

Interactions élastiques et inélastiques des électrons avec la matière. Analyse de surface. Méthode EPES.

B. GRUZZA ^a, P. TOMKIEWICZ ^b, C. ROBERT-GOUMET ^a, L. BIDEUX ^a

^aLASMEA UMR CNRS 6602, Université Blaise Pascal, 63177-Aubière Cedex, France

^bDépartement de Microélectronique, Institut de Physique, Université de Technologie de Silésie, Krzywoustego 2, 44-100 Gliwice, Pologne

Un électron qui chemine dans un matériau a soit été créé soit c'est un électron primaire qui appartient au faisceau d'excitation de l'échantillon. Toutefois l'excitation peut être aussi une source de rayons X, mais dans ce cas la distribution énergétique des électrons ne montre pas de pic élastique. Nous devons distinguer le processus de création de l'électron avec son post-cheminement dans le substrat. Seuls des électrons élastiques (ayant gardé leur énergie initiale) sont comptabilisés dans tout pic d'un spectre d'analyse. La méthode EPES (Elastic Peak Electron Spectroscopy) basée sur le pourcentage d'électrons primaires rétrodiffusés élastiquement vers la surface, est une puissante technique d'analyse. Toutefois elle nécessite un programme de simulation de trajectoire électronique dans le matériau, basé sur la connaissance des sections efficaces de diffusion élastique et de celle de la valeur λ_i , le libre parcours inélastique des électrons. Nous montrons ici la simulation de Monte-Carlo et la théorie basée sur une description couches par couches du substrat

1. INTRODUCTION

Les interactions des électrons de moyenne énergie (quelques keV) ont conduit par le passé à des méthodes d'analyse des surfaces des matériaux. Elles servent à reconnaître les espèces atomiques présentes et leur concentration. Le plus souvent des électrons sont émis au sein de l'échantillon et sortent de la surface avec des énergies cinétiques diverses qui permettent de faire une analyse spectrale.

L'analyse propre à la réflexion des électrons sans changement de la valeur de l'énergie cinétique, s'appelle la spectroscopie du pic élastique ou EPES.

2. PROCESSUS DE CRÉATION D'ÉLECTRONS

Le faisceau primaire est caractérisé par son intensité I_0 et son énergie E_0 . Son orientation peut être variable. Servant à exciter l'échantillon, il est constitué soit de photons (X ou UV), soit d'électrons de moyenne énergie ($\approx 2\text{keV}$).

Dans le matériau un électron peut être éjecté d'un atome par ionisation par exemple. Sa principale caractéristique est son énergie cinétique. Les électrons analysés contribuent aux signaux recueillis par l'analyseur (figure 1). La création d'un électron dépend de la nature de la particule primaire, de la section efficace du processus, et de la nature des atomes du substrat.

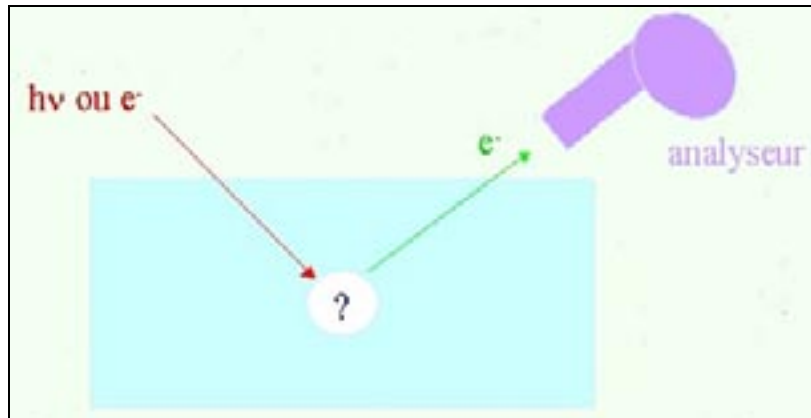


Figure 1 : Représentation schématique de la création d'un électron dans un échantillon et de son analyse en énergie cinétique.

