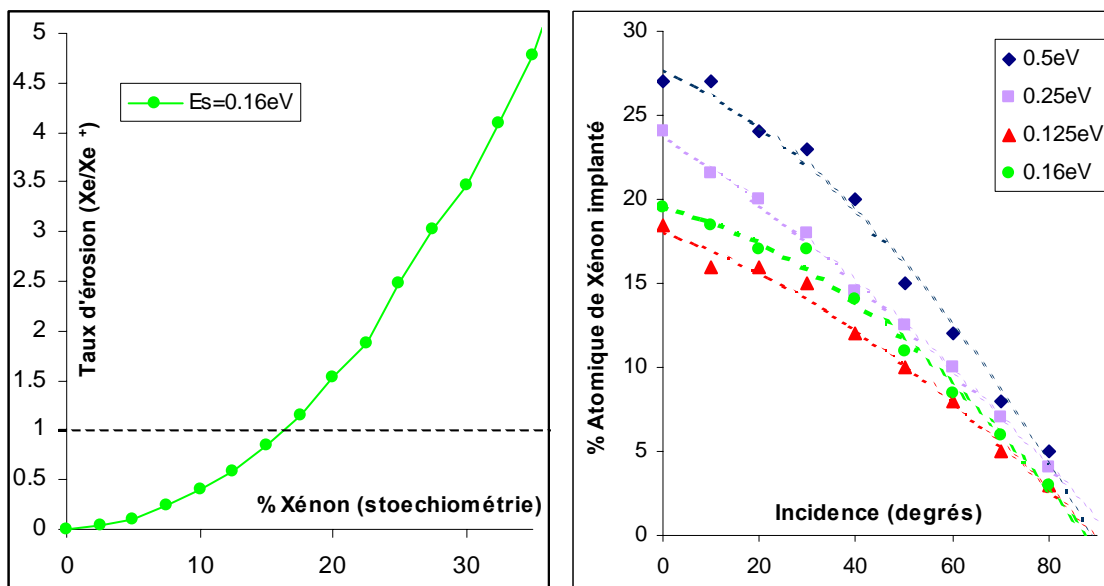


Figure E-52 : Taux d'érosion du xénon implanté dans une cible de carbone bombardé par du xénon à 600eV à incidence normale et concentration de xénon provoquant un taux d'érosion de 1 en fonction de l'énergie de surface et de l'angle d'incidence

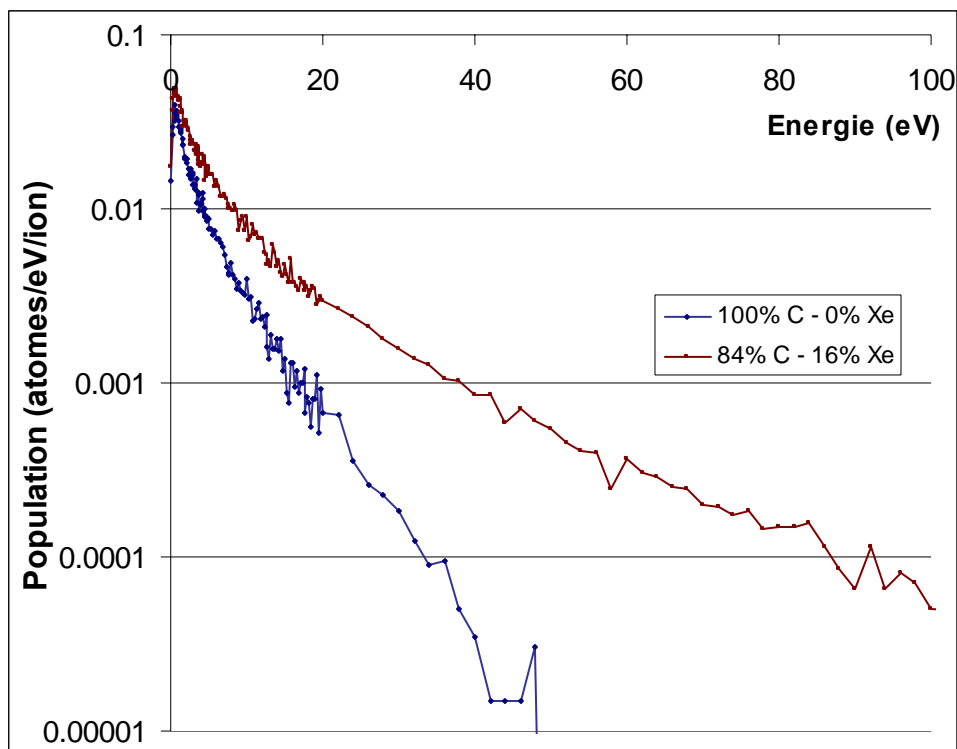


Expérimentalement nous avons observé que l'émission dépend du flux d'ions. Si la concentration en xénon dépend du flux, alors les variations d'émission avec le flux peuvent être expliquées par les variations de concentration en xénon.

Durant une expérience d'érosion, la concentration en xénon varie avec le temps. On se déplace donc sur la courbe de la Figure E-51 d'une concentration nulle à une concentration d'équilibre en surface. La concentration en xénon dépend de plusieurs paramètres.

- la fonction d'implantation en fonction de la profondeur
- le taux d'érosion du xénon implanté
- le taux d'érosion du Kapton
- la diffusion du Xénon implanté dans la cible.

*Remarque :* Nous avons observé une variation très grande de taux d'érosion expérimentalement (signal nul pour un flux tendant vers 0) alors que les variations prévisibles sont bien plus faibles (du simple au double). Or nous avons vu au chapitre §-C.V.2.3.4 que la réponse du spectromètre de masse dépend de l'énergie des atomes analysés. Nous avons découvert ce phénomène très tardivement dans le déroulement de la thèse. Il est probable que nous observions plus une variation du spectre en énergie des produits d'érosion qu'une variation de l'émission dans la direction étudiée. Cette variation du spectre en énergie des produits d'érosion pour une érosion à incidence normale à 600eV quand du xénon est implanté dans la cible a été calculé avec CSiPI et est représenté sur la Figure E-53. Nous avons considéré deux cas : une concentration de xénon nulle et la concentration maximale de xénon (16%). En présence d'ions, les produits d'érosion sont bien plus nombreux pour les fortes énergies. Cela se comprend facilement si on considère le schéma d'érosion très simple illustré sur la Figure E-49 qui permet de l'émission à haute énergie.



**Figure E-53: Spectre en énergie des atomes de carbone issus d'une cible de carbone et d'une cible de carbone contenant 16% de Xénon sous bombardement par des ions  $Xe^+$  à 600eV sous incidence normale**

Les variations du signal mesuré au spectromètre de masse semblent être une aberration de mesure. En réalité, elles donnent tout de même une information car si elles ne traduisent pas une variation d'émission, elles traduisent tout de même une variation d'énergie des produits d'érosion due à une variation de concentration en xénon en surface de la cible.

Le fait que la concentration en xénon dépende du flux de xénon est tout de même un argument fort en faveur d'une diffusion de xénon, nous allons développer cet argument dans le paragraphe suivant. De plus si on en croit les simulations de CSiPI, des concentrations de xénon différentes s'accompagnent tout de même de taux d'érosion différents.

#### **E.V.2.4. Influence de la diffusion**

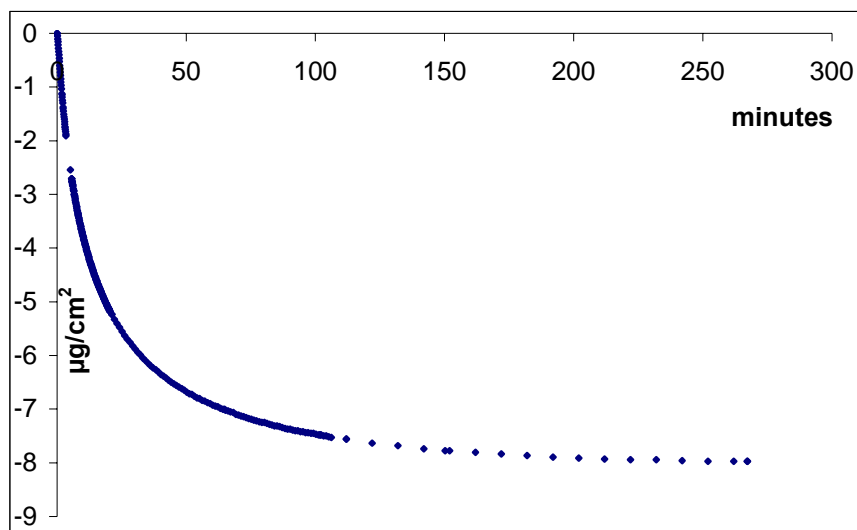
En absence de diffusion, parmi les termes influant sur la concentration en xénon cités au paragraphe précédent, l'implantation et l'érosion de xénon et du Kapton sont proportionnels à la fluence. La diffusion au contraire est un phénomène qui ne dépend pas de la fluence mais du temps. Aussi, en absence de diffusion du xénon dans le matériau, la concentration en xénon à la surface de la cible ne dépend pas du flux mais seulement de la fluence. C'est la diffusion qui fait apparaître une dépendance au flux.

C'est donc l'existence du phénomène de diffusion qui permet d'expliquer qu'à faible flux d'ions érodants, la concentration en xénon implanté est faible en surface alors qu'elle est plus élevée à fort flux. Cette diffusion a été observée expérimentalement grâce à des microbalances à quartz. La Figure E-54 montre la masse d'un dépôt de Kapton sur une microbalance à quartz après une expérience d'érosion ionique. On observe dès l'arrêt de la source d'ions une perte de masse dans le temps. Cette dernière masse est attribuée à la désorption du xénon implanté hors du Kapton. La masse mise en jeu montre que le xénon se trouve à des profondeurs bien supérieures à la profondeur de pénétration (quelques dizaines d'angströms). Il a donc diffusé à l'intérieur du film durant l'érosion.

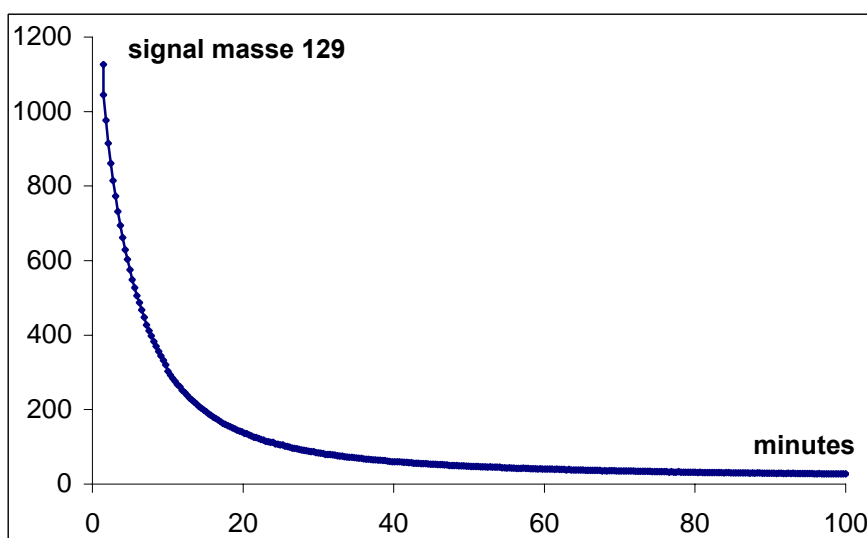
Cette diffusion a également été mise en évidence par spectrométrie de masse de la masse 129 (isotope abondant du Xénon). Après l'érosion, nous avons coupé la source d'ions et son alimentation en xénon. On observe alors avec la Figure E-55 une décroissance lente de la pression résiduelle en xénon dans l'enceinte. La lenteur de la décroissance est due à la désorption du xénon de la cible de Kapton qui libère continuellement du xénon. En absence de cible dans l'enceinte, la décroissance est quasi instantanée.

Les suivis de la désorption par QCM et spectrométrie de masse ne sont pas directement comparables. En effet, ces mesures ont été réalisées pendant deux expériences différentes, avec des cibles différentes. De plus dans le cas de la mesure par microbalance, le matériau étudié était en réalité un polyimide synthétisé à l'ONERA, de même formule chimique que le Kapton, mais de microstructure a priori différente. Cette structure et en particulier la densité joue a priori un grand rôle sur la constante de diffusion du xénon dans le Kapton.

On peut d'ailleurs comprendre que le xénon puisse diffuser dans le Kapton dans la mesure où sa densité est de  $1.42\text{g/cm}^3$  alors que le carbone qui est un autre matériau carboné a une densité de  $3.52\text{g/cm}^3$ . Ainsi le Kapton présente un volume libre permettant la diffusion du gaz.



**Figure E-54 : Mesure de masse d'une cible de Kapton par QCM après bombardement ionique par du Xénon à 600eV**



**Figure E-55 : Mesure de la pression résiduelle en xénon due à la désorption de xénon d'une cible de Kapton**

Le rôle joué par la diffusion explique que le phénomène de dépendance au flux de pulvérisation ionique (taux d'érosion, énergie des produits d'érosion et a priori lobe d'émission) existe dans le cas du Kapton et pas dans celui de l'aluminium. En effet, on comprend que le Kapton, matériau polymère, est sujet à la diffusion de xénon alors que l'aluminium métallique ne l'est pas. Par ailleurs, l'aluminium ayant un taux d'érosion bien plus élevé que le Kapton, le xénon a moins de possibilités de s'accumuler.

### **E.V.3. Conclusion**

Nous avons vu dans cette partie que la composition des cibles d'érosion évolue au cours de l'érosion. C'est le cas a priori pour les cibles polyatomiques pour lesquelles certains atomes ont un taux d'érosion supérieur aux autres. Mais nous avons vu que c'est également le cas pour les cibles monoatomique. En effet, la surface évolue à cause de l'implantation de xénon. Or le xénon implanté peut sensiblement modifier les propriétés de la cible en surface.

Nous avons vu que cette influence de la concentration en xénon implanté en surface peut faire apparaître une dépendance au flux d'ions érodants de la pulvérisation ionique pour les matériaux permettant la diffusion des ions implantés en leur sein. C'est en particulier ce que nous avons étudié dans le cas du bombardement ionique du Kapton par le xénon.

## **E.VI. Conclusion**

Nous avons vu dans cette partie que les cibles réelles sont bien plus complexes à étudier que les cibles idéales. En effet, l'érosion de cibles réelles fait parfois intervenir des phénomènes dynamiques. Ainsi nous avons observé que la rugosité d'échantillons peut varier au cours de l'érosion. Nous avons montré que l'étude de l'érosion en fonction de l'angle d'incidence ne suffit pas à expliquer la croissance de la rugosité, par contre elle aide à prévoir les angles privilégiés par la rugosité. Nous attribuons plutôt la croissance de la rugosité à la contamination des facettes de la rugosité par les produits d'érosion issus d'autres facettes.

Nous avons montré que la formation de la rugosité est d'une grande importance puisqu'elle modifie sensiblement l'érosion ainsi que l'émission. Ainsi, une étude sur un matériau lisse n'est pas représentative de la pulvérisation ionique d'une cible de même nature mais rugueuse.

Enfin, nous avons vu que la stœchiométrie de la cible évolue au début de l'érosion. L'implantation d'ions xénon est un cas particulier de l'évolution de la stœchiométrie. Cette évolution modifie considérablement les propriétés de la cible, en particulier dans le cas d'une cible constituée d'atomes légers. Nous avons observé dans le cas du Kapton que les propriétés de flux d'atomes érodés sont fortement modifiées, en quantité et en énergie. Dans le cas du Kapton la diffusion du xénon au sein de la cible rend les propriétés des produits d'érosion dépendantes du flux d'ions érodants.

Du fait de la découverte tardive de la réponse du spectromètre de masse dépendante de l'énergie, nous n'avons pas pu différencier l'effet des ions implantés sur le spectre en énergie et sur le taux d'émission.

En pratique, certains paramètres ne peuvent pas toujours être négligés pour la production de données pour la prévision des effets de jet des propulseurs plasmiques. En effet, un matériau ne se limite pas à sa nature, mais il faut également tenir compte de son état de surface. Une mesure instantanée n'est pas forcément représentative d'un échantillon durant sa vie. En effet les cibles d'érosion évoluent à cause du bombardement ionique. Enfin, les essais accélérés doivent être considérés avec prudence dans le cas de matériaux permettant la diffusion du xénon.

# Partie F. Conclusion

Dans le but de progresser dans la prévision des effets de jet de la propulsion liés à la pulvérisation ionique, nous avons entrepris une étude théorique et expérimentale de ce phénomène.

Nous avons en particulier développé le code CSiPI qui simule la cascade de collisions produite par un ion incident dans une cible. CSiPI a été développé en s'inspirant de TRIM, mais nous avons introduit une description bien plus fine des phénomènes de surface. Ainsi, dans le cas des métaux, nous obtenons des bons résultats de simulation pour le taux d'érosion en fonction de l'énergie et de l'angle, pour la direction d'émission et pour l'énergie des particules érodées.

Toutefois CSiPI ne peut pas gérer les cibles polyatomiques dans la mesure où on ne peut pas tenir compte de la modification de la composition de la cible en surface. Par ailleurs, la simulation de cibles à liaisons covalentes nécessite encore des vérifications. On se heurte dans ce cas au problème de l'énergie de surface qui est un paramètre d'entrée capital. Ces limitations de l'applicabilité de CSiPI pourraient faire l'objet d'études ultérieures.

Nous avons également effectué des études expérimentales au moyen de l'installation IDEFIXe. Dans un premier temps nous avons mis en évidence un dysfonctionnement de notre source d'ions de type Kaufman. En effet, celle-ci produit un faisceau de neutres qui participe à l'érosion et perturbe donc l'étude de la pulvérisation ionique. Après avoir caractérisé ce faisceau de neutres, nous avons établi que ces derniers sont produits par échange de charge avec le gaz de l'enceinte, ainsi que par des collisions avec les bords des trous de la grille d'accélération de la source d'ions. Fort de ces observations, nous avons émis des recommandations pour s'affranchir des perturbations induites par ces neutres.

Nous avons ainsi pu effectuer des mesures d'érosion, de contamination et d'émission. Pour mesurer la contamination, nous avons développé une technique basée sur l'érosion d'un dépôt sur une microbalance à quartz. Cette technique a été validée lors de mesures pour différentes énergies avec l'argent ainsi que pour des mesures à des incidences variables dans le cas du cuivre. On obtient alors des données rapidement et avec une meilleure précision que les mesures qui étaient effectuées par pesées passives avant cette thèse.

