

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université El Hadj Lakhdar de Batna

Thèse

Présentée au

Département d'Electronique
Faculté des Sciences de l'Ingénieur

Pour l'obtention du diplôme de
Doctorat Es Science en Electronique
Option : Microélectronique

Par

M'hamed BOULAKROUNE

Thème

**Restitution des signaux lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires.
Contribution à l'amélioration de la résolution en profondeur par déconvolution
multirésolution. Application aux couches de silicium dopées par le bore**

Soutenue le 08 / 10 / 2008 devant le jury composé de :

Dr. Malek BENSLAMA	Prof.	Univ. Constantine	Président
Dr. Djamel BENATIA	Prof.	Univ. Batna	Rapporteur
Dr. Zohir DIBI	M.C.	Univ. Batna	Examineur
Dr. Ramdane MAHAMDI	M.C.	Univ. Batna	Examineur
Dr. Djamel CHIKOUCHE	Prof.	Univ. M'Sila	Examineur
Dr. Farid BOUTTOUT	M.C.	Univ. M'Sila	Examineur

Remerciements

Ce travail, financé par le ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique Algérien, a été réalisé au Laboratoire de Télécommunication et traitement du signal (TELE) et à l'unité d'analyse physico-chimique des matériaux (PCPM) de l'Université Catholique de Louvain, Belgique. Je remercie Messieurs les Professeurs Luc Vandendorpe directeur du laboratoire Tele et Patrick Bertrand Directeur de l'unité PCPM pour l'accueil qu'ils m'ont réservé dans leurs laboratoires et pour l'intérêt qu'ils ont apporté à mon travail.

Je tiens à exprimer mes remerciements à Monsieur le Professeur Djamel Benatia ; qu'il soit assuré de ma profonde gratitude pour avoir dirigé ce travail, ainsi que pour son aide et ses conseils qu'il n'a cessé de me prodiguer au cours de ces quatre années. Qu'il trouve ici l'expression de ma sincère reconnaissance.

Je rends hommage à une personne qui n'est plus parmi nous depuis une année. Cette personne était mon ex-promotrice Mme Meriem Berrabah. Cette femme aussi courageuse et généreuse m'a appris que «l'enseignant est un serviteur de la pensée» et que «la recherche est un chemin sans fin». Elle m'a toujours appris que pour aller loin il faut aller en groupe et pour arriver tôt il faut aller seul. Que dieu la bénisse en sa vaste paradis.

Je remercie Monsieur Malek Benslama, Professeur au département d'électronique, université de Constantine qu'il m'a fait l'honneur de présider le jury de soutenance.

Je tiens à remercier Monsieur Djamel Chikouche, Professeur au département d'électronique, Université de M'sila et Monsieur Farid Bouttout, Maître de Conférence au département d'électronique, Université de M'sila et Messieurs : Zoheir Dibi et Ramdane Mahamdi, Maîtres de Conférence au département d'électronique, Université de Batna, qui ont fait l'honneur de bien vouloir examiner ce travail et participer à ce jury.

Je tiens à remercier Monsieur Remy Prost, Professeur au CREATIS, MSA de Lyon, pour la discussion que nous avons eue en septembre 2004 sur la déconvolution multirésolution, ses encouragements, ses conseils et la documentation précieuse qu'il m'a offerte.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur Ahmed El Oualkadi chargé de recherche au laboratoire de microélectronique (DICE), université catholique de Louvain pour l'intérêt qu'il apporté à mon travail, son suivi, ses conseils et ses encouragements. Je lui suis très reconnaissant.

Un grand merci également à Monsieur Nimer Wehbe, attaché de recherche à l'unité PCPM, pour ses orientations et son aide. Merci pour sa sympathie et sa disponibilité.

J'exprime toute ma sympathie envers tous les membres de l'unité PCPM et du laboratoire TELE qui m'ont permis d'effectuer ce travail dans les meilleures conditions ; les professeurs : Arnaud Delcorte, Macq Benois ainsi les thésards : Haoudji, Rony, Niulfar, Saloumi, Sébastien, Anne et tous les autres thésards qu'ils me pardonnent de ne pas tous les citer !

Un merci particulier et spécial à ma femme Nabila pour ses sacrifices, son soutien et ses encouragements tout au long de ce travail de thèse. Je lui exprime ma profonde reconnaissance et je souhaite qu'elle soutienne également sa thèse dans les meilleurs délais.

Je voudrais enfin remercier tous mes amis que j'ai eu la chance de connaître. Je pense en particulier à Rassim, Abdessalem, Tarek, Djamel. Je leur souhaite beaucoup de bien, un futur brillant et une vie pleine de réussite.

*A la mémoire de ma mère
A ma femme Nabila
A mes filles Nada et Maha
A toute ma famille*

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE

1

CHAPITRE 1 :

L'ANALYSE EN PROFONDEUR PAR SIMS : GENERALITES

Historique	6
Introduction	6
1. Principe de l'analyse SIMS	7
2. L'analyseur ionique à secteur magnétique CAMECA Ims-6f	8
2.1. La source d'ions primaires	9
2.2. La colonne primaire	9
2.3. La chambre objet	10
2.4. La colonne secondaire	10
2.4.1. Filtrage des aberrations, filtrage spatial	12
2.4.2. Dispersion en énergie des ions secondaires	12
2.4.3. Filtrage en masse	12
2.5. La détection	13
3. Caractéristiques générales	14
3.1. Une analyse élémentaire ou isotopique	14
3.2. Une analyse destructive	14
3.3. Une analyse semi-quantitative	14
4. Différents types d'analyse	15
4.1. Spectrométrie de masse	15
4.2. Imagerie ionique	15
4.3. Profils en profondeur et SIMS dynamique	16
4.3.1. Dynamique du signal	16
4.3.2. Sensibilité	17
4.3.3. Résolution en profondeur	17
5. Différents processus de l'analyse SIMS	17
5.1. La pulvérisation	17
5.1.1. La pulvérisation collisionnelle	17
5.1.2. La pulvérisation par excitation électronique	18
5.2. L'ionisation des atomes pulvérisés	19
5.2.1. L'émission ionique intrinsèque	20
5.2.2. L'émission ionique induite par réaction chimique de surface	20
5.3. La transmission des ions secondaires	20
5.4. Equation SIMS de base	21
6. Mécanismes gouvernants la résolution en profondeur	21
6.1. Le mixage collisionnel	22
6.1.1. Pouvoir d'arrêt et pertes d'énergie	24
6.1.2. Influence du mixage collisionnel sur la résolution en profondeur	24
6.1.3. Modélisation de la décroissance exponentielle	25
6.2. Effets de l'oxygène sur la résolution en profondeur	26
6.2.1. Le gonflement de la matrice : le swelling	27
6.2.2. L'analyse sous soufflage d'oxygène	27
6.2.3. La ségrégation	28

6.3.	Problèmes d'érosion non homogène	29
6.3.1.	Inclinaison du fond du cratère	29
6.3.2.	Effets de bords	29
6.3.3.	Rugosité induite	29
7.	Evaluation de la résolution en profondeur	30
7.1.	Évaluation à partir d'une interface abrupte	30
7.2.	Évaluation à partir d'un delta-dopage	31
7.3.	Séparation de deux deltas-dopage	33
8.	Amélioration de la résolution en profondeur	34
8.1.	Optimisation des paramètres physiques de l'analyse	34
8.2.	Traitement numérique post-érosion	35
	Conclusion	35
	Bibliographie	36

CHAPITRE 2 :
LA FONCTION DE RESOLUTION EN PROFONDEUR ET SA DETERMINATION
EXPERIMENTALE

Introduction	40
1. Définition de la résolution en profondeur	40
2. Propriétés de la fonction de résolution	43
2.1. Allure générale de la fonction de résolution	43
2.2. Spécificité de la fonction de résolution	44
2.3. Aire sous la fonction de résolution	44
2.4. Domaine d'amplitude et support de la fonction de résolution	45
2.5. Position, largeur, dissymétrie : caractérisation par les moments de la fonction de résolution	45
3. Modélisation de la fonction de résolution	48
4. Différentes formes de la DRF	49
4.1. Forme polynomiale	49
4.2. Forme gaussienne	49
4.3. Modèle de Dowsett	50
5. Détermination de la fonction de résolution	52
5.1. Procédure théorique	52
5.2. Détermination expérimentale de la DRF	54
5.2.1. Fittage des données expérimentales	54
5.2.2. Comportement et évolution des paramètres de la DRF	55
5.2.3. Phénomènes physiques liés aux paramètres de la DRF	58
5.3. Limitation de la résolution en profondeur à basse énergie	59
Conclusion	61
Bibliographie	62

CHAPITRE 3 :
LA DECONVOLUTION : ETAT DE L'ART ET METHODES

Introduction	64
1. La convolution	65
1.1. Etablissement de la convolution dans le signal SIMS	65

1.2.	Rappels théoriques sur la convolution	66
1.2.1.	Définition mathématique	66
1.2.2.	Linéarité et invariance	66
1.2.3.	Stabilité	67
1.2.4.	Propriétés du produit de convolution	67
2.	La déconvolution dans le domaine continu	67
2.1.	Les différents problèmes de la déconvolution	67
2.2.	Classification des méthodes de déconvolution	68
2.3.	La déconvolution continue en absence du bruit	68
2.3.1.	Existence de l'inverse de convolution	69
2.3.2.	Non existence de l'inverse de convolution : solution principale	69
2.4.	La déconvolution continue en présence du bruit	70
2.4.1.	Définition et sources de bruit	70
2.4.2.	Différents types de bruit	70
2.4.3.	Rapport signal sur bruit	72
2.4.4.	Le bruit dans l'analyse SIMS	72
2.4.5.	L'équation de convolution en présence du bruit	72
2.4.6.	Résolution de l'équation de convolution en présence du bruit : filtrage de Wiener	73
3.	La déconvolution dans le domaine discret	75
3.1.	Système discret	75
3.2.	Réponse impulsionnelle	75
3.3.	Convolution discrète	76
3.4.	Modélisation matricielle de la convolution	76
3.5.	Résolution de l'équation de convolution discrète	78
3.5.1.	Cas non bruité	78
3.5.2.	Cas bruité	79
4.	Méthodes non itératives de la deconvolution	79
4.1.	Filtrage inverse et solution des moindres carrés	79
4.2.	Filtrage au sens des moindres carrés sous contraintes : Régularisation	80
4.2.1.	Philosophie de la régularisation	81
4.2.2.	Différentes approches de la régularisation	81
4.2.3.	Interprétation géométrique de la régularisation	84
4.2.4.	Choix de l'opérateur de régularisation	85
4.2.5.	Détermination du paramètre de régularisation	85
4.3.	Introduction du modèle de solution dans la régularisation de Tikhonov-Miller	87
5.	Méthodes itératives de la déconvolution	89
5.1.	Les contraintes dures	89
5.2.	L'algorithme de Van Cittert et ses premiers prolongements	91
5.2.1.	Introduction des contraintes dures dans l'algorithme de Van Cittert	91
5.2.2.	Introduction de la régularisation de Miller dans l'algorithme de Van-Cittert contraint. Approche de Brice	91
5.3.	La régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal pré-déconvolué. Approche de Mancina	92
6.	Déconvolution sans fonction de résolution	92
6.1.	La déconvolution aveugle « myope »	92
6.2.	La déconvolution partielle	93
	Conclusion	94
	Bibliographie	95

CHAPITRE 4 :
LA DECONVOLUTION MULTIRESOLUTION PAR DECOMPOSITION SUR UNE BASE
D'ONDELETTES

Introduction	99
1. Décomposition en sous-bandes	99
1.1. Principe	99
1.2. Conditions de reconstruction parfaite	100
1.2.1. Solution d'Esteban et Galand	101
1.2.2. Solution de Smith et Barnwell	101
2. Décomposition sur une base d'ondelettes	102
2.1. Principe	102
2.2. Décomposition-Reconstruction d'un signal	103
2.3. Décomposition itérée	104
2.3.1. Décomposition dyadique régulière	104
2.3.2. Décomposition dyadique itérée	104
2.3.3. Décomposition irrégulière	104
3. Déconvolution multirésolution	105
3.1. Modélisation de la déconvolution multirésolution	105
3.2. Algorithme de la déconvolution multirésolution	106
3.3. Formulation matricielle de la déconvolution multirésolution	108
4. Déconvolution multirésolution régularisée	110
5. Seuillage des coefficients d'ondelettes	112
5.1. Principe du seuillage	112
5.2. Différents types de seuillage	114
5.2.1. Seuillage dur	114
5.2.2. Seuillage doux	114
5.3. Estimer l'écart-type du bruit	115
6. Déconvolution par la régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal décomposé sur une base d'ondelette	115
7. Définition des erreurs	117
Conclusion	117
Bibliographie	117

CHAPITRE 5 :
PERFORMANCES THEORIQUES DE LA DECONVOLUTION MULTIRESOLUTION

Introduction	120
1. Exigences de la déconvolution	120
1.1. Spectre de la DRF et nécessité de la régularisation	120
1.2. Présence des composantes négatives	121
2. Analyse multirésolution d'un signal	123
2.1. Familles d'ondelettes utilisées et filtres associés	123
2.1.1. Les quatre filtres	124
2.1.2. Ondelette de Coiflet	124
2.1.3. Ondelette de Symlet	125
2.2. Décomposition d'un signal SIMS simulé sur une base d'ondelette. Débruitage du	
signal	126
2.3. Paramètre de régularisation α	131

2.4. Choix de l'opérateur de régularisation	133
3. Mise en oeuvre de la déconvolution multirésolution	134
3.1. Déconvolution des marches de concentration abruptes	134
3.2. Déconvolution des créneaux de concentration	139
3.3. Déconvolution de gaussiennes	142
3.4. Limite de séparation	147
3.5. L'auto - déconvolution	151
3.6. Discussion sur les erreurs	155
Conclusion	156
Bibliographie	157

CHAPITRE 6 :

APPLICATION DE LA DECONVOLUTION AUX PROFILS SIMS REELS

Introduction	159
1. Nécessité de la déconvolution des profils SIMS	159
2. Déconvolution des deltas – dopages	160
2.1. Déconvolution des profils multi deltas – dopages	160
2.2. Déconvolution de deux deltas-dopage séparés de 70 Å	170
3. Déconvolution des créneaux de concentration	172
3.1. Créneau de concentration de largeur 120 Å	172
3.2. Deux créneaux de concentration de largeur 400 Å	174
4. Déconvolution de triple marches de concentration	178
5. Déconvolution sans DRF. La déconvolution partielle	179
Conclusion	188
Bibliographie	189

CONCLUSION GENERALE

190

Annexe 1
Annexe 2
Annexe 3

INTRODUCTION GENERALE

La microélectronique moderne se caractérise par une réduction rapide et continue des dimensions des composants constitués de matériaux semi-conducteurs, tel le silicium. Ceci conduit à l'utilisation de zones dopées à forts gradients de concentrations sur de très faibles épaisseurs (quelques dizaines de nm) [1-4]. L'objectif, au futur, est de faire fonctionner les transistors des microprocesseurs non plus à l'échelle du micromètre mais à l'aide d'atomes individuels. A l'instar du microprocesseur de nombreux objets vont subir des innovations grâce aux nanotechnologies (un millième de micron) qui exploitent, quant à elles, des structures de niveau atomique et moléculaire [5, 6].

Le développement de la microélectronique implique le développement d'outils de caractérisation capables d'analyser les nanostructures. En d'autres termes, les méthodes d'investigation utilisées doivent être de plus en plus fines et capables de détecter des traces d'impuretés de plus en plus faibles dans des volumes de plus en plus petits.

Parmi les outils de caractérisation utilisés, on trouve la Spectrométrie de Masse des Ions Secondaires (SIMS) en mode dynamique. Cette technique offre en effet la possibilité d'accéder à la constitution en profondeur des dispositifs, et elle est capable de détecter des concentrations d'impuretés inférieures au *ppb* (partie par billion) tout en offrant (à l'heure actuelle) une résolution en profondeur acceptable de l'ordre de quelques nanomètres [7-9]. Malgré les considérables efforts menés pendant ces dernières années pour améliorer les performances de la technique SIMS, la résolution en profondeur reste limitée devant les nouvelles exigences des technologies modernes, allant largement au delà de ses possibilités et l'analyse des zones superficielles est quasiment impossible. Il convient donc de repousser les limites de l'analyse par SIMS, cela passe d'une part par une étude physique et instrumentale des facteurs limitant la résolution en profondeur et, en particulier, de s'affranchir de tous les phénomènes parasites : parmi ceux-ci, le bruit qui la dégrade fortement [10]. D'autre part, d'explorer d'autres moyens pour aider la résolution en profondeur de franchir ses limites instrumentales, pour qu'elle soit en synchronisme avec les besoins des technologies modernes de la microélectronique. Un prototype de ce genre de traitement du signal est la déconvolution [10-19].

La déconvolution est le processus de restauration d'un signal dégradé par filtrage linéaire et invariant. Les hypothèses nécessaires pour modéliser un dispositif par une équation de convolution étant uniquement la linéarité et l'invariance par translation, on retrouve ce modèle dans de nombreux domaines : traitement des signaux et des images, astronomie, géophysique, médecine, physique, etc. [20-24].

La déconvolution est une méthode de résolution du problème inverse qui, de ce fait, n'a pas toujours une solution unique, en particulier, lorsque le signal est bruité. En effet, l'effet du bruit sur le résultat de la déconvolution est, bien évidemment, la génération des artefacts et des oscillations qui, en mesure des concentrations par l'analyse SIMS, ne sont pas tolérées. Cette difficulté impose quelques précautions dans son emploi notamment lorsqu'on ne dispose pas de connaissance a priori sur le signal source recherché. Ainsi les meilleurs résultats seront obtenus dans les applications où, par exemple, on connaît a priori le support et/ou le caractère positif des signaux recherchés.

Il est nécessaire à la bonne compréhension des paramètres qui règlent la mise en oeuvre de la technique de déconvolution et à la compréhension de la philosophie générale attachée aux problèmes de régularisation d'un problème mal posé, en particulier, l'introduction de nouvelles informations sur la solution – informations absentes de l'équation initiale à résoudre – va jouer un rôle régularisant. Le choix de l'opérateur et le calcul du paramètre de régularisation se font en considérant les signaux décrites dans le domaine des fréquences normalisées sur le support complet. Notre idée est adapter localement le paramètre de régularisation dans le domaine des fréquences, ainsi à amener à déconvoluer les signaux décomposés préalablement par projection sur une base d'ondelettes [25-29].

Les différentes approches proposées jusqu'à nos jours et qui s'appuient sur la régularisation quadratique de Tikhonov-Miller avec une résolution itérative des équations normales ont prouvé leurs limites face au bruit dans les signaux SIMS [11, 14, 19]. L'objectif visé de ce travail est de développer d'autres méthodes de déconvolution pour améliorer la résolution en profondeur de l'analyse par SIMS. En particulier, la déconvolution monorésolution basée sur la régularisation de Tikhonov-Miller peut être étendue à la déconvolution multirésolution régularisée par décomposition sur une base d'ondelettes [29-31]. En plus, un seuillage des coefficients d'ondelettes du signal, en fonction du niveau de bruit dans les données, peut être introduit de façon à accroître la qualité du signal déconvolué [32].

Dans le premier chapitre de ce travail, nous passerons en revue les phénomènes sur lesquels est fondée, et dont souffre, l'analyse par SIMS. Les hypothèses utilisées lors de l'interprétation des mesures seront soulignées et les principaux paramètres expérimentaux qui définissent sa réalisation seront présentés à travers la description de l'appareillage. A partir de ces paramètres, une quantification des mesures sera mise en évidence. Les mécanismes qui régissent la résolution en profondeur vont être cernés, parmi lesquels le mixage collisionnel est considéré comme le principal responsable à sa dégradation, une étude sur ce phénomène sera détaillée.

Nous abordons dans le deuxième chapitre le problème de la résolution en profondeur, un des paramètres clés de la méthode. Sa connaissance est en effet indispensable pour juger de la proximité du profil mesuré avec le profil initial. Ensuite, nous procéderons à sa mesure expérimentale dans le cas du bore dans le silicium. Cette mesure nous amènera à définir la réponse impulsionnelle du système d'analyse, appelée fonction de résolution en profondeur (DRF : *Depth Resolution Function*). Ses propriétés et ses caractéristiques seront examinées et une forme analytique sera utilisée pour permettre la mise en oeuvre d'une manière souple de la déconvolution.

Le troisième chapitre donne l'état de l'art de la déconvolution et présente les différentes techniques de restauration de l'information. Ce domaine est très vaste, nous nous sommes limités pour ce qui est des techniques traitées dans le domaine SIMS. En particulier, la régularisation d'un problème mal posé. Cela nous a amené d'analyser en profondeur les techniques qui s'appuient sur la régularisation quadratique de Tikhonov-Miller avec une résolution itérative des équations normales. Nous développerons par la suite le formalisme matriciel nécessaire au problème que nous voulons traiter.

A la base des limites des différentes méthodes de déconvolution exposées dans le chapitre 3, nous présenterons dans le quatrième chapitre un nouvel algorithme de déconvolution (dans le domaine SIMS), appelé déconvolution multirésolution. Cela fait appel aux techniques de décomposition par projection sur une base d'ondelette. A partir des résultats obtenus par Donoho

et al. [32] dans le cadre de débruitage, nous proposons d'intégrer le seuillage sur les coefficients obtenus lors de la projection des données SIMS sur une base d'ondelette.

Le cinquième chapitre sera consacré à la validation de la déconvolution multirésolution sur des profils SIMS simulés. L'étude des différents profils permettra en particulier de définir les conditions opératoires, afin que le traitement numérique appliqué aux profils expérimentaux soit le plus possible adapté au type du signal étudié. A partir de cette validation nous serons en mesure de donner les performances de la méthode. En particulier, ces performances vont être comparées avec celles de la plus récente proposée dans le domaine SIMS. Ce sera l'occasion pour nous de discuter de la fiabilité des résultats obtenus et de définir les critères qui permettent d'en juger.

Enfin, le dernier chapitre de cette étude verra, après avoir justifier le choix d'un algorithme particulier, l'application de la déconvolution aux profils de concentration réels. Ses performances vont être validées et comparées dans un contexte réel. Nous terminons par une conclusion générale et les perspectives du travail effectué.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **Panda D., Dhar A. et Ray S.K.**, *Characteristics of DC magnetron sputtered ternary cobalt–nickel silicide thin films for ultra shallow junction devices*, *Microelectronic Engineering*, 2008, Vol. 85 n° 3, pp. 559-565
- [2] **Castillo J. P., Jácome A. T., Malik O. et López N. T.**, *Very shallow boron junctions in Si by implantation and SOD diffusion obtained by RTP*, *Microelectronics Journal*, 2008, Vol. 39 n° 3-4, pp. 678-681
- [3] **Sridaran S., Partha A. C. et Dutta S.**, *Fabrication and passivation of GaSb photodiodes* *Journal of Crystal Growth*, 2007, article *In Press*
- [4] **Gwilliam R., Cowern N.E.B., Colombeau B., Sealy B. et Smith A.J.** *Vacancy engineering for ultra-shallow junction formation*, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2007, Vol. 261 n° 1-2, pp. 600-603
- [5] **Tillack B., Yamamoto Y., Bolze D., Heinemann B., Rücker H., Knoll D., Murota J. et Mehr W.**, *Atomic layer processing for doping of SiGe Thin Solid Films*, 2006, Vol. 508 n° 1-2, pp. 279-283
- [6] **Skotnicki T.**, *Materials and device structures for sub-32 nm CMOS nodes*, *Microelectronic Engineering*, 2007, Vol. 84 n° 9 -10, Pages 1845-1852
- [7] **Juhel M., Laugier F., Delille D., Wyon C., Kwakman L.F.Tz. et Hopstaken M.**, *SIMS depth profiling of boron ultra shallow junctions using oblique O_2^+ beams down to 150 eV*, *Applied Surface Science*, 2006, Vol. 252, n° 19, pp. 7211-7213
- [8] **Giubertoni D., Bersani M., Barozzi M., Pederzoli S., Iacob E., van den Berg J.A. et Werner M.**, *Comparison between the SIMS and MEIS techniques for the characterization of ultra shallow arsenic implants* *Applied Surface Science*, 2006, Vol. 252 n°19, pp. 7214-7217
- [9] **M. Bersani, D. Giubertoni, E. Iacob, M. Barozzi, S. Pederzoli, L. Vanzetti et M. Anderle**, *Boron ultra low energy SIMS depth profiling improved by rotating stage* *Applied Surface Science*, 2006, Vol. 252 n° 19, pp. 7315-7317
- [10] **Boulakroune M., Eloualkadi A., Benatia D. et Kezai T.**, *New approach for improvement of secondary ion mass spectrometry profile analysis*, *Japanese Journal of applied physics*, 2007, Vol. 46 n° 11, pp. 7441-7445

-
- [11] **Fares B., Gautier B., Dupuy J.C., Prudon G. et Holliger P.,** *Deconvolution of very low primary energy SIMS depth profiles*, Applied Surface Science, 2006, Vol. 252 n° 19, pp. 6478-6481
- [12] **Yang M. H. et Goodman G. G.,** *Application of deconvolution to boron depth profiling in SiGe heterostructures*, Thin Solid Films, 2006, Vol. 508 n° 1-2, pp. 276-278
- [13] **Kawashima Y., Ide T., Aoyagi S. et Kudo M.,** *Deconvolution analysis of dopant depth profile of Si at AlGaAs/GaAs interface using Al composition profile as reference*, Applied Surface Science, 2004, Vol. 231-232, pp. 800-803
- [14] **Gautier B., Dupuy J. C., Semmache B. et Prudon G.,** *SIMS depth profile correction for the study of the first step of the diffusion of boron in silicon*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 1998, Vol. 142 n° 3, pp. 361-376
- [15] **King B. V. et Tsong I. S. T.,** *Deconvolution of atomic mixing effects from SIMS depth profiles*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 1985, Vol. 7-8, n° 2, pp. 793-797
- [16] **Fearn S. et McPhail D.S.,** *High resolution quantitative SIMS analysis of shallow boron implants in silicon using a bevel and image approach*, Applied Surface Science, 2005, Vol. 252 n° 4, pp. 893-904
- [17] **Naundorf V. et Abromeit C.,** *Limits of depth resolution for sputter sectioning: Moments of tracer depth distribution*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 1989, Vol. 43 n° 4, pp. 513-519
- [18] **Boulakroune M. et Benatia D.,** *Beyond of the experimental limit of SIMS in-depth resolution*, Journal of engineering and applied sciences, 2007, Vol. 2(5), pp. 808-823
- [19] **Mancina G.,** *Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse par SIMS par deconvolution : algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la microélectronique silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2001, 184 p.
- [20] **Egerton R.F., Wangb F., Malac M., Moreno M.S. et Hofer F.,** *Fourier-ratio deconvolution and its Bayesian equivalent*, Micron journal, 2007, article in press,
- [21] **Egerton R.F., Qian H. et Malac M.,** *Improving the energy resolution of X-ray and electron energy-loss spectra*, Micron journal, 2006, Vol. 37, pp. 310–315
- [22] **Garcia-Talaveraa M., et Ulicnyb B.,** *A genetic algorithm approach for multiplet deconvolution in g-ray spectra*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 2003, Vol. 512, pp. 585–594
- [23] **Zhanga J.D., Zhoua T.J., Cheunga C.K., Belinga C.D., Funga S. et Ngb M.K.,** *Deconvolution of 2D coincident Doppler broadening spectroscopy using the Richardson–Lucy algorithm*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 2006, Vol. A 560, pp. 552–557
- [24] **Malyarenkoa D.I., Chena H., Wilkersona A.L., Tracya E.R., Cookea W.E., Manosa D.M., Sasinowskib M., et Semmesc O.J.,** *Gap TOF-SIMS line shape analysis for resolution enhancement of MALDI MS spectra of a peptide mixture*, Applied Surface Science, 2004, Vol. 231–232, pp. 357–361
- [25] **Starcks J.-L., Nguyenb M. K. et Murtaghc F.,** *Wavelets and curvelets for image deconvolution: a combined approach*, Signal Processing, 2003, Vol. 83, pp. 2279 – 2283
- [26] **Ismail A. E., Rutledge G. C. et Stephanopoulos G.,** *Using wavelet transforms for multiresolution materials modelling*, Computers and Chemical Engineering, 2005, Vol. 29 pp. 689–700
- [27] **Jammal G. et Bijaouib A.,** *DeQuant: a flexible multiresolution restoration framework*, Signal Processing, 2004, Vol. 84, pp. 1049 – 1069
-