3. LE CHEMINEMENT DES ÉLECTRONS DANS LE MATÉRIAU

Les électrons créés vont subir des interactions inélastiques et élastiques au sein du matériau.

Dans le cas d'interaction inélastique, il n'y a pas de changement de direction mais une perte d'énergie a lieu.

Dans le cas d'interaction élastique, il y a changement de direction sans perte d'énergie.

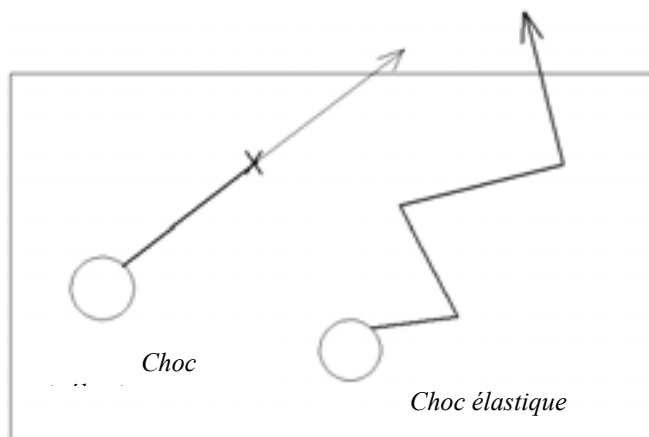


Figure 2 : représentation schématique d'interactions élastique et inélastique

On notera la possibilité pour un électron de changer plusieurs fois de direction avant de sortir du matériau.

4. EXCITATION ELECTRONIQUE. DISTRIBUTION DES ELECTRONS REEMIS.

La figure 3 représente le spectre total des électrons sortant de la surface d'un échantillon lorsque la source primaire est un canon à électrons. On distingue 4 régions :

- (1) : électrons secondaires de très faible énergie
- (2) : électrons créés comme les électrons Auger
- (3) : électrons primaires ayant subi des pertes d'énergie caractéristiques
- (4) : électrons primaires rétrodiffusés constituant le pic élastique (P.E.)

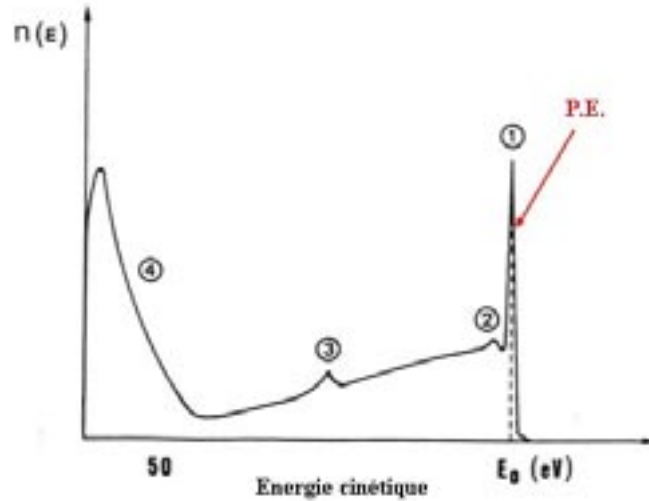


Figure 3 : distribution des électrons rétrodiffusés sous excitation électronique

5. PRINCIPAUX PARAMETRES

Il existe des paramètres qui caractérisent le transport d'électrons et un pic sans perte dans les spectres d'énergie.

Le premier est le libre parcours inélastique (IMFP) λ_i qui est défini comme la distance moyenne qu'un électron peut faire entre deux collisions inélastiques. Rassemblant les nombreux résultats de la littérature [1] [2] [3] nous avons obtenu une loi de dépendance du facteur λ_i en fonction du numéro atomique Z des atomes du substrat et de l'énergie cinétique E_0 des électrons.

$$\lambda_i = \frac{1}{2} \left(\sqrt[n]{\prod_{i=1}^n a_i} E_0^{\sum_{i=1}^n \frac{p_i}{n} + a(Z)} \frac{E_0}{\ln(\gamma E_0)} \right) \quad (1)$$

Sur le site web référencé [4] un programme permet le calcul des valeurs du libre parcours inélastique des électrons.