L'étude de matériaux isolants est plus problématique dans la mesure où la surface bombardée sert également d'électrode. Nous avons tout de même réussi à étudier le taux d'érosion de polyimide PMDA-ODA (Polymère du Kapton) avec cette technique. L'étude de verres est d'une grande importance dans le cadre des effets de jet de la propulsion plasmique. Ainsi il serait d'un grand intérêt d'adapter cette technique à ce genre de matériau.

Ce système de microbalances nous a également permis d'étudier des lobes de contamination par l'aluminium pour différentes énergies. Ces premiers résultats très prometteurs mériteraient d'être poursuivis avec d'autres matériaux plus complexes.

Enfin, nous avons également étudié l'émission des produits d'érosion par spectrométrie de masse, mais nous avons été confrontés à un problème expérimental lié au fonctionnement du spectromètre de masse.

Les mesures d'érosion et de contamination ont été retrouvées par la simulation avec CSiPI. Ainsi, nous disposons maintenant d'outils expérimentaux fiables et efficaces pour étudier l'érosion ionique et la contamination en temps réel et in-situ.

Dans le but de mieux comprendre les paramètres influant sur la pulvérisation ionique, nous avons entrepris une étude de l'émission au moyen de CSiPI. Nous en avons conclu que l'énergie de surface est un paramètre clé de l'érosion ionique dans la mesure où elle agit comme un filtre en énergie pour les particules quittant la cible. Nous avons ainsi pu observer qu'une cascade peu énergétique tend à produire une émission rasante, alors qu'une cascade plus énergétique tend à produire une émission statistique suivant une loi en cosinus de l'angle d'émission. Nous avons également mis en évidence la grande influence des phénomènes de surface qui rendent difficile la prédiction a priori de la direction et la forme des lobes d'émission.

Enfin, nous avons étudié dans quelle mesure les résultats expérimentaux et de la simulation sont applicables dans le cas de l'exposition de panneaux solaires exposés aux ions d'un propulseur plasmique. En effet, les cibles étudiées en laboratoire sont généralement idéales.

Or nous avons mis en évidence la grande influence de la rugosité de la cible d'érosion sur le phénomène de pulvérisation ionique. La rugosité tend à limiter l'influence de l'angle d'incidence sur l'érosion. Elle modifie également la direction des lobes d'émission. Ainsi, pour une application réelle, il est indispensable de tenir compte de la rugosité des cibles exposées à un bombardement ionique.

Par ailleurs, nous avons mis en évidence expérimentalement la croissance spontanée de rugosité dans le cas du bombardement ionique de Kapton sous incidence  $60^\circ$ . Nous avons alors entrepris une étude théorique afin de déterminer les causes de cette croissance de la rugosité. Nous sommes arrivés à la conclusion qu'elle se développe probablement à cause de la contamination de certaines facettes de la surface par des produits d'érosion issus d'autres facettes. Cette explication nécessite encore quelques vérifications pour être définitivement établie.

Nous avons également mis en évidence l'influence des ions implantés sur la pulvérisation ionique. Là encore notre étude a été perturbée par les caractéristiques de notre spectromètre de masse. Mais nous avons tout de même mis en évidence un phénomène d'implantation d'ions Xénon dans le Kapton ainsi que la diffusion du xénon implanté. Par ailleurs, nous avons établi que la diffusion dans le Kapton induit une dépendance en flux d'ions de la pulvérisation ionique. Ainsi l'utilisation de données expérimentales pour des applications réelles n'est valable que dans la mesure où les flux d'ions sont comparables.

Grâce à cette thèse nous avons acquis des outils expérimentaux et de simulation permettant d'étudier la pulvérisation ionique. Cela nous a permis d'acquérir une connaissance plus fine du phénomène de pulvérisation ionique. Nous avons également déterminé des paramètres qui doivent être pris en compte dans l'optique de la prévision des effets de jet de la propulsion plasmique.

# Références

- 1 *Cours de technologie spatiale, Techniques et Technologies des Véhicules Spatiaux*, Volume 3, Module XI : Propulsion, p303
- 2 E.Y. Choueriri *Journal of Propulsion and Power* Vol.20, No 2 (2004)
- 3 M. Martinez-Sanchez *Journal of Propulsion and Power* Vol. 14, No.5, 1998
- 4 R.G. Jahn, E.Y. Choueiri, , *Encyclopedia of Physical Science and Technology*, Vol.5, 3rd ed., Academic Press, 2002, pp. 125-141
- 5 D. Y. Oh, *AIAA* 2005-4270
- 6 I.D. Boyd, *AIAA* 2000-0466
- 7 M.Tajmar, J.Gonzalez, A.Hilgers, *AIAA* 2000-3526
- 8 E.J. Pencil, T. Randolph, D.H. Manzella *AIAA*-1996-2709
- 9 Y. Garnier, V. Viel, J.-F. Roussel, D. Pagnon, L. Magne, M. Touzeau, *IEPC* 99-083
- 10 Y. Garnier, V. Viel, J.-F. Roussel, J. Bernard, *J. Vac. Sci. Technol. A* 17(6) (1999) 3246-3254
- 11 R.D. Kolasinski *AIAA* 2004-4110
- 12 D. Brinza, J. Wang, J. Polk, M. Henry, *AIAA* 2000-0465
- 13 I.D. Boyd, M.L. Falk *AIAA* 2001-3353
- 14 A.B. Nadiradze, V.A. Obukhov, G.A. Popoc, IAC-04-IAF-S.4.06
- 15 J.M. Fife, M.R. Gibbons, W.A. Hargus, D.B. VanGilder, D.E. Kirtley, L.K. Johnson, *IEPC*-03-136
- 16 S.Provost, C.Theroude, P. Chèoux-Damas, *IEPC* 2003-IEPC
- 17 S.Provost, C.Theroude, T. Tondou, V. Viel-Inguibert, 9th *International Symposium on Materials in Space Environment* 131 -2003
- 18 M.R. Nackles, J.J. Wang, *AIAA* 2004-3789
- 19 P.C. Zalm, *Surface and Interface Analysis* Vol. 11, 1-24 (1988)
- 20 M.W. Thompson, *Vacuum* 66 (2002) 99-114
- 21 V.S. Smentkowski *Progress in Surface Science* 64 (2000) 1-58
- 22 E. Rutherford, *Philosophical Magazine* Series 6, vol. 21, 1911, p669-688
- 23 N. Bohr *Philosophical Magazine* 25,10 (1913)
- 24 J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark *The stopping and Range of Ions in Solids* Pergammon Press (1985)
- 25 P. Sigmund, *Topics in applied Physics*, « Ion Bombardment I », Eds. : R. Behrisch, K. Wittmaack Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1981) p9-67
- 26 H. Oeschner *Applied Physics* 8. 185-198 (1975)
- 27 J. Bohdansky, J. Roth, H. Bay, *J. Appl. Phys.* 51 (1980)2861 et 52 (1981) 1610
- 28 C. Garcia-Rosales, W. Eckstein, J. Roth, *Journal of Nuclear Materials* 218 (1994) 8-17
- 29 D. Rosenberg, G.K. Wehner *J. Appl. Phys.* Vol 33 No 5 1962
- 30 H. Oeschner, *Z. Physik* 261, 37-58 (1973) (by springer-Verlag 1973)
- 31 Y. Yamamura Radiation effects, 1984, Vol. 80, pp 57-72
- 32 W. Takeuchi, Y.Yamamura *Radiation Effects*, 1983, Vol.71, p 53-64
- 33 W. Eckstein, *Series in materials Science 10* « Computer Simulation of Ion-Solid Interactions » Springer (1991)
- 34 Philibert, Vignes, Brechet, Combrade, *Métallurgie : du minerai au matériau* « Cohésion, structure et propriétés physiques », Editeur Masson, p249
- 35 L. Pauling *Journal of the American Chemical Society* Vol 54, p 3570-3582 (1932)
- 36 K. Nordlund, E. Salonen, J. Keinonen, C.H. Wu *Nuclear Instruments and methods in Physics ResearchB* 180 (2001) 77-84
- 37 C.Hopf, A. von Keudell, W. Jacob *Journal of Applied Physics*, vol 94, No 4
- 38 C.L. Marker, L.A. Clemons, B.A. Banks, S. Miller, A. Snyder, C.C. Hung, C.A.Karniotis, D.L. Waters, *AIAA* 2005-4413
- 39 R. Zacharia, H. Ulbricht, T. Hertel *Physical Review B* 69, 155406 (2004)
- 40 E.Oyarzabal, J.H.Yu, J. Hanna, G.R. Tynan, R.P. Doerner, K.J. Taylor, K. Schmid, *AIAA* 2005-3525
- 41 P.D. Reader, H.R. Kaufman, *J. Vac. Sci. Technol.*, Vol 12, No 6 (1975)
- 42 E.J. Pencil, T. Randolph, D. Manzella, *AIAA*.1996-2709
- 43 V. Khayms, K. Kannenberg *AIAA* 2005-3861
- 44 J.M. Fife, W.A. Hargus, D.A. Jaworske, C. Sarmiento, L. Mason, R. Jankovsky, J.S. Snyder, S. Malone, J. Haas, A. Gallimore, *AIAA* 2000-3521
- 45 M. Keidar, I.D.Boyd *Journal of Applied Physics* Vol. 86, No 9 1999
- 46 Yvan Garnier, Thèse de SUPAERO, Toulouse (1999)
- 47 L.B. King, A.D. Gallimore *AIAA* 1996-2712



- <sup>48</sup> O.B. Duchemin, Thèse du *California Institute of Technology*, Pasadena, USA (2001)
- <sup>49</sup> G.K. Wehner, *Physical review* 108, 35 (1957)
- <sup>50</sup> J.J. Blandino, D.G. Goodwin, C.E. Garner *Diamond and Related Materials* 9 (2000) 1992-2001
- <sup>51</sup> R. Kolasinski AIAA-2005-3526
- <sup>52</sup> S. Pullins, Y. Chiu, D. Levandier, R. Dressler, AIAA-2000-0603
- <sup>53</sup> J. W. Emhoff, I.D. Boyd AIAA-2004-3786
- <sup>54</sup> H. Leiter, L. Biagioni, F. Scortecci, M. Tartz, G. Noci, D. Feili AIAA-2005-4409
- <sup>55</sup> M. Crofton, I.D. Boyd *Journal of Propulsion and Power*, No1 (2001)
- <sup>56</sup> Institute for Electrical and Electronics Engineers, New York. IEEE Standard on Piezoelectricity, 1978. Vol. 176
- <sup>57</sup> C.D. Stockbridge, *Vacuum Microbalance Techniques*, edited by K. Behrndt (Plenum, New York 1966) Vol 5, p 193
- <sup>58</sup> E.P. EerNisse *J. Appl. Phys.*, Vol 43, No 4 (1972)
- <sup>59</sup> J. Sielanko, J. Filiks, J. Herec *Vacuum* 70 (2003) 381 - 384
- <sup>60</sup> A. Goehlich, D. Gillmann, H.F. Döbele, *Nuclear Instrument and Methods in Physics Research B* 179 (2001) 351-363
- <sup>61</sup> G. Drouseaux, A. Carlan, Z. Jiang *J. Phys. II France* 3 (1993) 1461-1477
- <sup>62</sup> K. Obara, M. Mabuchi, N. Imamura, T. Fujikawa, T. Yamada, N. Terada, *Surface and Coatings Technology* 169-170 (2003) 223-227
- <sup>63</sup> J.D. Williams, M. Gardner, M. Johnson, P. Wilbur IEPC-03-130
- <sup>64</sup> J.D. Williams, M. Johnson, D. Williams AIAA 2004-3788
- <sup>65</sup> M.A. Mantienieks, J.E. Foster, P.K. Ray, S.V. Shutthanandan, T.S. Thevuthasan IEPC-01-309
- <sup>66</sup> M.A. Mantienieks, P.K. Ray, S.V. Shutthanandan, T.S. Thevuthasan, IEPC 2001-309
- <sup>67</sup> M. Stepanova, S.K. Dew, *Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. B* 215 (2004) 357-365
- <sup>68</sup> M. A. Makeev, A.L. Barabasi, *Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. B* 222 (2004) 316-334
- <sup>69</sup> M. Küstner, W. Eckstein, E. Hechtel, J. Roth, *Journal of Nuclear Materials* 265 (1999) 22-27
- <sup>70</sup> T. Kenmotsu, Y. Yamamura, T. Muramoto, N. Hirovani, *Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. B* 228 (2005) 369-372
- <sup>71</sup> M. Stepanova, S.K. Dew, I.P. Soshnikov, *Physical Review B* 66, 125407 (2002)
- <sup>72</sup> M. Tartz, D. Monova, H. Neumann, H. Leiter, J. Esch AIAA-2005-4414
- <sup>73</sup> K. B. Cheney, E.T. Pitkin *Journal of applied Physics* vol.36 No 11 1965
- <sup>74</sup> J.B. Malherbe, R.Q. Odendaal, *Applied Surface Science* 144-145 (1999) 192-200
- <sup>75</sup> R. Michael, D. Stulik, *Nuclear Instruments and methods in Physics Research B* 28 (1987) 259-263
- <sup>76</sup> *Sputtering by particle bombardment II* (p257)
- <sup>77</sup> R.M. Bradley, J.M.E. Harper *J. Vac. Sci Technol. A* 6 (4), 1988
- <sup>78</sup> M. Feix, A.K. Hartmann, R. Kree, J. Munoz-Garcia, R. Cuerno *Physical Review B* 71 125407 (2005)
- <sup>79</sup> S. Habenicht, K.P. Lieb, W. Bolse, U. Geyer, F. Roccaforte, C. Ronning *Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. B* 161-163 (2000) 958-962
- <sup>80</sup> A. Toma, F. Buatier de Mongeot, R. Buzio, G. Firpo, S.R. Bhattacharyya, C. Boragno, U. Valbusa, *Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. B* 230 (2005) 551-554
- <sup>81</sup> P. Karmakar, D. Ghose *Nuclear Instruments and methods in Physics Research B* 222 (2004) 477-483
- <sup>82</sup> M.A. Makeev, R. Cuerno, A.L. Barabasi *Nuclear Instruments and methods in Physics Research B* 197 (2002) 185-227
- <sup>83</sup> G.D. Manason, B.B. Meckel, P.A. Harkins, *Journal of Applied Physics* 32 (1961) 369
- <sup>84</sup> S. Netcheva, P. Bertrand *Nuclear Instruments and methods in Physics Research B* 151 (1999) 129-134
- <sup>85</sup> J.B. Malherbe, N.G. van der Berg *Surf. Interf. Anal.* 22 (1994) 538
- <sup>86</sup> J.B. Malherbe, N.G. van der Berg, F. Claudel, S.O.S Osman, R.Q. Odendaal, F. Krok, M. Szymonski *Nucl. Inst. and Meth. In Phys. Res B* 230 (2005) 533-538
- <sup>87</sup> J.W. Lee, T.H. Kim, S.H. Kim, C.Y. Kim, Y.H. Yoon, J.S. Lee, J.G. Han, *Nucl. Inst. and Meth. In Phys. Res B* 121 (1997) 474-479
- <sup>88</sup> M. Guenther, G. Gerlach, G. Suchanek, K.-J. Eichhorn, B. Wolf, A. Deineka, L. Jastrabik *Surface and Coating Technology* 158-159 (2002) 108-113
- <sup>89</sup> V. Hnatowicz, V. Perina, A. Mackova, V. Svorcik, V. Rybka, D. Fink, J. Heitz, *Nucl. Inst. and Meth. In Phys. Res B* 175-177 (2001) 437-441
- <sup>90</sup> T. Tondu, V. Inguibert, AIAA 2005-3527
- <sup>91</sup> W. Eckstein, *Journal of Nuclear materials* 281 (2000) 195-202
- <sup>92</sup> R.A. Zühr, J. Roth, W. Eckstein, U. von Toussaint, J. Luthin *Journal of Nuclear Materials* 290-293 (2001) 162-165
- <sup>93</sup> K.S. Sengupta, H.K. Birnbaum *J. Vac. Sci. Technol. A* 9 (6) 1991

---

<sup>94</sup> A.J. Zambano, S. Talapatra, A.D. Migone *Phys. Rev. B* 64, 075415 (2001))

<sup>95</sup> A.J. Zambano, S. Lafdi, M.T. Aziz, W. McMillin, G. Shaughnessy, A.D. Migone, M. Yadasaka, S. Iijima, K. Kokai, K. Takahashi, *Nanotechnology* 13 (2002) 201-204

# Annexes

<i>Annexe a. Description de l'installation expérimentale</i>	<i>3</i>
a.I. Description générale	3
a.II. La source d'ions	4
a.III. Paramètres de contrôle de la source	9
a.IV. Conclusion	15
<i>Annexe b. Spectrométrie de masse</i>	<i>16</i>
b.I. Présentation de la spectrométrie de masse	16
b.II. Montage expérimental	18
<i>Annexe c. Evolution de la surface</i>	<i>25</i>
c.I. Evolution des points anguleux	25
c.II. Evolution déduite d'une surface	28
<i>Annexe d. Influence des perturbations</i>	<i>33</i>
d.I. Etude d'un angle	33
d.II. Etude d'une perturbation	34
d.III. Conclusion	36



# Annexe a. Description de l'installation expérimentale

## a.I. Description générale

L'installation IDEFIXe est une enceinte sous vide équipée d'une source d'ions et de diverses possibilités d'équipements (brides, passages de parois, passages électriques). La Figure a-1 permet de visualiser les possibilités d'équipement de l'enceinte.