- [28] **Deng G., Taya D. B. H. et Marusic S.,** *A signal denoising algorithm based on over complete wavelet representations and Gaussian models*, Signal Processing, 2007, Vol. 87, pp. 866–876
- [29] **Roques S., Bouyoucef K., Touzillier L. et Vigneau J.,** *Prior knowledge and multiscaling in statistical estimation of signal-to-noise ratio - Application to deconvolution regularization*, Signal Processing, 1995, Vol. 41, pp. 395-401
- [30] **Iqbal M.,** *Deconvolution and regularization for numerical solutions of incorrectly posed problem*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 2003, Vol. 151, pp. 463–476
- [31] **Burdeau J. -L, Goutte R. et Prost R.,** *Joint nonlinear-quadratic regularization in wavelet based deconvolution schem*, IEEE Int. Conference on signal processing WCCC-ICSP-2000, 2000, Vol. 1, pp. 77-80
- [32] **Donoho D. L. Johnstone I. M., Kerkyacharian G. et Picard D.,** *Wavelet shrinkage: Asymptotia*, JRSS, ser. B., 1995, Vol. 57, n° 2, pp. 301-369

Sommaire du chapitre 1

L'ANALYSE EN PROFONDEUR PAR SIMS : GENERALITES

Historique	6
Introduction	6
1. Principe de l'analyse SIMS	7
2. L'analyseur ionique à secteur magnétique CAMECA Ims-6f	8
2.1. La source d'ions primaires	9
2.2. La colonne primaire	9
2.3. La chambre objet	10
2.4. La colonne secondaire	10
2.4.1. Filtrage des aberrations, filtrage spatial	12
2.4.2. Dispersion en énergie des ions secondaires	12
2.4.3. Filtrage en masse	12
2.5. La détection	13
3. Caractéristiques générales	14
3.1. Une analyse élémentaire ou isotopique	14
3.2. Une analyse destructive	14
3.3. Une analyse semi-quantitative	14
4. Différents types d'analyse	15
4.1. Spectrométrie de masse	15
4.2. Imagerie ionique	15
4.3. Profils en profondeur et SIMS dynamique	16
4.3.1. Dynamique du signal	16
4.3.2. Sensibilité	17
4.3.3. Résolution en profondeur	17
5. Différents processus de l'analyse SIMS	17
5.1. La pulvérisation	17
5.1.1. La pulvérisation collisionnelle	17
5.1.2. La pulvérisation par excitation électronique	18
5.2. L'ionisation des atomes pulvérisés	19
5.2.1. L'émission ionique intrinsèque	20
5.2.2. L'émission ionique induite par réaction chimique de surface	20
5.3. La transmission des ions secondaires	20
5.4. Equation SIMS de base	21
6. Mécanismes gouvernants la résolution en profondeur	21
6.1. Le mixage collisionnel	22
6.1.1. Pouvoir d'arrêt et pertes d'énergie	24
6.1.2. Influence du mixage collisionnel sur la résolution en profondeur	24
6.1.3. Modélisation de la décroissance exponentielle	25
6.2. Effets de l'oxygène sur la résolution en profondeur	26
6.2.1. Le gonflement de la matrice : le swelling	27
6.2.2. L'analyse sous soufflage d'oxygène	27
6.2.3. La ségrégation	28
6.3. Problèmes d'érosion non homogène	29
6.3.1. Inclinaison du fond du cratère	29
6.3.2. Effets de bords	29
6.3.3. Rugosité induite	29

7. Evaluation de la résolution en profondeur	30
7.1. Évaluation à partir d'une interface abrupte	30
7.2. Évaluation à partir d'un delta-dopage	31
7.3. Séparation de deux deltas-dopage	33
8. Amélioration de la résolution en profondeur	34
8.1. Optimisation des paramètres physiques de l'analyse	34
8.2. Traitement numérique post-érosion	35
Conclusion	35
Bibliographie	36

Chapitre 1

L'ANALYSE EN PROFONDEUR PAR SIMS : GENERALITES

HISTORIQUE

Les premières observations de la pulvérisation ionique ont été faites par Thomson en 1910. C'est à Herzog et Viehboek que l'on doit les travaux de base qui ont conduit à l'élaboration de la technique, autour de 1949, à l'université de Vienne, en Autriche. Deux projets d'instruments SIMS ont été développés de façon indépendante dès la fin des années cinquante. Un projet états-unien, sous la conduite de Liebl et Herzog fut financé par la NASA, et mené à bien au sein de la société *GCA Corp* dans le Massachusetts. Le domaine d'application à l'époque était uniquement la géologie (la détermination des compositions des météorites tombées sur Terre). En France, un projet fut initié à l'université d'Orsay par Raimond Castaing et mené à bien par son thésard, puis par son continuateur Georges Slodzian. Les deux instruments furent industrialisés respectivement par *GCA Corp* et *Cameca*, une filiale de la *CSF* localisée dans la région parisienne. Cette société est toujours impliquée en 2008 dans les instruments SIMS. Les deux premiers instruments, l'américain et le français intégraient tous les deux un analyseur magnétique. Au début des années 70, des instruments SIMS furent développés avec des *quadripôles* en guise d'analyseurs: Alfred Benninghoven à l'Université de Münster et K. Wittmack dans la région de Munich. Au début des années 80, à l'Université de Münster des analyseurs à temps de vol (*Time Of Flight* - TOF) furent intégrés à des instruments SIMS. Depuis, l'analyse par spectrométrie de masse s'est imposée dans d'autres disciplines : la biologie, la métallurgie, la médecine, etc.

Dans le domaine de la microélectronique, l'analyse par SIMS a joué un rôle déterminant à son développement. En particulier, la réalisation des profils en profondeur, grâce à la sensibilité de l'analyse et à ses performances en matière de résolution en profondeur, a contribué à l'imposer dans ce domaine où la détection d'éléments présents en faible quantité dans une matrice semi-conductrice, dopant ou contaminant, est vitale. L'analyse par SIMS est appelée à jouer un rôle de plus en plus important dans la détection rapide de défauts, sur le site même de production des composants électroniques.

INTRODUCTION

Dans ce premier chapitre, après le principe de l'analyse SIMS, une description simplifiée de l'appareil utilisé dans ce travail permettra d'explicitier les processus d'obtention des données SIMS. Ensuite, nous détaillerons une revue des phénomènes physiques, d'un point de vue purement phénoménologique, sur lesquels est fondée l'analyse en profondeur par SIMS. Les principaux paramètres pratiques d'une analyse SIMS vont être mises en évidence. Nous établirons la relation entre le profil de concentration initial et la mesure expérimentale. La compréhension des différents paramètres ainsi que les phénomènes qui les engendrent nous permettra de dégager les conditions expérimentales qui permettent d'obtenir les meilleures performances de la résolution en profondeur. Enfin, nous conclurons sur la problématique de l'application de l'analyse SIMS à la caractérisation des matériaux de la microélectronique moderne.

1. PRINCIPE DE L'ANALYSE SIMS

Lors de l'analyse par SIMS, une source d'ions produit un faisceau d'ions accélérés et focalisés. Le matériau à analyser est bombardé par ce faisceau, appelé faisceau primaire. Dans des conditions typiques d'une analyse, la taille de la sonde du faisceau primaire est de quelques microns. Un balayage est appliqué au faisceau primaire de manière à homogénéiser le bombardement et à couvrir, sur l'échantillon, une surface de forme carrée pouvant aller de $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ à $500 \times 500 \mu\text{m}^2$.

L'oxygène (O_2^+) et le césium (Cs^+) sont les ions primaires les plus fréquemment utilisés. Les ions primaires frappent l'échantillon suivant un angle d'incidence oblique. Chaque ion atteint l'échantillon avec une énergie allant typiquement de moins d'un keV à 20 keV (selon les conditions adoptées), de manière à se situer au dessus du seuil de déplacement des atomes de la surface d'un solide. L'impact des ions primaires sur l'échantillon engendre des cascades de collisions sous la surface, conduisant à l'émission de diverses espèces parmi lesquelles on trouve des photons (ultraviolets, visibles, infrarouges), des électrons, des atomes neutres (sous forme simple ou sous forme d'agrégats) et enfin des ions monoatomiques ou poly-atomiques (Figure 1). De ce fait, le faisceau primaire creuse progressivement un cratère à la surface de l'échantillon. Le balayage appliqué au faisceau primaire permet d'obtenir un cratère carré à fond plat (de $10 \mu\text{m}$ à $500 \mu\text{m}$ de coté). Les ions dits secondaires (par comparaison avec les ions primaires issus de la source) émis par l'échantillon, constituent la source d'information de l'analyse par SIMS. Ils sont exploités pour déterminer les profils de concentration des éléments présents dans l'échantillon. Celui-ci est porté à un potentiel électrique positif ou négatif de plusieurs kilovolts selon que l'on souhaite extraire des ions secondaires positifs ou négatifs. Par conséquent, ils sont accélérés par cette tension d'extraction, triés en énergie grâce à un champ électrostatique puis triés en masse par un champ magnétique. Les ions secondaires qui ont franchi tous les filtres sont finalement comptés par un multiplicateur d'électrons ou par une cage de Faraday.

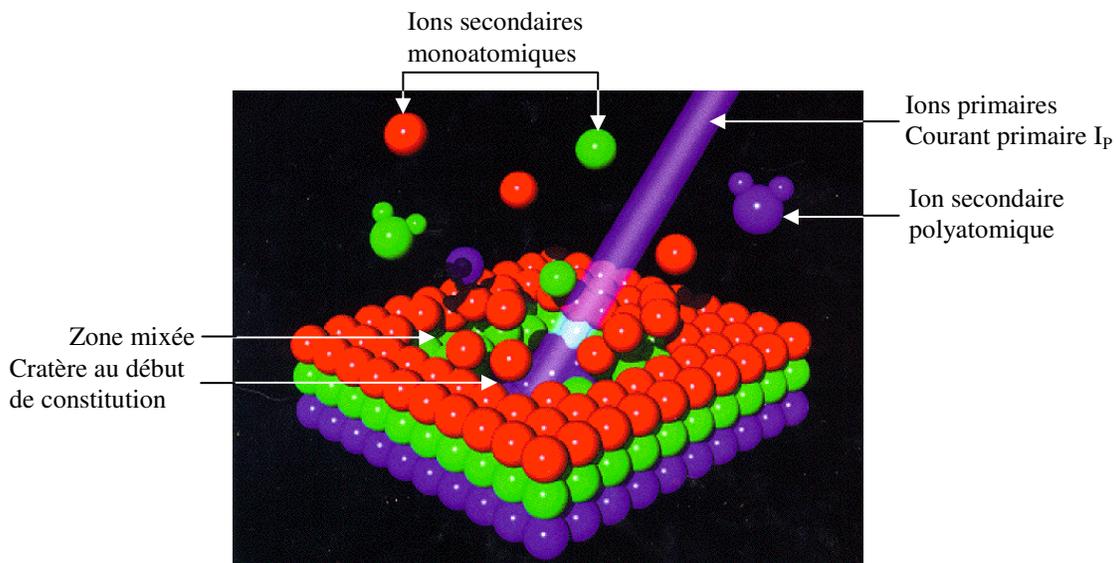


Figure 1 : Principe de l'analyse par SIMS.

2. L'ANALYSEUR IONIQUE A SECTEUR MAGNETIQUE "CAMECA Ims-6f"

Il existe plusieurs types d'analyseurs ioniques dont chacun présente ses propres avantages et inconvénients, à savoir : l'analyseur ionique à secteur magnétique, l'analyseur ionique à quadripôle et le SIMS en temps de vol. Les performances d'un analyseur se caractérisent par sa limite en masse, c'est-à-dire la masse la plus élevée qu'il est capable d'analyser, son pouvoir de résolution en masse et en profondeur qui chiffrent son aptitude à séparer des ions de masses voisines et deux monocouches voisines respectivement, sa sensibilité, généralement très élevée, qui indique la plus petite quantité de matière qu'il peut détecter.

Nous allons baser notre description sur l'analyseur ionique à secteur magnétique CAMECA Ims-6f utilisé dans notre travail. Nous ne prétendons pas à décrire précisément le fonctionnement complexe de cet appareil. Le lecteur intéressé par plus de détails pourra consulter à dessein les références suivantes : [1, 2]. Nous nous contenterons d'une description succincte et nous nous concentrerons sur les paramètres fondamentaux pour notre étude.

La Figure 2 représente le schéma de principe de l'analyseur ionique CAMECA Ims-6f. Cet analyseur est constitué de plusieurs parties principales dont : la source d'ions primaires (le duoplasmatron), la colonne primaire qui achemine ces ions primaires vers l'échantillon, l'étage de collecte et de transfert qui extrait les ions secondaires de la cible, le secteur électrostatique qui trie les ions en énergie, le secteur magnétique qui les trie en masse, et enfin le détecteur qui les compte.

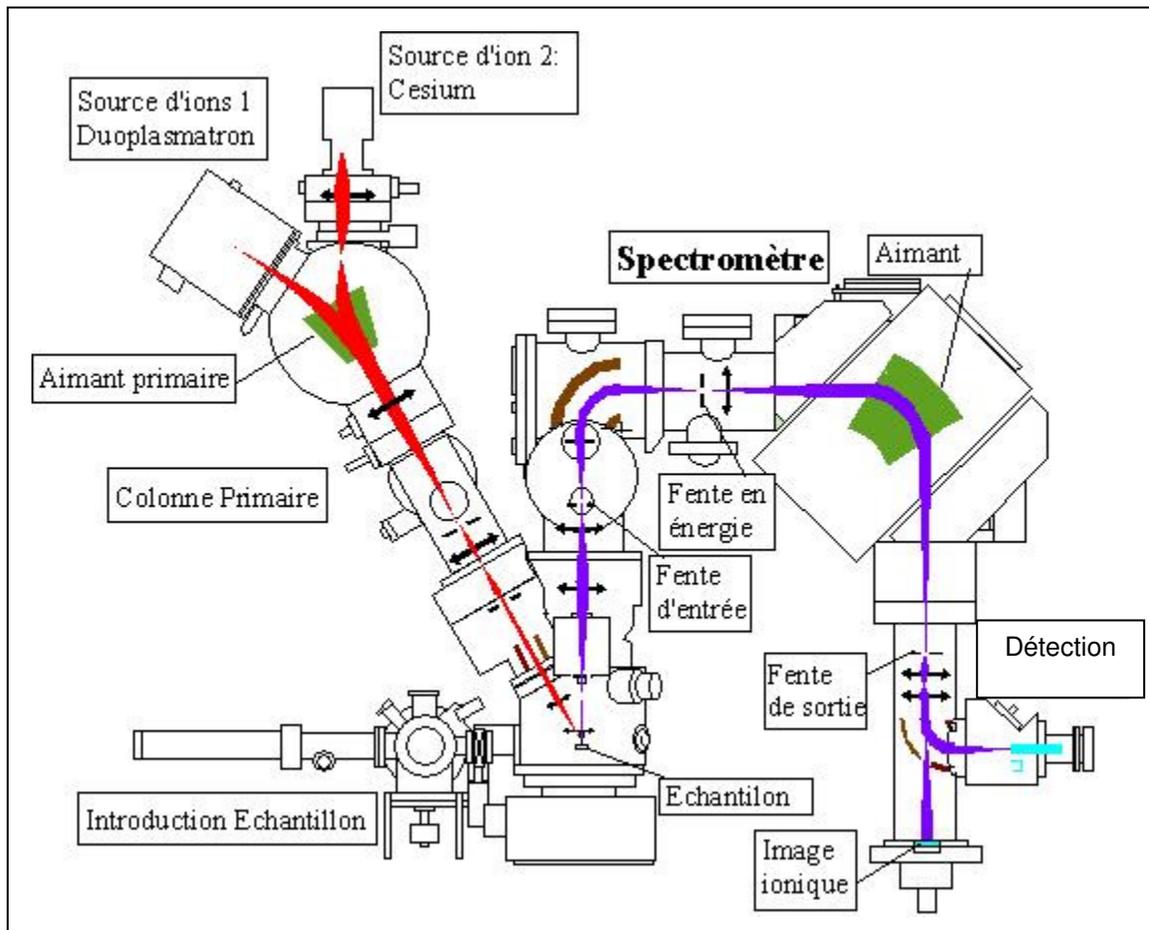


Figure 2 : Schéma de principe de l'analyseur ionique CAMECA Ims-6f.

2.1. La source d'ions primaires

La source d'ions produit un faisceau qui est accéléré à des énergies de plusieurs keV par l'électrode d'accélération. Les ions primaires les plus utilisés sont O_2^+ . Ils sont produits par un duoplasmatron à cathode froide faisant partie de la famille des sources à plasma. Cette source est capable de produire des ions positifs ou négatifs : O^+ , O^- , en plus elle peut produire des ions Ar^+ qui est un projectile également assez utilisé en analyse par SIMS. L'utilisation extensive d'ions O_2^+ tient en fait que le faisceau d'oxygène est réactif et provoque une modification de la composition des premières couches atomiques de la cible. Cette modification se traduit principalement par une forte augmentation du taux d'ionisation des éléments électropositifs qui améliore fortement la résolution en profondeur et la dynamique du signal. L'analyse par SIMS peut être également conduite sous faisceau de Césium. Les ions Cs^+ sont obtenus à partir d'un composé solide et non gazeux comme dans le cas du duoplasmatron, ce qui nécessite donc une source de nature différente. Le bombardement par des ions Cs^+ exalte l'émission ionique secondaire des éléments électronégatifs tels les halogènes, le phosphore, le sélénium, le tellure, le carbone, l'oxygène et les métaux nobles [8]. Leur utilisation connaît actuellement un regain d'intérêt grâce à ces vertus dans le domaine de la quantification des profils en profondeur. Dans certains cas, l'utilisation des ions MCs^+ où M est l'espèce étudiée, minimise les effets de matrice qui handicapent la quantification des profils SIMS [8, 9]. La description complète de ces deux sources peut être trouvée dans les références [1-3]. A noter qu'il est possible d'utiliser des ions primaires N_2^+ ou Xe^+ .

2.2. La colonne primaire

La Figure 3 montre les principaux éléments d'un exemple de colonne primaire. Les colonnes primaire et secondaire se comportent comme des systèmes optiques dans lesquels le faisceau lumineux est remplacé par un faisceau de particules chargées. Divers composants permettant d'agir sur le faisceau: lentilles électrostatiques, diaphragmes, fentes et défecteurs. Afin de minimiser les défauts de ces composants, les faisceaux d'ions doivent être accélérés à des énergies de plusieurs keV.

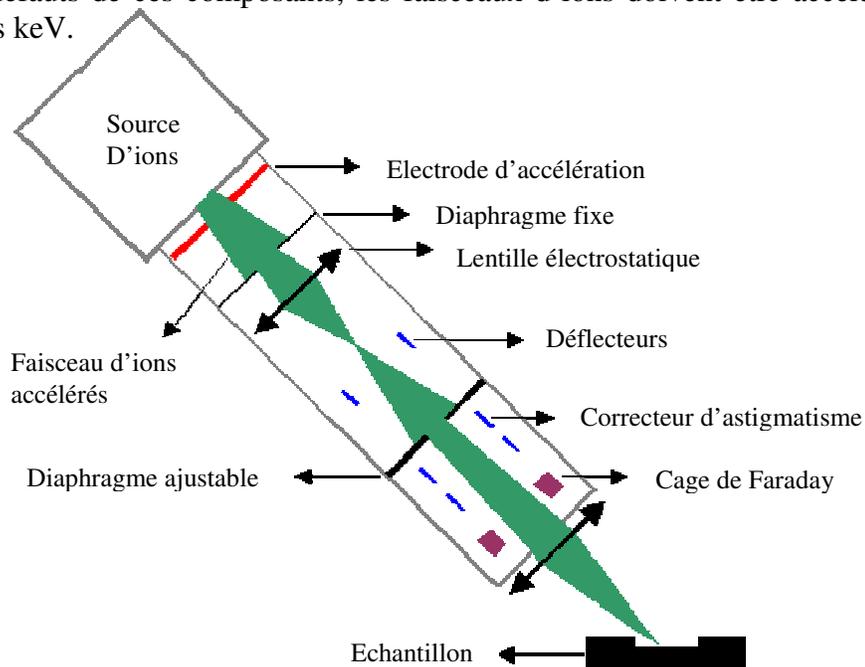


Figure 3 : Schéma descriptif d'un exemple de colonne primaire.

La colonne primaire permet:

- d'assurer la pureté du faisceau d'ions primaires par filtrage magnétique en sortie de la source,
- de régler l'intensité du faisceau (entre 1 nA et plusieurs μA) selon les conditions d'analyse,
- d'assurer la mise en forme du faisceau et sa focalisation sur la surface d'échantillon,
- d'assurer un balayage du faisceau à la surface de l'échantillon,
- de positionner correctement la zone analysée à la surface de l'échantillon afin que le cratère soit correctement aligné avec la colonne secondaire,
- de dériver le faisceau dans la cage de Faraday pour mesurer son intensité lorsqu'il n'est pas dirigé vers l'échantillon.

La taille de la sonde (diamètre du faisceau à la surface de l'échantillon) peut descendre jusqu'à environ $1\ \mu\text{m}$ pour des faisceaux peu intenses (utilisé pour faire de l'imagerie). Dans les conditions standards qui permettent de mesurer des profils de concentrations, elle peut dépasser $10\ \mu\text{m}$ de diamètre.

Le balayage du faisceau permet d'homogénéiser le bombardement primaire sur l'ensemble de la surface analysée et d'obtenir, le plus possible, un cratère à fond plat (Figure 4). La planéité du fond du cratère est un élément déterminant pour l'obtention d'une résolution en profondeur élevée lorsque des profils de concentrations sont mesurés.

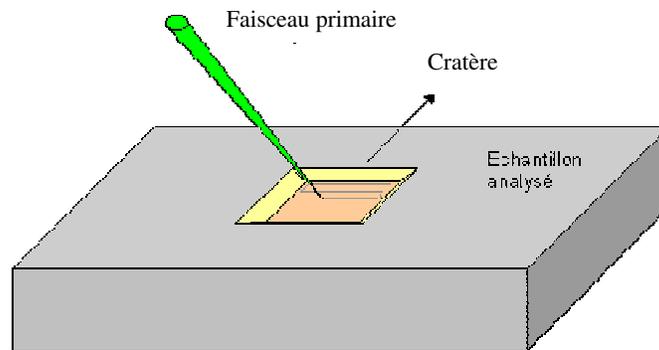


Figure 4 : Cratère créé par le balayage du faisceau primaire. Le balayage du faisceau est matérialisé par le trait gris dans le cratère. Le faisceau secondaire (absent dans la figure) est généré à partir du point d'impact du faisceau primaire.

2.3. La chambre objet

La chambre objet, dans laquelle est placé l'échantillon, est placée sous ultravide (2.10^{-9} à 2.10^{-8} torrs selon les conditions de fonctionnement). Dans le cas de l'analyseur ionique à secteur magnétique CAMECA, l'échantillon est porté à un potentiel de ± 4500 volts, tandis que l'électrode d'extraction est reliée à la masse, ce qui permet d'extraire des ions secondaires de polarité choisie.

2.4. La colonne secondaire

La Figure 5 illustre les principaux éléments d'une colonne secondaire. Lorsque l'échantillon est éclairé par le faisceau primaire, chaque point de l'échantillon est l'équivalent d'une source d'ions (de la même façon que chaque point d'un objet éclairé par un faisceau lumineux est une source de lumière). La colonne secondaire constitue un système d'optique électrostatique qui forme divers types d'images ioniques au niveau des diaphragmes et des fentes

du système. Ces images sont formées grâce aux lentilles électrostatiques, au secteur électrostatique et à l'électroaimant du spectromètre de masse. Chaque fente ou diaphragme peut être élargi, décalé ou rétréci afin de sélectionner l'information désirée. On distingue ainsi :

- le diaphragme du "cross-over" (couplé à une fente) au niveau duquel se forme l'équivalent ionique du « plan de Fourier » d'un système optique : chaque point du plan du diaphragme recueille les ions émis dans une direction donnée depuis l'échantillon;
- le diaphragme image où est projetée une image ionique de la surface de l'échantillon;
- la fente en énergie qui permet, si elle est rétrécie, de filtrer les ions en fonction de leur énergie cinétique;
- la fente en masse qui permet de filtrer les ions en fonction de leur masse, ou plus exactement en fonction de leur rapport M/q , M étant leur masse et q leur charge électrique. En générale, très peu d'ions possèdent plus d'une charge électrique élémentaire. Pour cette raison, nous parlerons par la suite essentiellement de leur masse.

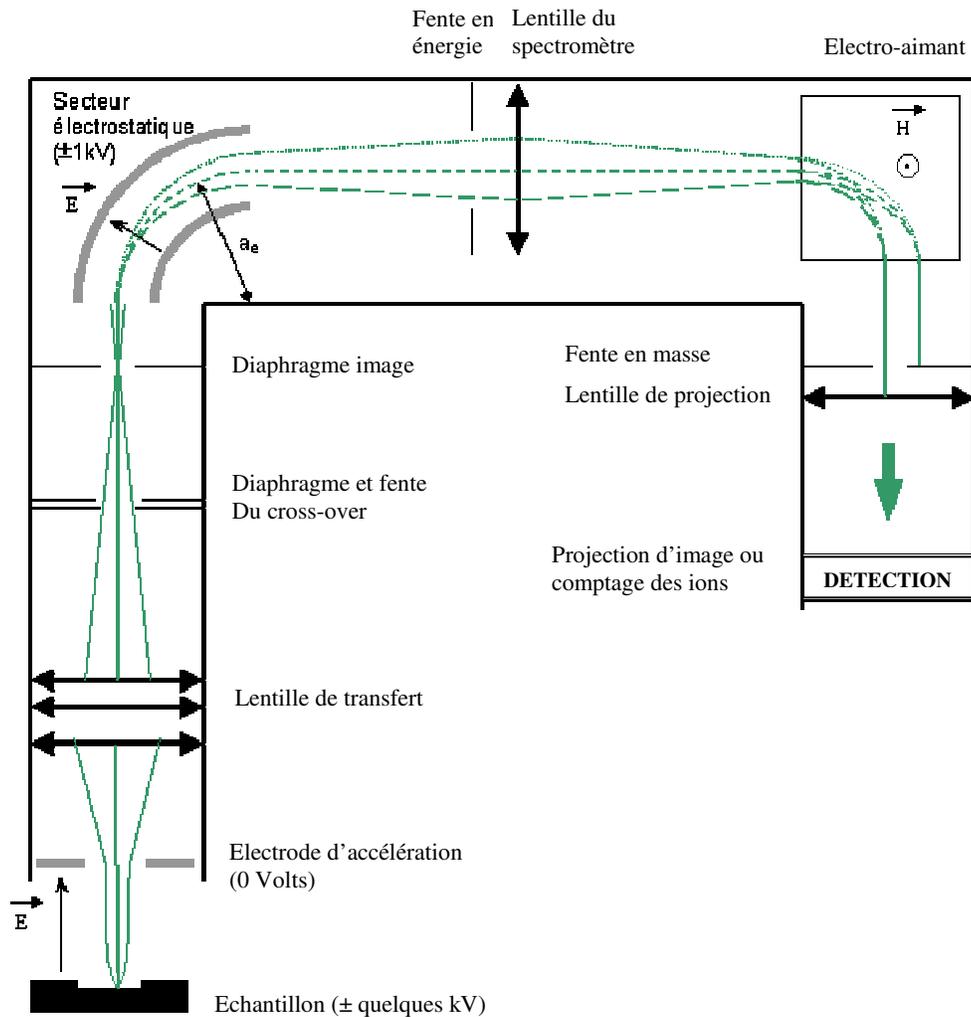


Figure 5 : Schéma descriptif d'un exemple de colonne secondaire.