Notons que d'autres paramètres sont parfois utilisés:

- la profondeur d'échappement
- la longueur d'atténuation
- la profondeur d'information

D'une manière générale, on peut diviser ces appellations en deux groupes:

- les termes qui décrivent le parcours microscopique d'un électron sans perte d'énergie
- ceux qui décrivent la décroissance d'un flux macroscopique d'électrons dans une direction

donnée du solide. Ainsi on appelle $\alpha = e^{-\frac{d}{\lambda_i}}$ le facteur d'atténuation d'un courant d'électrons lors de la traversée d'une épaisseur d de matière.

Le second paramètre jouant un rôle essentiel est la section efficace de diffusion élastique. Pour plus de détails nous renvoyons le lecteur à notre article référencé [5].

6. LA SPECTROSCOPIE DU PIC ELASTIQUE (EPES)

6.1. Expérimental

Le pourcentage $\eta_e = I_e/I_0$ du nombre d'électrons rétrodiffusés élastiquement est le facteur essentiel de la spectroscopie EPES. Pour le déterminer il faut connaître le courant primaire I_0 à l'aide d'une cage de Faraday et enregistrer le pic élastique qui indique le courant rétrodiffusé I_e . On

peut, si l'analyseur le permet, mesurer le courant des électrons rétrodiffusés avec l'énergie initiale E_0 [6] [7].. Il faut toutefois avoir à l'esprit que l'on ne recueille que les électrons entrant dans l'ouverture angulaire de l'appareil et donc que forcément le pourcentage mesuré sera plus petit que celui total η_e .

6.2. Approche théorique simple

Le substrat est décrit par un empilement de monocouches atomiques, le courant élastique est du à la contribution η_e^1 de chacune d'entre elles. L'intensité du courant primaire I_0 est diminuée à chaque traversée de α . Il en est de même des courants émis vers la surface.

Ainsi on écrit :

$$\eta_e = \eta_e^1 + \alpha^2 \eta_e^1 + \alpha^4 \eta_e^1 + \alpha^6 \eta_e^1 + \dots \quad \text{ou} \quad \eta_e = \frac{\eta_e^1}{1 + \alpha^2}$$

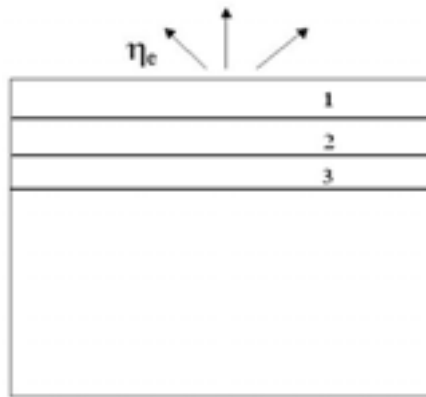


Figure 4 : modélisation couche par couche d'un échantillon émettant le pourcentage η_e du faisceau primaire d'électrons.

6.3. Simulation informatique

Afin de mieux simuler la trajectoire des électrons élastiques dans le matériau on utilise un programme de simulation informatique (méthode de Monte-Carlo) [5]. Le programme calcule les sections efficaces de diffusion suivant l'énergie des électrons et le numéro atomique de l'atome diffuseur, propose un λ_i qu'il est possible de changer manuellement. On peut également indiquer l'angle d'incidence du faisceau primaire. La statistique est basée sur le nombre d'électrons ressortant sans avoir fait d'interaction inélastique et sur l'angle de sortie.

La figure 5 montre le menu déroulant permettant de préciser la structure de l'échantillon. Après avoir choisi A/A/A/A avec $A = Ag$ et l'énergie $E_0 = 200$ eV, nous obtenons le pourcentage $\eta_e = 5.2\%$ (4^{ème} colonne). La cinquième colonne indique le pourcentage d'électrons entrant dans l'analyseur type RFA. Toujours pour un échantillon d'argent, les figures 6a et 6b informent bien sur la profondeur de pénétration des électrons suivant l'énergie primaire. Il a été montré que pour tous les types d'échantillons, et l'énergie $E_0 = 200$ eV, que 96% des électrons étaient réfléchis par les deux premières couches atomiques [5] prouvant ainsi la sensibilité de l'EPES à l'analyse de la surface.