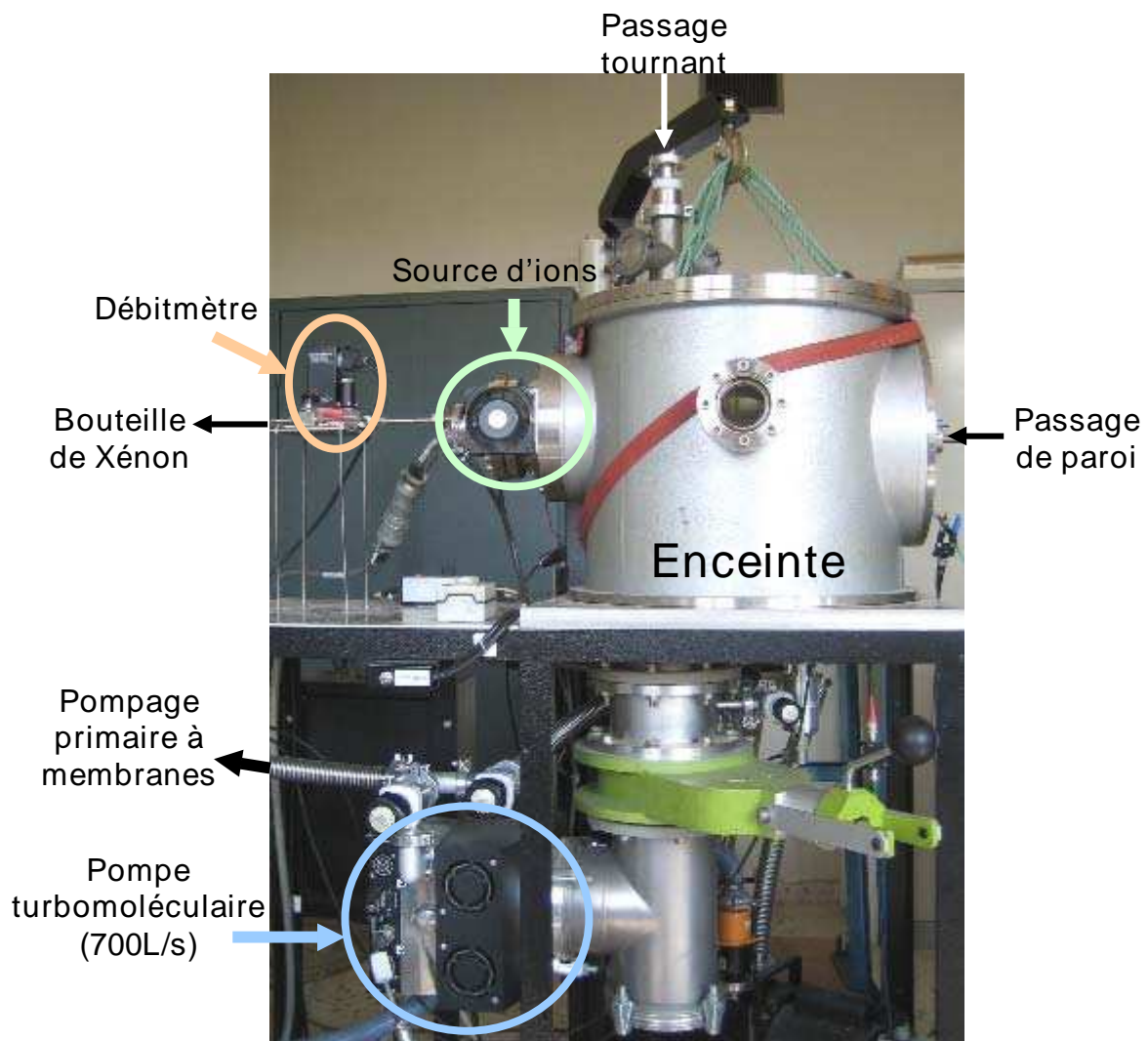


Figure a-1 : Photo de l'installation expérimentale IDEFIXe

Le pompage est effectué par une pompe turbomoléculaire avec une pompe primaire à membrane. Ainsi le pompage est "sec", ce qui est important quand on étudie la contamination. En effet, on évite alors la déposition d'huiles de pompage sur les cibles de contamination étudiées. Le pompage atteint 700L/s, ce qui permet d'obtenir un vide de l'ordre de  $10^{-7}$  mBar. Toutefois, en fonctionnement, du gaz est injecté dans l'enceinte via la source d'ion à hauteur de quelques dixièmes de Nml/min, ce qui fait augmenter la pression autour de  $10^{-4}$  mBar.

*Remarque* :Le débit d'alimentation en gaz est exprimée en Nml/min. N signifiant que le gaz est considéré dans les conditions normales de température ( $T^{\circ}=273^{\circ}\text{K}$ ) et pression ( $P^{\circ}=1\text{bar}$ ). Ainsi, en considérant l'enceinte comme un Réacteur à Alimentation Continue (RAC) on peut estimer la pression de l'enceinte en fonction de l'alimentation en gaz. La pression résulte alors de l'équilibre entre l'alimentation et le pompage et vaut :

$$P(\text{bar}) = P^{\circ} \frac{\text{Débit}_{\text{alimentation}}(\text{Nml} / \text{min})}{60 \cdot 1000 \cdot \text{Débit}_{\text{pompage}}(\text{L} / \text{s})} \frac{T}{T^{\circ}}$$

En pratique, la pression est mesurée au moyen d'une jauge de Penning étalonnée à l'azote. Or on désire mesurer une pression de Xénon. Pour cela la lecture doit être multipliée par un facteur correctif 0.33 qui traduit la meilleure aptitude à l'ionisation du xénon que l'azote. Sur la Figure a-2, on observe une relativement bonne corrélation entre la valeur prévue dans le cas du RAC et celle mesurée.

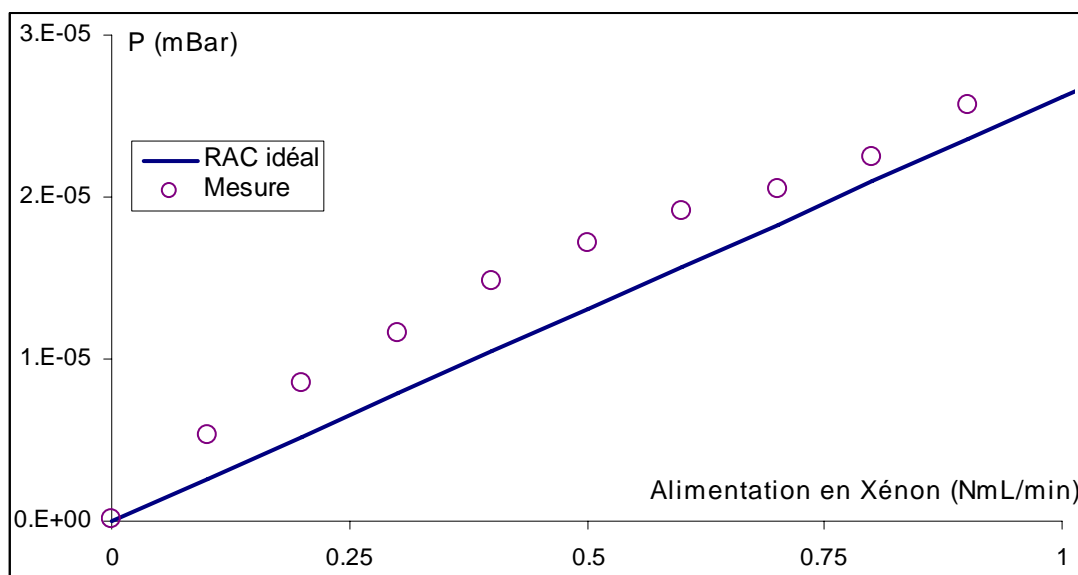


Figure a-2 : Préviation et mesure de la pression dans l'enceinte en fonction de l'alimentation en xénon

Cette mesure offre une validation de la qualité du pompage et du contrôle de débit de l'alimentation.

## a.II. La source d'ions

L'élément essentiel de l'installation est la source d'ions. Il en existe plusieurs sortes, ainsi, pour la simulation d'effets de jet de la propulsion plasmique, on aurait pu utiliser un propulseur à effet Hall. Mais ce choix aurait fortement limité les marges de manœuvre pour

les conditions d'érosion étudiées. En effet, les propulseurs ont un domaine de fonctionnement étroit, et ils sont d'une grande susceptibilité d'utilisation. Nous avons donc préféré utiliser une source d'ions à grille permettant une grande souplesse dans le réglage de l'énergie et le flux d'ions.

Ainsi, la source d'ions que nous utilisons est une source d'ions dite "à grilles" de type Kaufman de 3cm de diamètre produite par "Ion Tech" sous la dénomination "3cm Ion Source". Ce genre de source est généralement utilisé pour effectuer de la gravure ionique.

La souplesse de ce genre de source permet une utilisation dans une gamme d'énergie située entre 100eV et 1200eV selon le constructeur, avec des courants d'ions de quelques mA à quelques dizaines de mA.

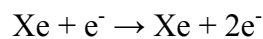
*Remarque :* Ce type de source d'ions est en réalité dérivé des propulseurs ioniques à grille développés pour la NASA par Kaufmann et al. au début des années 1960. Toutefois, la source d'ions que nous utilisons est plus rustique qu'un véritable propulseur à grilles. Il s'agit d'un équipement commercial qui n'est pas aussi bien optimisé.

## a.II.1. Principe de fonctionnement

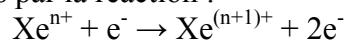
La bonne utilisation de la source d'ions passe par la bonne compréhension de son fonctionnement. C'est pourquoi nous nous sommes attardés sur la compréhension des phénomènes mis en jeu lors de la création des ions dans la chambre d'ionisation et leur extraction hors de la source.

### a.II.1.1. Production des ions

Les ions sont créés par bombardement électronique de gaz Xénon au moyen d'électrons selon la réaction :



Il s'agit de la première ionisation du Xénon. Mais de façon générale, d'autres ionisations successives sont possibles par la réaction :



Dans ce processus d'ionisation, c'est l'électron incident qui apporte l'énergie nécessaire à l'ionisation du Xénon. Ainsi, puisque l'énergie d'ionisation croît avec le nombre d'ionisations, le nombre d'ionisations possibles est déterminé par l'énergie des électrons. La Figure a-3 indique les énergies nécessaires à l'ionisation du Xénon pour différents nombres d'ionisation.

Au sein de la chambre d'ionisation (on peut se référer à la Figure a-4), les électrons sont émis par la cathode qui dans notre cas est un filament de tungstène chauffé. Ainsi, l'énergie des électrons dépend de leur position dans la chambre d'ionisation et est majorée par la différence de potentiel entre la cathode et l'anode qui forme le corps de la chambre d'ionisation. Le constructeur de la source indique de ne pas descendre en dessous d'une valeur de 30eV. On travaille donc à cette énergie pour limiter la formation d'ions multiples. Dans ces conditions de fonctionnement, comme on peut l'observer sur la Figure a-3, on peut a priori obtenir des ions simplement et doublement chargés. En pratique, après leur première ionisation, les ions sont rapidement extraits de la chambre d'ionisation. Ils ont donc une faible probabilité de subir une seconde ionisation.

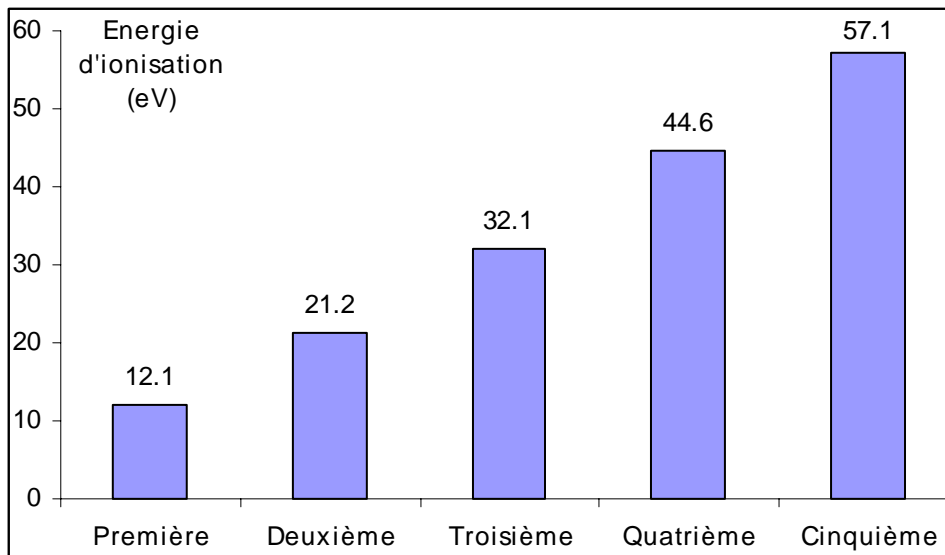


Figure a-3 : Energie des différentes ionisations du xénon

Un système d'aimants permanents crée un champ magnétique qui augmente le parcours des électrons jusqu'à l'anode. Par conséquent, ce champ magnétique permet d'accroître sensiblement la probabilité d'ionisation. Dans l'idéal, il serait avantageux d'ioniser tous les atomes de xénon introduit dans la source d'ions. D'ailleurs, c'est pratiquement le cas dans le cas des propulseurs ioniques. Mais notre source d'ions en est une version simplifiée, ainsi en général le taux d'ionisation se situe au voisinage de 25%.

Le potentiel du faisceau d'ions est déterminé par le potentiel de l'anode de la chambre d'ionisation. La Figure a-4 permet de visualiser la chambre d'ionisation et le reste de la source d'ions. A ce niveau, les ions possèdent une énergie potentielle électrique élevée et une énergie cinétique quasiment nulle.



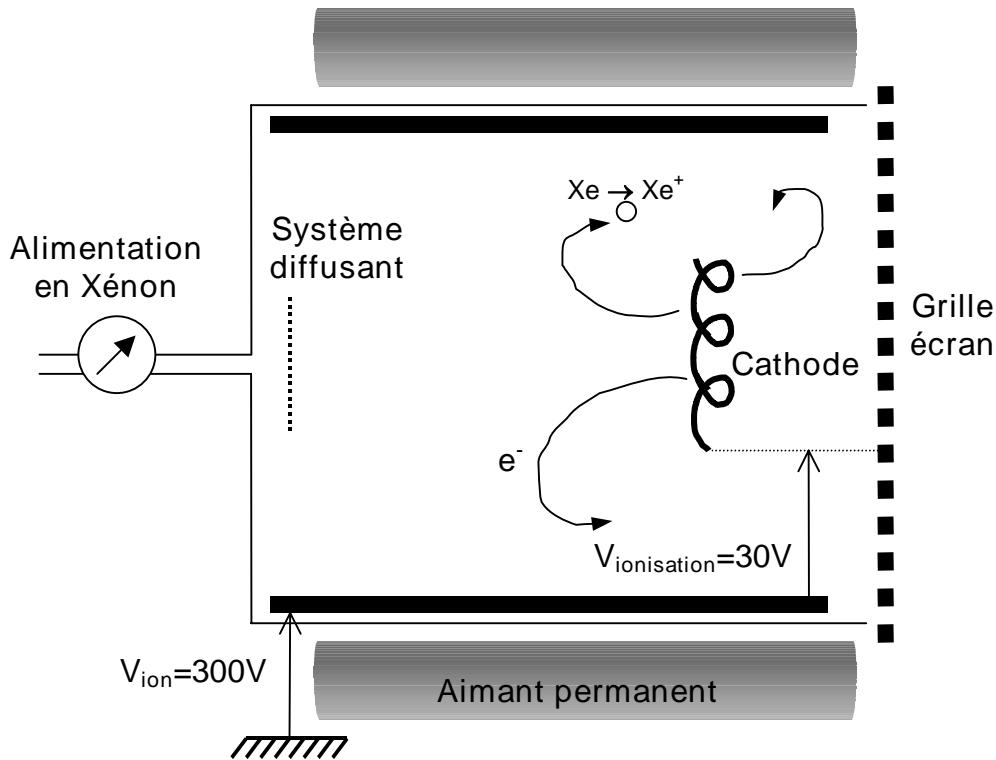


Figure a-4 : Chambre d'ionisation de la source d'ions

### a.II.1.2. Extraction des ions

Comme on peut le voir sur la Figure a-4, la grille dite "écran" délimite la sortie de la chambre d'ionisation. Or cette grille est portée au potentiel de la cathode, soit le potentiel le plus négatif de la chambre d'ionisation. Par conséquent elle attire les ions vers la sortie de la chambre d'ionisation.

En pratique, une seconde grille dont les trous sont en regard de la première est ajoutée en aval de la grille écran. Cette seconde grille appelée "grille accélératrice" ou "grille d'accélération" est polarisée négativement et permet de mieux extraire les ions de la chambre d'ionisation vers l'enceinte. En effet, les grilles extraient des ions chargés positivement de la chambre d'ionisation. Par conséquent, il apparaît une forte charge d'espace dans les trous de la grille. Or le flux de particules chargées de masse  $m$  et de charge  $q$  que l'on peut extraire sur une épaisseur  $d$  au moyen d'une différence de potentielle  $V_{total}$  est limité au courant  $j_{max}$  qui peut être déterminé par la loi de Child :

$$j_{max} = K \left( \frac{q}{m} \right)^{0.5} \left( \frac{V_{total}^{3/2}}{d^2} \right), \text{ où } K \text{ est une constante liée à la géométrie du système.}$$

Ainsi, en absence de grille d'accélération, le terme  $V_{total}$  se réduit au potentiel de l'anode de la source d'ions, alors que la grille d'accélération permet d'augmenter cette différence de potentiel. Par conséquent, pour extraire un courant d'ions maximum, il faut diminuer la distance entre les deux grilles, ce que l'on ne peut pas maîtriser, et augmenter la différence de potentiel  $V_{total}$ . Le potentiel de la grille d'écran étant imposé par l'énergie que l'on souhaite imposer aux ions, il faut alors augmenter en valeur absolue le potentiel négatif de la grille d'accélération pour accroître le courant d'ions produit par la source.

En sortie de source, les problèmes de charge d'espace sont supprimés grâce à un neutraliseur (filament de tungstène chauffé) qui injecte des électrons dans le faisceau d'ions et le neutralise.

Toutefois, au voisinage proche de la grille d'accélération, le potentiel négatif de cette dernière repousse les électrons. Il en résulte un domaine en sortie de source appelée « gaine électrostatique » où le plasma n'est pas neutralisé.

### a.II.2. Potentiels locaux

Un paramètre essentiel de l'érosion ionique est l'énergie des ions. Cette énergie est cinétique dans l'enceinte, mais l'énergie des ions leur a été initialement fournie sous forme d'énergie potentielle dans la chambre d'ionisation au potentiel  $V_{anode}$ . Quand ils quittent la source d'ions, ils sont soumis à un potentiel variable en fonction de leur position. Par conservation de l'énergie, la vitesse des ions est régie par le potentiel électrique local  $V_{local}$  par la relation :

$$qV_{anode} = qV_{local} + \frac{1}{2}mv^2$$

La Figure a-5 montre les potentiels locaux vus par les ions sortant de la source d'ions. On voit en particulier comment ils transforment leur énergie potentielle électrique en énergie cinétique. Ainsi les ions sont produits sous un potentiel élevé et possèdent une énergie cinétique quasi nulle. Quand les ions ont quitté la chambre d'ionisation et la gaine électrostatique, la situation est inversée. Mais au voisinage de la grille d'accélération, les ions sont soumis à un potentiel négatif, ils ont donc une énergie cinétique supérieure à leur énergie finale.