2.4.1. Filtrage des aberrations, filtrage spatial

Les composants d'optique électrostatique de la colonne secondaire comportent des aberrations. Lorsqu'une analyse nécessite une optique secondaire de meilleure qualité, le diaphragme et la fente du cross-over peuvent être réglés de manière à filtrer certaines de ces aberrations. Cela est utile surtout dans des conditions de haute résolution en masse lorsqu'il est nécessaire de lever des interférences de masse (par exemple entre ^{31}P et $^{30}\text{Si}^1\text{H}$). Dans les autres cas, il est préférable d'utiliser une ouverture large afin de laisser passer un maximum de signal. Une image ionique de la surface de l'échantillon est projetée sur le plan du diaphragme image. Ce diaphragme permet de ne laisser passer que les ions provenant d'un disque situé au centre du cratère (Figure 6). Lorsqu'on souhaite avoir une bonne résolution en profondeur, on utilise un diaphragme image de faible diamètre afin de diminuer les effets de bords (les flancs du cratère émettent des ions qui brouillent l'information "profondeur"). Si la résolution en profondeur n'est pas importante, il est généralement préférable d'utiliser le diaphragme le plus large afin de transmettre un maximum de signal.

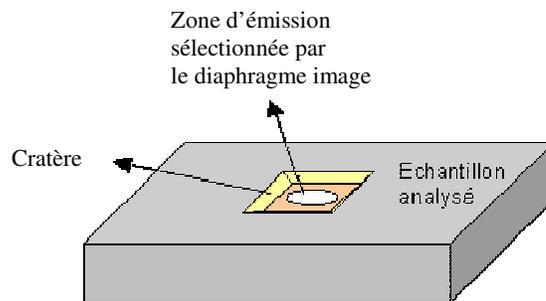


Figure 6 : Illustration de la zone d'émission des ions secondaires pouvant être sélectionnée par le diaphragme image (seuls les ions émis à partir du disque blanc franchissent le diaphragme).

2.4.2. Dispersion en énergie des ions secondaires

Les ions secondaires n'ont pas tous exactement la même énergie cinétique. L'énergie cinétique d'un ion secondaire comprend deux composantes :

- l'énergie apportée par la tension secondaire (quelques keV),
- une petite composante pouvant aller de quelques eV à quelques dizaines d'eV qui provient de la cascade de collision qui a abouti à l'éjection de l'ion hors de l'échantillon.

Le secteur électrostatique sépare les ions secondaires qui ont des énergies cinétiques différentes. Cette séparation a deux rôles :

- le rôle principal est d'améliorer la résolution en masse; pour cela, la fente en énergie n'a pas besoin d'être rétrécie: elle est le plus souvent entièrement ouverte et laisse passer tous les ions (voir la section suivante).
- dans certains cas particuliers, la fente en énergie est utilisée en tant que filtre afin de résoudre certaines interférences de masse : cette méthode est appelée "technique de l'offset".

2.4.3. Filtrage en masse

L'électro-aimant et la fente en masse jouent un rôle essentiel puisque c'est l'électro-aimant qui permet de séparer les trajectoires des ions de masses différentes et que la fente en masse

permet de ne conserver que les ions ayant la masse voulue. En pratique, la fente reste fixe, et l'ajustement du champ magnétique du spectromètre permet de choisir la masse. D'autres paramètres sont toutefois susceptibles de brouiller la sélection en masse :

- l'énergie des ions secondaires dont la distribution s'étale sur plusieurs dizaines d'eV,
- la direction d'émission des ions secondaires à partir de la surface de l'échantillon.

Le brouillage des masses dû à la distribution en énergie des ions vient du fait que l'électro-aimant sépare simultanément les ions de masses différentes et d'énergies différentes. Le rôle principal du secteur électrostatique est de résoudre ce problème. Pour cela, le secteur et la lentille du spectromètre sont réglés de telle sorte que la séparation en énergie engendrée par le secteur soit exactement opposée à celle que produit l'électro-aimant. De cette manière, l'électro-aimant sépare les masses en même temps qu'il regroupe les énergies (voir les trajectoires des ions sur la Figure 5). Chaque point de la fente en masse recueille ainsi des ions d'une masse donnée quelle que soit leurs énergies.

La résolution en masse est exprimée par le rapport $M/\Delta M$ où M est la masse de l'ion et ΔM la plus petite différence de masse qui peut être résolue. Dans les conditions d'analyse standard (si le problème du brouillage en énergie est correctement réglé) la résolution en masse atteint une valeur de 300 qui est suffisante pour séparer des ions qui auraient pour masses respectives 299 et 300 Uma. Ce réglage est dit de "basse résolution en masse".

Les réglages à haute résolution nécessitent de résoudre le brouillage des masses dû aux directions d'émission des ions depuis la surface de l'échantillon. Ces réglages consistent à rétrécir la fente du cross-over et la fente en masse. Ils permettent dans des cas extrêmes d'atteindre des résolutions de l'ordre de $M/\Delta M = 10000$ [6]. Ces réglages permettent de résoudre certaines interférences de masse. Considérons par exemple le cas d'une recherche de phosphore dans une plaque de silicium. Une résolution d'environ 3600 est nécessaire pour séparer les espèces suivantes :

- ^{31}P de masse $M = 30,974$,
- $^{30}\text{Si} \ ^1\text{H}$ de masse $M = 30,982$.

Toutefois ce type de réglage est pénalisant car il diminue le signal transmis.

2.5. La détection

Au-delà de la fente en masse, plusieurs types de détections sont possibles. Pour établir un spectre de masse ou un profil en profondeur, un multiplicateur d'électrons est utilisé. Un multiplicateur est constitué d'une série d'électrodes qui produisent une avalanche d'électrons à chaque impact d'un ion. Ce dispositif permet ainsi de compter individuellement l'ensemble des ions qui l'atteignent jusqu'à des cadences d'environ 10^6 ions par seconde. La détection est linéaire sur une gamme considérable de signaux (6 à 7 décades) ce qui permet de détecter simultanément des traces et des majoritaires. Une simple cage de Faraday, beaucoup moins sensible, remplace le multiplicateur en tant que dispositif de comptage lorsque le faisceau d'ions est trop intense.

Les fonctions d'imagerie peuvent être assurées soit par le multiplicateur d'électrons, soit en mode "microscope". Avec le multiplicateur d'électrons, l'image est reconstituée point par point grâce au balayage du faisceau primaire (principe comparable à celui d'un microscope électronique à balayage). La résolution spatiale dépend alors de la taille de sonde du faisceau primaire. Celle-ci peut être optimisée jusqu'à environ $1\mu\text{m}$. En mode "microscope", la colonne secondaire est

utilisée pour projeter sur une anode résistive une image ionique de la surface de l'échantillon (principe comparable à celui d'un microscope optique traditionnel).

La dernière décennie a vu le développement massif d'appareils SIMS pour lesquels le flux d'ions primaires est réduit de façon à ne plus provoquer d'érosion notable de l'échantillon. Ce qui permet d'obtenir des analyses chimiques de surface. Le fonctionnement en mode pulsé permet à la fois de réduire la dose d'ions primaires et de travailler sans trop de problèmes liés à l'analyse [5].

3. CARACTERISTIQUES GENERALES

3.1. Une analyse élémentaire ou isotopique

Il est possible de détecter par SIMS tous les éléments de la classification, y compris les éléments les plus légers (H, B, Li, etc.) difficilement ou non accessibles par d'autres méthodes. Il n'est par contre pas possible d'obtenir d'informations sur la nature des liaisons chimiques entre les éléments présents dans la matrice, sauf par voie indirecte.

L'un des atouts majeurs de l'analyse par SIMS est sa sensibilité car contrairement aux techniques spectroscopiques, la détection des ions ne s'accompagne d'aucun rayonnement parasite ni de fond continu. La détection des ions est assurée par un multiplicateur d'électrons qui est capable de repérer un ion isolément sans ambiguïté. La sensibilité est de l'ordre du *ppm* (partie par million) pour beaucoup d'éléments, et même du *ppb* (partie par billion) dans certains cas, ce qui explique le succès de la technique dans le domaine des semi-conducteurs où la détection de dopants, donc d'éléments présents en faible concentration dans une matrice donnée, est cruciale.

3.2. Une analyse destructive

L'analyse par SIMS entraîne l'érosion de la surface de l'échantillon jusqu'à des profondeurs qui peuvent atteindre quelques micromètres. Il faudra donc à chaque analyse sacrifier une partie de la surface de l'échantillon (de l'ordre de 500 μm x 500 μm) et effectuer les analyses avec circonspection si l'échantillon s'avère rare ou précieux. Par ailleurs, la petitesse du cratère sous investigation en fait une technique d'analyse localisée, qui fournira donc une information sur une aire très restreinte, à partir de laquelle une généralisation à tout l'échantillon sera ou ne sera pas possible selon que l'échantillon est homogène ou non sur toute sa surface.

3.3. Une analyse semi-quantitative

L'un des inconvénients de la technique est la difficulté d'obtenir des estimations quantitatives des mesures, c'est à dire de connaître exactement la concentration de l'élément analysé dans la matrice. Généralement, la quantification se fait par comparaison avec des mesures étalons conduites dans des conditions similaires à celles utilisées pour l'échantillon considéré. Dans le domaine des semi-conducteurs, on utilise généralement des échantillons standards préparés par implantation ionique.

Ce paragraphe nous donne l'occasion de préciser la définition de paramètres importants que nous aurons l'occasion de rencontrer dans notre étude de la résolution en profondeur. Ces paramètres conditionnent théoriquement la quantification des profils SIMS. En effet, si l'analyse par SIMS était idéale, le nombre d'atomes détectés serait exactement égal au nombre d'atomes présents initialement dans le solide. Si ce n'est pas le cas, il faut en chercher les causes au cours

des trois phases importantes qui jalonnent le parcours des atomes de l'intérieur de la cible vers le détecteur : la pulvérisation, l'ionisation et la transmission, le long de la colonne secondaire.

4. DIFFERENTS TYPES D'ANALYSE

La technique SIMS analyse, par spectrométrie de masse, les ions secondaires issus de la pulvérisation. Le mode de détection des ions conditionne le type d'analyse : analyse élémentaire (spectre de masse), profil de répartition en profondeur (évolution d'intensité d'un ion en fonction du temps d'abrasion) et image ionique (cartographie chimique).

4.1. Spectrométrie de masse

Le but de ce type d'analyse est de repérer la présence de certains éléments dans un échantillon donné. Le spectromètre est donc réglé de manière à balayer une plage précise de valeurs du rapport masse/charge des ions secondaires et de repérer l'intensité ionique détectée correspondant à chaque valeur. Ce type d'analyse nécessite des courants primaires très faibles, inférieurs à 5 nA.cm^{-2} (une densité de 1 nA.cm^{-2} est préférable, contrairement au SIMS dynamique qui utilise de forts courants de l'ordre de μA) afin que l'irradiation soit suffisamment douce pour qu'une bonne partie des ions émis conservent la structure des molécules adsorbées. Des études d'états d'oxydation, de chimisorption, de structure d'adsorbats, de réactivité de surface, etc., ont pu être menées par ce type de régime. Le travail d'interprétation consistera à l'identification des pics obtenus, dont certains nécessitent l'emploi d'une très haute résolution en masse ou un filtrage en énergie très élevé, car certains rapports (masse / charge) peuvent être très proches, ce qui engendre un problème majeur pour la quantification qui est le problème d'interférence.

4.2. Imagerie ionique

Ce type d'analyse est appelé SIMS statique, la profondeur d'échappement des ions secondaires ne dépasse pas les trois premières couches atomiques sous la surface de l'échantillon, ce qui localise le signal accessible sur la surface de l'échantillon étudié. Tandis que les profils en profondeur donnent des informations dans la direction perpendiculaire à la surface, il est parfois utile de connaître les variations de composition dans les deux autres directions. Cette caractéristique, couplée à un balayage du faisceau primaire sur la surface de l'échantillon, permet d'obtenir des images ioniques. Il est par exemple possible d'étudier l'homogénéité de la surface, ou de localiser des phases différentes. On a accès à une image ionique qui peut être obtenue de deux façons :

- ✚ La première méthode, définie comme le mode microscope, consiste à focaliser *optiquement* le faisceau d'ions secondaires pour obtenir une image ou plusieurs images successives de la surface dans certains plans sur le trajet de ce faisceau et d'interposer au niveau de l'un de ces plans un diaphragme de champ qui permet la délimitation de l'aire analysée. L'analyse ou la production de l'image finale concerne alors l'ensemble de l'aire délimitée par le diaphragme. La résolution latérale de l'analyse dépend des aberrations optiques du système (aberrations chromatiques), c'est à dire dispersion en énergie et diffusion sur les bords de diaphragmes.
- ✚ La seconde méthode, définie comme le mode microsonde, consiste à effectuer la détection des ions secondaires en synchronisme avec le balayage primaire. Le signal détecté à un instant donné correspond donc à une position donnée du faisceau primaire focalisé

(la sonde ionique) sur la surface de l'échantillon. L'image de répartition des ions secondaires considérés sur la surface peut alors être reconstituée, par exemple en alimentant avec le signal un tube cathodique dont le balayage est synchronisé avec le balayage de la sonde ionique. L'aire analysée (ou l'aire imagée) est alors délimitée par sélection électronique des signaux correspondants à ces aires. La résolution latérale dépend de la qualité de cette sélection et des tailles respectives de la sonde ionique et de l'unité de temps de détection ou de l'aire de reconstitution : pixel.

4.3. Profils en profondeur et SIMS dynamique

C'est le mode qui nous intéresse, il est très largement utilisé en microélectronique où la distribution en profondeur des dopants ou des éléments majeurs est une information très importante. Pour cela c'est très utile de le détailler afin de mieux comprendre les différents mécanismes qui le gouvernent. En fait, l'érosion inhérente à la pulvérisation permet de pratiquer une analyse en profondeur de l'échantillon, c'est à dire de collecter les ions secondaires en fonction du temps pour obtenir un profil de concentration en profondeur. C'est un aspect très important qui se place au centre de notre travail. La résolution accessible par l'analyse SIMS est de l'ordre d'une dizaine de nanomètres, ce qui rend la technique très compétitive dans le domaine de l'étude des multicouches superficielles des semi-conducteurs.

Notons que le caractère dynamique de l'analyse n'est pas en contradiction avec le fait que l'analyse par SIMS est une analyse de surface, car bien que l'échantillon soit érodé par le faisceau primaire, il n'en reste pas moins que les ions secondaires proviennent toujours des trois premières couches atomiques sous la surface instantanée. Un profil en profondeur idéal s'apparente donc à un découpage plan par plan de la surface de l'échantillon couplé à une mesure dans chaque plan de la concentration de l'espèce voulue. Le cas réel est loin d'être réalisable, les différentes caractéristiques de l'analyse en profondeur sont :

4.3.1. Dynamique du signal

Une caractéristique essentielle de l'analyse en profondeur est la dynamique du signal. Elle est utilisée pour valider les performances de l'analyse, généralement elle est déterminée par le nombre de décades entre le maximum et le minimum du signal pour un profil d'un élément implanté dans une matrice donnée. La dynamique du signal pour un instrument peut être limitée, pour les signaux élevés, par l'incapacité du système de détection de répondre à tous les ions arrivant sur le détecteur (saturation). A la queue du signal (pour les faibles signaux), la dynamique du signal est limitée par le bruit de fond qui est problème majeur pour la quantification et la déconvolution, il peut être éliminé uniquement par le débruitage (ce point va être détaillé dans le chapitre 4).

La Figure 7 qui représente un profil du bore implanté dans le silicium montre une dynamique du signal d'environ 5 décades.

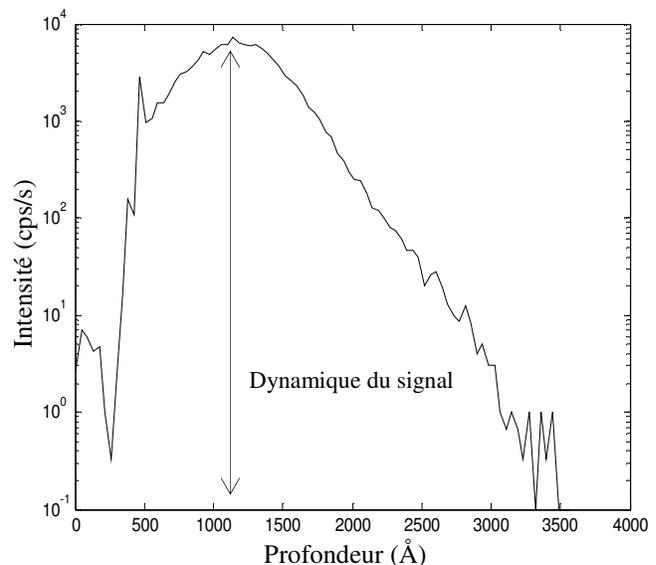


Figure 7 : Profil en profondeur du bore dans le silicium, présentant une dynamique du signal de 5 décades.

4.3.2. Sensibilité

L'un des manières d'exprimer la sensibilité est de donner la concentration minimale d'un élément donné détectable par le système. Ce paramètre est étroitement lié à la transmission de l'instrument mais il variera d'un élément à un autre en fonction de la capacité de l'élément à s'ioniser et à se pulvériser. La sensibilité dépend également de la vitesse d'érosion, du faisceau incident (oxygène, césium ou argon), du vide qui règne dans la chambre objet, et enfin du bruit de fond de l'appareil.

4.3.3. Résolution en profondeur

La résolution en profondeur obtenue par l'analyse SIMS est similaire aux celles obtenues par d'autres techniques qui se basent sur la pulvérisation des couches successives de l'échantillon. La résolution en profondeur dans l'analyse SIMS n'est plus la dynamique du signal ; un profil qui présente une bonne dynamique du signal peut avoir une mauvaise résolution en profondeur !

La résolution en profondeur peut être définie comme la différence de profondeur minimale à partir de laquelle on peut mesurer une différence de concentration de manière significative. Pratiquement si on a une différence de concentration ΔC qui se traduit sur une très faible épaisseur (quelques couches atomiques), la résolution en profondeur correspond à la profondeur qu'il faut abraser pour passer de $C_1+10\% \Delta C$ à $C_2-10\% \Delta C$, C_1 et C_2 étant les concentrations initiale et finale.

Les phénomènes mis en jeu lors de l'émission ionique ne concernent que quelques couches atomiques, et l'on estime généralement que 85 % des ions provenant de la première couche. Si les phénomènes de pulvérisation ne viennent pas perturber l'arrangement des atomes, la résolution en profondeur peut être théoriquement de quelques nanomètres [5, 6]. Nous aurons l'occasion de revenir de manière plus exhaustive sur ce point dans ce chapitre.

5. DIFFERENTS PROCESSUS DE L'ANALYSE SIMS

5.1. La pulvérisation

La surface des solides, quelque soit leur nature, s'érode sous bombardement ionique. En dépit du caractère universel de la pulvérisation et l'âge relatif de ce processus (sa découverte remonte au siècle dernier), la compréhension de ce phénomène est loin d'être achevée tant sur le plan de la mesure expérimentale que sur le plan théorique. De nombreux mécanismes de pulvérisation, parfois controversés, ont été proposés depuis un siècle [1-3]. Aujourd'hui le consensus général est qu'aucun de ces mécanismes ne peut lui seul englober toutes les observations. Il semble, au contraire, que suivant les conditions de bombardement ou de la classe de matériaux envisagés (métaux, composés ionique,...) tel jeu de mécanismes intervienne plus ou moins sans qu'une règle générale puisse être dégagée facilement. Parmi ces mécanismes, on peut distinguer : la pulvérisation collisionnelle et la pulvérisation par excitation électronique.

5.1.1. La pulvérisation collisionnelle

Lorsque l'ion incident pénètre dans le solide, il dépose une fraction de son énergie par choc élastique avec les noyaux des atomes cibles et les met en mouvement. Le processus des cascades de collisions conduisant à la pulvérisation ionique est décrit dans le modèle de Sigmund [11], développé pour les solides atomiques, élémentaires et isotopes. Une partie

de l'énergie déposée dans le solide est réfléchi vers la surface par l'intermédiaire des atomes de recul (atomes de la cible mis en mouvement soit par collision directe avec les particules incidentes, soit par l'intermédiaire de collisions en cascades). Si l'énergie de ces derniers au voisinage de la surface est supérieure à l'énergie de liaison des atomes en surface du solide, ils peuvent provoquer l'émission d'atomes de surface dans le vide. Le reste de l'énergie déposée par les particules primaires est dissipée par la création des défauts [16], le ralentissement subséquent des particules primaires conduit à leur implantation. Dans ce cas, si le volume d'interaction des particules primaires avec le solide est de l'ordre de leur profondeur d'implantation (quelques nanomètres à quelques dizaines de nanomètres pour les énergies considérées), les atomes pulvérisés ne proviennent que des trois premières couches atomiques (85 % de la première et 15 % de la deuxième et la troisième couche) [5, 15, 17].

Il est important de souligner que la dissipation d'énergie des ions primaires dans le volume d'interaction avec le matériau (quelque fois appelé épaisseur perturbée ou couche modifiée ou zone mixée) provoque à la fois une modification des compositions, la création des défauts atomiques, voire une amorphisation locale, des déplacements parasites des constituants par recul ou par diffusion accélérée. Par ailleurs, le bombardement provoque l'émission de forte quantité d'électrons secondaires, ce qui conduit pour les matériaux isolants, à des modifications importantes du potentiel de surface (effet de charge).

5.1.2. La pulvérisation par excitation électronique

Le second mode de perte d'énergie du projectile est celui causé par les collisions inélastiques de la particule primaire avec les électrons du solide (pertes électroniques). Pour certaines classes de solides isolants tels les halogénures alcalins [1, 4, 5, 6], les cristaux de gaz rares et les cristaux moléculaires [1, 7], ce dépôt d'énergie électronique est la cause d'excitation et d'ionisation interne et qui peut se transformer en mouvement atomique. Pour la pulvérisation qui tire son origine de l'excitation électronique, la question en suspens est celle du transfert d'énergie. Comment l'énergie introduite dans le système électronique par excitation et ionisation est-elle convertie en énergie cinétique susceptible de déplacer des atomes ? Il y a actuellement un certain nombre de suggestions pour expliquer cette conversion; un prototype serait l'excitation d'un état fondamental liant en un état excité anti-liant. La dissociation aurait lieu dans le cas où la durée de vie de l'état anti-liant est comparable ou plus grande que le temps nécessaire pour séparer les deux noyaux sous l'action de leur répulsion mutuelle.

Quelque soit le mécanisme de pulvérisation, au bout d'un certain temps tous les atomes sont bien sûr pulvérisés, mais il est intéressant de comparer le nombre d'atomes éjectés n_T par rapport au nombre d'ions incidents N_0 . On définit pour cela le *taux de pulvérisation* par le nombre d'atomes pulvérisés par ion incident. Chaque espèce a son propre taux de pulvérisation Y_k , et le taux total Y_t qui est la somme des taux de chacune d'entre elles :

$$Y_t = \sum_k Y_k = \frac{n_T}{N_0} \quad (1)$$

L'intérêt du taux de pulvérisation global est de comparer par la suite l'intensité secondaire par rapport à l'intensité du courant ionique primaire. Le taux de pulvérisation dépend principalement de l'énergie et de l'angle d'incidence des ions primaires, de leur nature et de la composition de la matrice.

Grâce au logiciel SRIM (*Stopping and Range of Ions in Matter*), développé par Ziegler et Biersak [36], nous avons pu simuler les variations du rendement de pulvérisation en fonction de l'énergie et de l'angle d'incidence pour différents ions primaires. Les résultats obtenus sont illustrés dans les Figures 8 et 9.

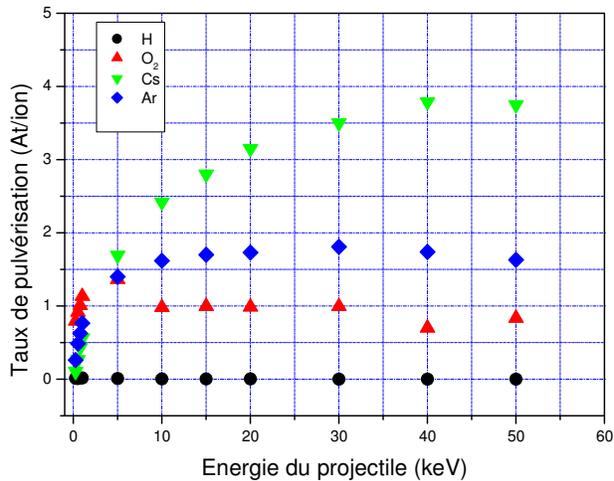


Figure 8 : Variation du rendement de pulvérisation du silicium sous incidence normale pour différents ions primaires d'énergie croissante. Le meilleur rendement est pour le césium, pour les autres gaz, le maximum de rendement est pour une énergie de 30 keV.

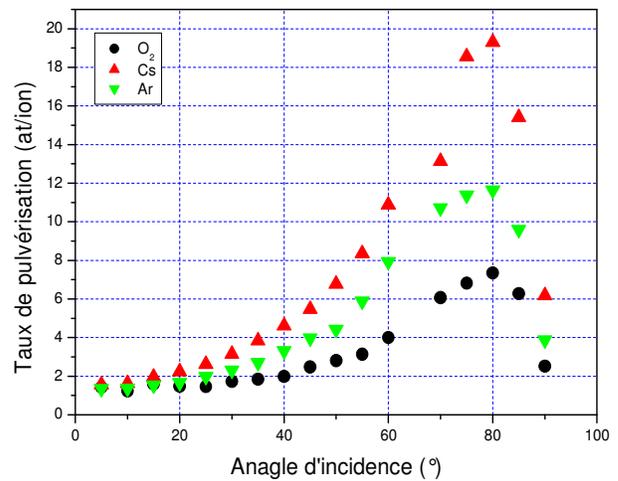


Figure 9 : Influence de l'angle d'incidence sur le rendement de pulvérisation du silicium pour différents ions primaires. Le maximum du taux de pulvérisation est pour $\theta=80^\circ$.

D'après ces courbes, le taux de pulvérisation dépend fortement de la masse et d'énergie des projectiles. Le plus faible rendement, quasi-stationnaire, détecté est pour l'hydrogène (de masse atomique 1 Uma). Cependant, le rendement le plus élevé est celui du Césium de masse atomique 133 Uma). La gamme d'énergie donnant le meilleur rendement est comprise entre 30 et 40 keV. La dépendance du rendement de pulvérisation avec l'angle d'incidence est très forte, l'angle donnant le meilleur rendement est égale à 80° . Ces résultats s'accordent bien avec les résultats expérimentaux des références [1, 2, 11, 16, 17].

On note que les atomes de la cible ne sont pas forcément pulvérisés proportionnellement à leur concentration dans la matrice. Ce phénomène, appelé pulvérisation préférentielle, provoque pour l'espèce pulvérisée préférentiellement un appauvrissement et donc l'enrichissement d'une autre à la surface de l'échantillon. Cet effet va initier un régime transitoire des concentrations locales jusqu'à ce qu'un certain rapport de concentration entre les deux espèces soit atteint. Ce phénomène complique très sérieusement la quantification des profils.

5.2. L'ionisation des atomes pulvérisés

L'émission ionique secondaire d'une cible est le phénomène sur lequel l'analyse SIMS est basée. La sensibilité de cette méthode est directement corrélée aux taux d'ionisation des différentes espèces pulvérisées. Cette probabilité d'ionisation peut dépendre de nombreux paramètres : le type de l'ion primaire (M_1, Z_1), son énergie, son angle d'incidence, la composition locale du solide (environnement chimique des plus proches voisins d'un atome) et la structure cristallographique de la cible. Il est important à ce stade de distinguer deux modes d'émission qui seront décrits par la suite.