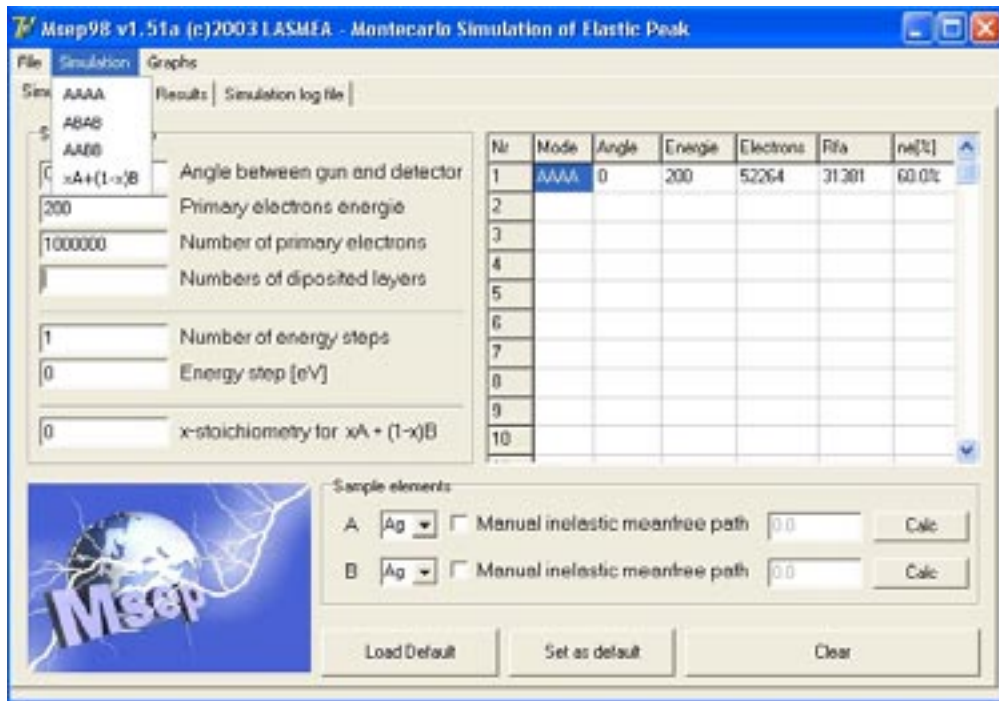


Figure 5 : Programme de simulation informatique et résultats pour un échantillon d'or pur

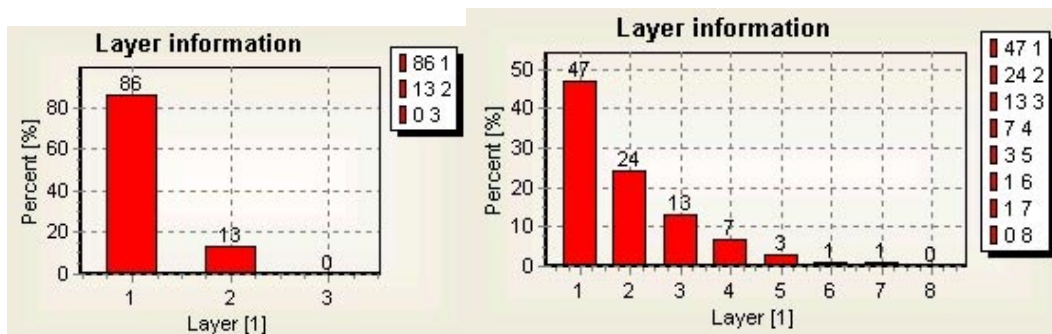


Figure. 6a : provenance des électrons élastiques pour $E_0 = 200$ eV (échantillon d'argent)

Figure. 6b : provenance des électrons élastiques pour $E_0 = 800$ eV (échantillon d'argent)

La réémission des électrons élastiques suit une distribution angulaire qui dépend entre autre de l'angle d'incidence du faisceau primaire. Les figures 7 montrent les émissions angulaires de ces électrons pour une incidence normale (0°) et une incidence rasante (70°) des électrons incidents (échantillon d'argent).