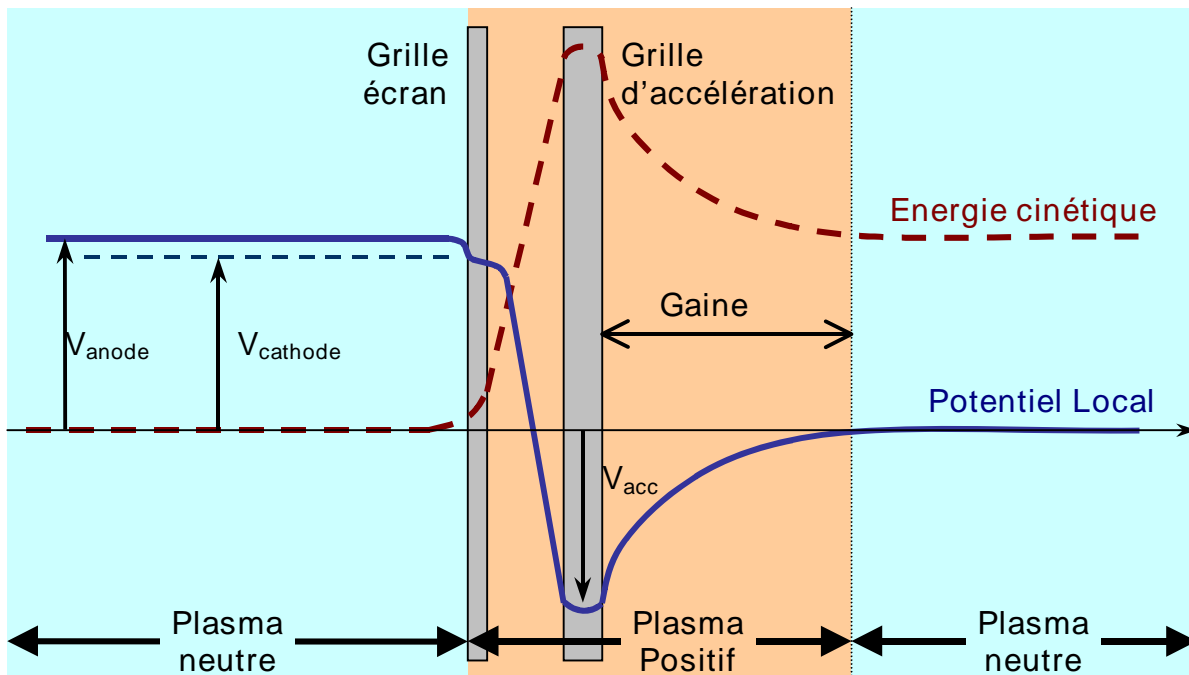


Figure a-5 : Energies cinétiques des ions extraits de source d'ions soumis au potentiel électrique le long de leur parcours

Ainsi, la grille d'accélération permet aux ions d'acquérir alors qu'ils la traversent une énergie cinétique très élevée. Nous verrons par la suite que ce phénomène est d'une grande importance.

## a.III. Paramètres de contrôle de la source

### a.III.1. Taux d'ionisation

On a déjà évoqué le taux d'ionisation du gaz, noté  $\zeta$ . Pour un flux total d'ions  $J$  et une alimentation en gaz  $D$ , il peut être calculé par la formule suivante :

$$\zeta = \frac{J(A)}{D(Nml/min)} \frac{600 \cdot kT^\circ}{q}$$

Puisqu'un fort taux d'ionisation se traduit par une plus faible pression en gaz dans l'enceinte, on a tout intérêt à maximiser ce taux d'ionisation. En effet, l'atmosphère résiduelle est susceptible de produire des réactions d'échange de charge avec les ions.

Ainsi, il existe plusieurs solutions pour augmenter le taux d'ionisation :

- On peut limiter le flux de gaz. Mais il existe un débit minimum en dessous duquel la source ne peut plus produire le courant d'ions demandés.
- On peut augmenter l'énergie des électrons bombardants les ions, mais on risque alors de produire des ions de charge multiple.
- On peut augmenter le débit des électrons bombardant le gaz. Pour cela, il faut chauffer la cathode à des températures plus élevées pour augmenter son émission. Mais pour des raisons technologiques liées à l'échauffement de la source, on ne peut pas augmenter indéfiniment la production d'électrons.

Ainsi, en travaillant aux limites de fonctionnement de la source d'ions, on a arrive à produire 10mA d'ions à 300eV (et une accélération de -300V) avec une alimentation en gaz de 0.3 Nml/min, soit un taux d'ionisation de 40%. Ce taux d'ionisation n'est pas bon, et pourtant c'est le meilleur que l'on peut obtenir. D'ailleurs, pour des raisons de stabilité de la source, on préfère s'éloigner de ces conditions limites de fonctionnement.

### a.III.2. Réglage des paramètres d'accélération : minimisation du courant d'accélération

#### a.III.2.1. Origines du courant d'accélération

On a vu que le système d'accélération est composé de deux grilles. Sur la seconde dite grille d'accélération, on mesure un "courant d'accélération" du à la collection de charges d'ions. On distingue deux origines pour ce courant d'accélération.

Les ions primaires sont issus de la chambre d'ionisation et impactent directement la grille d'accélération à grande vitesse lors de leur extraction.

Les ions secondaires proviennent de l'enceinte : Ce sont des ions lents créés par des réactions d'échange de charge à l'intérieur de l'enceinte. Ils sont d'autant plus facilement collectés par la grille d'accélération que cette dernière est polarisée négativement.

Enfin, il arrive qu'après un certain temps de fonctionnement, l'isolant placé entre les deux grilles soit contaminé en surface et qu'il permette ainsi une certaine conduction électrique. Il y a donc un léger court-circuit qui augmente le courant d'accélération mesuré. La Figure a-6 illustre ces trois origines du courant d'accélération.

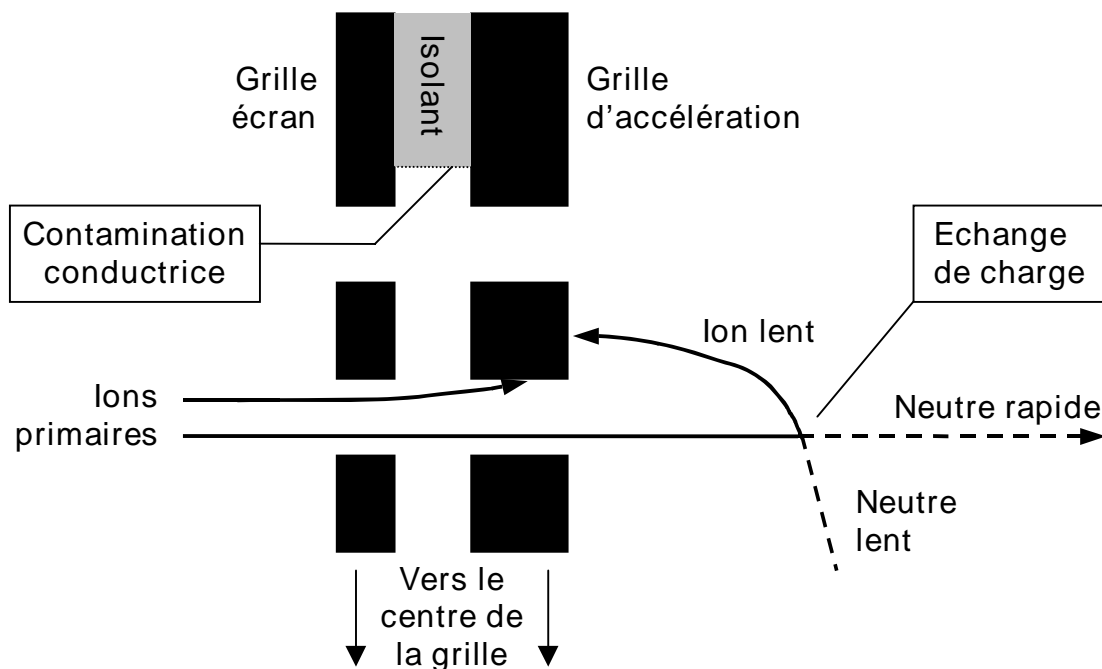


Figure a-6 : Vue en coupe du bord du système d'extraction, et origines du courant d'accélération

Le courant d'accélération traduit donc des imperfections du fonctionnement de la source d'ions. On souhaite donc toujours que ce dernier soit très faible. Ainsi, la géométrie des grilles est sensée être optimisée pour minimiser les collisions directes d'ions sur les grilles. Or, si c'est le cas pour les grilles de propulseurs ioniques, notre source d'ions est moins sophistiquée. Ainsi nos grilles sont rigoureusement planes tandis que celles des propulseurs ioniques sont légèrement courbées. On peut d'ailleurs observer une usure plus rapide sur les bords des grilles due à une érosion ionique par les ions. Ce phénomène est d'autant plus néfaste que l'érosion des trous de la grille d'accélération modifie sa forme et la trajectoire des ions. On risque ainsi d'augmenter les collisions directes d'ions primaires.

Les ions secondaires sont issus d'échanges de charge. Ce phénomène correspond au passage de la charge d'un ion rapide à un atome neutre de son voisinage. Cet échange de charge peut s'effectuer sans collision élastique et donc sans transfert de quantité de mouvement. La réaction d'échange de charge produit donc un neutre rapide et un ion lent à partir d'un ion rapide et d'un neutre lent. Les ions d'échange de charge produits au sein de la gaine électrostatique sont systématiquement collectés par la grille d'accélération puisqu'elle est polarisée négativement.

Des trois origines du courant d'accélération, la pollution des isolants est la moins néfaste, toutefois, elle indique un mauvais fonctionnement de la source. Dans ce cas, nous nettoyons les isolants par abrasion et par chauffage à haute température. On élimine ainsi les dépôts carbonés par combustion et on supprime les court-circuit métalliques par oxydation des métaux.

Le courant d'accélération traduisant un régime de fonctionnement qui n'est pas optimisé, nous avons essayé de déterminer les réglages de source qui permettent de le limiter.

### a.III.2.2. Minimisation du courant d'accélération

Nous avons cherché expérimentalement à trouver comment minimiser le courant d'accélération. En réalité, les paramètres sur lesquels on peut jouer sont limités. Ainsi, pour produire un courant donné à une énergie donnée, nous pouvons choisir le débit de gaz et la tension d'accélération.

En pratique le débit de gaz est optimisé pour obtenir un bon taux d'ionisation. Il influe relativement peu sur le courant d'accélération. Le débit de gaz doit être minimisé de façon à diminuer la pression résiduelle en gaz et ainsi limiter les échanges de charge.

Au contraire, le courant d'accélération est fortement dépendant de la tension d'accélération. En effet, la tension d'accélération modifie la carte des potentiels. Ainsi les trajectoires des ions dépendent fortement de la tension d'accélération. Ainsi, dans des conditions données de courant et d'énergie nous avons fait varier la tension d'accélération et mesuré le courant d'accélération. Ainsi, la Figure a-7 montre le courant d'accélération mesuré sur la grille d'accélération pour un faisceau d'ions à 300eV de 10mA. Le courant d'accélération est exprimé comme une fraction du courant total.

Pour information, le constructeur indique que le courant d'accélération devrait avoisiner 10% du courant total.

Dans ce cas, on observe alors qu'il existe une tension d'accélération optimale entre 250 et 300V qui permet de minimiser le courant d'accélération.

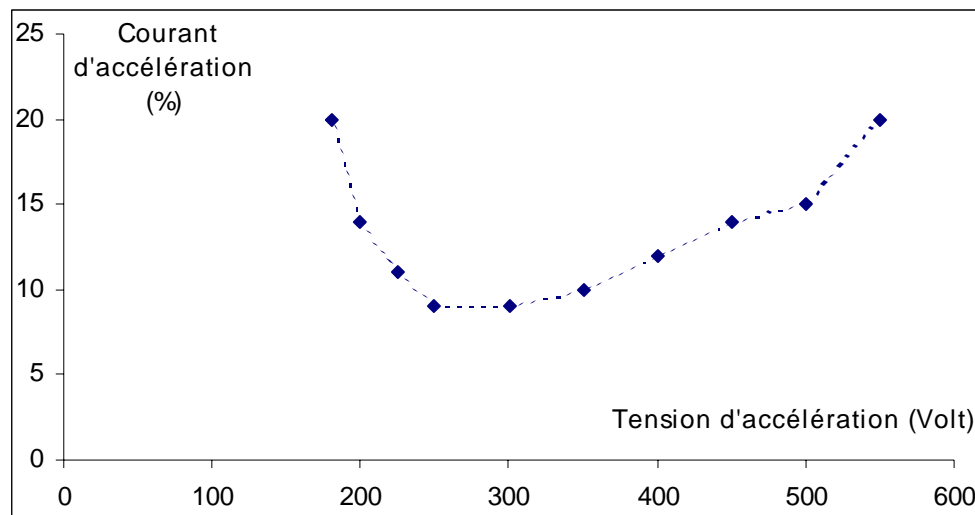


Figure a-7 : Courant d'accélération exprimé en pourcentage du courant d'ions en fonction de la tension d'accélération appliquée

Nous avons ainsi déterminé les conditions de fonctionnement qui permettent de minimiser la tension d'accélération.

Nous avons effectué ce travail pour différentes énergies et différents courants et pour chaque caractéristique du flux d'ions nous avons mesuré la tension d'accélération optimale produisant le courant d'accélération minimum. La Figure a-8 rapporte les valeurs de tension d'accélération optimale obtenues pour différentes conditions d'utilisation de la source d'ions. On peut alors observer plusieurs tendances :

- Plus le courant est élevé, plus la tension d'accélération doit être importante: cela traduit la loi de Child évoquée au §a.II.1.2.

- Plus l'énergie des ions est importante plus la tension d'accélération optimale est basse. Cette observation traduit encore la loi de Child.

- Pour un courant donné, la différence de potentiel entre les deux grilles est une constante. Cette dernière observation s'explique aisément. En effet, jusqu'à la sortie de la source d'ions, les potentiels locaux vus par les ions ne dépendent que de la différence de potentiel entre l'anode et la grille d'accélération (à une constante près). Ainsi en gardant cette différence de potentiel constante, les trajectoires des ions ne dépendent pas de l'énergie de consigne des ions.

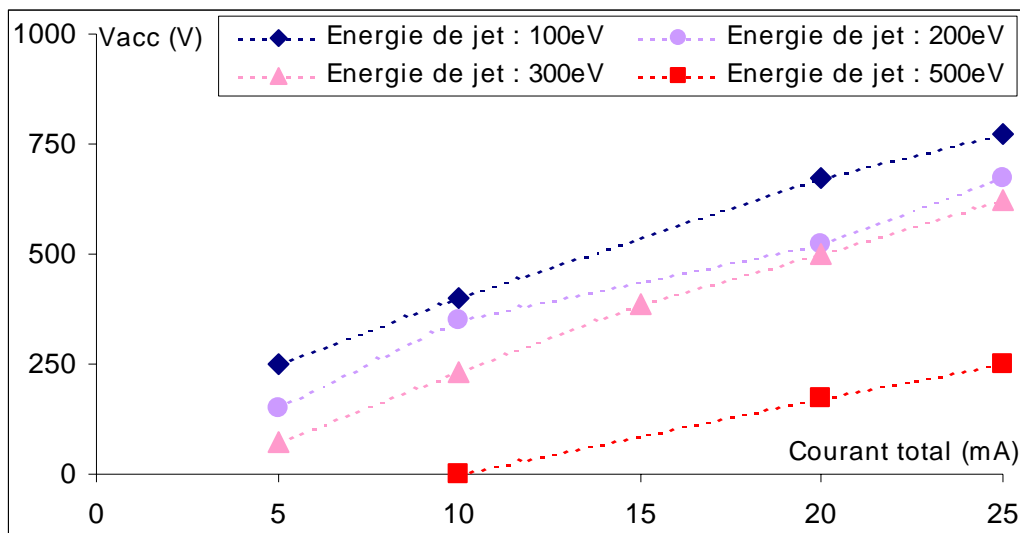


Figure a-8 : Tension d'accélération optimale en fonction du courant d'ions de leur énergie

Ainsi, nous avons mis en évidence le fait qu'il existe un réglage optimum de la tension d'accélération qui limite le courant d'accélération. Cette tension correspond à une bonne focalisation du faisceau d'ions à travers la grille d'accélération.

### a.III.3. Divergence du faisceau d'ions

La divergence du faisceau d'ions en sortie de source dépend fortement de la tension d'accélération. En effet, plus la tension d'accélération est élevée, plus le faisceau est divergent. Nous avons vu dans le paragraphe précédent que pour un courant donné, la trajectoire des particules ne dépend jusqu'à la grille d'accélération que de la différence de potentiel entre l'anode et la grille d'accélération. Pourtant pour un courant donné, et une différence de potentiel entre l'anode et la grille d'accélération identique, la divergence du faisceau d'ions dépend fortement de leur énergie. Ainsi la Figure a-9 montre des mesures du courant ionique dans l'enceinte effectuées à 38cm de la source d'ions. On observe alors que pour une énergie de 100eV et une accélération de -500V, le faisceau est extrêmement divergent, à tel point qu'il paraît presque plat dans la zone étudiée. Au contraire, la mesure effectuée à 300eV (Tension d'accélération de -300V), montre un faisceau beaucoup moins divergent. Ainsi le courant mesuré dans l'axe de la source est quatre fois plus important dans ce second cas que dans le premier.

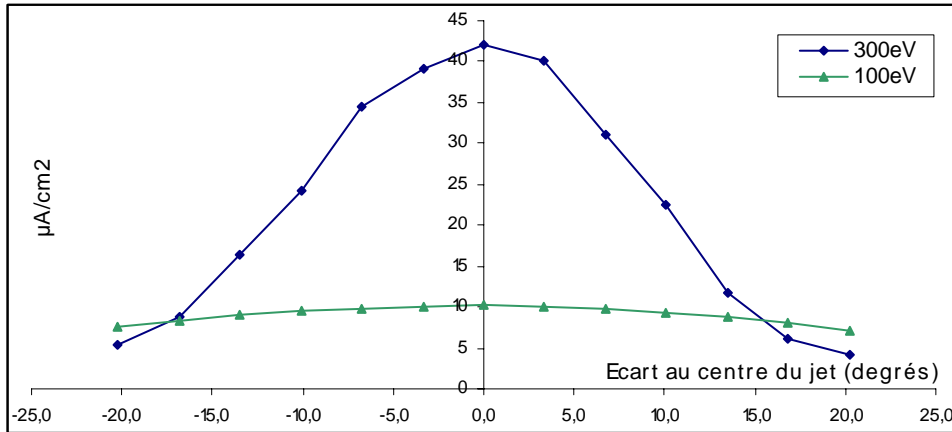


Figure a-9 : Profils du courant d'ions dans l'enceinte pour une énergie d'ions de 300eV (10mA,  $V_{acc}=-300V$ ) et de 100eV (10mA,  $V_{acc}=-500V$ )

Ainsi, plus la tension d'accélération est négative, plus le faisceau d'ions est divergent. Plusieurs phénomènes expliquent cette divergence. En particulier, il apparaît une divergence à l'intérieur de la gaine électrostatique à cause de la charge d'espace. Ainsi plus cette gaine est importante, plus la divergence est importante.