5.2.1. L'émission ionique intrinsèque

Celle-ci est composée d'espèces atomiques réellement présentes dans l'échantillon. L'observation de ces ions intrinsèques suppose que ni le bombardement (nature des projectiles), ni la contamination de surface produite par les gaz résiduels de l'atmosphère ambiante (O₂, CO₂, H₂O,...) ne dérangent l'environnement chimique de l'espèce éjectée. La première condition nécessite généralement un bombardement par un gaz rare (Ar, Ne, Xe, Kr, He) pour ne pas induire l'effet chimique, la deuxième contrainte nécessite un vide poussé combiné à une densité de courant primaire élevée pour éviter le phénomène d'adsorption.

5.2.2. L'émission ionique induite par réaction chimique de surface

Celle-ci peut être provoquée par l'adsorption en surface d'une espèce réactive qui exalte la sortie des ions secondaires (typiquement soufflage d'oxygène) combiné au bombardement d'un gaz rare. Une émission similaire, due à la modification des environnements chimiques des atomes en surface, peut être obtenue par bombardement direct avec une espèce active (Oxygène ou Césium). L'implantation de ces projectiles conduit à l'établissement d'une concentration stationnaire de ces espèces en surface, cet environnement chimique stable contrôle alors l'ionisation des espèces éjectées. On peut aussi détecter des ions résultant d'une interaction particule cible - particule projectile (ex. SiO₂ pour du Silicium bombardé sous oxygène), cette modification conduit à une augmentation décisive, en termes de sensibilité, des rendements d'ionisation des espèces détectées [29].

Le taux d'ionisation d'une espèce donnée k (parfois appelée probabilité d'ionisation) est définie comme le nombre de particules ionisées de l'espèce rapportée au nombre total des particules pulvérisées de l'espèce dans un état de charge donné (nature, ionisé une fois, deux fois, etc.). On le note $\alpha^{\pm n}(k)$ selon qu'il s'agit de la production d'ions négatifs ou positifs.

$$\alpha^{\pm n}(k) = \frac{n(k^{\pm n})}{n(k)} \quad (2)$$

Où $n(k^{\pm n})$ est le nombre d'ions k^{\pm} émis, $n(k)$ est le nombre d'atomes k pulvérisés.

De la même que le taux de pulvérisation, le taux d'ionisation est spécifique à un élément donné dans une matrice donnée et variera avec la composition de la matrice. Cet effet est appelé effet de matrice complique également la quantification des profils en profondeur.

5.3. La transmission des ions secondaires

Enfin les atomes pulvérisés puis ionisés seront acheminés vers le détecteur, opération qui modifie encore le profil puisqu'une partie seulement des ions secondaires est transmise à travers l'appareillage. La transmission totale de l'instrument dépend de l'espèce atomique suivie. Elle est définie par le facteur de transmission η (parfois noté f ou T) qui caractérise le nombre d'ions effectivement détectés par rapport au nombre d'ions créés à la sortie de l'échantillon [5, 18]. Les pertes d'ions secondaires s'effectuent presque à tous les étages du secteur secondaire :

- l'étage de collecte possède un angle et une énergie d'admission maximaux,
- le spectromètre (secteur électrostatique et magnétique), selon la résolution en masse demandée, laissera passer plus au moins d'ions secondaires,
- le détecteur, et plus particulièrement le multiplicateur d'électrons, dont la transmission initiale est 100 %, vieillit au cours du temps. Il est néanmoins facile de corriger cette dérivé par la mesure du rendement ionique le jour d'analyse.

La transmission totale de l'instrument η , dépendant des espèces atomiques suivies, est donnée par :

$$\eta(k^{\pm n}) = \frac{n_{\text{det}}(k^{\pm n})}{n(k^{\pm n})} \quad (3)$$

Où n_{det} est le nombre d'ions $k^{\pm n}$ détectés.

Comme le taux d'ionisation et le taux de pulvérisation, le facteur de transmission peut également varier selon l'espèce considérée.

5.4. Equation SIMS de base

A partir des taux de pulvérisation et d'ionisation, ainsi que le facteur de transmission, on peut écrire l'équation théorique qui relie la concentration de surface d'un élément k donné au signal SIMS :

$$I_k^{\pm n} = I_p \eta Y_k^{\pm n} \quad (4)$$

Où $Y_k^{\pm n}$ est le taux d'émission ionique (nombre d'ions de l'élément k émis par ion primaire envoyé sur la cible) et I_p est l'intensité primaire. En supposant que les processus de pulvérisation et d'ionisation soient indépendants, on peut écrire :

$$I_k^{\pm n} = I_p \eta_k \alpha_k^{\pm} Y_k^c C_k^s \quad (5)$$

Où Y_k^c est le rendement de pulvérisation élémentaire (*component sputter yield*) dépendant éventuellement de la concentration de surface de l'élément k : C_k^s .

Cette équation est dite « équation SIMS de base », elle montre que l'intensité du faisceau d'ions détectée n'est reliée à la concentration de l'échantillon que de façon indirecte. Elle met également en évidence l'importance du choix des conditions expérimentales puisque les coefficients Y , α et η dépendent du choix de l'ion primaire, de son énergie, de l'espèce que l'on détecte, de la polarité de son ionisation et des réglages adoptés dans les dispositifs de collecte des ions, de spectromètre et de la détection. L'ensemble de ces paramètres peut faire varier de plusieurs décades le produit $Y.\alpha.\eta$, modifiant ainsi d'autant la valeur de la concentration de l'élément analysé. Les conditions d'analyses adoptées doivent, dans la plupart du temps, faire l'objet d'un compromis afin de concilier la performance voulue de la résolution en profondeur avec un signal suffisamment élevé pour atteindre les limites de détection souhaitées. L'équation SIMS de base va nous servir pour la quantification des profils en profondeur, ce point est bien détaillée dans l'annexe 1.

6. MECANISMES REGISSANT LA RESOLUTION EN PROFONDEUR

Dans l'analyse SIMS, bien que l'érosion ionique est prometteuse, n'est pas parfaite ; on est loin d'une érosion idéale qui se voudrait un *micro-sectionnement* monocouche par monocouche sans dégâts secondaires derrière la surface. La forme des profils en profondeur de composition atomique se dégrade (élargissement, distorsion, décalage éventuel) à cause d'une redistribution spatiale des atomes sous la surface instantanée. Cette redistribution a lieu approximativement sur une étendue de l'ordre de grandeur de la largeur des *cascades de collisions* induites par le bombardement primaire (≈ 50 à 200 \AA). La planéité de la surface à l'échelle atomique est elle-même éventuellement perturbée, renforçant alors la perte de résolution en profondeur.

Par ailleurs, l'impact des ions primaires et leur interaction avec le profil initial de la cible provoquent d'autres phénomènes, sur lesquels nous reviendrons, qui dégradent également

la résolution en profondeur : ségrégation, diffusion, apparition d'une rugosité en fond de cratère, etc. Il en résulte qu'une interface abrupte, une couche très fine ou encore deux couches très peu éloignées ne pourront être analysées avec une précision suffisante pour les caractériser entièrement. D'une manière générale, les phénomènes dégradant la résolution en profondeur contribuent à la modification toute entière des profils initiaux.

Pour mener à bien cette étude paramétrique, il est nécessaire de caractériser les effets d'élargissement et de distorsion sur des profils initiaux standards : Dirac de concentration d'une espèce donnée noyée dans une matrice, échelon de concentration éventuellement répétés (superréseaux). Dans ces conditions, une couche supposée infiniment fine par exemple, paraîtra lors de l'analyse posséder une largeur Δz , cette largeur servant de référence pour caractériser la résolution en profondeur.

Afin de maîtriser les phénomènes mis en jeu et de proposer des solutions pour remédier aux facteurs de dégradation de la résolution en profondeur, il faut tout d'abord les identifier le plus précisément possible. C'est ce que nous proposons de faire dans les sections suivantes.

6.1. Le mixage collisionnel

C'est le phénomène le plus nuisible dans l'analyse SIMS car il est propre et indissociable de la mesure elle-même. Les développements récents visent à le minimiser, sachant qu'il ne sera pas complètement éradiqué. Il résulte du transfert d'énergie des ions primaires aux atomes de la cible, avec une nette prédominance des chocs atomiques (élastiques) dans la gamme d'énergie utilisée en SIMS. En effet, l'énergie cinétique des ions incidents est, au moment de l'impact, transférée à l'intérieur de la cible sous forme de déplacement d'atomes. Il en résulte une nouvelle distribution locale des espèces. Au final, on obtiendra une redistribution des espèces atomiques sous la surface de l'échantillon. Cette surface est dite « instantanée », puisque l'échantillon est progressivement érodé. Des atomes initialement situés à la même profondeur pourront être soit éjectés de la surface, soit repoussés vers l'intérieur du matériau (voir Figure 10).

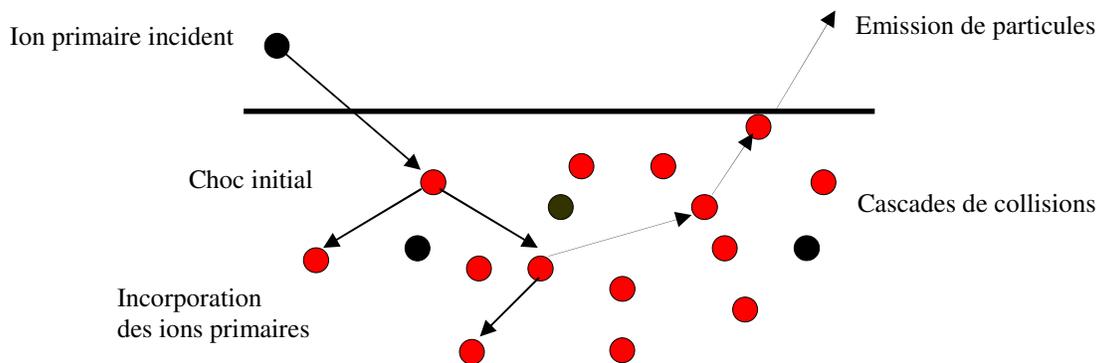


Figure 10 : Principe du mixage collisionnel

Ce phénomène existe indépendamment des éléments chimiques mis en jeu, il a lieu quelque soit le type d'ions primaires et les matériaux constituant l'échantillon.

Suivant l'énergie des ions primaires, plusieurs régimes du mixage collisionnel sont à envisager :

- *Le régime de simple choc*

Dans le régime de simple choc, l'atome cible heurté suite à une collision directe ion-cible. Un atome de la cible reçoit suffisamment d'énergie pour être éjecté mais pas suffisamment pour

induire une cascade de collisions. Donc, ce régime concerne uniquement le premier choc de l'ion incident avec un atome de la cible. De part le caractère unidirectionnel du faisceau primaire, le transfert d'énergie est très anisotrope et les atomes frappés sont énergétiquement « poussés » vers l'intérieur du matériau.

- *Le régime de cascades linéaires*

Il concerne les chocs entre atomes de la cible. Les atomes mis en mouvement après choc direct, peuvent générer à leur tour des cascades de collisions. Ces chocs sont moins énergétiques que les chocs directs, mais beaucoup plus nombreux. En effet, un seul ion incident provoquera ainsi un nombre considérable de chocs par cascade, jusqu'à ce que l'énergie transférable d'un atome à un autre devienne inférieure à l'énergie de déplacement des atomes de la cible, c'est-à-dire quelques vingtaine de eV environ. Après un nombre de chocs relativement faible, la cascade de collisions perd la mémoire de la direction initiale de l'ion incident et devient pratiquement isotrope. L'énergie cinétique restante après extinction des cascades se dissipe sous forme de phonons. Ce mécanisme est purement balistique (c'est-à-dire qu'il y a transfert d'énergie cinétique entre les atomes de la cible), sa durée approximativement est de 10^{-13} à 10^{-12} s. En outre, la cascade de collisions crée une région endommagée avec apparition de trous et atomes interstitiels, ainsi qu'une accumulation d'énergie cinétique en excès (mais inférieur au seuil de déplacement des atomes). Le retour à un état énergétique stable se fait en dissipant l'énergie de manière thermique, ce retour prend environ 10^{-11} à 10^{-9} s selon les matériaux. Ensuite, il peut y avoir des mécanismes de type diffusion, suite à la génération de lacunes et interstices [23]. Ces phénomènes sont surtout présents avec les métaux. Dans notre cas (semi-conducteurs), nous nous limiterons uniquement à l'influence du mixage collisionnel.

- *Le régime de pointe thermique (spike)*

Ce régime se produit dans la gamme des hautes énergies des ions primaires (quelques MeV, excepté pour les ions lourds de quelques keV). Ces ions primaires sont stoppés rapidement et tendent à générer des pointes thermiques, la densité des atomes en recul générés par la cascade est telle qu'elle pourrait conduire à une évaporation localisée en surface. La majorité des atomes d'un certain volume sont en mouvement [33].

Ces trois régimes sont illustrés dans la Figure 11.

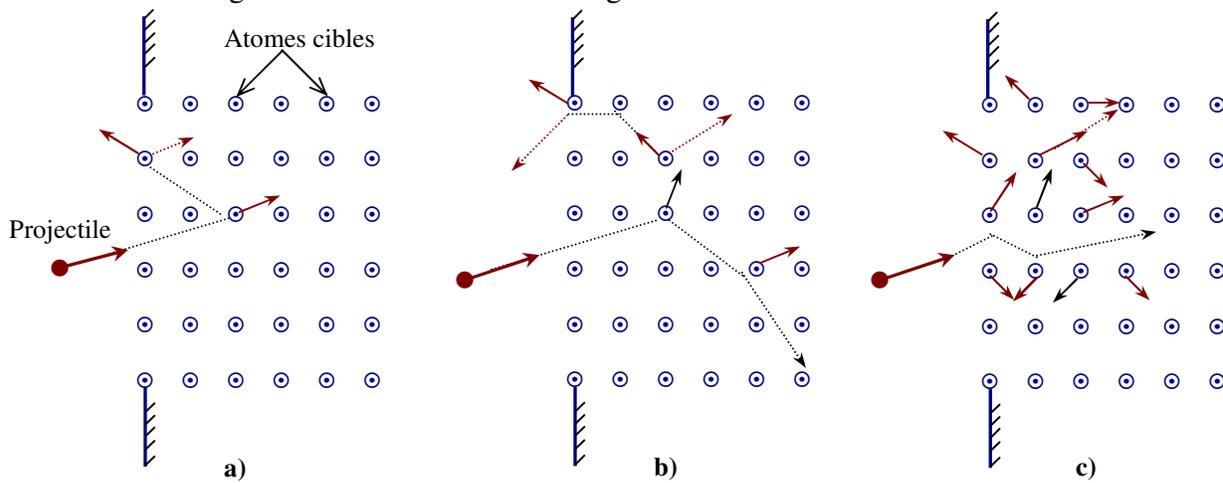


Figure 11 : Les différents régimes de pulvérisation par collision élastique

- Le régime de simple choc
- Le régime de cascade de collision linéaire
- Le régime de pointe thermique

6.1.1. Pouvoir d'arrêt et perte d'énergie

Le pouvoir d'arrêt est une grandeur permettant de quantifier la capacité d'un matériau à ralentir et à stopper un ion incident. Il désigne la quantité cinétique perdue par l'ion par unité de distance parcourue. Il peut se décomposer en trois termes dont les valeurs relatives dépendent, entre autres, de l'énergie cinétique de l'ion ainsi que de sa masse. Ces deux termes sont :

- le pouvoir d'arrêt nucléaire met en jeu une collision directe entre les noyaux de l'ion et de la cible,
- le pouvoir d'arrêt électronique dont l'origine est dû à un couplage entre l'ion et le nuage électronique des atomes de la cible.

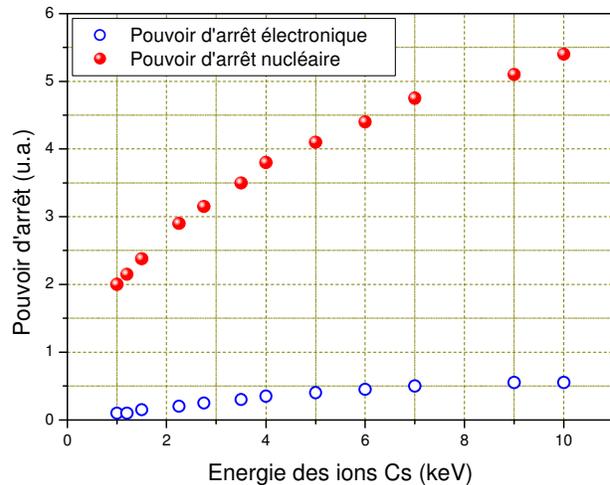


Figure 12 : Pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire pour le cas des ions Cs⁺ en fonction de leur énergie cinétique initiale.

Comme le montre la Figure 12, dans la gamme d'énergie utilisée en SIMS, c'est le pouvoir d'arrêt nucléaire qui est prépondérant.

La perte d'énergie par collisions élastiques entre le projectile et les atomes de la cible est appelée perte d'énergie nucléaire. Cette perte d'énergie par unité de longueur est le pouvoir d'arrêt nucléaire de la cible. Lorsque le projectile incident possède une énergie faible, les diamètres de collisions avec un atome cible sont très grands et les sections efficaces d'interactions entre l'ion de l'atome deviennent alors considérables. A basse énergie, le pouvoir d'arrêt nucléaire devient prépondérant.

A basse vitesse, la perte d'énergie par collisions inélastiques avec les électrons de la cible résulte des transferts d'électrons entre le projectile et l'atome cible, c'est bien le pouvoir d'arrêt électronique. Dans la gamme d'énergies accessibles par SIMS le pouvoir d'arrêt électronique est négligeable devant le pouvoir d'arrêt nucléaire (voir Figure 12).

6.1.2. Influence du mixage collisionnel sur la résolution en profondeur

Dans l'analyse SIMS l'effet le plus important, sur la résolution en profondeur, est celui du mixage collisionnel. Les méthodes utilisées donnent une idée assez bonne des dommages créés dans les couches mixées. Ces méthodes ne prennent pas en compte des phénomènes tels que l'effet de matrice, la pulvérisation préférentielle etc., mais elles donnent une idée précise sur la forme de la dégradation causée par les phénomènes balistiques. En effet, les dégâts causés par les collisions s'étendent, à partir de la surface de l'échantillon sur une profondeur W , qu'on appelle « zone mixée », et qui est de l'ordre de quelques dizaines d'angströms. Puisque les ions éjectés ne proviennent pas tous que des deux ou trois premières couches atomiques. On peut considérer que le détecteur ne compte pas les ions provenant de l'échantillon original, mais ceux du même échantillon dont le profil de concentration est légèrement modifié par le mixage collisionnel. Toute la difficulté dans la reproduction du profil de concentration en profondeur réside donc dans la dégradation du profil réel causé par le mécanisme du mixage collisionnel, qui est directement lié aux conditions expérimentales.

Les analyses SIMS montrent qu'une couche infiniment fine d'un élément donné dans une matrice donnée (un *delta-dopage*) est représenté par une courbe asymétrique possédant un front de montée rapide et une traînée décroissante beaucoup moins rapide. On considère généralement que les parties montante et descendante ont un comportement exponentiel, alors que la partie haute de la courbe est de forme arrondie, à une allure gaussienne (voir Figure 13).

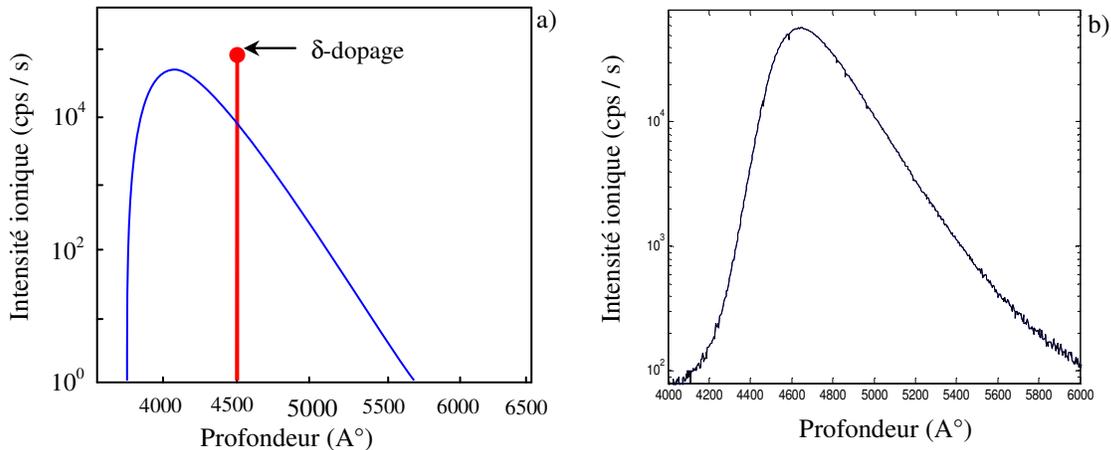


Figure 13 : a) Schéma de l'analyse par SIMS d'un traceur très fin dans une matrice
 b) Effet du mixage collisionnel sur un delta-dopage de Bore dans le Silicium. Profil expérimental 5.2 keV / O_2^+ , 46.1° d'incidence.

Dans la littérature, les parties exponentielles sont associées aux constantes Λ_u et Λ_d qui représentent la longueur nécessaire pour que le signal respectivement croisse ou décroisse d'une décade (On note que les indices « d » et « u » sont utilisés pour « up » et « down » respectivement). Etant donné que cette courbe sera exploitée analytiquement, on préfère lui associer une fonction exponentielle en base e, donc de type $Ae^{\pm \frac{z}{\lambda}}$, A est un coefficient d'ajustement de l'amplitude, par la suite on utilise plutôt $\lambda = \Lambda/2.3$ qui représente donc la distance nécessaire pour que le signal varie d'un facteur e.

La Figure 15 montre un profil d'une analyse SIMS d'un delta-dopage de bore dans le silicium. L'effet le plus remarquable du mixage collisionnel est la décroissance exponentielle. Cette décroissance handicape gravement l'analyse de tels profils car elle occulte d'éventuels détails utiles. Par conséquent, dans le cas de l'analyse d'un échantillon épais ou d'un profil s'étalant profondément en profondeur, par la présence, derrière ce profil, d'une couche mince ou tout autre motif de petites dimensions ou de concentration plus faible, son profil mesuré serait partiellement ou même complètement dissimulé par la décroissance exponentielle.

6.1.3. Modélisation de la décroissance exponentielle

Le paramètre qui retient généralement toute l'attention est la décroissance exponentielle du signal, car sa longueur relative le rend responsable d'une très grande partie de la perte de la résolution due au mixage collisionnel. Plusieurs modèles ont été proposés pour percevoir ce qui se passe lors du mixage collisionnel. Le plus ancien et le plus simple est celui de Liao *et al.* [34] considère qu'une couche Z de dose D est instantanément diluée dans une zone mixée W lorsque la couche Z-W est sur le point d'être pulvérisée à la surface de l'échantillon. Tous les atomes de la couche Z seront alors incorporés quasi instantanément dans la zone mixée W et certains seront pulvérisés. La pulvérisation de la couche supérieure d'épaisseur dZ entraîne

une diminution de la zone, qui devient alors $D_1 = D.(W-dZ)/W$. Cette nouvelle dose est instantanément diluée sur une distance W : la concentration est alors diminuée de $(W-dZ)/W$. A chaque épaisseur dZ pulvérisée, la concentration locale aurait été divisée par $(W-dZ)/W$, ce qui nous donne le comportement exponentiel de la concentration. Ce modèle ignore le front de montée et fait débiter la réponse à une couche par une décroissance exponentielle de paramètre W .

Hofman [35] a proposé un modèle MRI (*Mixing-Roughness-Information*), plus quantitatif, reliant la décroissance exponentielle λ_d avec l'épaisseur de la zone mixée W par $W \approx 1.6 \lambda_d$. Ce qui permet d'estimer l'épaisseur de la zone mixée ainsi que l'effet du mixage collisionnel.

Bien que ces modèles sont incomplets, permettent de relier directement la décroissance exponentielle à l'épaisseur de la zone mixée W , donc à l'énergie des ions primaires E_p , et de se faire une idée assez claire de l'origine de ce paramètre.

On désigne par R_p la profondeur de pénétration des ions primaires dans la cible, qui est reliée à la largeur de la zone mixée W . Le logiciel SRIM-2006 [36], permet de calculer cette valeur en fonction de l'énergie des ions primaires E_p , l'angle d'incidence θ , et la nature des espèces en jeu. Ce logiciel utilise la méthode de Monte Carlo pour calculer les différents paramètres, ainsi que de déceler une relation entre R_p et les conditions expérimentales, qui est de la forme :

$$R_p = A E_p^n \cos(\theta) \quad [\text{\AA}] \quad (6)$$

L'ordre de grandeur de n pour différents éléments se situe entre 0.5 et 1, A est compris entre 20 et 60. Normalement λ_d soit également de la même forme.

Dupuy *et al.* [54] ont constaté la linéarité de λ_d en fonction de la profondeur de pénétration des ions primaires R_p , dans le cas du bore dans le silicium. Petravac *et al.* [38] l'ont étudié en particulier dans le cas de Ge dans Si et Si dans AsGa, et cela quelque soit le type du faisceau primaire employé. Smirnov *et al.* [37] et Meuris *et al.* [39] ont également constaté le même comportement dans le cas de l'arsenic dans le silicium. La pente de linéarité entre λ_d et R_p est très dépendante de type des ions primaires employé. En effet, l'utilisation de l'oxygène aboutit à des pentes plus faibles, donc de meilleures résolutions en profondeur grâce au phénomène de gonflement de la matrice (*swelling*) par oxydation superficielle de la surface instantanée, nous reviendrons après à ce point avec plus de détails.

La dépendance linéaire de λ_d avec $\cos(\theta)$ a été vérifiée par Petravac *et al.* dans le cas de Ge dans Si [38] et dans le cas de Si dans GaAs [41]. Les diverses études ont aboutit à sa modélisation par une loi quadratique de λ_d^2 selon une loi de la forme suivante :

$$\lambda_d^2(E_p, \theta) = \lambda_{int}^2 + (A E_p^{0.5} \cos \theta)^2 \quad (7)$$

Où λ_{int} est la pente intrinsèque de l'échantillon.

A cause de la complexité des phénomènes physiques et leur interprétations relatives. Aucune théorie n'a pas pu prévoir de manière absolue et exacte la valeur de λ_d . Une étude détaillée de ce paramètre ainsi que d'autres paramètres sera menée dans le chapitre 2.

6.2. Effets de l'oxygène sur la résolution en profondeur

D'une manière générale l'utilisation intensive d'un élément réactif, comme source d'ions primaires, trouve son origine dans les propriétés de facteurs chimiques améliorant la qualité

du signal des ions secondaires. En effet, la présence d'oxygène dans la couche mixée provoque une augmentation très importante du taux d'ionisation des espèces à analyser, donc de la sensibilité et de la dynamique du signal. Les conséquences les plus remarquables de l'analyse par O_2^+ est l'amélioration de la résolution en profondeur et la diminution du régime transitoire, ce qui impose d'emblée l'utilisation d'un faisceau d'oxygène dans les différents types d'analyse. Nous allons examiner ses propriétés dans le domaine de la résolution en profondeur.

6.2.1. *Le gonflement de la matrice : le swelling*

Le phénomène d'oxydation de la matrice sous bombardement d'oxygène est désigné en SIMS sous le nom *swelling*, c'est-à-dire gonflement de la matrice sous l'effet de l'incorporation des ions primaires. Ce phénomène, transparent pour l'opérateur, va provoquer d'une part une augmentation très importante du taux d'ionisation des espèces à analyser, et d'autre part une dilution locale de toutes les espèces par la présence des atomes d'oxygène incorporés.

Le gonflement de la matrice agit comme une sorte de dilatation locale de l'échelle des profondeurs, due à l'incorporation des ions primaires, et se traduit par une amélioration de la résolution en profondeur. Les atomes d'oxygène incorporés reçoivent une partie des chocs initialement destinés à ceux du silicium (ainsi qu'aux impuretés), et sont eux même pulvérisés par les ions incidents suivants. Cette conséquence très importante impose souvent l'utilisation de l'oxygène comme faisceau primaire dans de nombreux cas.