7. CONCLUSION

Les principes des spectroscopies électroniques doivent être bien compris pour mener à bien des analyses de surface. Notamment les processus qui interviennent lorsque les électrons traversent le matériau. Il faut aussi tenir compte du type d'analyseur utilisé.

La spectroscopie EPES est basée sur la réflexion élastique des électrons primaires par un substrat. Cette méthode est très sensible à la surface et en faisant varier l'énergie primaire du faisceau on peut arriver à analyser précisément la zone superficielle. Nous avons utilisé cette méthode à bon escient dans divers travaux [8] [9] [10] [11].

Cette technique nécessite un programme d'aide à l'interprétation, toutefois il est aussi envisageable pour certains travaux d'utiliser des échantillons standards pour références. Il serait alors nécessaire de bien étalonner le système d'analyse que l'on utilise.

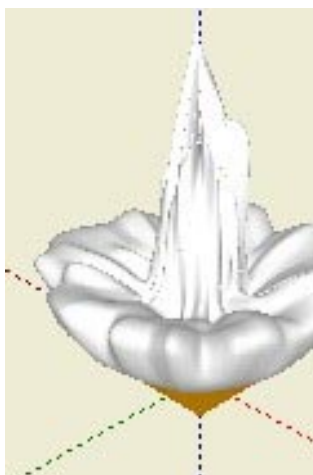


Figure 7a : émission des électrons élastiques par un substrat d'argent pour une incidence primaire de 0° ($E_0 = 200$ eV)

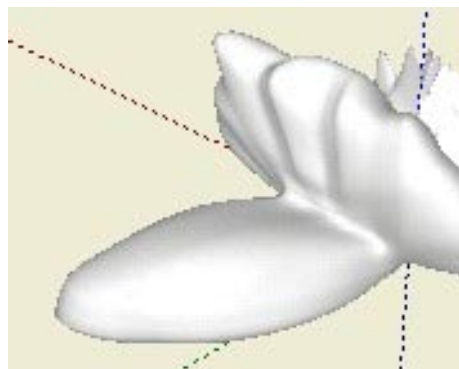


Figure 7b : émission des électrons élastiques par un substrat d'argent pour une incidence primaire de 70° ($E_0 = 200$ eV)

- [1] C. J. Powell, A. Jablonski, J. Phys. Chem. Ref. Data 1999, **28**, 19
- [2] A. Jablonski, C. J. Powell, J. Vac. Sci. Tech. A 2003, **21**, 274
- [3] C. J. Powell, A. Jablonski, NIST Electron Inelastic-Mean-Free-Path Database (SRD 71), Version 1.1, U.S. Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, 2000
- [4] <http://lasmea.univ-bpclermont.fr/Personnel/Bernard.Gruzza/Surface.html>
- [5] C. Robert, B. Gruzza, L. Bideux, P. Bondot, Math. Comp. Simulation 1998, **47**, 419
- [6] A. Sulyok, G. Gergely, B. Gruzza, L. Bideux, Vacuum 1994, **45**, 325
- [7] D. Zeze, L. Bideux, B. Gruzza, F. Golek, D. Danko, S. Mroz, Vacuum 1997, **48**, 401
- [8] C. Jardin, G. Gergely, B. Gruzza Materials Chemistry and Physics 1992, **32**, 197
- [9] C. Jardin, S. Kessas, B. Khelifa P. Bondot, B. Gruzza, J. Phys. D 1991, **24**, 1115
- [10] B. Gruzza, P. Bondot, A. Porte, C. Jardin, G. Gergely, Acta Phys. Polonica 1992, **81**, 159
- [11] W. Dolinski, S. Mroz, J. Palczynski, B. Gruzza, P. Bondot, A. Porte Acta Phys. Polonica 1992, **81**, 193