Par ailleurs, dans la gaine électrostatique, les ions subissent une décélération selon la composante longitudinale de leur vitesse. Plus cette décélération est importante, plus la composant transversale prend un poids important. Nous allons détailler ces origines de la divergence du faisceau d'ions dans les paragraphes suivants.

### a.III.3.1. Description de la gaine électrostatique

En sortie de la grille accélératrice, cette dernière repousse les électrons de telle sorte que l'on se trouve en présence d'un plasma chargé positivement qui a tendance à diverger. Cette zone non neutralisée est la gaine électrostatique. Plus la tension d'accélération est élevée plus cette dernière est épaisse.

Le profil de potentiel  $V$  dans la gaine est régi par l'équation de Poisson :

$$\Delta V = \frac{q}{\epsilon_0} (n_{ions} - n_{electrons})$$

où  $\epsilon_0$  est la constante diélectrique du vide,  $q$  la charge de l'électron et  $n$  désigne une densité de particules.

On considère que les électrons ont une distribution de Boltzman dans un champ de potentiel électrique soit :

$$n_{electrons} = n_0 \cdot e^{\frac{qV}{kT}}$$

Avec  $n_0$  la densité en électrons et en ions du plasma électriquement nul en sortie de gaine.

Nous ferons l'hypothèse d'un flux d'ions homogène non divergents. Dans ce cas, les ions ont une densité inversement proportionnelle à leur vitesse  $v$  soit :

$$n_{ions} = \frac{J}{qvS}$$

avec  $qV_{anode} = \frac{1}{2}mv^2 + qV$  où  $J$  est le courant d'ions produit par la source et  $S$  la surface de la source.

$$\text{soit } n_{ions} = n_0 \sqrt{\frac{V_{anode}}{V_{anode} - V}} \text{ avec } n_0 = \frac{J}{qS} \sqrt{\frac{m}{2qV_{anode}}}$$

Dans les conditions d'utilisation de la source que nous utilisons, la résolution numérique 1D de l'équation de Poisson donne une épaisseur maximale de gaine de 4mm environ pour la tension d'accélération la plus élevée que nous utilisons, soit  $V_{acc} = -560V$ , pour un courant d'ions à 40eV de 10mA. Dans ces conditions, la Figure a-10 représente le potentiel dans la gaine obtenu par la résolution en une dimension de l'équation de Poisson.

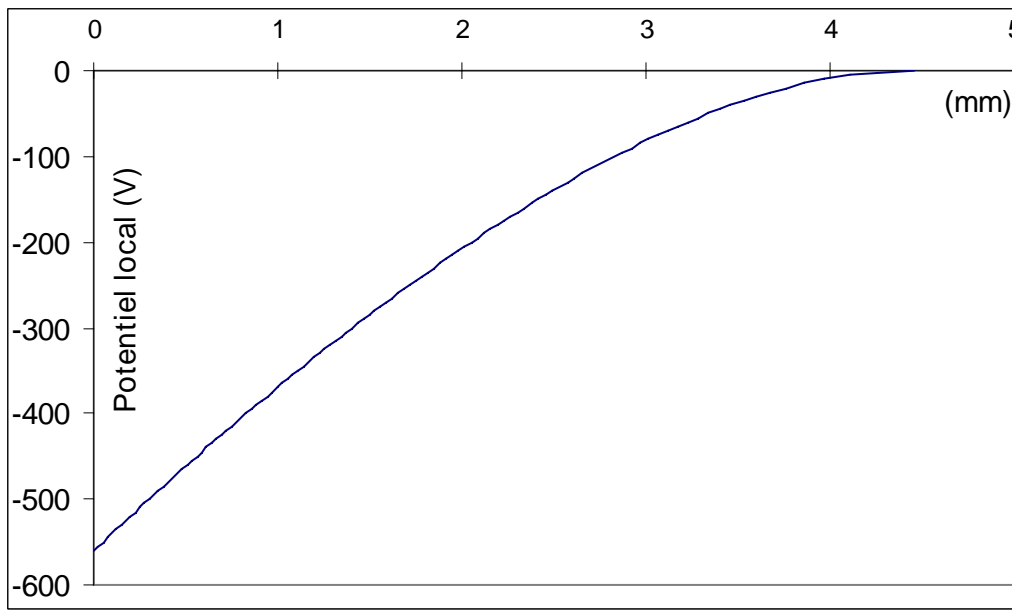


Figure a-10 : Exemple de profil de gaine calculé pour  $V_{anode}=40eV$ ,  $V_{acc}=-560V$   $J=10mA$

### a.III.3.2. Décélération longitudinale des ions

Par ailleurs, en sortie de grille les ions sont décélérés dans la gaine jusqu'à atteindre leur vitesse de consigne. La décélération a lieu selon la composante normale aux grilles  $v_{\perp}$  alors que la composante tangentielle reste inchangée  $v_{\parallel}$ . Ceci provoque la divergence du jet comme l'illustre la Figure a-11.

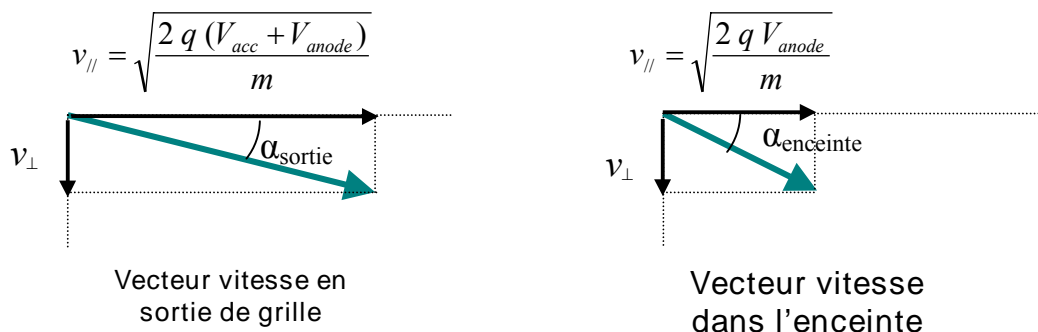


Figure a-11 : Vecteurs vitesse d'un même ion en sortie de la grille d'accélération (gauche) et dans l'enceinte après sortie de la gaine électrostatique



On peut alors montrer qu'il existe une relation entre l'angle  $\alpha_{\text{sortie}}$  du vecteur vitesse à la sortie de la grille d'accélération et l'angle  $\alpha_{\text{enceinte}}$  dans l'enceinte :

$$\tan \alpha_{\text{sortie}} = \tan \alpha_{\text{enceinte}} \cdot \sqrt{1 + \frac{V_{\text{acc}}}{V_{\text{anode}}}}$$

On remarque que cet effet de divergence du fait de la décélération uniquement selon la composante longitudinale de la vitesse de l'ion est d'autant plus important que l'énergie de consigne imposée par  $V_{\text{anode}}$  est faible.

## a.IV. Conclusion

Nous avons donc vu que les réglages de la source d'ions sont très contraints. En effet, si on veut maximiser l'efficacité d'ionisation de la source et minimiser le courant d'accélération, un seul réglage permet de produire un faisceau d'ions pour une énergie donnée et un courant total donné.

Si on désire également maîtriser la divergence du faisceau d'ions, par exemple pour augmenter la densité d'ions au centre du jet, on doit limiter le courant total d'ions, ce qui semble paradoxal.

Ainsi, les conditions optimales d'utilisation de la source d'ions sont assez contraignantes et cette partie nous permet de déterminer ces réglages optimaux.

# Annexe b. Spectrométrie de masse

## b.I. Présentation de la spectrométrie de masse

La spectrométrie de masse utilise la différence du rapport masse/charge ( $m/q$ ) d'atomes ou de molécules ionisés pour les séparer. Ces ions sont ensuite quantifiés. Le schéma de la Figure b-1 permet de décrire schématiquement le fonctionnement général d'un spectromètre de masse.

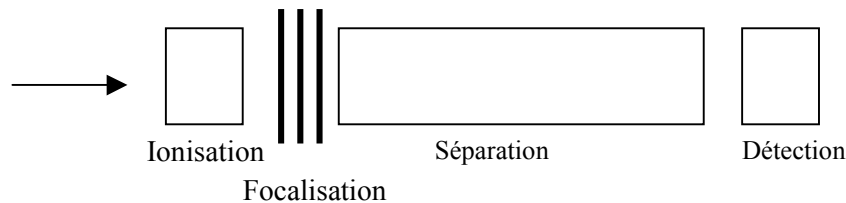
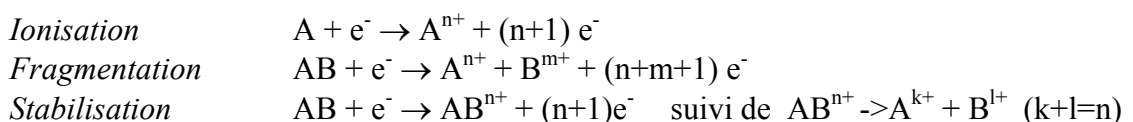


Figure b-1 : Principe de fonctionnement du spectromètre de masse

### b.I.1. Ionisation

Les produits à étudier sont dans un premier temps ionisés. Dans notre cas, cette opération est effectuée grâce au bombardement par des électrons énergétiques. Mais ce bombardement peut aussi donner lieu à des fragmentations de molécules. La fragmentation peut également être postérieure à l'ionisation, on parle alors de stabilisation.



### b.I.2. Focalisation

Un ensemble de plaques polarisées permet d'extraire les ions de la région d'ionisation et de les focaliser dans la direction du séparateur d'ions.

### b.I.3. Séparation

Il existe plusieurs techniques de séparation. Certaines utilisent la trajectoire des ions soumis à un champ magnétique ou électrique, d'autres utilisent le temps de vol des ions de leur création jusqu'à un détecteur. Dans notre cas nous utilisons un quadripôle.

Ce filtre représenté de façon schématisée par la Figure b-2 est constitué de quatre barreaux polarisés par une tension alternative haute fréquence. Les ions sont séparés dans un champ quadripolaire à haute fréquence entre les quatre barreaux. La tension entre les électrodes a une composante alternative  $V \cos \omega t$  et une composante continue  $U$ . Les ions

passant entre les barreaux subissent des oscillations. Pour des valeurs de  $U, V$  et  $w$  fixées, seules les particules d'un rapport  $(m/q)_0$  donné traversent le quadripôle et atteignent le détecteur. Ainsi la filtration peut être effectuée soit en faisant varier  $w$  soit en faisant varier  $V$  (c'est le cas pour des raisons pratiques), on obtient alors une relation linéaire entre  $V$  et  $(m/q)_0$ .

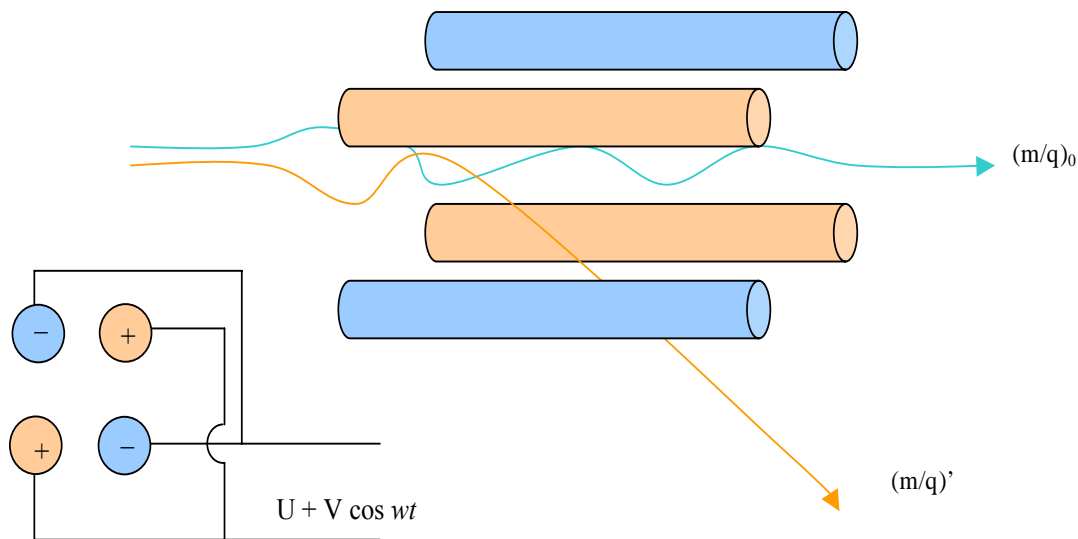


Figure b-2 : Principe de fonctionnement du filtre quadripôle

#### b.1.4. Détecteur

Le détecteur permet de transformer un flux d'ions en courant électrique. Pour cela on utilise le phénomène de production d'électrons secondaires.

Les ions accélérés impactent une cible qui libère alors des électrons. Ces électrons sont collectés par une deuxième cible (polarisée négativement par rapport à la première) qui libère à son tour des électrons. Ce phénomène est répété plusieurs fois et à chaque étape, la quantité d'électrons est multipliée. On obtient finalement un flux d'électrons qui peut être mesuré. Ce dispositif est appelé multiplicateur d'électrons secondaires. La Figure b-3 permet d'en visualiser une photo et le principe de fonctionnement.

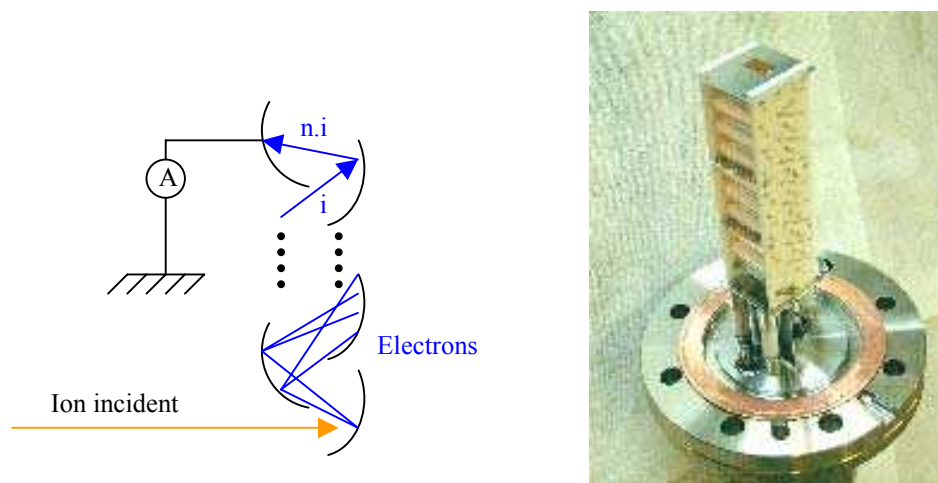


Figure b-3 : Principe de fonctionnement et photo d'un multiplicateur d'électrons secondaires

## b.II. Montage expérimental

### b.II.1. Principe

On désire disposer d'un degré de liberté sur le spectromètre de masse de façon à pouvoir mesurer des lobes d'émission. L'idéal serait de pouvoir déplacer le spectromètre de masse autour de l'échantillon. Mais du fait de l'encombrement du spectromètre de masse, cela est impossible. La stratégie retenue est donc de donner un degré de liberté de rotation au moyen d'un soufflet métallique souple. La Figure b-4 illustre cette différence entre la solution idéale et celle que nous avons retenue.

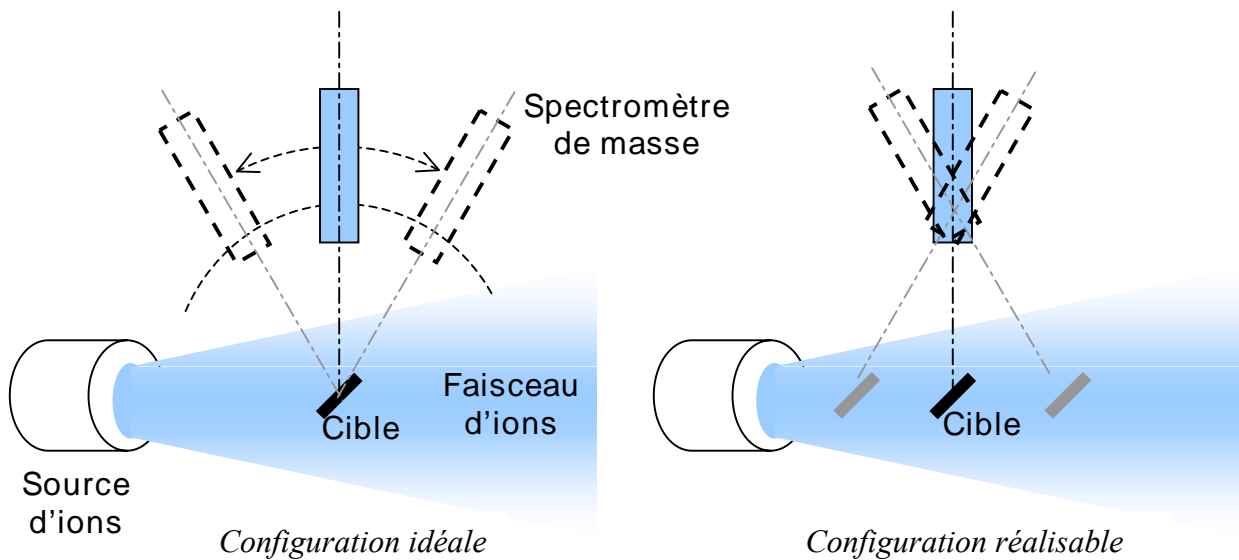


Figure b-4 : Stratégie retenue pour équiper l'enceinte d'un spectromètre de masse

En pratique, le spectromètre de masse est monté sur l'enceinte sous vide comme représenté par la Figure b-5 au moyen d'un soufflet dimensionné de façon à permettre une course angulaire entre  $-30^\circ$  et  $+30^\circ$ . Cette amplitude correspond à un échantillon cible placé en fond de chambre et proche de la source. Avec ce montage, à chaque angle de visée  $\alpha$  (défini par la Figure b-5) correspond une distance à la source  $L$ , ainsi qu'une distance au spectromètre de masse  $d$ . Par conséquent, la création d'un lobe d'émission nécessite la connaissance du flux d'ions sur la cible pour chaque direction d'émission.

Ce montage a l'avantage de permettre un second degré de liberté : l'angle  $\beta$ . Ainsi, on peut mesurer des lobes d'émission en 3 dimensions.