Meuris *et al.* [39] ont développé un modèle pour l'origine de l'amélioration de la résolution en profondeur par l'utilisation d'ions primaires O_2^+ . Ils ont montré que le gain de résolution en profondeur obtenu par le *swelling* est de 2.26. Une autre approche formulée par Gautier [5], où il a montré que le gain en résolution en profondeur lié à ce phénomène peut atteindre 2.35 par l'incorporation de l'oxygène dans le silicium.

Les gains expérimentaux confirment les résultats de ces modèles, bien que les valeurs sont parfois dispersées, par exemple Petravac *et al.* [38] ont obtenu des gains de 1.8 à 2.3 pour Ge dans Si, Meuris *et al.* [39] ont obtenu un gain de 1.7 pour As dans Si. Cette faible valeur serait due à un effet opposé à l'amélioration de la résolution en profondeur, à savoir la ségrégation de As en présence de l'oxygène.

Dans le cas de l'analyse d'une impureté dans une matrice de SiO_2 , aucun gain en résolution ne peut apparaître par rapport à une analyse avec des faisceaux de gaz neutre [39]. Ceci s'explique que dans le cas de l'analyse avec un faisceau des ions primaires (*swelling*), les atomes d'oxygène incorporés dans la matrice encaissent une partie des chocs initialement destinés au silicium (bien entendu au impureté), et sont pulvérisés à la place des atomes initiaux de la matrice. Dans le cas d'une matrice de SiO_2 présente dès le départ, il n'y a pas d'incorporation d'oxygène dans la matrice, déjà saturée en oxygène, et donc le phénomène de *swelling* n'a pas lieu. La profondeur érodée correspond à celle initiale du SiO_2 et non dans le silicium, ce qui ne permet pas de bénéficier de l'effet de l'incorporation primaire.

6.2.2. *L'analyse sous soufflage d'oxygène*

L'analyse SIMS peut être conduite sous une atmosphère d'oxygène ou de nitrogène au lieu sous un vide poussé. L'un des principaux avantages du soufflage réside dans sa capacité de diminuer la longueur du régime transitoire, jusqu'à le rendre presque nul. Sans la fuite d'oxygène, les premiers instants de bombardement par des ions réactifs s'accompagne de la modification progressive de la composition de la couche mixée, période pendant laquelle les taux de pulvérisation et d'ionisation sont en perpétuel changement. Le signal SIMS sera

pendant cette période très différent de la véritable distribution en profondeur analysée, et sera généralement délaissé lors de l'interprétation. La présence d'oxygène, favorise l'apparition quasi-immédiate d'une couche oxydée, et permet de réduire la portion de signal déformée par les phénomènes transitoires.

En outre, cette technique est surtout bénéfique pour l'analyse des métaux où il se développe rapidement une topographie de surface qui dégrade complètement la précision de la mesure. L'exemple frappant de l'analyse d'un échantillon composé de couches alternées de Fer et de Titane a été mis en évidence par Prudon [1]. Dans cette série de mesures, seules les deux ou trois premières couches sont discernables pour une analyse sans soufflage, et le profil de concentration s'atténue jusqu'au devenir quasiment plat. Avec une faible pression d'oxygène ($2 \cdot 10^{-7}$ Torr), toutes les couches sont discernables, mais l'atténuation augmente avec la profondeur et la résolution est encore très insuffisante. Enfin, en utilisant une pression d'oxygène plus importante ($> 2 \cdot 10^{-6}$ Torr), l'amélioration de la résolution est spectaculaire et aucune dégradation n'est visible avec la profondeur.

L'autre avantage du soufflage d'oxygène est l'augmentation du taux d'ionisation des impuretés électropositifs (comme le bore). Ce taux est déjà amélioré par l'utilisation de l'oxygène comme faisceau primaire, par rapport à d'autres éléments comme le xénon ou le césium. Cependant, à basse énergie et sans pression d'oxygène, le swelling est insuffisant. Avec le soufflage, l'incorporation est plus importante, ce qui augmente le taux d'ionisation et la résolution en profondeur. Tous ces avantages assurent une meilleure reproductibilité des profils.

L'inconvénient de l'incorporation et de la saturation de la surface en oxygène est la diminution de la vitesse d'érosion par un facteur 2 à 4, et donc l'allongement du temps de mesure. Un autre désavantage de l'emploi du soufflage de l'oxygène est la difficulté de régler le faisceau primaire. La pression d'oxygène entraîne une focalisation moins bonne que dans le vide, en particulier à basse énergie [42].

6.2.3. La ségrégation

Lorsqu'on bombarde du silicium par des ions d'oxygène, ceci s'accompagne d'une incorporation importante d'ions primaires dans la cible qui se traduit par une oxydation des premières couches atomiques de la surface de l'échantillon. On obtient donc une interface dynamique SiO_2 / Si qui se déplace vers l'intérieur de l'échantillon au fur et à mesure de l'analyse. Certains espèces réagissent à ce phénomène et fuient vers l'interface SiO_2 / Si , là où il n'y a plus d'oxygène. C'est le cas par exemple du cuivre et de l'argent [44] ou encore de l'arsenic [42]. Lorsqu'un tel phénomène apparaît, il devient très difficile de pulvériser les espèces qui se réfugient perpétuellement en profondeur, dans les régions dépourvues d'oxygène. On obtient donc des queues de profil très longues (λ_d prend des valeurs très élevées), ce qui entraîne une dégradation de la résolution en profondeur.

L'apparition de ce phénomène est très dépendante de la quantité d'oxygène présente dans la couche mixée, et donc de l'angle d'incidence du faisceau primaire. Lorsqu'on a un angle d'incidence inférieur à environ 25° , une couche de SiO_2 stœchiométrique se forme [1, 5, 44], favorisant donc la ségrégation.

Le germanium possède un comportement plutôt atypique face à l'incorporation d'oxygène dans la matrice. Il semble que cet élément migre en présence d'une quantité faible d'oxygène, sans que cela ne soit préjudiciable à la résolution en profondeur. Cet élément réagit à l'oxydation en se regroupant en couches de Ge pur puis en amas de Ge. Contrairement à la ségrégation, ce phénomène ne nuit pas forcément à la résolution en profondeur, tout du moins expérimentalement [45], et semble au contraire l'améliorer dans certaines conditions d'analyse.

Ce comportement pose un problème sur le plan théorique car il montre qu'une bonne valeur de λ_d (comme on peut en obtenir en analysant du Ge dans Si) n'est pas forcément équivalente au fait que le matériau se comporte selon les lois du mixage collisionnel, et que la ségrégation semble ne pas forcément jouer un rôle nuisible dans la résolution en profondeur. Il faut donc se méfier en interprétant un tel profil.

6.3. Problèmes d'érosion non homogène

La surface exposée au bombardement ne s'érode pas toujours de façon homogène. Par conséquent, le cratère produit par l'érosion n'est pas plat, ce qui entraîne que tous les points du cratère ne sont plus situés à la même profondeur. On conçoit aisément que dans ce cas, les ions secondaires qui arrivent en même temps sur le détecteur ne proviennent pas tous de la même profondeur. Il est donc important pour obtenir une bonne résolution en profondeur que le fond du cratère soit aussi plat que possible.

6.3.1. Inclinaison du fond du cratère

Durant une analyse, au fur et à mesure que le faisceau primaire creuse le cratère, il peut arriver que le fond de ce dernier forme un petit angle par rapport au plan de la surface de l'échantillon. La Figure 14-1 illustre schématiquement le phénomène en exagérant l'angle qui peut aller jusqu'à environ 0.02° , engendrant alors un dénivelé de quelques dizaines de nanomètres entre les deux extrémités du cratère. Ce phénomène se produit lorsque l'angle d'incidence du faisceau primaire sur l'échantillon par rapport à la normale est élevé, ce qui est le cas à basse énergie d'impact. Dans ce cas, l'angle d'incidence change de façon significative lors du balayage. La différence de profondeur entre les bords opposés du cratère engendre une dégradation de la résolution en profondeur. Cette dégradation est d'autant plus faible que :

- le diaphragme image est étroit,
- la profondeur du cratère est faible (à quelques dizaines de nm de profondeur, la résolution reste très bonne ; au delà, elle se dégrade progressivement).

6.3.2. Effets de bords

Même si le cratère creusé par le balayage du faisceau primaire possède un fond plat, ses flancs peuvent être inclinés. Lorsque le faisceau primaire bombarde le pourtour du cratère, il peut éjecter des ions qui ne proviennent pas du fond de cratère. Si tels ions sont détectés en quantité importante, ils peuvent ainsi brouiller l'information « profondeur » du profil de concentration mesuré. La solution consiste à ne conserver que les ions émis à proximité du centre du cratère. Cela peut être réalisé grâce au diaphragme image. On sélectionne généralement un diaphragme de diamètre nettement plus petit que le cratère afin d'obtenir une marge suffisante sur les flancs. En contrepartie, le signal transmis diminue en proportion de la surface du diaphragme (voir Figure 14-2).

6.3.3. Rugosité induite

Les phénomènes de rugosité induite sont plus particulièrement visibles dans les solides non amorphisés sous bombardement ionique, tel que les métaux. On observe une variation importante du rendement de pulvérisation avec l'orientation cristalline (y compris sur des échantillons dont la surface initiale est plane), ce qui conduit à une macro-rugosité dans le cas

des solides polycristallins, mais aussi à un effet angulaire dans les monocristaux (voir Figure 14-3).

L'anisotropie du cristal se traduit par une variation angulaire du rendement de pulvérisation qui conduit finalement à une forte microrugosité de la surface bombardée. Cet effet de canalisation peut être diminué, ou supprimé, par la présence de gaz réactif tels que l'oxygène ou l'azote qui formeraient une couche superficielle d'oxyde ou de nitrure, qui est une couche totalement amorphe inhibant ainsi la canalisation.

L'influence de l'apparition de la rugosité sur la résolution en profondeur se traduit par une nette dégradation de celle-ci et une baisse de la vitesse d'érosion. Fares [46] a montré que la résolution en profondeur (en présence d'une rugosité induite) peut être améliorée sans soufflage en baissant l'énergie d'impact ou en diminuant l'angle d'incidence pour la même énergie. Néanmoins, à basse énergie, la résolution est toujours meilleure avec soufflage, et s'améliore quand l'angle d'incidence augmente. Il a obtenu les meilleurs résultats en termes de résolution en profondeur dans le cas de l'analyse 0.5 keV / O₂⁺ (44°, incidence oblique).

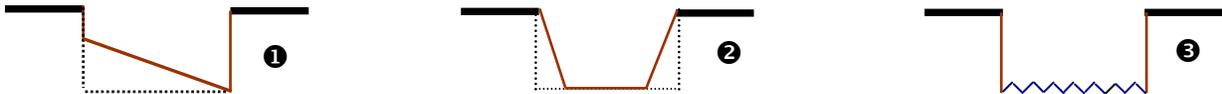


Figure 14 : Problèmes d'érosion non homogène : ❶ inclinaison du fond du cratère ❷ effets de bords ❸ rugosité induite.

7. EVALUATION DE LA RESOLUTION EN PROFONDEUR

La résolution en profondeur est un paramètre essentiel de toute méthode d'analyse en profondeur, y compris l'analyse SIMS. Elle est nécessaire pour quantifier l'aspect fidélité de la reproduction du profil réel. Cependant, pour pouvoir comparer les performances de diverses analyses, il est important de mettre des chiffres concrets sur la résolution en profondeur. En effet, la résolution en profondeur est généralement exprimée en Å/décade (nombre de nanomètres de profondeur nécessaires pour obtenir une variation du signal détecté d'une manière significative). Dans des conditions optimales, la résolution en profondeur peut descendre jusqu'à environ 10 Å/décade et permet de distinguer des détails tels que des puits quantiques. Dans des conditions défavorables, elle peut atteindre plusieurs centaines de Å/décade.

Selon la forme du signal de la structure étudiée; couche mince, interface, delta-dopage, plusieurs critères d'évaluation de la résolution en profondeur peuvent être envisagés.

7.1. Évaluation à partir d'une interface abrupte

Dans l'analyse SIMS, la mesure d'une interface abrupte aboutit à un profil élargi et étalé en profondeur. Dans ce cas, la résolution en profondeur est mesurée par la distance nécessaire pour que le signal décroisse de 84 % à 16 % de l'intensité maximale [51]. Ce critère a été choisi pour la ressemblance entre l'allure de l'interface mesurée et celle de la fonction erreur, résultat de la convolution d'une interface abrupte avec une gaussienne d'écart-type σ . Dans ce cas, la distance Δz séparant $z_{84\%}$ et $z_{16\%}$ est égale à 2σ (Figure 15).

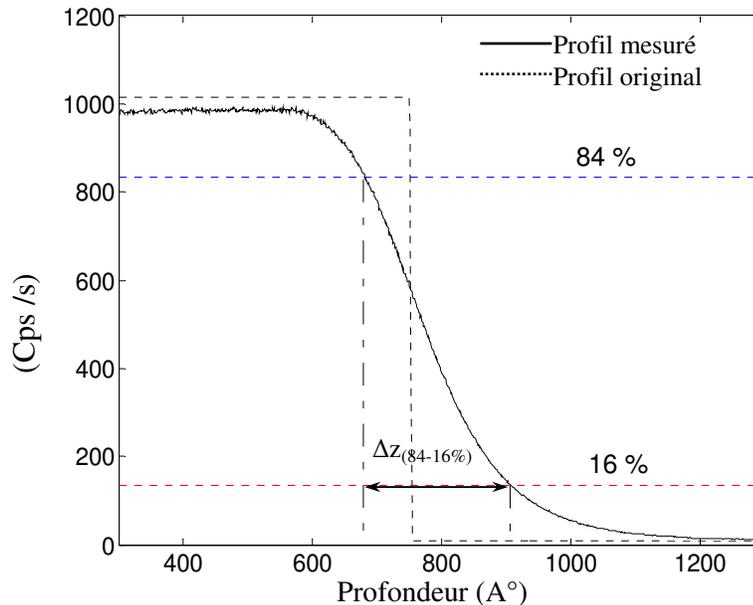


Figure 15 : Evaluation de la résolution en profondeur à partir d'une interface abrupte.

D'autres auteurs mesurent la longueur nécessaire pour que le signal décroisse entre 90% et 10% du maximum du signal ce qui correspond à 2.564σ , où encore entre 95% et 5% pour 3.29σ . Quel que soit le choix de l'intervalle comme critère définissant la résolution en profondeur, ce choix reste arbitraire et n'a pas d'importance fondamentale. Bien que le critère $\Delta z_{(84\%-16\%)}$ semble plus logique dans le cas où l'on considère une fonction erreur pour décrire l'interface. Cependant, ce critère devient arbitraire comme les autres si la fonction de résolution n'est pas gaussienne, dans ce cas le profil mesuré n'est pas une fonction erreur. Ce qui est effectivement le cas !

Selon le modèle du mixage collisionnel, la mesure d'une interface abrupte descendante montre après analyse une traînée exponentielle très nette caractérisée par le paramètre Λ_d . De plus, si on prend un front montant au lieu d'un front descendant, on s'aperçoit que la distance Δz n'est pas la même que pour le front descendant. En fait, une interface montante montrera la même attitude exponentielle, la même constante peut être définie dans le cas d'une interface montante par le paramètre Λ_u qui est souvent inférieur à celui du front descendant. Ce qui élimine la possibilité d'une fonction de résolution en profondeur uniquement gaussienne.

7.2. Évaluation à partir d'un delta-dopage

La plus fine structure géométrique qui puisse exister et qui peut caractériser la résolution en profondeur est le delta-dopage, c'est à dire une monocouche atomique contenant une impureté, à l'intérieur d'une matrice. Le profil en profondeur obtenu d'un delta-dopage contient tous les éléments pour définir la résolution en profondeur. L'élaboration de telle monocouche d'un élément dans une matrice n'est pas aisée. Néanmoins, dans le domaine des semiconducteurs, les technologies actuelles permettent de réaliser de tels échantillons pour beaucoup de combinaisons d'impuretés et de matrices (B, As, Ge dans Si, Si dans AsGa, etc.).

L'avantage de l'analyse d'un δ -dopage est de donner directement la réponse impulsionnelle du système de la mesure. La courbe obtenue lors de l'analyse de telle structure est schématisée dans la Figure 16.

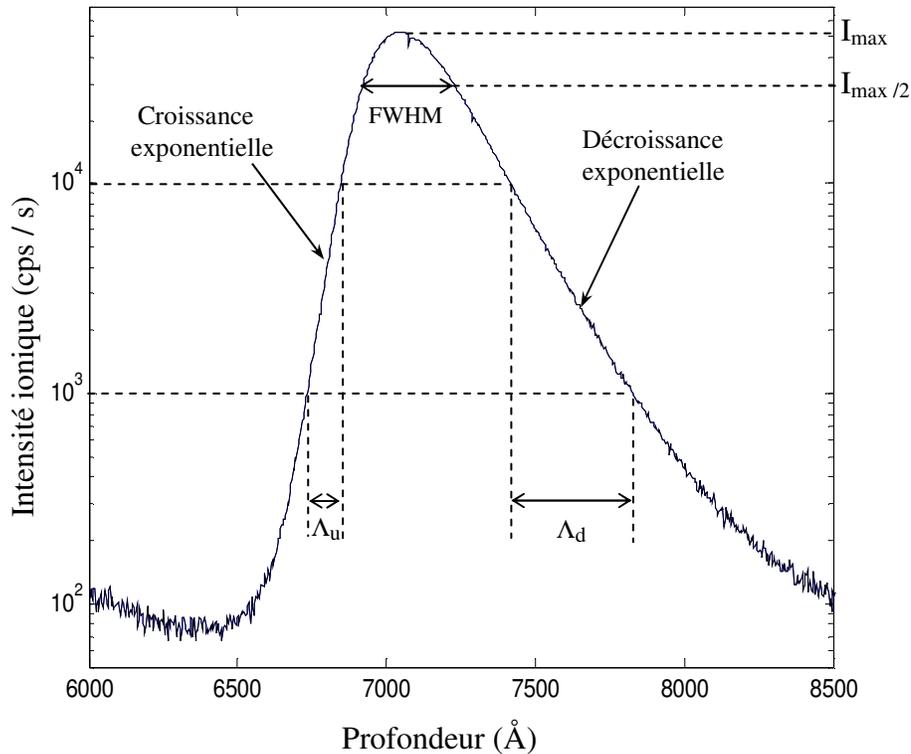


Figure 16 : Evaluation de la résolution en profondeur à partir d'un delta-dopage. Profil expérimental de bore dans le silicium ; 5.2 keV / O_2^+ , 46.1° d'incidence.

Dans ce type de mesure, la résolution en profondeur peut être caractérisée par la mesure de la largeur à mi-hauteur (FWHM). Dans le cas d'une gaussienne ce paramètre est donné par $FWHM = 2.335\sigma$. Même si ce paramètre est simple à obtenir et assez intuitif, il n'est pas rigoureux pour caractériser une courbe en cloche, il faut donc l'utiliser en parcimonie.

Dans le modèle du mixage collisionnel, nous avons vu que la mesure de δ -dopages possèdent une traînée exponentielle qu'on peut les caractériser comme dans le cas des interfaces par la distance nécessaire pour que le signal décroisse d'une décade ou d'un facteur e : λ_d . Dans plusieurs publications, la résolution en profondeur mesurée à partir d'un δ -dopage est représentée uniquement par le paramètre λ_d . La prépondérance du mixage collisionnel dans la déformation des profils en profondeur en justifie cette comparaison, ce qui suppose alors que la dégradation est entièrement décrite par le mixage collisionnel. Dans des conditions d'analyse spécifiques, par exemple l'analyse à très basse énergie, où le mixage collisionnel est minimisé, la seule donnée de λ_d devient insuffisante et les autres caractéristiques de la courbe deviennent alors non négligeables et ont autant de poids que λ_d .

7.3. Séparation de deux deltas-dopage

La résolution en profondeur peut être caractérisée par la mesure de la distance minimale séparant deux deltas-dopage. Si l'on considère deux couches très fines, de quelle distance doivent-elles être séparées pour que la mesure puisse distinguer chacune d'elle ?

L'analyse SIMS de deux deltas-dopage très proches conduit à un profil en profondeur possédant deux courbes en forme de cloches s'interpénétrant avec deux maxima séparés par un minimum local (voir Figure 17). Dans une mauvaise mesure, ces deux courbes se superposent donnant ainsi une seule courbe en forme de cloche plus large que les précédentes. Dans ce cas la mesure des pentes exponentielles de part et d'autre des pics ne nous donne aucune information valable.

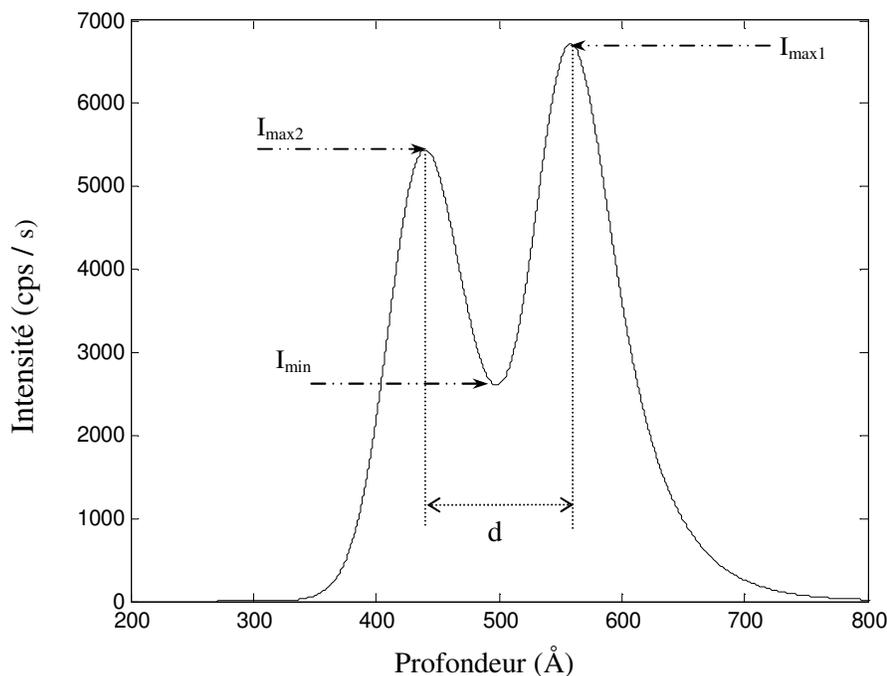


Figure 17 : Estimation de la résolution en profondeur à partir de la limite de séparation de deux delta-dopages adjacents.

Le critère de séparabilité est défini par la *limite de séparation* qui est la distance $d_{C\%}$ qui doit séparer deux couches deltas pour que le contraste $C\%$ soit égal à un certain pourcentage de l'intensité maximale [5]:

$$C_{\%} = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max}} \cdot 100 \quad (8)$$

Dans le cas où les deux pics n'ont pas la même intensité maximale, dans ce cas on choisit la moyenne des deux intensités $(I_{\max1} + I_{\max2}) / 2$.

$C_{\%}$ est proportionnel de la distance d , on choisit un seuil de contraste C_0 correspondant à d_0 , tel que C_0 permette de distinguer les deux couches. La résolution en profondeur est donc assimilée à cette distance d_0 .

8. AMELIORATION DE LA RESOLUTION EN PROFONDEUR

8.1. Optimisation des paramètres physiques de l'analyse

Du point de vue de la mesure, le problème est de se rapprocher au mieux du profil original existant dans l'échantillon. Dans un premier temps, il est avantageux pour une cible donnée de jouer sur les paramètres physiques (énergie et angle d'incidence des ions primaires, masse et nature des projectiles, présence ou non d'un soufflage d'oxygène, etc.). Dans un très grand nombre de cas une optimisation des paramètres physiques est possible et conduit à une amélioration de la résolution en profondeur. Grossièrement on observe les tendances suivantes :

- *Nature et énergie des projectiles*

La décroissance exponentielle caractérisée par le paramètre λ_d est proportionnelle d'une part de la nature des ions primaires ; une analyse avec un élément réactif donne des meilleures résolutions en profondeur (phénomène de swelling, voir § 7.2.1). En plus avec le soufflage d'oxygène améliore d'avantage la résolution en profondeur (voir § 7.2.2). D'autre part, à la pénétration des ions primaires. En effet, R_p augmente avec l'énergie des ions primaires, il apparaît primordial de travailler avec l'énergie primaire la plus faible possible pour avoir un gain en résolution important. L'inconvénient de travailler à très faible énergie est l'augmentation du temps nécessaire pour collecter un profil (de l'ordre de 18 heures et plus), et le risque de cratère non homogène à cause du très faible taux de pulvérisation propre à cette gamme d'énergie (l'incidence normale n'arrangeant rien au problème de la faiblesse du taux de pulvérisation).

- *Angle d'incidence*

L'équation (7) indique qu'il est souhaitable d'augmenter l'angle d'incidence des ions primaires pour minimiser le mixage collisionnel. En effet, l'augmentation de l'angle d'incidence permet de baisser la profondeur de pénétration des ions primaires pour une même énergie. De plus, dans le cas où l'énergie primaire est déjà très basse, l'augmentation de l'angle d'incidence provoque une augmentation très sensible du taux de pulvérisation, ce qui réduit un peu les temps d'analyse.

L'augmentation de l'angle est également souhaitable lorsqu'on souhaite profiter du gain en résolution apporté par un faisceau d'oxygène en minimisant le phénomène de ségrégation qui apparaît pour certains éléments. En effet, nous avons vu que lorsque l'angle d'incidence était supérieur à 25°, il n'y avait pas de formation de SiO_2 stœchiométrique. Les phénomènes de ségrégation en seront amoindris tandis que l'incorporation des ions primaires permettra un gain de résolution même s'il n'y a pas formation de SiO_2 . En revanche, l'augmentation excessive de l'angle d'incidence provoque des problèmes d'homogénéité du cratère, qui peuvent s'avérer très rédhibitoires. En plus avec des angles d'incidence très rasants s'accompagne de problèmes importants de focalisation du faisceau primaire.

- *Masse des ions primaires*

Dans le modèle du mixage collisionnel, la profondeur de pénétration des ions primaires dépend de la masse des projectiles et de la masse des atomes de la cible. Des projectiles plus lourds ont un parcours plus court dans le solide, ce qui se traduit par un R_p plus faible et donc des résolutions en profondeur meilleures.

- *L'aire analysée*

Pour éviter les problèmes d'homogénéité du cratère : fond plat, rugosité induite, effets de bords de cratère, on prend la précaution de ne collecter que le centre de l'aire analysée. On veillera donc à ce que l'aire analysée soit plus petite que l'aire balayée, afin de ne collecter que des ions provenant de la partie du cratère qui a le plus de chance d'être plane. Les analyseurs ioniques récents possèdent un système de fenêtrage électronique qui permet de ne sélectionner qu'une partie de l'aire balayée. Restreindre l'aire analysée possède également une importance sur la dynamique du signal car cela permet de ne pas prendre en compte les atomes tombant des bords du cratère qui créent parfois un bruit de fond dans le signal final. L'inconvénient du fenêtrage de l'aire analysée est de diminuer l'intensité détectée et ne sera pas envisageable dans le cas où le signal est trop faible. Dans ces conditions, un compromis doit se faire pour éviter ces problèmes et pour avoir une bonne dynamique du signal avec une résolution en profondeur meilleure.

8.2. Traitement numérique post-érosion

Besoin de la micro-électronique moderne

Comme s'est indiqué dans l'introduction générale, le développement continu des technologies de fabrication des composants électroniques impose de nouvelles exigences pour les techniques d'analyse en profondeur. Les composants électroniques sont en effet constitués de couches souvent très fines de matériaux semi-conducteurs de composition variable empilées les unes sur les autres. L'épaisseur de ces couches diminue régulièrement au fur et à mesure que la technologie fait des progrès et ne dépasse plus dans certains cas quelques dizaines de nanomètres. Ce qui exige en effet des résolutions en profondeur accrues, actuellement insuffisante pour caractériser sans ambiguïté les structures courantes produites par l'industrie micro-électroniques.