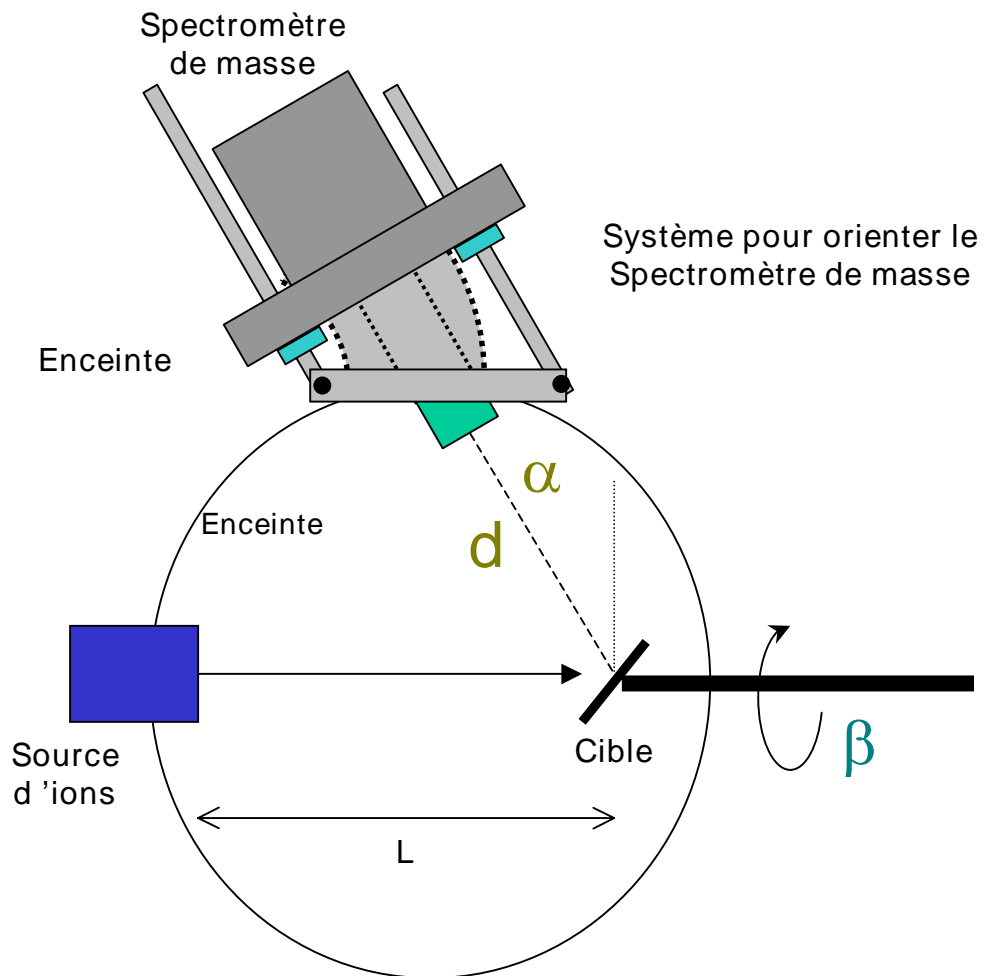


Figure b-5 : Montage du spectromètre de masse pour mesure du lobe d'émission

### b.II.2. Réalisation

Le spectromètre de masse équipé d'un système de pompage propre est monté sur un bâti mobile (sur roulettes). Il est lié à l'enceinte d'érosion IDEFIXe par l'intermédiaire d'un soufflet métallique. La Figure b-6 illustre ce montage et son encombrement. Sur la Figure b-7, on peut alors distinguer le soufflet métallique ainsi qu'un système constitué de deux tiges filetées et d'écrous qui permet en modifiant les valeurs des longueurs  $L_1$  et  $L_2$  (définies sur la Figure b-7) de faire varier la direction de visée du spectromètre de masse. La cible est alors placée dans la direction de visée du spectromètre de masse.

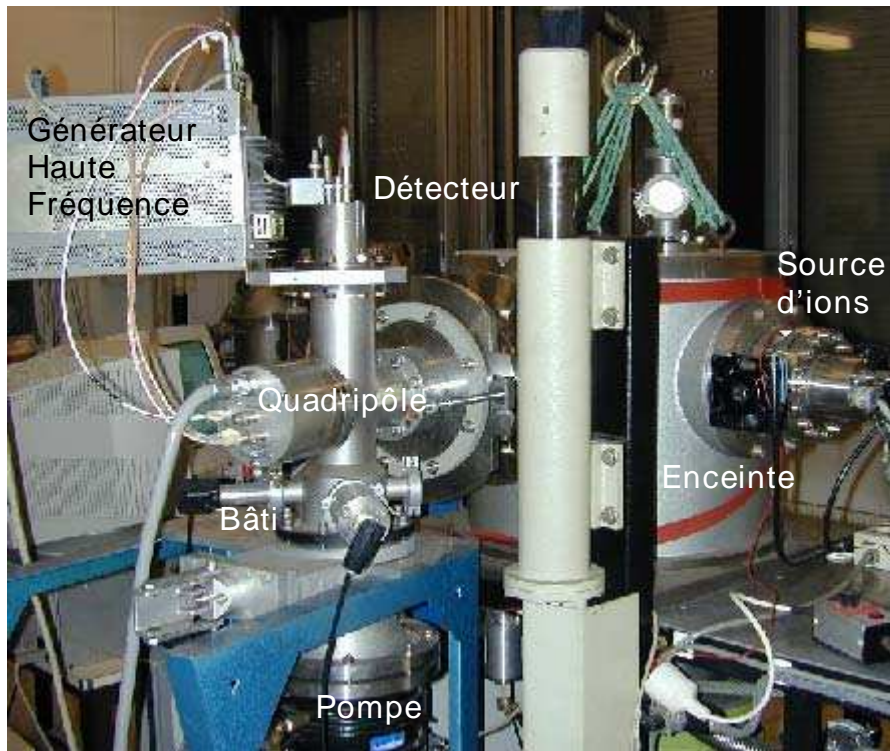


Figure b-6 : Vue de côté de l'installation

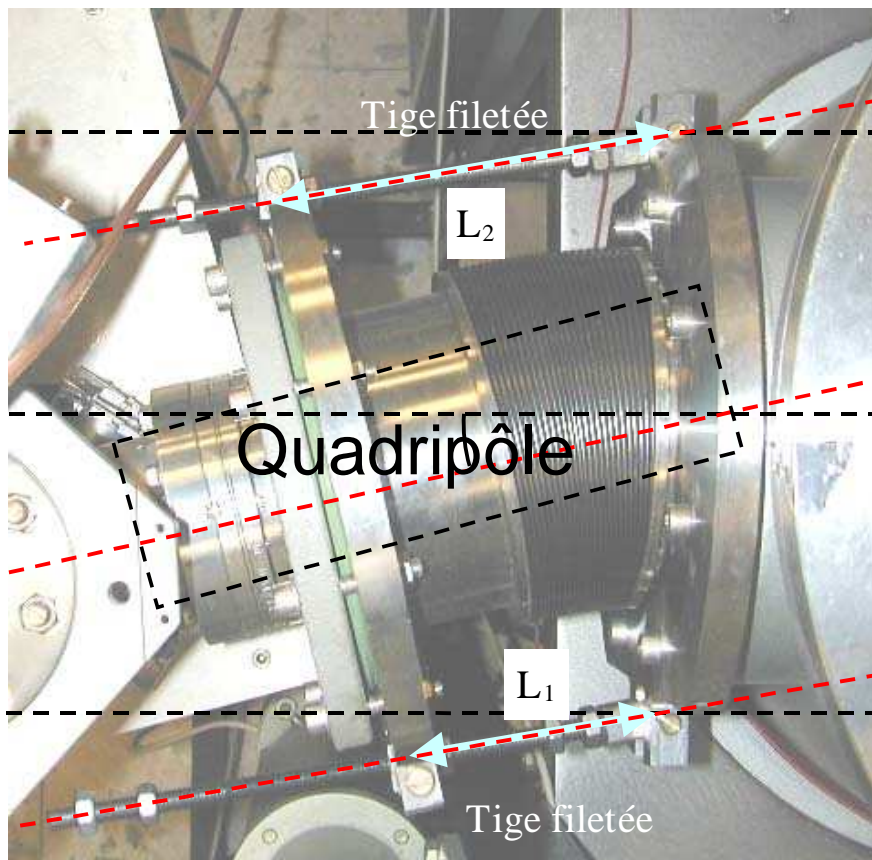


Figure b-7 : Système d'orientation du spectromètre de masse

### b.II.3. Filtration des ions

Comme cela a été expliqué précédemment, pour étudier des particules neutres, le spectromètre de masse les ionise dans un premier temps avant de les séparer au moyen du quadripôle. Toutefois, si l'on supprime l'ionisation en tête du spectromètre de masse, on observe tout de même un signal. Ce signal correspond à la mesure des ions. Ces derniers peuvent être produits directement au moment de l'érosion, mais la littérature indique que la proportion des produits d'érosion sous forme d'ions est très faible à basse énergie<sup>1</sup>. Ils peuvent également être produits par échange de charge au sein de l'enceinte.

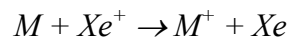
#### b.II.3.1. Production d'ions lors de l'érosion

En réalité, dans le cas des métaux purs, l'ionisation est liée au passage de la surface à forte vitesse. Ainsi, à faible vitesse (comme c'est le cas pour une érosion à basse énergie) peu d'atomes sont ionisés. Ainsi, alors que le taux d'érosion de l'aluminium par  $\text{Ar}^+$  à 3keV vaut 3 atomes par ion, la production d'ions est de 0.007 ions  $\text{Al}^+$  par ion incident, soit 0.2% d'ionisation<sup>1</sup>.

Par contre dans le cas de liaisons ioniques dans le solide, il semblerait que les atomes puissent garder leur polarisation. La référence ne précise pas l'état d'ionisation d'atomes issus de liaisons covalentes, mais on peut s'attendre à ce que les liaisons iono-covalentes se comportent comme les liaisons ioniques pures.

#### b.II.3.2. Production d'ions par échange de charge

Après leur érosion les produits d'érosion neutres (notés  $M$ ) sont susceptibles d'être ionisés par échange de charge avec les ions  $\text{Xe}^+$  issus de la source d'ions.



La probabilité d'ionisation d'une molécule  $M$  est proportionnelle à la section efficace d'échange de charge avec les ions  $\text{Xe}^+$  ainsi qu'au flux d'ions traversé. Or cette section efficace d'échange de charge dépend fortement de la molécule étudiée. Ainsi dans certains cas, la proportion du signal due aux ions peut devenir majoritaire.

La proportion d'ionisation dépend également fortement de la position de la cible dans l'enceinte. Ce phénomène est expliqué par la Figure b-8. On y observe qu'un échantillon placé en fond de chambre traverse un flux d'ions xénon moindre que s'il est placé en proximité de la source, par conséquent il subit un nombre moindre d'ionisations par échange de charge. Donc le signal dû aux ions croît quand la cible d'érosion est rapprochée de la source d'ions.

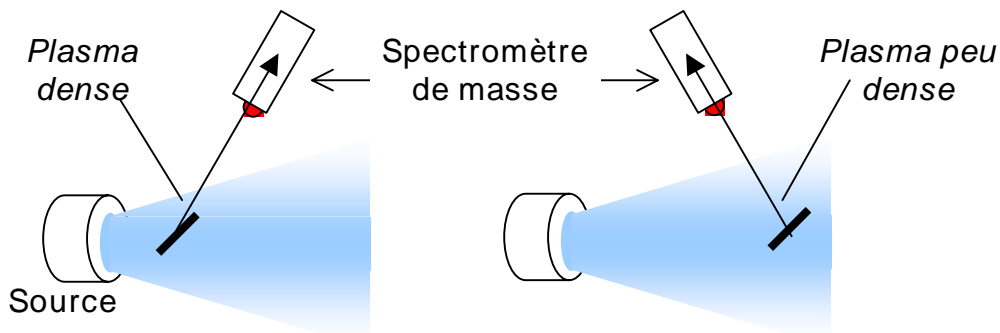


Figure b-8 : Influence de la position de la cible sur la production d'ions par échange de charge

### b.II.3.3. Suppression des ions

Or du fait de la faible efficacité d'ionisation de la chambre d'ionisation en tête du spectromètre de masse, les ions ont une bien plus forte influence sur le signal mesuré que les molécules neutres. On a donc décidé de supprimer les ions du faisceau analysé au moyen d'un système de grilles polarisées. On utilise alors trois grilles parallèles disposées en tête du spectromètre de masse. Les deux grilles externes sont reliées à la masse, alors que la grille centrale se voit appliqué un potentiel positif  $V_F$  de 200V repoussant les ions. Ce montage est représenté par la Figure b-9.

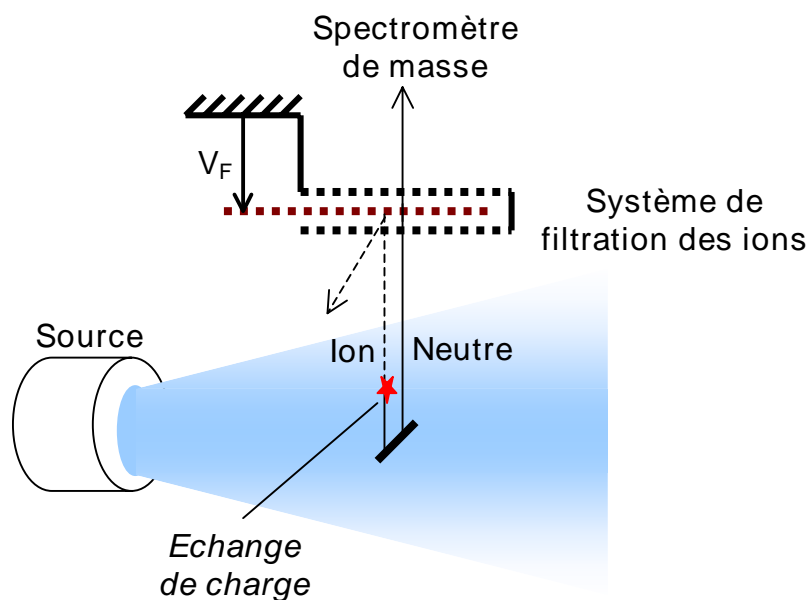


Figure b-9 : Système de filtration des ions

Un second intérêt de la filtration du signal dû aux ions est de supprimer la non linéarité en courant induite par les ions. En effet, l'érosion est proportionnelle au flux d'ions érodants. De la même façon, les échanges des charges dans le plasma dérivant sont proportionnels au flux d'ions traversé. Ainsi, en présence d'ions, le signal mesuré par le spectromètre de masse est la superposition d'un signal dû aux neutres évoluant de façon linéaire avec le courant d'ions érodants et un signal dû aux ions évoluant avec le carré du flux d'ions érodants.

### b.II.4. Signal de fond

Pendant une mesure avec le spectromètre de masse, pour une masse donnée, le signal mesuré est l'addition de plusieurs composantes. Celle qui nous intéresse est due aux molécules directement émises par la cible dans la direction du spectromètre de masse, alors



que les autres composantes sont issues de sources secondaires. Dans le cas de l'érosion de certaines cibles telles le Kapton, le taux d'érosion étant faible, la composante du signal qui n'est pas due aux produits d'érosion et que l'on appellera signal de fond n'est pas négligeable.

Parmi les composantes du signal mesuré on répertorie :

- Les molécules issues de la cible émises dans la direction du spectromètre de masse.
- Des molécules issues de la cible et collectées après un ou plusieurs rebonds sur les parois de l'enceinte.
- Des molécules érodées du fond de la chambre d'érosion.
- Des molécules érodées de la source (grilles).
- Des molécules de l'atmosphère résiduelle de la chambre (évolue au cours du temps du fait du dégazage).
- Des molécules issues du dégazage du spectromètre de masse.

On souhaite ne mesurer que les molécules émises directement de la cible dans la direction du spectromètre de masse. Pour cela on utilise un diaphragme équipé d'un obturateur décrit par la Figure b-10. On peut alors observer que le diaphragme permet de limiter l'angle de visée. On observe également que la différence entre le signal mesuré avec un obturateur ouvert et avec un obturateur fermé correspond à l'émission directe dans la direction du spectromètre de masse.

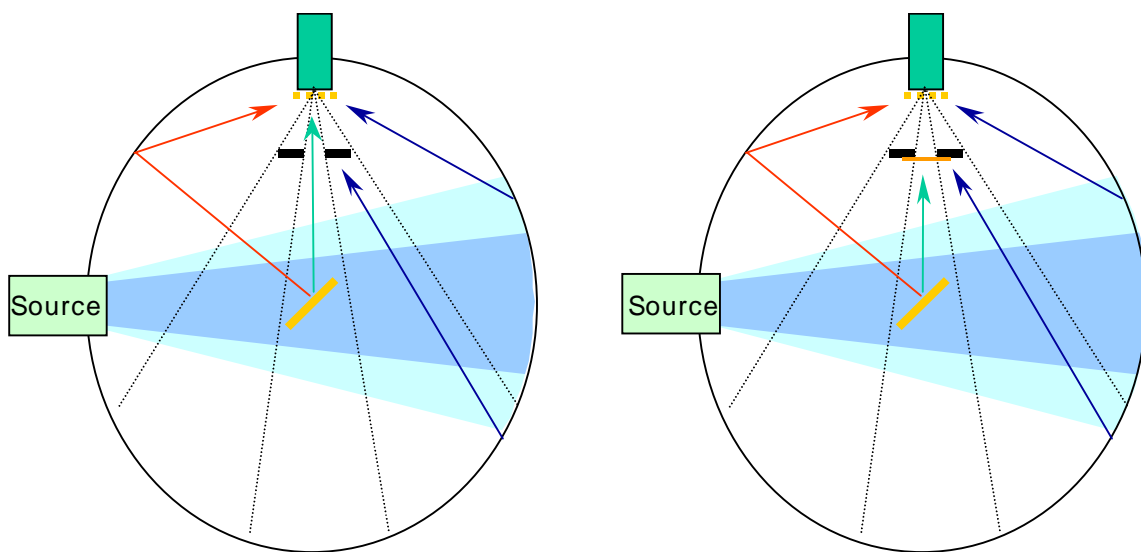


Figure b-10 : Système de diaphragme et obturateur pour supprimer le signal de fond.

Le graphique de la Figure b-11 montre l'exemple de la mesure du signal de la masse 12 au cours du temps. Dans un premier temps, l'obturateur est ouvert, on observe un signal légèrement bruité qui tend à décroître de façon continue. Après huit minutes, on ferme le diaphragme. Le signal chute alors instantanément (on est limité par le temps d'acquisition d'une minute). A la seizième minute, l'obturateur est rouvert et le signal remonte instantanément et retrouve la courbe décroissante initiale.