Les limites de l'analyse par SIMS sont actuellement bien cernées, mais susceptibles encore d'amélioration. L'optimisation des paramètres physiques constitue le cheval de bataille des constructeurs de microanalyseurs ioniques. La résolution en profondeur est relativement bien connue du point de vue expérimental, dont la limite actuelle est de l'ordre de 2 à 10 nm en régime stationnaire. Cette résolution instrumentale reste limitée devant l'énorme développement technologique des industries des composants électroniques, malgré les considérables efforts menés pendant ces dernières années pour améliorer les performances de la technique SIMS. Il convient donc d'explorer d'autres moyens pour aider la résolution en profondeur de franchir ses limites instrumentales pour qu'elle soit en synchronisme avec les besoins des technologies modernes de la micro-électronique. Le moyen le plus utilisé pour atteindre ce but est le traitement du signal. Un prototype de ce genre de traitement du signal est la procédure de *déconvolution* (qui est l'objectif terminal de notre travail, le chapitre 3 en sera consacré) dont le but est de remonter à une meilleure approche du profil réel à partir du profil expérimental [53-56]. Avant de traiter la déconvolution, il faut tout d'abord identifier la réponse impulsionnelle du système SIMS, appelée la *Fonction de Résolution en Profondeur* (DRF), qui constitue le cœur de notre travail et sera l'objectif du prochain chapitre.

CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons détaillé le principe et les caractéristiques de l'analyse en profondeur par SIMS. A travers une description de l'analyseur ionique CAMECA *Ims-6f*, nous

avons tenté de répondre à toutes les questions aux quelles est confronté l'expérimentateur jusqu'au l'aboutissement du signal.

Malgré les nombreux avantages de l'analyse par SIMS, les majeurs inconvénients de la technique sont la destruction de l'échantillon et l'altération du profil réel de concentration recherché. Les phénomènes de redistributions induits directement ou indirectement par bombardement ionique sont nombreux et complexes. Nous avons vu que la source de dégradation de la résolution en profondeur de la technique est de nature balistique. Nous avons en particulier insisté sur le mixage collisionnel qui représente le mécanisme principal limitant la résolution en profondeur. Nous avons pu déceler les conditions optimales d'amélioration de la résolution en profondeur qui sont : utiliser un élément réactif (phénomène de swelling), réduire l'énergie des ions primaires, augmenter l'angle d'incidence, utiliser un soufflage d'oxygène, restreindre l'analyse sur une aire inférieure à l'aire balayée, etc. Avec l'optimisation de ces paramètres physiques, la résolution en profondeur peut s'améliorer d'un facteur 2 en moyenne et la majorités des phénomènes physiques peuvent être éliminés, sauf le mixage collisionnel, sera toujours présent car il est propre à la mesure. Ce phénomène peut être minimisé mais il ne sera jamais éliminé complètement. Un moyen numérique sera donc nécessaire pour éradiquer son effet, et donc d'avoir une résolution en profondeur meilleure.

Toutes les performances de la technique ne sont toutefois pas compatibles entre elles et les critères prioritaires doivent être déterminés pour chaque analyse. La haute résolution en profondeur engendre par exemple une baisse du signal transmis qui fait remonter la détection limite vers des concentrations plus élevées. Chaque cas d'analyse doit donc faire l'objet des conditions qui lui sont propres et qui dépendent de l'élément analysé, du matériau dans lequel il est contenu et de l'information que l'on souhaite privilégier.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **Prudon G.**, *Etude de la sensibilité et de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires : Application à la silice et au silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1990, 299 p.
- [2] **Benninghoven A., Rüdener F. G. et Werner H. W.**, *Secondary Ion Mass Spectrometry principles. Basic, concepts, instrumental aspects, Applications and trends*, John Wiley & Sons, New York, 1987, 1227 p.
- [3] **Renard D., Rasser B., et Shuhmacher M.**, *New developments for an improved automation of the Cameca Ims-6f*, dans **Benninghoven A. et al.** [11], pp. 719-722
- [4] **Vickerman J. C., Brown A. et Reed N. M.**, *Secondary ion mass spectrometry*, Ed. Clarendon Press-Oxford, New York, 1987, 341 p.
- [5] **Brice G.**, *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires. Mise au point d'une procédure de déconvolution et applications*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1997, 222 p.
- [6] **Boulakroune M.**, *Traitement numérique des mesures par sonde ionique*, Thèse de magister, Département d'électronique, Université Mentouri de Constantine, 1999, 78 p.
- [7] **Wilson R. G., Stevie F. A. et Magee C. W.**, *SIMS: a practical handbook for depth profiling and bulk impurity analysis*, Ed. John Wiley & sons, 1989, New York

- [8] **Gnaser H.** et **Oechsner H.**, *SIMS depth profile analysis using MCs^+ molecular ions*, Journal of Analytical Chemistry, 1991, n° 341, pp. 54-56
- [9] **Boulakroune M.** et **Berrabah M.**, *Traitement numérique des mesures par SIMS*, journal Sciences et technologie, 2002, pp. 9-16
- [10] **Ait-Kaki A.**, **Boulakroune M.**, **Boukezatta M.**, **M. Berrabah**, **Djahli F.**, **Bellatreche M. S.** et **Bielle-Daspert D.**, *Characterization of sub-micrometre silicon films (Si-LPCVD) heavily in-situ boron-doped and submitted to treatments of dry oxidation*, Journal of semiconductor sciences and technology, 2002, vol. 17, pp. 983-992
- [11] **Sigmund P.**, *Sputtering by ion bombardment: Theoretical concepts*, tome 47 de topics in Applied Physics, Springer-Verlag, Berlin, 1981, pp. 9-17
- [12] **Smith S. P.**, *Changes in relative secondary ion yields for dopants in GaAs due sputter-induced topography changes GaAs*, In: SIMS VII, proceeding of the SIMS international conference, California, USA, September 3-8th, 1989, pp. 107-110
- [13] **Migeon H. N.**, **Le Pipec C.** et **Le Goux J. J.**, *A new SIMS Instrument : The Cameca Ims 4f*, In : SIMS V proceeding of the SIMS International conference, 1989, pp. 831 -834
- [14] **Hillion F.**, **Daigne B.**, **Girard F.**, **Slodzian G.** et **Schuhmacher M.**, *A new high performance instrument: the CAMECA "Nanosims 50"*, In: SIMS IX, proceeding of the SIMS international conference, 1993, pp. 254-257
- [15] **Andersen H. H.** et **Bay H. I.**, *Sputtering by particles bombardment*, tome 47 de topics in Applied Physics, Springer-Verlag, Berlin, 1987, pp. 145-151
- [16] **Blanchard B.**, *Analyse par émission ionique secondaire SIMS*, Techniques de l'ingénieur, 1995, Vol. P3, n° 2618, pp. 1-39
- [17] **Botter R.** et **Bouchoux G.**, *Spectrométrie de masse*, Techniques de l'ingénieur, 1995, Vol. P3, n° 2615, pp. 1-39
- [18] **Essadani A.**, *Etude par spectrométrie de masse des ions secondaires des contacts Tungstène / Silicium et Tungstène / Chrome / Silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1988, 140 p.
- [19] **Galuska A. A.** et **Marquez S.**, *Elemental quantification through thin films and interfaces*, Materials sciences laboratory, the aerospace corporation, El Segundo, USA, 1982, pp. 363-365
- [20] **Mc-Phail D. S.**, **Dowsett M. G.**, **Fox H.**, **Houghton R.**, **Leong W. Y.**, **Parker E. H. C.** et **Patel G. K.**, *Quantifying the effects of uneven etching during the SIMS analysis of periodic doping structures grown by silicon MBE*, Surface and interface analysis, 1988, Vol. 11, pp. 80-87
- [21] **Lux G. E.**, **Stevie F. A.**, **Kahora M.**, **Wilson M.** et **Cochran W.**, *Secondary ion mass spectrometry quantification of elements in $TiSi_2$, TiN and TiW matrices*, American Vacuum society, 1993, Vol. 11, n° 4, pp. 22-28
- [22] **Vanderheide P. A.**, **Zhang M.**, **Mount G. R.** et **MC-Intyre N. S.**, *The infinite velocity method for SIMS quantification*, Journal Surface & interface analysis, 1994, Vol. 21, pp. 747-757
- [23] **Mancina G.**, *Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse par SIMS par déconvolution : algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la microélectronique silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2001, 184 p.

- [24] **Sigmund P.**, *Theory of sputtering I. sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets*, Physics Review, 1969, 182 (2), pp. 383-417
- [25] **Sigmund P.**, *Recoils implantation and ion beam induced composition changes in alloys and compounds*, Journal of applied physics, 1979, 50 (11), pp. 7261-7263
- [26] **Sigmund P.**, *Mechanisms and theory of physical sputtering by particle impact*, Nuclear Instruments and method, for physic Research, 1987, B 27, pp. 1-20
- [27] **Sigmund P.** et **Gras Marti**, *Distortion of depth profiles during sputtering, general description of collisional mixing*, Nuclear Instruments and method, for physic Research, 1980, 168, pp. 389-394
- [28] **Jiang Z. X.** et **Alkemade P. F. A.**, *A novel approach for the determination of the actual incidence angle in a magnetic-sector SIMS instrument*, Surface and Interface analysis, 1997, Vol. 25, pp.817-822
- [29] **Wittmaack K.**, *The use of secondary ion mass spectrometry for studies of oxygen absorption and oxidation*, Surface Sciences, 1977, Vol. 68, pp. 118-129
- [30] **Wittmaack K.**, *Raster scanning depth profiling of layer structures*, Applied Physics, 1977, Vol. 12(2), pp. 149-159
- [31] **Wittmaack K.**, *Ion induced electron emission as a means of studying energy-and angle-dependant compositional changes of solids bombarded with reactive ions. i. oxygen bombardment of silicon*, Surface Sciences, 1999, Vol. 7, pp. 372-392
- [32] **Wittmaack K.**, *Artifacts in low-energy depth profiling using oxygen primary ion beam: dependence on impact angle and oxygen flooding conditions*, Journal of Vacuum Sciences B, 1998, Vol. 16 n° 5, pp. 2776-2785
- [33] **Wehbe N.**, *Emission ionique des solides à l'impact d'agrégats Au_n^+ ($n=1-9$) accélérés entre 0.15 et 1.25 MeV*, Thèse de doctorat, Université Claude Bernard Lyon-1, 2006, 123 p.
- [34] **Liau Z. I.**, **Tsaur B. Y.** et **Mayer J. W.**, *Influence of atomic mixing and preferential sputtering on depth profiles and interfaces*, Journal of Vacuum Sciences and Technology, 1979, 16(2), pp. 121-127
- [35] **Hoffman S.**, *From depth resolution to depth resolution function: Refinement of the concept for delta-layers, single layers and multilayers*, Surface and Interface analysis, 1999, Vol. 27, pp.825-834
- [36] **Ziegler J.F.**, **Biersack J. P.** et **Littmark U.**, *The stopping and range of ions in solides*, Vol. 1. In : The stopping of ions in matter, New York: Pergamon Press, 1985, 321 p.
- [37] **Smirnov V. K.**, **Simakin S. G.**, **Potapov E. V.** et **Makarov V. V.**, *SIMS depth profiling of delta-doped layers in silicon*, Surface and interface analysis, 1996, Vol. 24, pp. 469-475
- [38] **Petravic M.**, **Elliman R. G.** et **Williams J. S.**, *Recoils mixing in SIMS profiling of thin buried layers*, In: International Conference on secondary Ion Mass Spectrometry, 1991: Amsterdam, The Netherlands (SIMS VIII), A. Benninghoven ed. New York: Wiley, 1992, pp. 367-370
- [39] **Meuris M.** et **Vandervost W.**, *On the effect of an oxygen beam in sputter depth profiling*, Journal of Vacuum Sciences and technology, 1991, Vol. A9, n°3, pp. 1482-1488
- [40] **Ng C. M.**, **Wee A. T. S.**, **Huan C. H. A.** et **See A.**, *Effect of oxygen flooding on crater surface composition and surface roughening in ultra shallow depth profiling*, In: SIMS XII, proceeding of the SIMS international conference, Brussels, Belgium, September 5-10th, 1999, pp. 55-58

- [41] **Petravic M.**, *Depth resolution during sputter profiling of Si in GaAs*, Nuclear Instruments and method, for physic Research, 1994, B85, pp. 388-390
- [42] **Vandervost W., Shepred F. R., Swanson M. L., Plattner H. H., Westcot O. M. et Mitchell I. V.**, *Segregation of Arsenic during SIMS analysis with an oxygen beam*, Nuclear Instruments and method, for physic Research, 1986, B15, pp. 201
- [43] **Homma Y. et Maruo T.**, *Comparison of beam induced broadening effects of Galium and Copper in oxygen bombarded silicon*, Surface and interface analysis, 1989, Vol. 14, pp. 725-729
- [44] **Williams J. S., Petravic M., Svensson B. G. et Conway**, *Oxydation of silicon by low energy bombardment*, Journal of Applied Physics, 1994, Vol. 76, n° 3, pp. 1440-1446
- [45] **Dowsett M. G., James D. M., Drummond I. W., El Gomati M. M., Bakush T. A., Street F. J. et Barlow R. D.**, *Redistribution of Ge in the SIMS altered layer during normal incidence O_2^+ bombardment of SiGe alloy material*, In: SIMS VIII, proceeding of the SIMS International Conference, 1991, A. Benninghoven ed. New York: Wiley, 1992, pp. 359-362
- [46] **Fares B.**, *Caractérisation par spectrométrie de masse des ions secondaires des zones actives du CMOS ultime: étude de la rugosité en fond de cratère et ses conséquences sur la vitesse d'érosion et sur la résolution en profondeur*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2004, 132 p.
- [47] **Kataoka Y., Yamazaki K., Shigeno M., Tada Y. et Wittmack K.**, *Surface roughening of silicon under ultra-low energy Cesium bombardement*, Applied surface Sciences, 2003, pp. 43-47
- [48] **Zalm P.C., et Vriezma C.J.**, *Oxygen bleed-in during SIMS depth profiling: curse or blessing?*, Nuclear Instruments and method for physic Research, 1992, B 64, pp. 626-631
- [49] **Clegg J.B.**, *Optimum beam energy for high depth resolution SIMS*, Journal of Vacuum Sciences and technology, 1994, A13(1), pp.143-146
- [50] **Hunter J. L., Corcoran F., Griffis D. P. et Osburn C. M.**, *Optimization of primary beam conditions for secondary ion mass spectrometry depth profiling of shallow junctions in silicon using Cameca Ims-3f*, Journal of Vacuum Sciences and technology, 1990, A8(3), pp.2323-2328
- [51] **Magee C. W. et Honig R. E.**, *Depth profiling by SIMS: depth resolution, dynamic range and sensitivity*, Surface and interface analysis, 1982, Vol. 4, n° 2, pp. 35-41
- [52] **Behrish R., et Wittmaak K.**, *Sputtering by particle bombardment III: Characterstics of sputtered particles, technical applications*, Applied Physics, Springer-Verlag, Berlin, 64, 1991, 410 p.
- [53] **Zalm P.C.**, *Limits to the deconvolution of depth profiles*, In: SIMS X, proceeding of the SIMS international conference, 1995, pp. 73-80
- [54] **Dupuy J. C., Prudent G., Dubois C., Warren P. et Dutartre D.**, *Depth resolution in SIMS study of boron delta-doping in epitaxial silicon*, Nuclear Instruments and method for physic Research, 1994, B85, pp. 379-382
- [55] **Gautier B., Dupuy J.C., Prost R. et Prudon G.**, *Effectiveness and limits of the deconvolution of SIMS depth profiles of boron in silicon*, Surface and interface analysis, 1997, Vol. 25, pp. 733-745
- [56] **Boulakroune M. et Benatia D.**, *Beyond of the experimental limit of SIMS in-depth resolution*, Journal of engineering and applied sciences, 2007, Vol. 2(5), pp. 808-823

Sommaire du chapitre 2

LA FONCTION DE RESOLUTION EN PROFONDEUR ET SA DETERMINATION EXPERIMENTALE

Introduction	40
1. Définition de la résolution en profondeur	40
2. Propriétés de la fonction de résolution	43
2.1. Allure générale de la fonction de résolution	43
2.2. Spécificité de la fonction de résolution	44
2.3. Aire sous la fonction de résolution	44
2.4. Domaine d'amplitude et support de la fonction de résolution	45
2.5. Position, largeur, dissymétrie : caractérisation par les moments de la fonction de résolution	45
3. Modélisation de la fonction de résolution	48
4. Différentes formes de la DRF	49
4.1. Forme polynomiale	49
4.2. Forme gaussienne	49
4.3. Modèle de Dowsett	50
5. Détermination de la fonction de résolution	52
5.1. Procédure théorique	52
5.2. Détermination expérimentale de la DRF	54
5.2.1. Fittage des données expérimentales	54
5.2.2. Comportement et évolution des paramètres de la DRF	55
5.2.3. Phénomènes physiques liés aux paramètres de la DRF	58
5.3. Limitation de la résolution en profondeur à basse énergie	59
Conclusion	61
Bibliographie	62

Chapitre 2

LA FONCTION DE RESOLUTION EN PROFONDEUR ET SA DETERMINATION EXPERIMENTALE

INTRODUCTION

Dans le chapitre précédent, nous avons vu que l'érosion ionique bien que prometteuse n'est pas parfaite ; on est encore loin d'une érosion idéale qui se voudrait un micro-sectionnement monocouche par monocouche sans dégâts secondaires derrière la surface. Le cas idéal se matérialise par une stricte proportionnalité entre le courant ionique secondaire et la concentration réelle (équation SIMS de base) à chaque instant sous-entend une fonction de résolution en forme de Dirac, ce qui néglige toute modification interne de la cible au cours de l'érosion ionique. Malheureusement, ce cas de figure est loin d'être réalisable, le cas réel est gouverné par plusieurs phénomènes, parmi lesquels le mixage collisionnel est considéré le phénomène le plus prépondérant. L'érosion inhérente à la pulvérisation conduit à l'implantation des ions primaires sous la surface analysée conduisant ainsi à des cascades de collisions à une étendue de l'ordre de grandeur de la largeur des cascades de collisions induites par le bombardement primaire. Le profil original se transforme en un profil mesuré (qui n'est pas rigoureusement identique au profil réel). Le Dirac de concentration se transforme en un profil étalé en profondeur donnant ainsi la fonction de résolution en profondeur (DRF pour *Depth Resolution function*) qui caractérise le système. Sa connaissance est la clé de la mise en oeuvre de n'importe quelle technique de restauration du signal SIMS, sa détermination ainsi que l'étude de ses propriétés conditionnent tous les résultats obtenus par la suite.

Dans ce chapitre, nous allons dans un premier temps décrire les propriétés qui déterminent le domaine de validité de la fonction de résolution. Nous verrons particulièrement qu'il est primordial de réunir certaines hypothèses avant de pouvoir situer le problème de l'analyse SIMS dans le champ d'action de la déconvolution. Nous passerons ensuite à la mesure expérimentale de cette fonction de résolution, et de son comportement en fonction des conditions expérimentales.

1. LA REPONSE IMPULSIONNELLE DU SYSTEME SIMS

Tout profil $n_r(z)$ peut être considéré comme une somme d'impulsions de Dirac décalées les unes par rapport aux autres, d'amplitude variable liée à la dose par unité de longueur comprise dans la tranche $(z, z+dz)$. Par conséquent, l'étude de la réponse d'un profil quelconque fournie après érosion ionique et collecte des ions secondaires peut être comprise par l'étude de la réponse à un Dirac de concentration. D'un point de vue modélisation, on peut considérer l'érosion ionique au sens large (un processus de pulvérisation + environnement physico-chimique associé à

l'instrument) comme un système qui, excité à l'entrée par un Dirac de concentration, donne en sortie un profil de concentration étalé en profondeur.

Le Dirac est une fonction théorique d'épaisseur nulle, d'amplitude infinie et dont l'intégrale sur \mathbf{R} est égale à 1. Il va de soi que dans le domaine de la physique, un tel signal n'existe pas, et il est remplacé par un signal fini d'épaisseur non nulle appelé « Pseudo-Dirac ».

Si on se place dans le domaine continu, le pseudo-Dirac pourra typiquement être une fonction nulle ou quasi nulle sur tout son domaine de définition, sauf sur un intervalle très petit autour de 0. Son intégrale devra aussi être égale à 1. Voici quelques exemples de fonctions assimilées à un Dirac et souvent utilisées :

- créneau d'épaisseur d , d'hauteur $1/d$,
- gaussienne de paramètre σ et d'amplitude $\sqrt{2\pi\sigma}$,
- fonction triangle de base a et d'hauteur $1/2a$.

Dans notre cas, il ne s'agit pas de signal électrique ou optique, mais de successions de plans atomiques. La plus petite structure existante sera alors une couche atomique, ce qui veut dire que dans la réalité, et comme dans tout système réel, on n'obtiendra jamais la vraie réponse impulsionnelle, mais au mieux la réponse à une couche atomique, que l'on peut assimiler à un créneau d'épaisseur égale à la distance moyenne inter-atomique. Dans la suite, la réponse impulsionnelle à ce pseudo-Dirac sera donc assimilée à la vraie réponse impulsionnelle SIMS. Elle fixera une limite de la résolution en profondeur par la mesure de ce Dirac ou delta-dopage. Cette réponse impulsionnelle est appelée la fonction de résolution en profondeur (DRF).

A noter que les techniques de fabrication des matériaux semi-conducteurs, « l'épataxie par jets moléculaire » ou MBE (*Molecular Beam Epitaxy*), ou la CVD (*Chemical Vapor Deposition*), permettent maintenant d'élaborer de telles couches grâce au contrôle de la vitesse de croissance.

En exprimant les concentrations atomiques par le nombre d'atomes par unité de volume présents à la profondeur z , on peut représenter symboliquement ceci de la manière suivante :

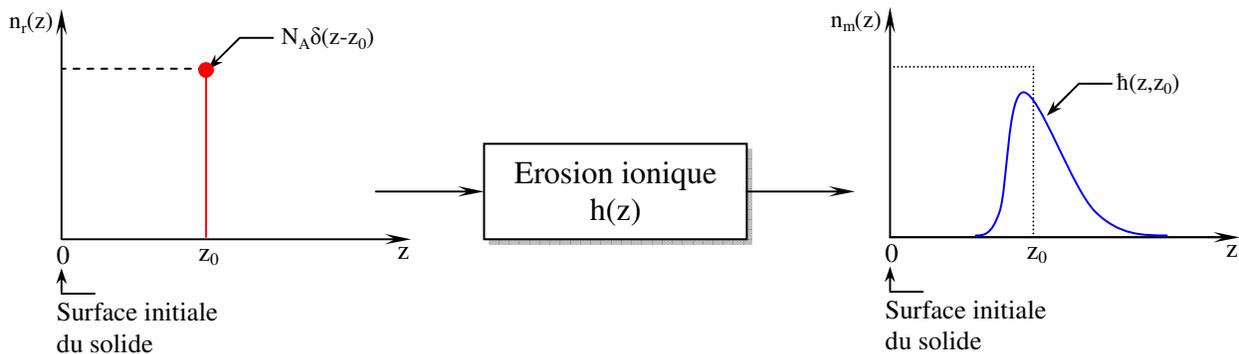


Figure 1 : Schéma de principe d'une réponse à un Dirac de concentration en SIMS pour une espèce donnée enterrée sous la surface.

L'amplitude N_A du Dirac est homogène à une concentration surfacique (at/cm^2) car le Dirac est homogène à l'inverse d'une longueur. Physiquement, le Dirac de concentration

représente idéalement un plan (partiel éventuellement) d'atomes marqueurs A noyé à la profondeur z dans un solide constitué d'atomes B. En supposant constante la densité atomique quelque soit la profondeur z dans le solide, le Dirac peut voir son amplitude N_A balayer la gamme de 0 à N_0 atomes par unité de surface, N_0 représentant la densité surfacique maximale d'atomes A par plan atomique.

$h(z, z_0)$ représente la réponse à un Dirac non unitaire d'amplitude N_A . Il est habituel cependant d'envisager la réponse impulsionnelle unitaire $h(z, z_0)$ pour caractériser un système. Il est toujours possible de normer la réponse impulsionnelle non unitaire $h(z, z_0)$ en divisant celle-ci par

sa norme (aire sous la courbe) : $h(z, z_0) = \frac{\tilde{h}(z, z_0)}{\|\tilde{h}(z)\|}$ telle que ;

$$\int_{-\infty}^{+\infty} h(z, z_0).dz = 1 \quad (1)$$

Dans des conditions où l'effet de matrice et non linéarité de la profondeur érodée avec le temps sont inexistantes, l'érosion ionique peut être considérée comme un système linéaire. En effet, si on double le profil d'entrée, la réponse en sortie doublera tout en conservant la même forme. De même, la réponse à une somme de profils d'entrée sera égale à la superposition des réponses des profils d'entrée prises séparément. Par conséquent, un profil mesuré $n_m(z)$ obtenu par érosion ionique peut être relié au profil réel quelconque original $n_r(z)$ par l'équation intégrale [1] :

$$n_m(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(z, z_0).n_r(z_0).dz_0 \quad (2)$$

Où $h(z, z_0)$ est la réponse impulsionnelle du système linéaire à la profondeur z lorsque l'impulsion est appliquée à la profondeur z_0 . Si $n_r(z_0)$ est la distribution de Dirac enterrée à la profondeur z_0 , on trouve bien d'après les propriétés de cette distribution que la sortie est donnée par :

$$n_m(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(z, z_0).\delta(z_0).dz_0 = h(z, z_0) \quad (3)$$

Par commodité, nous avons étendu la limite inférieure de l'intégrale à $-\infty$ bien que pour un solide semi-infini, on ait : $n_r(z) = 0$ pour $z < 0$.

La connaissance de la réponse impulsionnelle (fonction de résolution en profondeur) $h(z, z_0)$ détermine complètement la réponse à un profil d'entrée quelconque. Il est important de l'associer à la réponse de « tout le système » sur un Dirac de concentration. Par « tout le système », nous entendons à la fois l'instrument (réglage de l'optique primaire : densité de courant, focalisation des ions primaires, filtrage en masse et en énergie, pression de la chambre, nature et polarité des ions secondaires, planéité du porte échantillon, etc.) et l'interaction entre l'instrument et l'échantillon (énergie et angle d'incidence des ions primaires, masse et nature des projectiles, la rugosité induite, etc.).

L'intégrale de l'équation (2) est appelée intégrale de convolution notée symboliquement $n_m(z) = h(z) * n_r(z)$. D'un point de vue pratique, cette opération de convolution peut s'interpréter ainsi : on retourne d'abord la fonction de résolution puis on la translate à la profondeur $z = z_0$ pour donner $h(z-z_0)$. La valeur de la concentration mesurée est alors la moyenne de la concentration réelle $n_r(z)$ pondérée au voisinage de la profondeur z par $h(z-z_0)$. La fonction

de résolution agit comme une fonction de pondération qui tend à lisser les variations des pentes trop raides du profil original. En balayant ce profil réel par cette fonction, on génère pour toutes les profondeurs z les valeurs du profil mesuré $n_m(z)$.

2. PROPRIETES DE LA FONCTION DE RESOLUTION

2.1. Allure générale de la fonction de résolution

De façon générale, la fonction de résolution se présente comme une courbe en cloche possédant un seul maximum appelé mode, centré approximativement sur la profondeur z_0 du Dirac excitateur et s'étalant de façon plutôt dissymétrique de part et d'autre de cette profondeur z_0 ; la raideur du front montant est différente de celle du front descendant (présence généralement d'une queue traînante).

Cette dissymétrie est aussi bien observée expérimentalement que dans les simulations théoriques des réponses à un Dirac enterré [1,2]. Cette propriété est typique des fonctions de résolution en profondeur et elle est à opposer à la symétrie des fonctions de résolutions latérales. La raison de cette dissymétrie se trouve dans le fait que l'observation des fronts montants et descendants du marqueur s'effectue à des instants successifs. Le profil interne du Dirac excitateur évolue au cours de l'érosion, l'enregistrement de la concentration de surface (via le flux pulvérisé et ionisé) sur le front montant interviendra d'abord alors que le front descendant continuera d'évoluer avant d'être révélé par la mesure, c'est à dire avant que la surface instantanée commence à le balayer (voir Figure 2).