La décroissance monotone est due à l'atmosphère résiduelle qui est de plus en plus propre au cours de l'expérience. Ce phénomène est observable lors des premières utilisations après une mise à l'air de l'enceinte. Mais à partir du second jour d'expérience sans mise à l'air, le signal de fond reste quasiment constant dans le temps. Quant à la différence entre le

signal mesuré avec et sans obturateur, elle correspond à l'émission de carbone (masse 12) dans la direction du spectromètre de masse. Cette différence ne dépend pas du signal de fond.

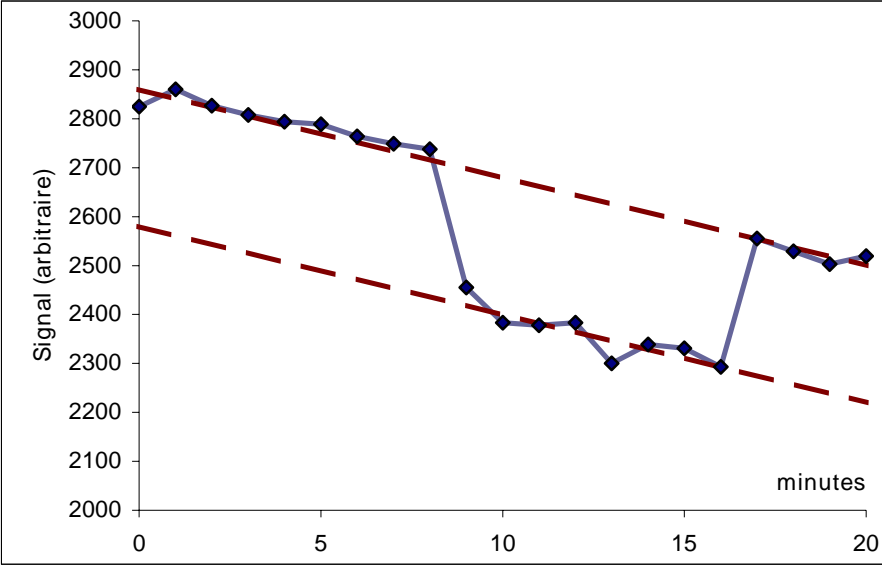


Figure b-11 : Mesure du signal d'émission directe (masse 12) par suppression d'un signal de fond variable

# Annexe c. Evolution de la surface

## c.1. Evolution des points anguleux

On a vu que beaucoup de formes tendent vers l'apparition de points anguleux. Or dès qu'on atteint un point anguleux, on ne peut plus traiter l'érosion en étudiant l'angle local puisque celui-ci n'y est plus défini. Il y a en quelque sorte deux angles pour un même point. Dans ce paragraphe on verra que les points anguleux sont susceptibles d'évoluer et se déplacer.

Pour cela, on se base sur l'approche de Barber en considérant une surface localement formée de deux segments. On peut alors étudier la direction prise par les deux segments et en déduire l'évolution de l'angle qu'ils forment. On distingue quatre cas suivant les mouvements relatifs des segments 1 et 2. En se plaçant dans un repère lié au premier segment et en étudiant le mouvement relatif de la surface 2, on peut distinguer plusieurs cas selon que l'on se déplace vers la zone *a*, *b*, *c* ou *d* du graphique de la Figure c-1.

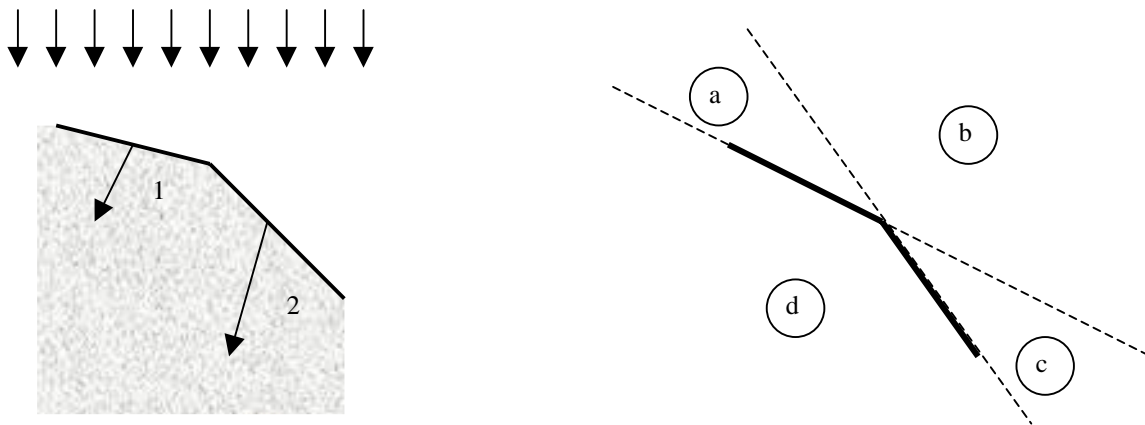


Figure c-1 : Différentes évolutions possibles d'un point anguleux

Les différents cas possibles sont résumés par les graphiques de Figure c-2 et Figure c-3. La Figure c-4 illustrant ces comportements par des simulations utilisant le modèle de Barber<sup>ii</sup>. La surface initiale est représentée en pointillés noirs. Le segment 2 déplacé est représenté en pointillés rouges. On s'aperçoit que dans certains cas, une partie du segment 2 disparaît. La nouvelle surface est tracée en traits pleins.

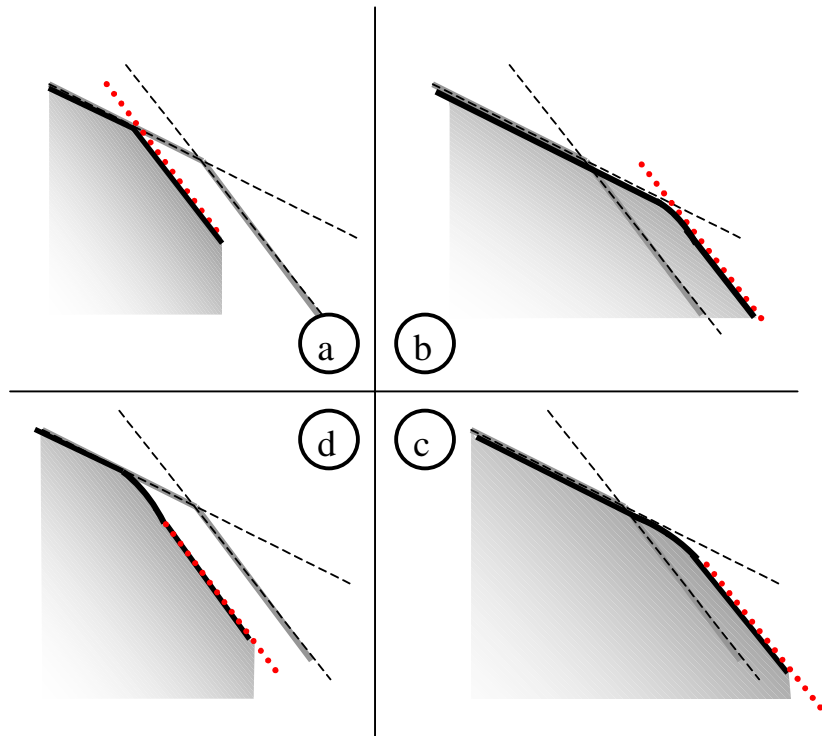


Figure c-2 : Quatre comportements possibles d'un angle convexe formé par deux segments

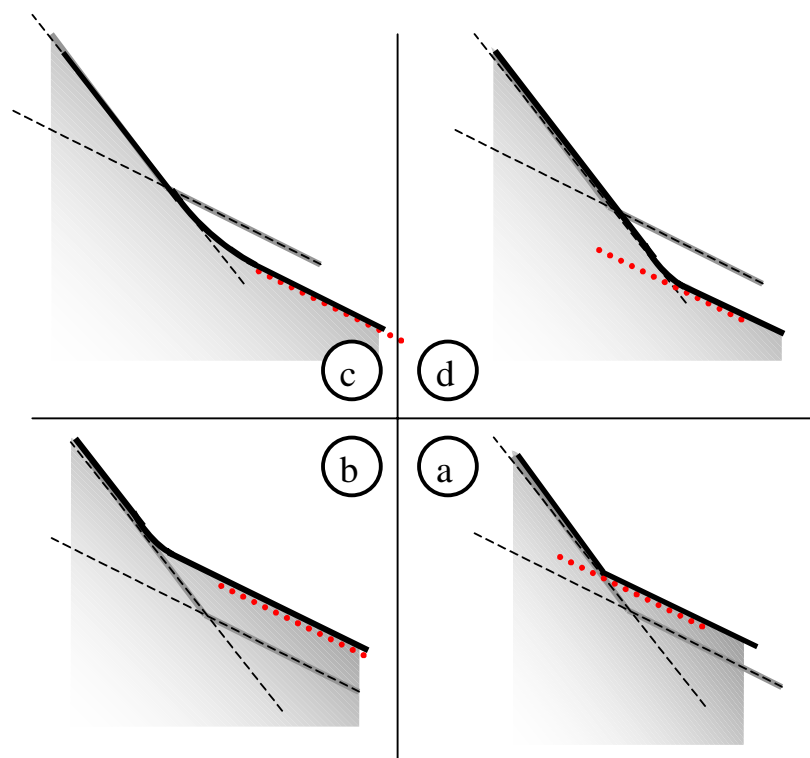


Figure c-3 : Quatre comportements possibles d'un angle concave formé par deux segments

Ainsi, dans le cas d'un angle convexe, dans le cas *a*, l'angle est conservé et tend vers un point anguleux.

Dans les cas  $b$  et  $c$ , un domaine apparaît entre les deux segments initiaux. Suivant les cas, la pente de ce segment va tendre vers l'angle du segment qui a le plus fort taux d'érosion ou  $\theta_m$  dans le cas où l'un des deux angles est supérieur et l'autre inférieur (voir paragraphes précédents). Dans le cas  $d$ , un segment apparaît. L'angle formé avec le *segment 1* tend vers un angle dont la vitesse relative de déplacement par rapport au *segment 1* est parallèle au *segment 1*.

Une surface formée de deux types de segments alternés dont les convexités correspondent au cas  $a$  ont des creux de type  $c$ . Dans un tel cas, la partie convexe a tendance à se réduire. Si les deux segments ont des angles tous les deux inférieurs ou supérieurs à  $\theta_m$ , le creux a tendance à s'ouvrir en formant une courbure dont les angles sont intermédiaires. Dans ce cas, on tend à lisser la surface. Par contre, si on a un angle supérieur à et l'autre inférieur, le creux s'ouvre en formant un point anguleux dont les angles sont les angles des deux segments. Dans ce cas, le motif serait stable. Or  $v_x$  s'annule uniquement en  $0^\circ$ ,  $\theta_m$ ,  $-\theta_m$ ,  $90^\circ$  et  $-90^\circ$ . Ainsi deux segments d'angles de même signe, l'un étant supérieur à  $\theta_m$  et l'autre inférieur ne peuvent pas se rapprocher (si le motif formé est convexe). Donc la situation  $a$  ne peut pas mener à des motifs stables. Un cas limite tend tout de même vers ce cas, il s'agit d'une surface formée de segments à  $0^\circ$  et  $90^\circ$ . Mais ce cas n'est que théorique.

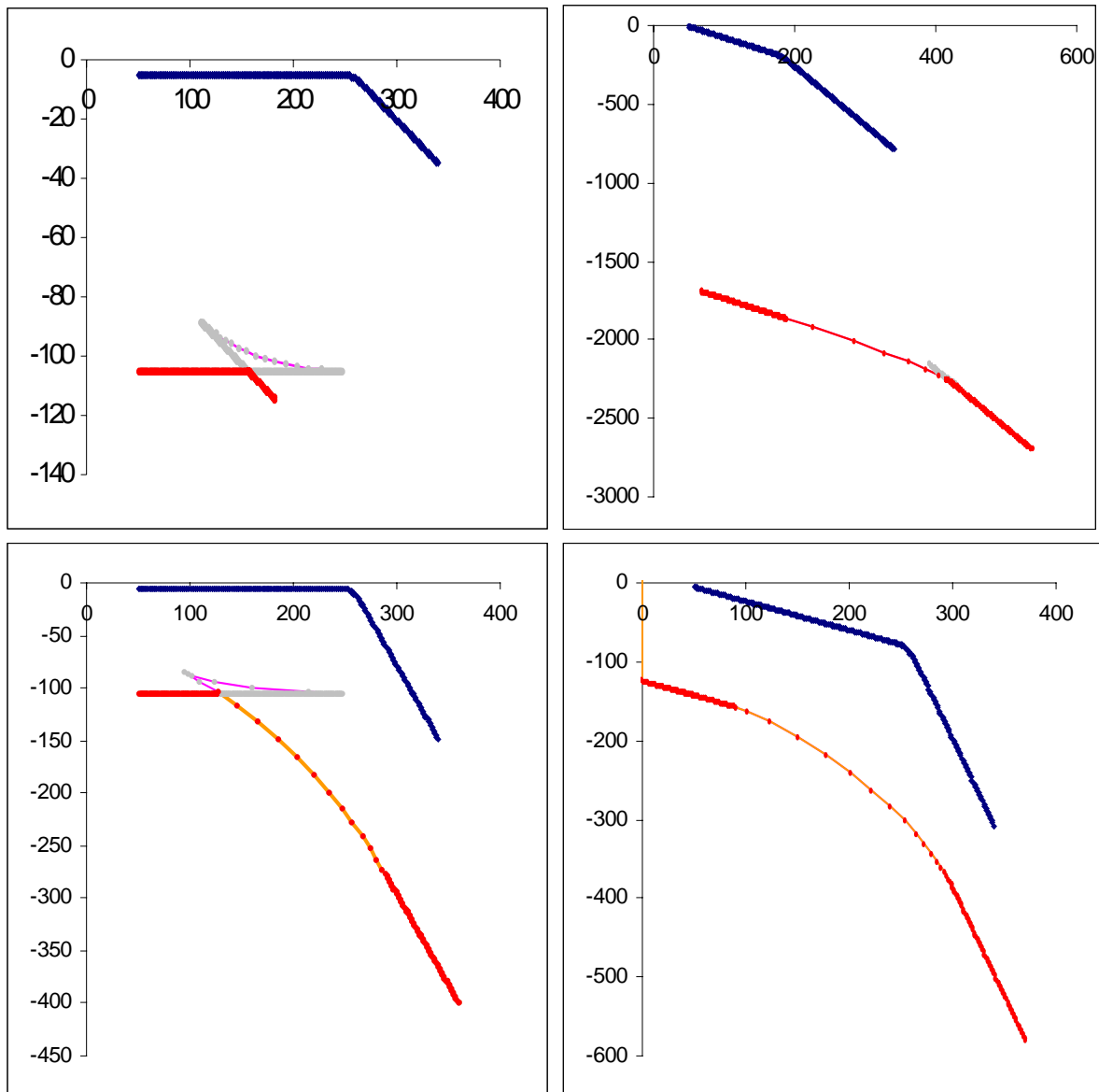


Figure c-4 : Simulation de l'évolution de formes convexes

## c.II. Evolution déduite d'une surface

### c.II.1. Erosion normale

On montre facilement que sous incidence normale, tout motif tend à disparaître rapidement. En effet, les creux ont tendance à s'aplatir et s'élargir, tandis que les pointes s'affinent et régressent. Cette évolution est simulée par la méthode de Barber à la Figure c-5. (Pour une meilleure visualisation, les courbes érodées sont translattées vers le haut d'une hauteur correspondant au taux d'érosion d'une surface plane).

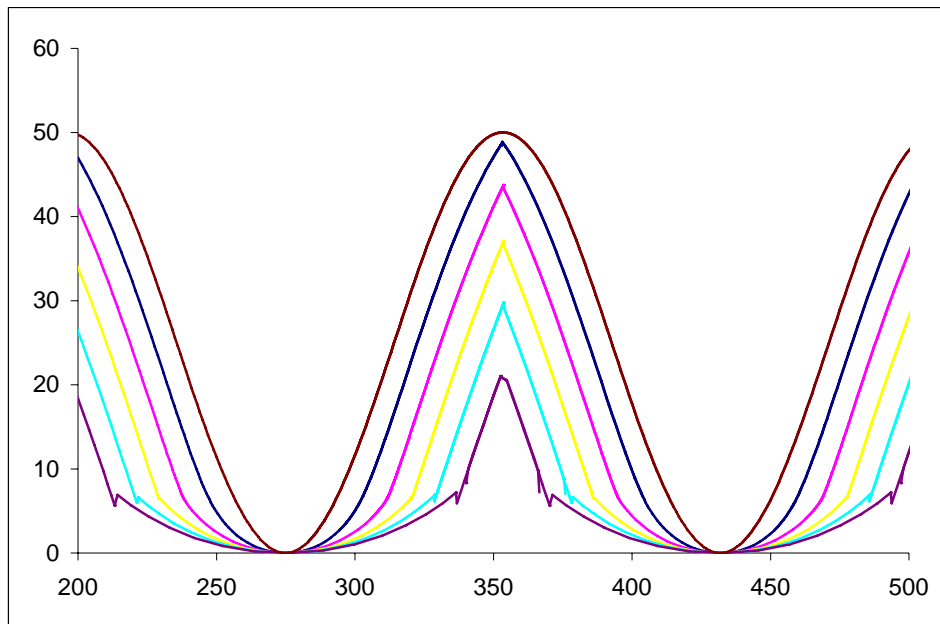


Figure c-5 : Simulation de l'évolution d'une surface sinusoïdale ( $y(x)=\sin(x)$ ) sous incidence normale

Dans ce cas on a représenté l'érosion d'une sinusoïdale (courbe la plus haute) pour des incréments de temps constants. Après cinq incréments de temps on obtient la courbe la plus basse de la Figure c-5. Ici, on ne s'intéresse pas trop aux évolutions quantitatives, mais plutôt qualitatives, c'est pourquoi on ne s'intéresse ni à l'échelle de temps ni à celle d'espace.

Comme prévu, on observe l'élargissement des creux et l'affinement des bosses. Des points anguleux apparaissent également.

*Remarque 1 :* On peut observer sur la courbe la plus érodée des irrégularités de profil au niveau des points anguleux. Ces irrégularités sont des aberrations de la représentation graphique et ne correspondent à aucune réalité.

*Remarque 2 :* On rappelle que l'une des hypothèses nécessaires au suivi de la rugosité en tenant compte du taux d'érosion local impose que les évolutions de pentes soient petites devant la cascade de collisions. Or dès qu'un point anguleux apparaît, cette hypothèse n'est plus vérifiée. Ce genre de modélisation est donc virtuel.

### c.II.2. Exemple d'érosion à incidence non nulle

Comme dans le cas d'une érosion à incidence normale, les bosses et les creux sont instables et disparaissent rapidement. On s'intéresse donc plutôt à des surfaces rugueuses ne présentant pas de creux, c'est à dire des surfaces pour lesquelles tous les angles d'incidence sont de même signe.

Dans ce cas, on peut observer par simulation des surfaces dont la rugosité semble être conservée. C'est le cas de la forme de la Figure c-7. Toutefois une simulation plus longue montrerait que l'amplitude finit par diminuer au bout d'un long temps d'érosion.

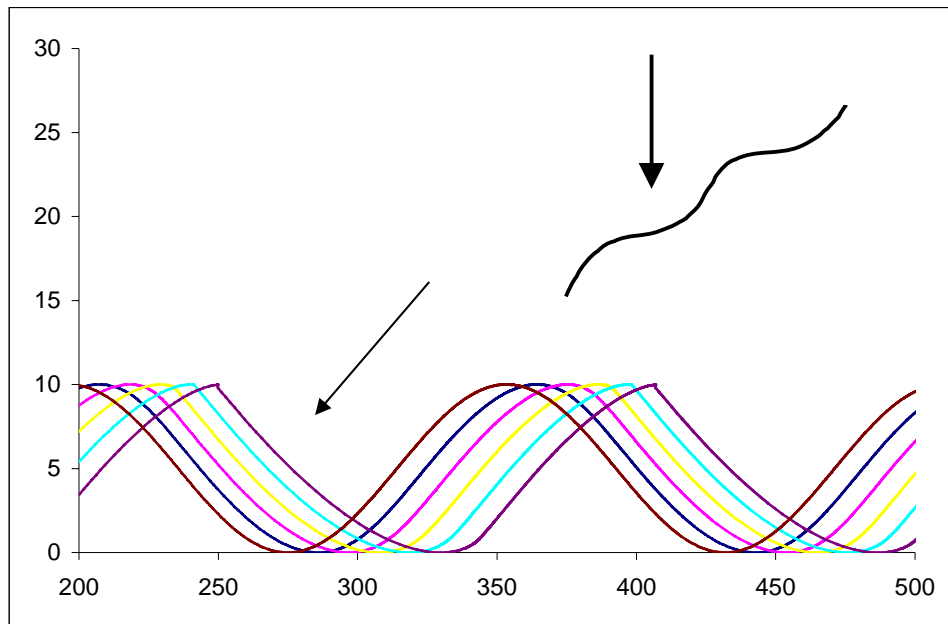


Figure c-6 : Simulation de l'évolution d'une surface sinusoidale ( $y(x)=0.2 \sin(x)$ ) sous incidence  $20^\circ$

Dans ce cas, la courbe initiale est la courbe qui a une forme de sinusoidale. Les incréments de temps sont les mêmes que ceux de la Figure c-5. Pour une meilleure visualisation, les courbes érodées ont été translatées dans la direction inverse des ions incidents et de la valeur de l'érosion à incidence nulle. On observe alors l'apparition d'un point anguleux de plus en plus marqué, mais pas de diminution apparente de l'amplitude de la rugosité.

### c.II.3. Cas général

On a vu que l'on tend souvent vers des segments et des points anguleux. A première vue, si on ne considère que des segments, tout motif idéal formé de deux angles semble stable. Mais en réalité c'est le comportement entre les angles qui régit l'évolution de ce genre de relief. On a vu au §-c.I que dans le cas d'une forme alternée de deux segments, les deux points anguleux (un concave et un convexe) ne peuvent pas être stables simultanément. Ce phénomène est illustré par la Figure c-7 représentant une simulation utilisant le modèle de Barber. Un seul des point anguleux est stable. C'est un résultat que l'on avait déjà observé sur la Figure c-6 où un seul point anguleux se forme.

Alors, si on ne peut pas garder simultanément les zones concaves et convexes, le relief tend à diminuer.



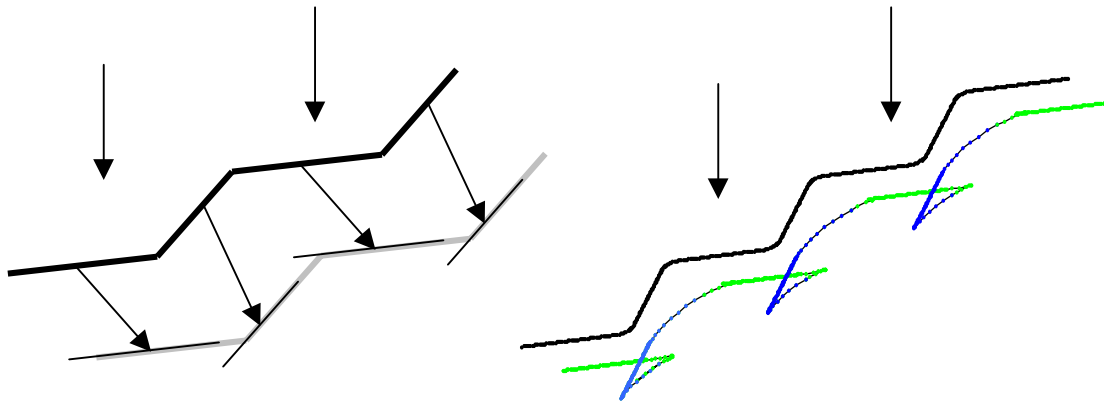


Figure c-7 : Stabilité apparente d'une surface formée par la répétition de deux segments et instabilité montrée par simulation



# Annexe d. Influence des perturbations

L'étude de l'évolution d'une surface en tenant compte des différences de taux d'érosion en fonction de l'incidence ne permet pas d'obtenir des angles supérieurs au plus fort angle de la surface d'origine. Nous voulons étudier si une perturbation de la surface peut faire apparaître des angles plus élevés. Pour cela, nous étudions l'influence d'un défaut sur une facette d'angle  $\theta$ . Dans notre cas, le défaut est un creux ou une bosse formé de deux segments d'angles  $\theta-\delta$  et  $\theta+\delta$ , où  $\delta$  est un petit angle.

## d.I. Etude d'un angle

Dans un premier temps nous nous intéressons à l'évolution d'un angle formé par deux surfaces.

Soient deux segments d'incidences  $\theta$  (positif) et  $\theta+\delta$ . On se place dans un référentiel lié au segment d'angle  $\theta$ . On considère alors l'angle hypothétique formé par l'intersection de ces deux segments et on s'intéresse au déplacement de ce point au cours de l'érosion.

Dans un temps  $dt$ , du fait de la différence de taux d'érosion  $\Delta Y=(Y(\theta+\delta)-Y(\theta))$  cette intersection se déplace sur le segment d'angle  $\theta$  de la distance  $l$ . Cette configuration est représentée par la Figure d-1.

On montre alors que pour un flux d'ions  $J$  sur une cible de densité  $d$ ,

$$l(\theta, \delta) = \frac{\Delta Y \cos(\theta)}{\tan(\theta + \delta) - \tan(\theta)} \frac{J}{d}$$

Ainsi  $l(\theta, \delta)$  est positif pour  $\theta < \theta_m$  et positif pour  $\theta > \theta_m$ , indépendamment du signe de  $\delta$ .

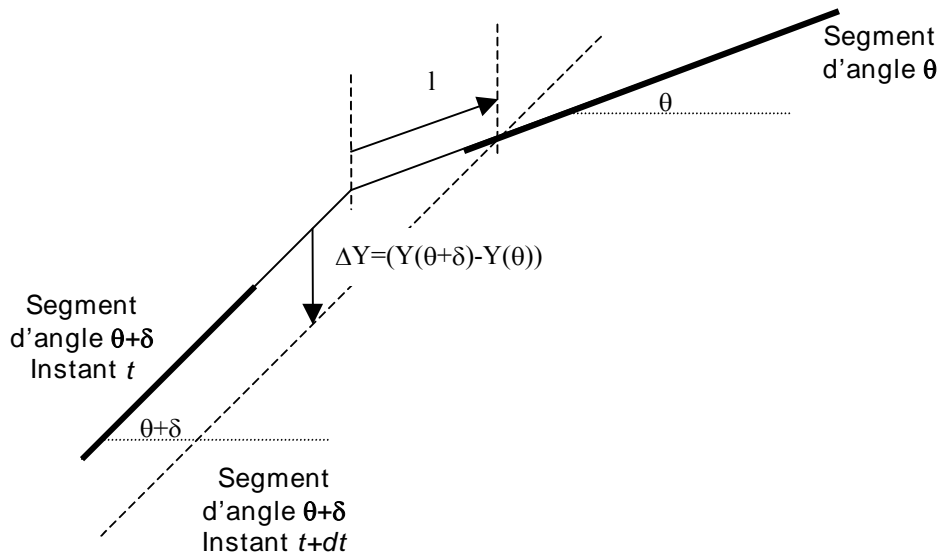


Figure d-1 : Mouvement relatif d'un segment par rapport à un autre

Cette étude d'un angle va maintenant nous permettre d'étudier une perturbation constituée de plusieurs angles.

## d.II. Etude d'une perturbation

Nous considérons maintenant un segment d'angle  $\theta$  (positif) avec une perturbation locale formée de deux segments d'angles  $\theta - \delta$  et  $\theta + \delta$ .

Nous nous intéressons à l'évolution dans le temps d'une telle perturbation. En se plaçant dans un référentiel lié à la surface d'angle  $\theta$ , la perturbation peut « monter » quand  $l$  est positif ( $\theta < \theta_m$ ) ou descendre quand  $l$  est négatif ( $\theta > \theta_m$ ). Ainsi, suivant la vitesse relative des deux segments de la perturbation, la perturbation peut s'ouvrir ou se refermer. Par ouvrir, on entend que l'angle le plus haut monte plus vite que l'angle le plus bas.

On considère maintenant le paramètre  $\chi$  tel que

$$\chi = \frac{l(\theta, +\delta)}{l(\theta, -\delta)}$$

$$\text{On montre alors que : } \chi = -\frac{\Delta Y(\theta, \delta) \cos(\theta + \delta)}{\Delta Y(\theta, -\delta) \cos(\theta - \delta)}$$

En considérant des petites valeurs de  $\delta$ , on peut effectuer les approximations suivantes :

$$\Delta Y(\theta, \delta) = Y(\theta + \delta) - Y(\theta) \approx \delta Y'(\theta) + \frac{1}{2} \delta^2 Y''(\theta)$$

$$\frac{\Delta Y(\theta, \delta)}{\Delta Y(\theta, -\delta)} \approx -\frac{\delta Y'(\theta) + \frac{1}{2} \delta^2 Y''(\theta)}{\delta Y'(\theta) - \frac{1}{2} \delta^2 Y''(\theta)} \approx -1 - \delta \frac{Y''(\theta)}{Y'(\theta)}$$

$$\frac{\cos(\theta + \delta)}{\cos(\theta - \delta)} \approx 1 - 2\delta \tan \theta$$

$$\text{Soit } \chi \approx (1 - 2\delta \tan \theta) \left( 1 + \delta \frac{Y''(\theta)}{Y'(\theta)} \right)$$

où  $Y' = dY/d\theta$  et  $Y'' = d^2Y/d\theta^2$  alors  $\chi = 1$  pour

$$\tan \theta = \frac{Y'/Y''}{2 + 2\delta Y'/Y''}$$

Les évolutions de perturbations en fonction de l'angle et de la forme de la perturbation (concavité ou convexité) sont résumées sur la Figure d-2. On y distingue quatre intervalles d'angle. On change de domaine quand on passe d'une valeur de  $\chi$  supérieure à 1 à une valeur inférieure ou inversement.

Par ailleurs, on sait que  $Y''$  s'annule au moins une fois entre  $0^\circ$  et  $\theta_m$  puisque  $Y'$  s'annule pour ces deux angles. Nous appelons alors  $\theta_1$  cet angle. Par contre on n'est pas certain de l'existence d'un second angle  $\theta_2$  entre  $\theta_m$  et  $\pi/2$ . Ainsi, on est certain que  $\alpha$  vaut 1 au moins une fois, en  $0^\circ$  et  $\theta_1$ , et le cas échéant entre  $\theta_m$  et  $\theta_2$ .

Nous avons alors étudié l'évolution d'une perturbation en fonction de la forme de l'irrégularité de surface (concave ou convexe) dans ces quatre domaines. Une flèche indique alors la direction de déplacement de la perturbation (montée ou descente). Par ailleurs, selon les cas, la perturbation tend à croître en taille (ouverture : ce qui est représenté par une perturbation plus grande en gras) ou à diminuer, voire disparaître (fermeture : ce qui est représenté par une croix).

	1		2		3		4	
	0	$\theta_1$	$\theta_m$	$\theta_2$	$\pi/2$			
$Y'(\theta)$	0	+	+	+	0	-	-	-
$Y''(\theta)$		+	0	-	-	-	0	+
$\frac{Y''(\theta)}{Y'(\theta)}$	$+\infty$	+	0	-	$-\infty$	$+\infty$	+	-
$\chi$	$>1$		1	$<1$		1	$<1$	

Figure d-2 : Evolution d'une perturbation sur un segment. Mouvement de la perturbation et tendance à croître ou disparaître.

En fonction de l'angle et la forme de la perturbation, tous les cas sont donc possibles (montée ou descente et ouverture ou fermeture)

### d.III. Conclusion

Si nous considérons une surface formée de deux types de segments, plusieurs situations peuvent intervenir. Si des défauts concaves se déplacent vers les creux, on considère que les irrégularités participent à creuser les creux. Si au contraire ils se déplacent vers les bosses, ils détruisent les bosses. De la même façon, si les défauts convexes se déplacent vers les bosses, on considère qu'ils participent à accroître les bosses et inversement qu'ils comblent les creux s'ils se déplacent vers ces derniers. Enfin, quand deux effets opposés se superposent, on ne peut pas déduire l'effet global.

Si la rugosité est formée de deux segments, son évolution dépend donc de la pente de ces deux segments. Chacun peut se situer dans chacun des quatre domaines définis sur la Figure d-2.

Ainsi la Figure d-3 résume les différents cas possibles. Deux segments y sont considérés : chacun peut se trouver dans chacun des quatre domaines d'angle considérés. On distingue alors dix cas possibles.









		Premier segment			
		domaine 1 	domaine 2 	domaine 3 	domaine 4 
Second segment	domaine 1 	Creuse creux & Creuse bosses	Creuse creux & Accroit bosses	?	Creuse creux
	domaine 2 		Comble creux & Accroit bosses	Comble creux	?
	domaine 3 			Comble creux & Accroit bosses	Creuse creux & Accroit bosses
	domaine 4 				Creuse creux & Creuse bosses

Figure d-3 : Effet des irrégularités sur la rugosité

Si l'on considère une surface initialement peu rugueuse, alors les segments à considérer ont à peu près l'angle d'incidence des ions. Ils sont donc tous les deux dans le même domaine. L'effet des irrégularités est donc a priori neutre puisqu'il accroît les creux et diminue les bosses ou inversement (diagonale du tableau de la Figure d-3).

Il faut toutefois remarquer que les rugosités formées de segments des domaines 1 et 2 sont divergentes puisque les défauts augmentent les bosses et creusent les creux. On pourrait ainsi expliquer la croissance d'une rugosité formée de segments appartenants aux domaines 1 et 2.

Malheureusement, cette étude nécessite une très fine connaissance de la variation du taux d'érosion en fonction de l'angle d'incidence.



# Références

---

<sup>i</sup> M.L. Yu, *Topics in applied Physics*, Ion Bombardment III, Eds. : R. Behrisch, K. Wittmaack Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1991) p93-160

<sup>ii</sup> G. Carter, B. Navinsek, J .L. Whitton , *Topics in applied Physics*, Ion Bombardment II, Eds. : R. Behrisch, K. Wittmaack Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1983) p231-266



## RESUME :

La propulsion plasmique expose certaines parties de satellites au bombardement ionique par des ions  $Xe^+$  de quelques centaines d'eV. Il apparaît alors un risque de diminuer la durée de vie ou les performances des satellites à cause des phénomènes d'érosion ionique ou de contamination par les produits d'érosion sur certaines surfaces du satellite. Des études expérimentales et numériques ont été entreprises afin de comprendre ces phénomènes et acquérir la capacité de produire des données expérimentales fiables.

L'installation expérimentale IDEFIXe nous a ainsi permis de mettre au point une technique particulièrement efficace de mesure de taux d'érosion par microbalances à quartz (QCM). Nous avons alors validé la mesure du taux d'érosion à incidence normale, ainsi que pour des incidences obliques avec des métaux (argent et cuivre). La contamination quant à elle a été étudiée par deux techniques complémentaires : la spectrométrie de masse qui étudie l'émission et la contamination sur QCM.

Parallèlement aux études expérimentales, nous avons développé le code CSiPI de type Monte Carlo permettant de produire des données quantitatives sur l'érosion, et l'émission (direction et énergie). Ce code reprend les fondements de TRIM en améliorant la description des collisions à la surface. On retrouve ainsi par la simulation les résultats expérimentaux.

En utilisant des mesures expérimentales et CSiPI, nous avons pu interpréter des résultats faisant intervenir des cibles plus complexes. Nous avons en particulier étudié l'influence de la rugosité de la cible sur la pulvérisation ionique ainsi que celle des ions implantés dans la cible.

**Mots clés :** Pulvérisation ionique, Contamination, TRIM, propulsion plasmique, QCM.

## ABSTRACT :

Plasma propulsion can induce ion bombardment by energetic  $Xe^+$  (hundreds of eV) on some external parts of satellites. This induces a risk of efficiency and lifespan reduction due to sputtering (typically on solar arrays) or contamination by sputtered materials on the satellite. For a better comprehension of these phenomena we performed experimental and simulation experiments. The final aim is to produce confident data for satellite design.

IDEFIXe is a setup which allowed us to develop efficient sputtering yield measurement by Quartz Crystal Microbalances (QCM). We validated it by measuring sputtering yields for various  $Xe^+$  ions energies and incidences on Silver and copper. In an other hand contamination was studied by directive mass spectrometry and contamination on QCM.

Furthermore we developed CSiPI, a Monte Carlo simulation tool for quantitative Ion Sputtering and emission calculation. This code is based on the TRIM approach of collision cascades, with an improved description of surface collisions. CSiPI reproduces experimental results in the case of metals bombardment.

Using the experimental and simulation tools that we developed, we studied the case of some complicated target. Especially, we studied and highlighted the strong influence of surface roughness and of implanted ions on sputtering and emission.

**Keywords:** Ion Sputtering, Contamination, TRIM, Plasma Propulsion, QCM