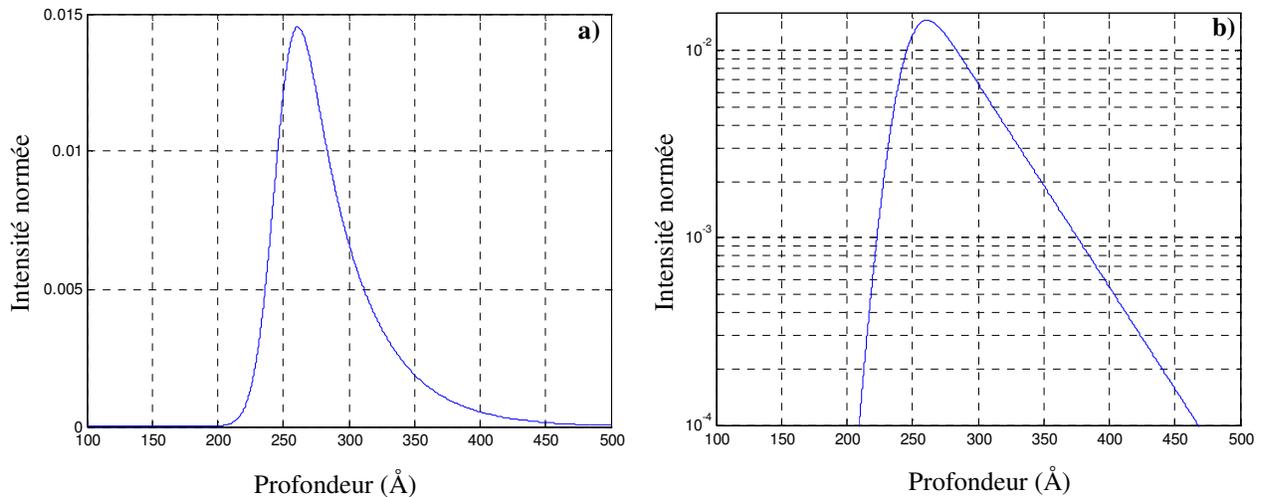


Figure 2: Allure générale de la fonction de résolution en profondeur (DRF). a) tracé linéaire, b) tracé logarithmique.

Vu de "l'extérieur", l'extraction des atomes du marqueur nous apparaît anticipée ou au contraire retardée par rapport à la profondeur attendue correspondant à l'enterrement initial du Dirac. Ces effets d'anticipation ou de mémoire sont dus physiquement à un relief microscopique (contribution des couches antérieures et postérieures à la profondeur moyenne), à une migration partielle vers la surface du marqueur (mixage collisionnel, diffusion thermique,...).

Par conséquent, cette dissymétrie n'est pas due à un profil initial dissymétrique ou même une distribution des dommages dissymétriques sous la surface instantanée ou à l'étendue finie de celle-ci ; on la rencontrerait de la même façon si une diffusion uniforme d'étendue infinie avait lieu dans l'échantillon.

Si la vitesse d'érosion est grande et les dégâts sous la surface sont faibles, la fonction de résolution aura tendance à se symétriser (peu d'écart pour la concentration de surface relative à des positions symétriques du profil interne). Dans ce cas, on se rapproche du comportement limite où la fonction de résolution serait un Dirac correspondant à une érosion idéale. Pour des conditions de bombardement ionique pas trop "dures" (énergie d'impact faible, incidence rasante), cette fonction de résolution a donc tendance à devenir symétrique.

Notons aussi que la présence d'une partie de la réponse avant la profondeur d'origine z_0 est propre aux fonctions de résolution en profondeur contrairement à ce qui se passe pour des systèmes travaillant dans le temps où la réponse suit toujours l'effet (principe de causalité temporelle, par exemple pour un filtre électrique).

2.2. Spécificité de la fonction de résolution

La DRF est spécifique à un élément donné, à la matrice qui le contient ainsi qu'aux conditions expérimentales, il faut également ajouter la spécificité de la DRF à l'instrument dans lequel l'analyse est conduite. En effet, le rôle de l'instrumentation peut se résumer à la qualité du faisceau primaire : focalisation, pureté, balayage, etc. Il n'est donc pas impossible que ces conditions soient reproductibles d'un instrument à l'autre, pour qu'on travaille à la même énergie et en même angle d'incidence, et que le mixage collisionnel reste la source principale de la dégradation de la résolution en profondeur. Néanmoins, la transposition de la fonction de résolution d'un appareil, par exemple, à secteur magnétique vers un appareil à quadripôle est encore assez hypothétique.

2.3. Aire sous la fonction de résolution

L'aire unité sous la fonction de résolution possède une signification physique simple. Prenons en effet, un profil réel $n_r(z)$ d'atomes A dans une matrice B dont l'aire sous la courbe représente la dose, c'est à dire le nombre total d'atomes A par unité de surface contenue dans tout le solide. D'après le principe de conservation de la matière, cette aire initiale doit se retrouver dans l'aire finale du profil mesuré, indépendamment de la forme de ce dernier (quelque soit la façon dont les atomes A s'échappent du solide en fonction de la profondeur analysée). Ce principe s'exprime par:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} n_m(z) \cdot dz = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} n_r(z) \cdot h(z, z_0) dz_0 dz = \int_{-\infty}^{+\infty} n_r(z) \cdot dz \quad (4)$$

Ce qui conduit à la condition de normalisation de la fonction de résolution, $\int_{-\infty}^{+\infty} h(z) \cdot dz = 1$.

2.4. Domaine d'amplitude et support de la fonction de résolution

Les fonctions de résolution envisagées comme cas particulier de réponse à un profil réel de concentration possèdent les propriétés de ces réponses; elles sont positives (mesure de concentration), d'amplitude bornée (comprise entre 0 et N_0 : nombre maximal d'atomes par unité de volume), définies sur $[0, +\infty[$ pour un solide semi-infini. Toutefois, elles sont souvent étendues sur $]-\infty, +\infty[$ (cas d'une gaussienne non tronquée), ce qui revient physiquement à négliger l'effet des bords initiaux du solide dès que la profondeur érodée est suffisamment importante. A titre indicatif, ces propriétés apparemment évidentes (positivité, borne d'amplitude, aire finie, ...) constituent des informations supplémentaires qui peuvent améliorer notablement une déconvolution des profils mesurés en empêchant la naissance de certains artefacts lors de cette restauration (typiquement des valeurs négatives) : on parle alors de déconvolution sous contrainte [2].

2.5. Position, largeur, dissymétrie : caractérisation par les moments de la fonction de résolution

Pour caractériser le plus finement possible la fonction de résolution (à défaut d'une représentation analytique d'origine théorique), il est nécessaire de mesurer quantitativement son décalage éventuel, sa largeur, son degré de dissymétrie. L'outil mathématique le plus adapté est l'utilisation des moments associés à la fonction de résolution ; ceux-ci présentent l'avantage d'être définis indépendamment de la forme particulière de la fonction de résolution. Il est possible de construire convenablement la fonction de résolution des 4 premières moments (méthode de courbes de Pearson [3]). Ceci assure donc, a priori, une meilleure transportabilité des fonctions de résolution obtenues, soit expérimentalement soit par simulation numérique, d'un laboratoire à l'autre. Cet aspect peut être utile en imaginant une déconvolution de "routine" de profils mesurés à partir de résultats étrangers à un laboratoire.

On définit les moments centrés (par rapport à $z = 0$) d'ordre n par la quantité :

$$\mu_n = \int_{-\infty}^{+\infty} z^n \cdot h(z) \cdot dz = \langle z^n \rangle \quad (5)$$

- Le moment d'ordre 0, égale à l'unité, représente l'aire sous la courbe $h(z)$.
- Le moment d'ordre 1 de $h(z)$ représente l'abscisse du centre de gravité de $h(z)$, ou autrement dit sa valeur moyenne.

$$\mu_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} z \cdot h(z) \cdot dz = \langle z \rangle = \bar{z} = E(z) \quad (6)$$

Où $E(z)$, dans le cadre d'une interprétation probabiliste de la fonction de résolution, représente l'espérance mathématique de la profondeur d'apparition (variable aléatoire) d'un atome marqueur. Pour un Dirac enterré à la profondeur z_0 . La mesure la plus naturelle pour mesurer un éventuel décalage de la réponse semble $\langle z \rangle$.

- Le moment d'ordre 2 de $h(z)$ représente le "moment d'inertie" ou l'élargissement de la fonction de résolution $h(z)$ autour de zéro.

D'un point de vue pratique, on utilise plutôt les moments centrés d'ordre n , notés μ_n^c , ces derniers étant calculés autour de la valeur moyenne $\mu_1 = \langle z \rangle$:

$$\mu_n^c = \int_{-\infty}^{+\infty} (z - \bar{z})^n \cdot h(z) \cdot dz = \langle (z - \bar{z})^n \rangle \quad (7)$$

Dans ce cas :

- ✓ $\mu_1^c = 0$,
- ✓ $\mu_2^c = \text{var}(z) = \sigma^2 = \langle (z - \bar{z})^2 \rangle$, où $\text{var}(z)$ et σ sont respectivement la variance et l'écart-type associés à la distribution statistique $h(z)$.

Outre les moments du 1^{er} et 2^e ordre, il est possible d'utiliser les moments d'ordre supérieur pour caractériser de manière plus précise la forme de la courbe.

- Le moment centré d'ordre 3 est :

$$\mu_3^c = \int_{-\infty}^{+\infty} (z - \bar{z})^3 \cdot h(z) \cdot dz \quad (8)$$

Ce moment caractérise la dissymétrie de la distribution par rapport à sa valeur moyenne (poids des coordonnées antérieures à z moins fort par rapport à celui des coordonnées postérieures par exemple). C'est pourquoi on adopte en qualité de paramètre de dissymétrie la grandeur sans dimension, noté γ_1 (ou SK *Skewness* : paramètre d'oblicité ou biais) définie comme le rapport du moment centré du 3^e ordre au cube de l'erreur quadratique moyenne :

$$\gamma_1 = \text{SK} = \frac{\mu_3^c}{\sigma^3} = \frac{\mu_3^c}{(\mu_2^c)^{3/2}} \quad (9)$$

Cette quantité, pour une distribution à un seul mode, indique suivant son signe le sens et l'importance de la dissymétrie (voir Figure 3) :

- ✓ $\gamma_1 = 0$: distribution symétrique
- ✓ $\gamma_1 > 0$: élargissement de la distribution par rapport au centre de gravité vers les grandes valeurs de la coordonnée z ; le front montant (ou bord d'attaque) est plus raide que le front descendant(ou bord de fuite) .
- ✓ $\gamma_1 < 0$: élargissement de la distribution vers les basses valeurs de la coordonnée z ; le front descendant est plus abrupt que le front montant.

Le moment centré du 4^e ordre μ_4^c peut, pour une variance donnée σ^2 , servir à caractériser le poids relatif des grands écarts par rapport à la moyenne vis-à-vis des petits écarts ; ceci permet de définir comme paramètre d'aplatissement (ou excès) au voisinage de z la grandeur sans dimension notée γ_2 :

$$\gamma_2 = \frac{\mu_4^c}{\sigma^4} - 3 = \frac{\mu_4^c}{(\mu_2^c)^2} - 3 \quad (10)$$

L'excès peut être considéré comme une mesure de l'importance relative des queues de $h(z)$ par rapport à la bosse principale. Soustraire 3 au rapport $\mu_4^c / (\mu_2^c)^2$ provient du fait qu'on prend la distribution gaussienne comme distribution étalon d'aplatissement. Or $\mu_4^c / (\mu_2^c)^2$ pour une gaussienne vaut 3. On dispose des règles suivantes pour estimer l'aplatissement relatif de $h(z)$ (voir Figure 3) :

- ✓ Excès très inférieur à 0 : distribution avec une coupure très abrupte des têtes et des queues.
- ✓ Excès très supérieur à 0 : distribution avec une queue substantielle.
- ✓ Excès = 0 : distribution gaussienne.

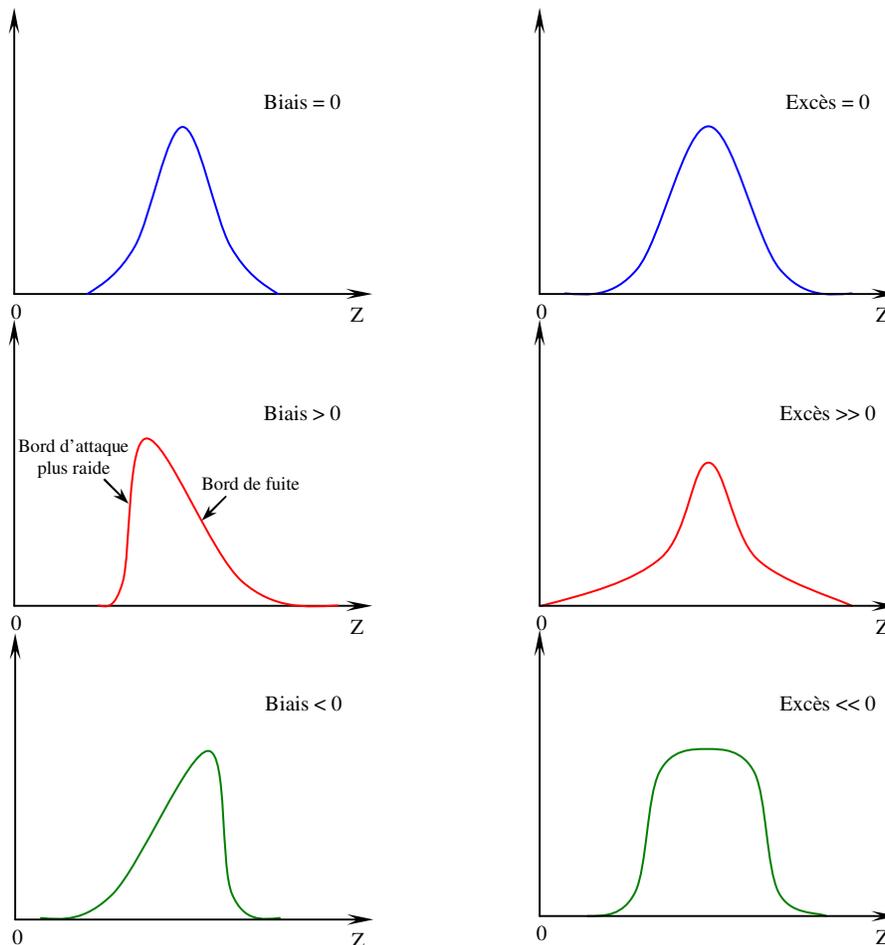


Figure 3 : Différents cas de dissymétrie et d'aplatissement suivant les valeurs de γ_1 et γ_2 . Pour une courbe symétrique, γ_2 définit l'allure ramassée ou étalée de la courbe de distribution. D'après [3].

L'inconvénient majeur de la méthode des moments est d'être très sensible aux imprécisions sur $h(z)$ au fur et à mesure que l'ordre s'accroît (à partir de 3 pratiquement). Expérimentalement, ces imprécisions sont causées par le bruit inévitable des courants secondaires lorsque $h(z)$ est proche de zéro et la troncature arbitraire du support de $h(z)$ (les écarts élevés $(z - \langle z \rangle)^n$ amplifiant notablement cette erreur). Il s'ensuit des variations plus ou moins chaotiques des biais même si une évolution monotone du degré de dissymétrie est visible à l'œil.

3. MODELISATION DE LA FONCTION DE RESOLUTION

Si on souhaite comparer les résultats provenant de diverses mesures, faites ou non dans les mêmes conditions expérimentales, il est préférable d'exprimer la fonction de résolution en fonction des paramètres analytiques ajustables, plutôt que de travailler sur des DRF numériques (expérimentales). Caractériser la DRF par une forme analytique, par *fittage*, possède plusieurs avantages [2] :

1. Le *fittage* effectue un lissage local de la courbe représentant la DRF. En SIMS, on considère que le bruit est additif, n'est pas propre à la DRF mais vient s'y ajouter de manière aléatoire. De ce fait, le *fittage* permet de supprimer le bruit de la fonction de résolution mesurée. De plus, la réponse impulsionnelle ne possède pas de points anguleux, il n'y a pas de perte d'information suite au *fittage*. Les calculs effectués avec une fonction de résolution analytique seront donc plus justes et plus précis qu'avec une DRF définie numériquement. La suppression du bruit est surtout importante lorsqu'on passe dans le domaine de Fourier. En effet, les nombreuses et rapides variations des composants du bruit dans le signal SIMS donnent dans l'espace de Fourier des fortes valeurs dans les hautes fréquences du spectre du signal. Ces hautes fréquences peuvent considérablement gêner les calculs (nous reviendrons à ce point dans le prochain chapitre).
2. La mesure de la DRF est réalisée avec une vitesse d'érosion donnée. Cette vitesse d'érosion détermine en quelque sorte une période d'échantillonnage. La déconvolution d'un profil quelconque par la DRF nécessite que ce profil et la DRF aient été échantillonnés avec la même période. Disposer d'une forme analytique permet donc de construire une DRF avec la période voulue afin de l'adapter au profil à déconvoluer. Cet avantage est probablement l'un des plus déterminants.
3. En faisant de nombreuses mesures dans des conditions expérimentales différentes, la forme de la DRF, et donc les paramètres analytiques la caractérisant varient. On peut obtenir, grâce à ces séries de mesures, des abaques de fonction de résolution permettant de prévoir ses paramètres en fonction de l'énergie et de l'angle d'incidence. La modélisation de la DRF permet donc d'effectuer la déconvolution sans avoir à faire une mesure de delta-dopage.
4. La fonction de résolution peut-être utilisée de façon à *fit*ter les données expérimentales en se restreignant à la dynamique mesurée, ou alors de façon à améliorer les performances de la déconvolution. Cette possibilité suppose que la forme de la DRF peut être extrapolée sur une grande dynamique.
5. Avec une bonne fonction de *fittage* pour la DRF, on peut prévoir de manière analytique le profil SIMS d'une structure particulière supposée connue. La comparaison avec le ou les profils mesurés de cette structure permettra éventuellement de déterminer les performances de l'appareil ou de vérifier que l'échantillon a été bien fabriqué.

4. DIFFERENTES FORMES DE LA DRF

Le fittage de la DRF par une forme analytique est un sujet de discussion assez débattu par différents auteurs [1-22]. D'un point de vue pratique, il est important que la forme analytique puisse fitter correctement la fonction de résolution dans des conditions expérimentales assez différentes, c'est-à-dire sur une plage d'énergies primaires et d'angles d'incidence assez grande, sans qu'on ait besoin d'apporter de corrections artificielles.

4.1. Forme polynomiale

La forme polynomiale de la DRF est proposée par Herzel *et al.* [4]. Ils utilisent un polynôme d'ordre 12 pour fitter la fonction de résolution du bore dans une matrice de SiGe. Un tel fittage n'est à notre avis pas réaliste, attendu que le comportement à l'infini d'un polynôme quel que soit son degré, ne pourra jamais être exponentiel. Herzel a par la suite artificiellement limité le domaine de définition de la fonction, et a précisé que dans les bas niveaux du signal, où le bruit est fort, la fonction de résolution a été extrapolée de manière exponentielle, ce qui permet de douter de la pertinence du choix polynomial !

L'un des problèmes principaux inhérents au fittage est relatif au nombre de paramètres nécessaires et suffisant pour décrire la DRF. Un fittage polynomial de degré 12 nécessite non moins de 13 paramètres dont on peut douter de l'indépendance et de l'unicité. En d'autres termes, les paramètres ainsi définis sont dégénérés et ne définissent pas la DRF de manière non ambiguë. Dans un tel cas, il n'est pas possible d'assigner un comportement aux 13 paramètres lorsque les conditions expérimentales varient, ce qui interdit toute extrapolation des valeurs des paramètres hors des conditions où la DRF a été effectivement mesurée. Il est donc souhaitable de limiter drastiquement le nombre de paramètres de fittage et de tenter de trouver pour chacun d'eux un minimum de signification physique ou graphique.

4.2. Forme gaussienne

La fonction de résolution gaussienne est largement utilisée en pratique, cette forme révèle généralement sur des profils à travers des interfaces hyper abrupts où la courbe de concentration mesurée apparaît approximativement symétrique. Le fittage de la DRF par une forme gaussienne est proposé par Prudon [1]. Le modèle mathématique d'une telle fonction est donné par l'équation :

$$G(z) = \frac{B}{\sqrt{2\pi}\sigma_g} \exp\left(\frac{-z^2}{2\sigma_g^2}\right) \quad (11)$$

Où : σ_g représente l'écart type de la fonction gaussienne, B : constante pour fixer l'amplitude et qui n'aura pas de sens après normalisation.

L'observation de la forme de la DRF suggère que sa courbe est caractérisée par trois parties distinctes : une pente exponentielle montante, un sommet arrondi, et enfin une pente exponentielle descendante. Donc cette courbe nécessite quatre paramètres ; un paramètre de positionnement plus trois paramètres de forme pure correspondant aux trois parties de la courbe la DRF.

Donc, à notre avis, le modèle de Prudon demeure limité et ne caractérise que partiellement la DRF. On ne peut pas restreindre toute une réponse impulsionnelle d'un système de caractérisation à un seul paramètre !

Les comportements exponentiels qui régissent la montée et la descente du signal imposent l'utilisation d'une double exponentielle pour décrire les parties de la DRF qui tendent vers l'infini. Cette double exponentielle est définie comme suit :

$$D(z) = A \cdot \begin{cases} e^{-\frac{z-z_0}{\lambda_u}} & z < z_0 \\ e^{-\frac{(z-z_0)}{\lambda_d}} & z > z_0 \end{cases} \quad (12)$$

z_0 ; paramètre de positionnement, positif ou négatif.

4.3. Modèle de Dowsett

Dowsett *et al.* [5] ont proposé, pour fitter au mieux la DRF, de convoluer la fonction double exponentielle (Eq. (12)) avec une gaussienne centré d'écart-type σ_g (Eq. (11)). Le résultat normalisé de la convolution est donné par la Figure 4, son équation est donnée par :

$$h(z) = \frac{1}{2(\lambda_u + \lambda_d)} \left\{ \begin{array}{l} \exp\left(\frac{z-z_0}{\lambda_u} + \frac{\sigma_g^2}{2\lambda_u^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{z-z_0}{\sqrt{2}\sigma_g} + \frac{\sigma_g}{\sqrt{2}\lambda_u}\right) + \\ \exp\left(-\frac{z-z_0}{\lambda_d} + \frac{\sigma_g^2}{2\lambda_d^2}\right) \operatorname{erfc}\left(-\frac{z-z_0}{\sqrt{2}\sigma_g} + \frac{\sigma_g}{\sqrt{2}\lambda_d}\right) \end{array} \right\} \quad (13)$$

La description de la DRF par cette forme analytique nécessite trois paramètres fondamentaux : λ_u , λ_d et σ_g . A et B (les amplitudes des différentes fonctions) disparaissent lors de la normalisation (nécessaires pour la définition de la fonction de résolution). Quant au paramètre z_0 , il ne joue aucun rôle dans la forme de la DRF.

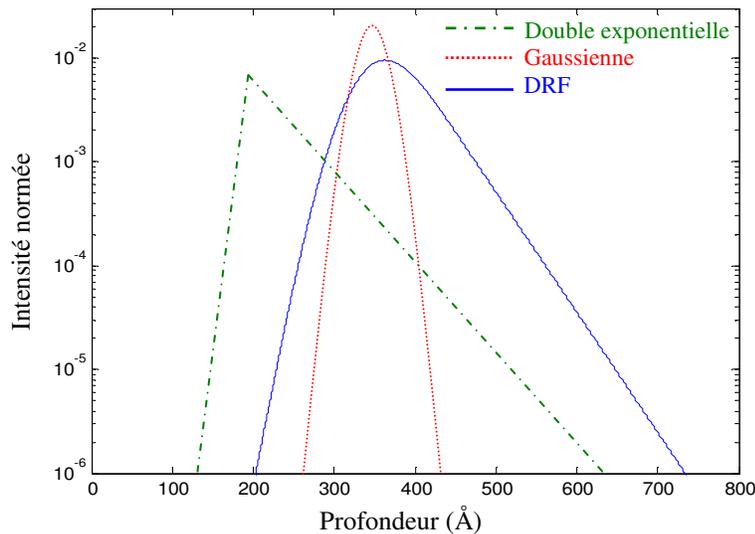


Figure 4 : Les fonctions qui composent la forme analytique de la DRF.

Selon Zalm [6], il existe une ambiguïté sur le choix de la fonction qui joue le rôle de la gaussienne que nous venons d'utiliser. Zalm montre qu'un fittage de qualité comparable peut-être obtenu en convoluant la double exponentielle avec une fonction triangle caractérisée par un paramètre de largeur Δ , définie sur une plage de profondeur déterminée et non de $-\infty$ à $+\infty$ comme une fonction gaussienne. Par exemple, sa fonction triangle est définie de $-\Delta$ à $+\Delta$ par :

$$T(z) = \frac{1 - \frac{|z|}{\Delta}}{\Delta} \quad (14)$$

Les fonctions que Zalm a étudié n'ont qu'un seul paramètre, ce qui permet en ajoutant les deux autres paramètre de la double exponentielle, d'en avoir trois au total, conformément à ce que nous souhaitons pour définir la DRF, aboutissant à la même valeur pour le moment d'ordre 2 du résultat de la déconvolution. Cependant la qualité de fittage utilisant ces fonctions n'est pas contestable, surtout en présence de bruit lors de la mesure expérimentale de la DRF.

Nous avons néanmoins opté pour une fonction d'élargissement gaussienne pour les raisons suivantes :

☞ La gaussienne est d'expression simple, elle est continue, dérivable, et n'a pas de point anguleux, dont le paramètre σ_g porte une signification facilement identifiable. De Plus, les propriétés de la gaussienne sont intéressantes, et peuvent faciliter les calculs : la transformée de Fourier d'une gaussienne est aussi une gaussienne, et la dérivée d'une gaussienne est une gaussienne multipliée par la variable. Cette forme analytique permet de disposer d'un outil puissant d'analyse de la résolution en profondeur, notamment par l'intermédiaire du calcul des moments de la fonction.

☞ Sur le plan expérimental, les phénomènes physiques indépendants de nature aléatoire qui pourraient intervenir lors de la mesure d'un signal, sont de forme gaussienne qui présente l'avantage d'être reliée à la statistique par le biais du théorème central limite. La somme de leurs contributions aboutira à une fonction de résolution gaussienne [1].

Dans la section 7 du chapitre 1, nous avons vu les différents critères d'évaluation de la résolution en profondeur, nous avons vu également que chaque critère a un certain degré de subjectivité. L'existence d'une forme analytique permet de donner des chiffres précis pour la résolution en profondeur, grâce au moment centré d'ordre 2 dont nous avons déjà parlé. Cette possibilité permet de comparer les performances en matière de résolution en profondeur de manière objective, c'est-à-dire le fait qu'il prend en compte la totalité de la courbe, ce qui ni pour la FWHM, ni pour les paramètres exponentiels.

La relative simplicité de la forme analytique choisie pour fitter la DRF autorise le calcul analytique des différents moments.

- Moment d'ordre 1 (moyenne) :

$$\mu_1 = \langle z \rangle = \lambda_d - \lambda_u + z_0 \quad (15)$$

- Moment centré d'ordre 2 :

$$\mu_2^c = \sigma_{\text{tot}}^2 = \lambda_d^2 + \lambda_u^2 + \sigma_g^2 \quad (16)$$

Le moment centré d'ordre 2 (μ_2^c) représente la variance de la fonction autour de sa valeur moyenne $\langle z \rangle$. σ_{tot} est son écart type, il nous donne une estimation de la résolution en profondeur, son carré est donc simplement la somme des carrés des paramètres de la DRF.

A noter que la position effective du δ -dopage n'est certainement pas la valeur moyenne de la DRF, car le mixage collisionnel n'est pas la seule source de dégradation de la résolution en profondeur.

Cependant, il est raisonnable de penser que $\langle z \rangle$ constitue une estimation correcte de cette position si le mixage est la cause principale de dégradation de la résolution [7]. La Figure 5 présente les différentes positions respectives de la DRF et du δ -dopage excitateur. La forme de la DRF introduit une ambiguïté sur la position des couches fines analysées par SIMS puisque le maximum de la DRF « position modale », qui est assimilée généralement à la position expérimentale d'une couche, ne correspond pas tout à fait à la position initiale de la couche analysée. L'anticipation de la DRF par rapport au Dirac excitateur sera mesurée par la quantité :

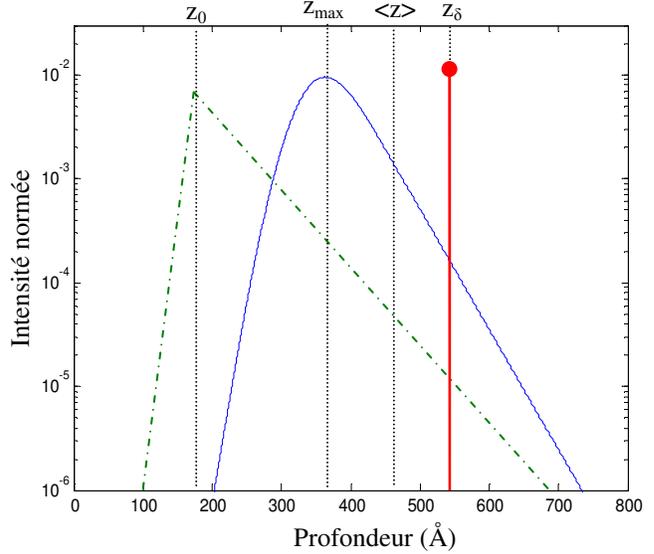


Figure 5 : Positions relatives de la DRF et du delta-dopage qui lui a donné naissance.

$$\Delta z_{\max} = z_{\max} - z_{\delta} \quad (17)$$

Le décalage $\Delta z_0 = z_{\delta} - z_0$ est relié à l'asymétrie de la courbe, on remarque que $\Delta z_{\max} = \Delta z_0$ si $\lambda_d = \lambda_u$, c'est-à-dire si la fonction de résolution est symétrique. Or cela ne sera jamais le cas, car la double exponentielle n'est pas symétrique, donc la DRF ne le sera pas non plus.

5. DETERMINATION DE LA FONCTION DE RESOLUTION

5.1. Procédure théorique

La définition de la résolution commande la pulvérisation à travers une couche très fine (infinitésimale c'est-à-dire monocouche). Si on ne dispose de tels étalons, ou on n'arrive pas à les réaliser, en particulier à cause de la non uniformité latérale. On procède alors à une érosion ionique à travers une structure test type marche montante ou descendante pour déterminer la DRF.

Prenons, par exemple, une fonction marche montante de concentration normalisée passant de 0 à 1 (passant à travers l'interface) :

$$n_r(z) = \begin{cases} 1 & \text{si } z > 0 \\ 0 & \text{si } z < 0 \end{cases} \quad (18)$$

L'origine des profondeurs étant prise sur l'interface. La réponse d'une telle marche après érosion ionique caractérisée par $h(z)$ est donnée par le produit de convolution : $n_m(z) = n_r(z) * h(z)$, en prenant la dérivée de cette réponse, on a :

$$\frac{dn_m(z)}{dz} = \frac{dn_r(z)}{dz} * h(z) = \delta(z) * h(z) = h(z) \quad (19)$$

Par conséquent, pour accéder à la forme de la fonction de résolution, il suffit de prendre la dérivée de la réponse à la marche montante. Dans le cas d'une marche descendante, il suffit de prendre la dérivée changée de signe. Si l'interface est située en $z = z_1$ au lieu de $z = 0$, on obtient simplement la translatée de la fonction de résolution en $z = z_1$. La Figure 6 illustre de manière symbolique comment une fonction marche montante (ou descendante) est élargie et distortue par profilage en profondeur avec une fonction de résolution arbitraire.

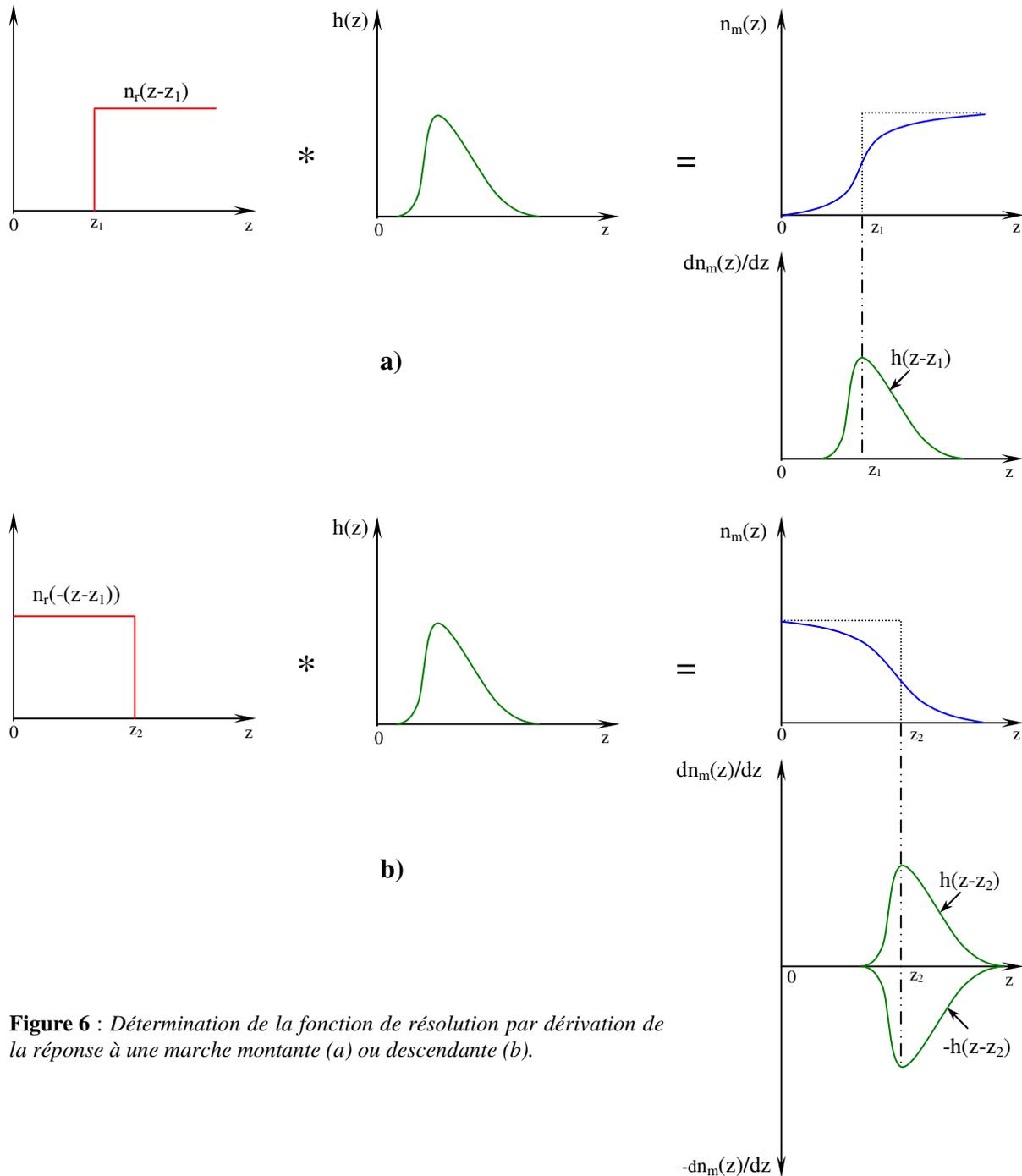


Figure 6 : Détermination de la fonction de résolution par dérivation de la réponse à une marche montante (a) ou descendante (b).

5.2. Détermination expérimentale de la DRF

Pour la présente étude expérimentale, nous avons choisi de mesurer la fonction de résolution du bore dans le silicium sous diverses conditions expérimentales, le bore se présente sous forme de deltas-dopage. Chaque échantillon est caractérisé par la concentration du bore, le nombre des deltas et les distances qui les séparent. L'avantage de déterminer la DRF dans des structures homogènes avec des concentrations faibles de dopants est qu'on s'affranchit des variations des taux de pulvérisation et d'ionisation avec la composition de l'échantillon. Les distorsions des profils dues aux effets de matrices sont absentes, il est donc plus facile d'étudier les altérations proprement dites des profils de concentration, qui sont dues uniquement au processus d'analyse.

Les analyses ont été faites dans l'analyseur ionique à secteur magnétique CAMECA Ims-6f, sous faisceau d'ions primaire O_2^+ , avec ou sans soufflage d'oxygène, en collectant les ions secondaires positifs sur une aire de 70 μm de diamètre (diaphragme de champ 2, diaphragme de contraste 1) et un balayage de 450 μm x 450 μm , et 70 nA de courant primaire, assurant ainsi une bonne focalisation. Ces conditions opératoires permettent de considérer le mixage collisionnel comme la seule source de dégradation de la résolution en profondeur, car la ségrégation due principalement à la formation du SiO_2 stoechiométrique est absente. En outre les profondeurs d'analyse sont assez faibles pour provoquer une rugosité induite (qui peut paraître pour des profondeurs supérieures à 800 nm [2]).

5.2.1. Fittage des données expérimentales

Les échantillons qui nous ont servi de mesurer la fonction de résolution en profondeur sont des multi-deltas-dopage de bore, régulièrement espacés dans une matrice de silicium. Les différentes versions de ces échantillons ont été analysées dans différentes conditions opératoires d'énergie et d'angle d'incidence. La Figure 7 montre un échantillon constitué de neuf deltas-dopage. Sur cet échantillon, par exemple, la fonction de résolution est mesurée sur les pics qui possèdent la plus grande dynamique (pic 9, pic 8, pic 5) permettant ainsi de fitter les pentes exponentielles avec une bonne précision.

La Figure 8 montre les fittages de la fonction de résolution en profondeur pour deux conditions expérimentales 5.5 keV / O_2^+ d'impact, 48.3° d'incidence et 9.5 keV / O_2^+ d'impact, 40.9° d'incidence.

Les fonctions de résolution ainsi déterminées ont été normées et le bruit de fond présent à la fin de profil a été soustrait. On remarque la qualité de fittage sur la quasi-totalité de la dynamique, qui est justifié par une excellente superposition de la forme analytique de la DRF et du delta-dopage mesuré comme l'atteste les tracés linéaires et logarithmiques,

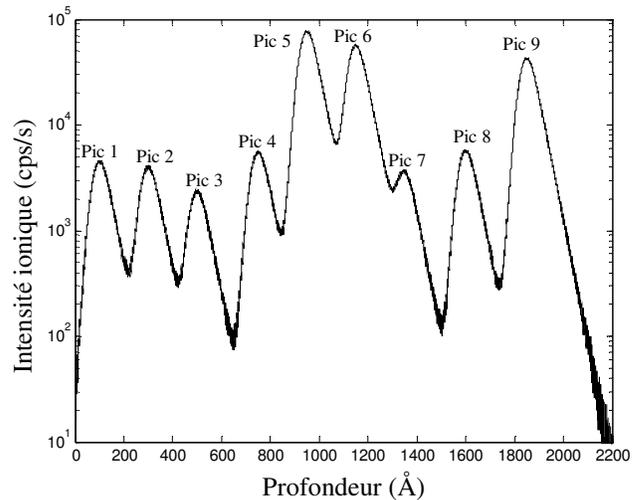


Figure 7: Profil en profondeur d'une version de l'échantillon sur lequel a été mesurée la DRF du bore dans le silicium 9.5 keV / O_2^+ , 40.9°.

excepté sur la partie où le rapport signal / bruit est mauvais. Notons que ces résultats confirment les travaux de Dowsett [5].

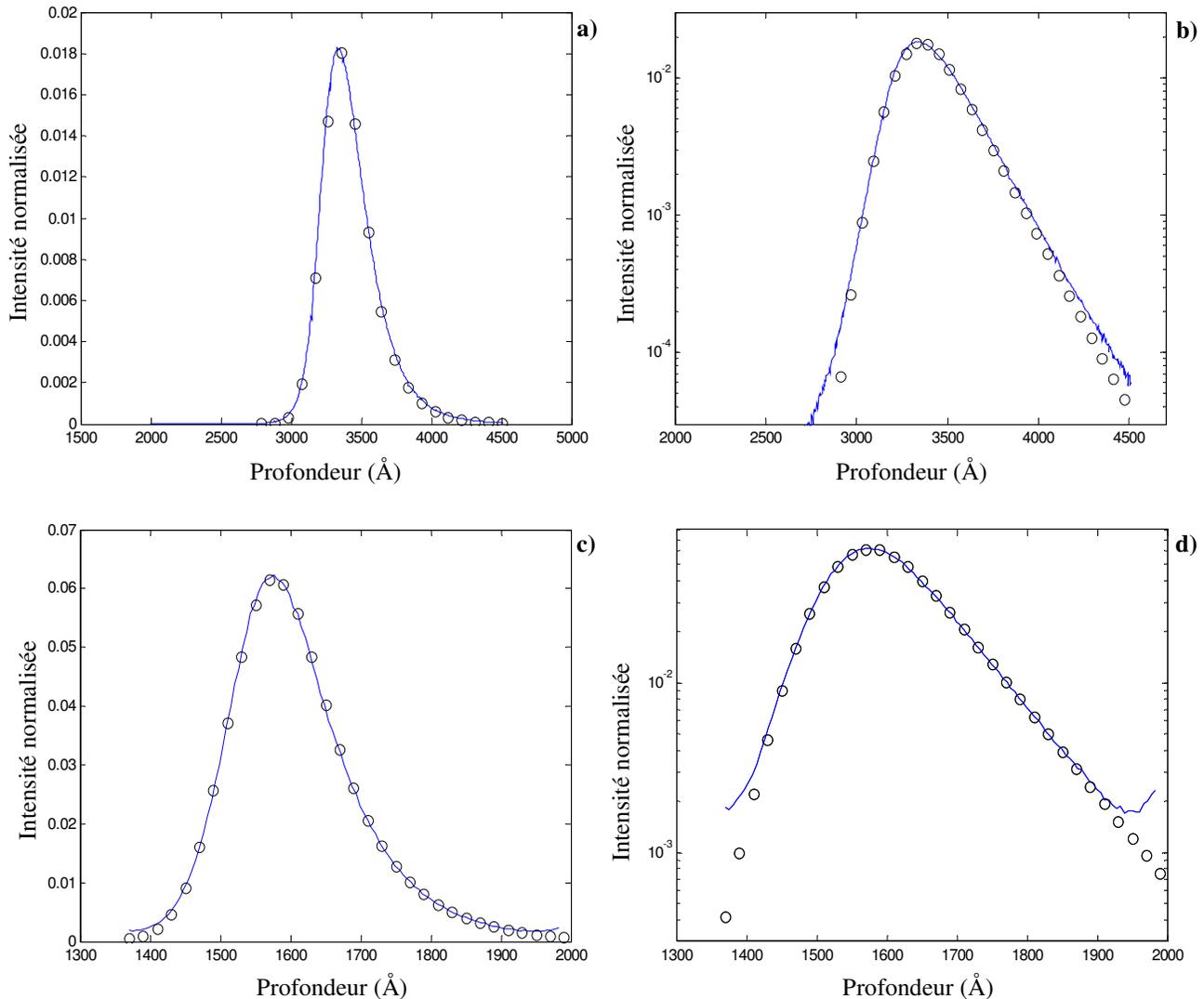


Figure 8 : Fittage par la forme analytique de la DRF des deltas-dopage de bore dans le silicium. Tracé linéaire et logarithmique. Les petits cercles correspondent au fittage, les traits continus aux données expérimentales. a-b) 5.5 keV / O_2^+ , 48.3°, c-d) 9.5 keV / O_2^+ , 40.9°.

5.2.2. Comportement et évolution des paramètres de la DRF

Lorsqu'on augmente l'énergie des ions primaires, on distingue clairement l'évolution de la forme de la DRF, ceci est caractérisé par l'aplatissement du sommet arrondi et la décroissance de la pente descendante de la DRF en suivant une allure de plus en plus longue. La Figure 9 présente les variations de la DRF en fonction des l'énergie des ions primaires. A noter que lorsque l'énergie des projectiles diminue, le bruit s'accroît dans le profil mesuré, ceci est dû d'une part à la taille de la sonde en basse énergie, d'autre part à la mauvaise focalisation de cette sonde (effet de bords de cratère).

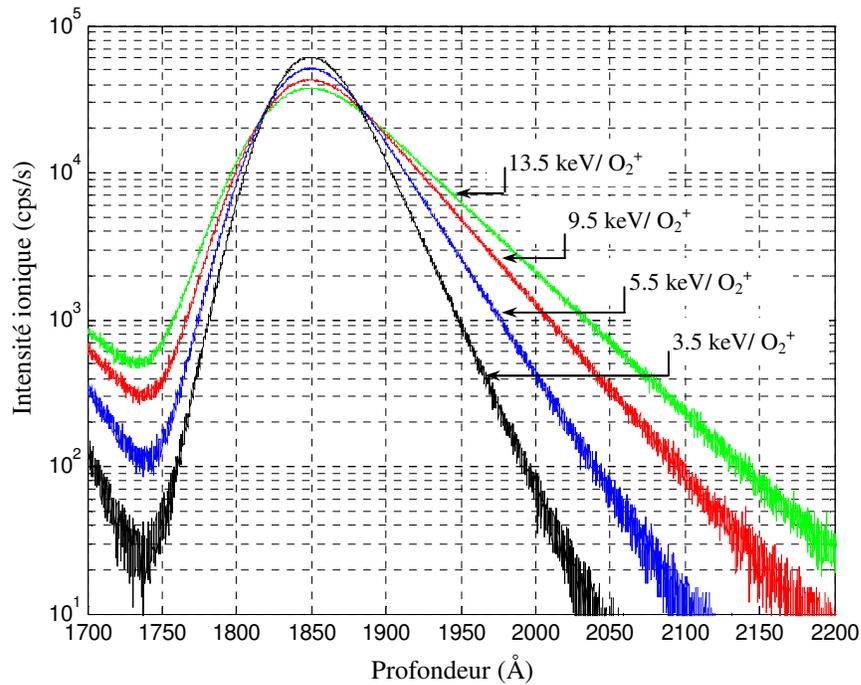


Figure 9 : Variation de la forme de la DRF en fonction de l'énergie des ions primaires.

Dans l'analyseur ionique Cameca, le fait que l'énergie varie en même temps que l'angle nous avons choisi d'exprimer les variations en fonction non pas de l'énergie primaire, mais de la profondeur de pénétration des ions primaires R_p .

R_p de sa part est directement impliqué dans le mixage collisionnel, dans le cas du bore dans le silicium. Ce paramètre est calculé par le logiciel TRIM et il est donné par la relation proposée par Dupuy *et al.* [8] :

$$R_p = 50.46 E_p^{0.665} \cos \theta \quad (20)$$

Où E_p est l'énergie d'impact des ions primaires et θ est l'angle d'incidence par ion oxygène et non par O_2^+ . A noter que cette relation n'est valable que pour $R_p > 30 \text{ \AA}$. L'avantage de R_p , par rapport à E_p , est de tenir compte de données relatives à l'interaction projectile-cible et de rassembler toutes les combinaisons des couples énergie-angle physiquement accessibles par l'expérience et qui varient de manière non indépendante. L'inconvénient de R_p est d'être simulé et non mesuré, contrairement à E_p , ce qui suppose de bien connaître les lois de variations, en particulier aux limites de validité de ces lois. La relation (20) n'est valable que pour des valeurs de R_p supérieures à 30 \AA , en dessous de cette limite, l'équation (20) sous-estime légèrement la valeur de R_p . La limite supérieure de R_p est de 142 \AA [2, 8]. La Figure 10 résume les variations de R_p en fonction de l'énergie des ions primaires et de l'angle d'incidence.

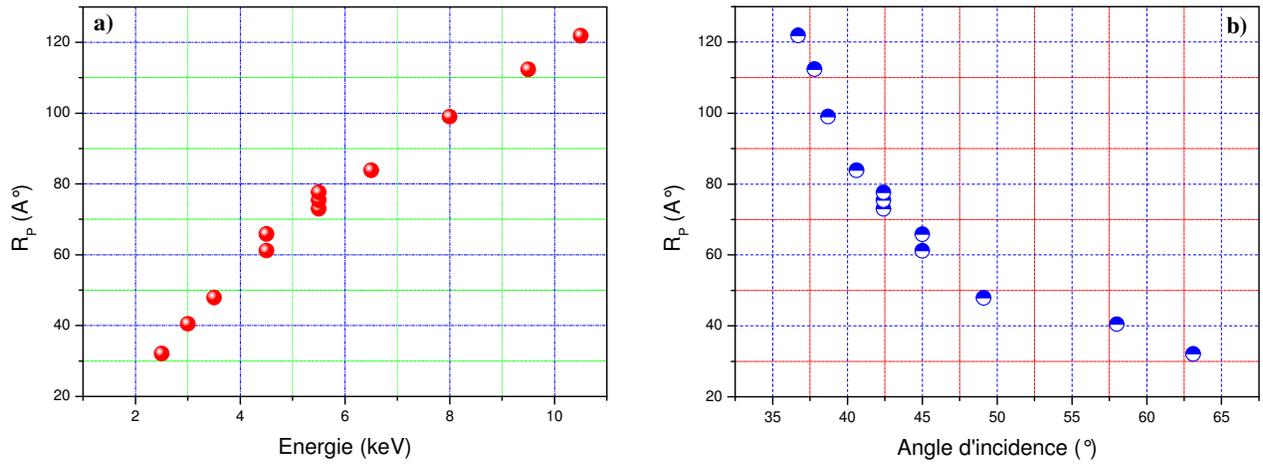


Figure 10 : Variations de la profondeur de pénétration des ions primaires en fonction de : a) l'énergie des ions primaires, b) l'angle d'incidence du faisceau primaire.

L'évolution des paramètres de fittage en fonction de la profondeur de pénétration des ions primaires est illustrée dans la Figure 11.

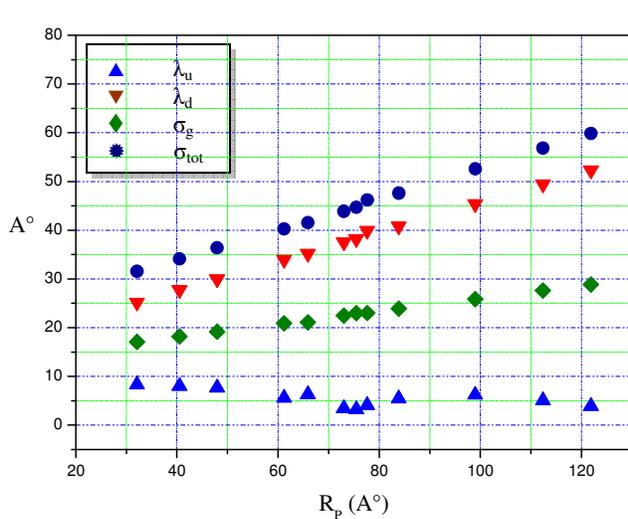


Figure 11 : Évolution des paramètres du fittage de la DRF en fonction de la profondeur de pénétration des ions primaires R_p .

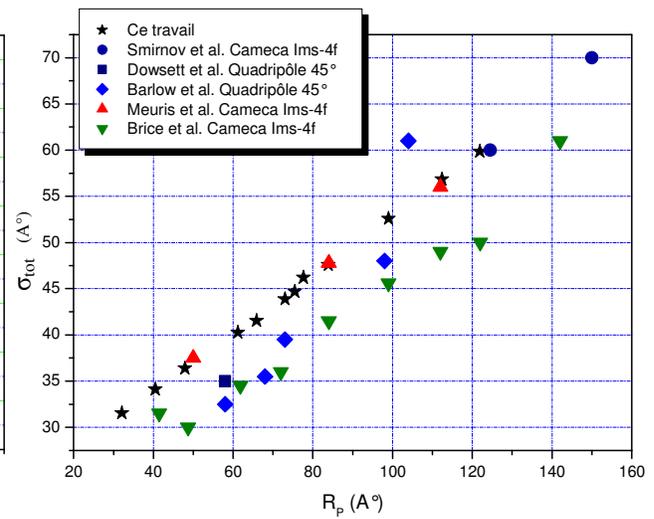


Figure 12 : Comparaison de la résolution en profondeur de ce travail avec celles de la littérature (incidence oblique).

En observant les variations des paramètres de la DRF en fonction de R_p (voir Figure 11), nous constatons que ces paramètres ont un comportement quasi linéaire : λ_d et σ_g sont croissants. Quant au paramètre λ_u semble pratiquement indépendant de R_p , il présente un comportement

chaotique, nous obtenons des valeurs quasi constantes variant de 3 à 8 Å autour d'une valeur moyenne d'environ 5 Å. Ce paramètre n'est pas sensible aux variations de R_p , ses grandes valeurs correspondent aux basses énergies, ce qui nous laisse penser qu'à ces basses énergies d'autres phénomènes entrent en jeu !

Les valeurs des ordonnées à l'origine de chacun des paramètres ne sont pas nulles. On pourrait pourtant penser que lorsque la profondeur de pénétration sera nulle, donc le mixage collisionnel inexistant, la résolution sera parfaite annulant la valeur de tous les paramètres. En effet, il est possible que certains paramètres qui dégradent la résolution soient insensibles à l'énergie des primaires, particulièrement ceux qui sont liés à la rugosité de l'échantillon ainsi que les phénomènes liés à la nature statistique de la pulvérisation (profondeur d'échappement). Ces phénomènes déterminent comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, la résolution ultime accessible par l'analyse SIMS.

Dans la gamme des énergies allant de 2.5 à 13 keV, Brice [2] a étudié les paramètres de DRF pour un échantillon contenant des deltas-dopage de bore dans le silicium, il a obtenu également un comportement linéaire des trois paramètres, sauf pour les énergies inférieures à 3.5 keV (soit $R_p < 47.9$ Å). Il a attribué les divergences des paramètres pour ces faibles énergies à la difficulté de régler la sonde ionique primaire et aux effets de l'incidence rasante. En outre le bruit de fond important présent dans ses profils expérimentaux rend l'évaluation des pentes exponentielles beaucoup moins précise.

La comparaison de nos résolutions en profondeur avec celles de la littérature est récapitulée dans la Figure 12. D'après cette compilation de résultats, nous pouvons constater que nos résultats sont cohérents avec les résultats d'autres auteurs, notamment avec ceux de Meuris *et al.* [9] et de Smirnov *et al.* [10], les meilleurs résultats sont obtenus par Brice [2]. La différence des résultats est due certainement à la qualité des échantillons (procédés de fabrication des deltas-dopage), des conditions d'analyse, type d'analyseur utilisé, etc.

En réalité, il n'est pas évident de faire une comparaison absolue, étant donné qu'il existe plusieurs types d'analyseurs, et chaque équipe peut personnaliser son propre appareil en modifiant ses caractéristiques. Néanmoins, la comparaison de nos fonctions de résolution du bore dans le silicium avec celles obtenues pour d'autres espèces dans le silicium montrent clairement que la résolution en profondeur dépend du type de dopant, bien que la théorie ne prévoit pas de variations dans le cas dilué [10, 12, 13].

5.2.3. Phénomènes physiques liés aux paramètres de la DRF

Avec une modélisation complète, le fittage idéal de la DRF aboutit à une forme analytique reliant tous les phénomènes physiques depuis le faisceau primaire jusqu'à la détection des ions secondaires. Malheureusement, ce n'est pas toujours le cas car on ne peut pas relier les trois paramètres de fittage de manière non ambiguë. En plus, la pulvérisation de l'échantillon est loin d'être complètement compris ; les mécanismes sont trop dépendants des espèces chimiques de la matrice et des espèces incidentes, et évidemment de leurs concentrations relatives. A cela s'ajoute le grand nombre de paramètres expérimentaux gérés par l'opérateur. Parfois leur sensibilité rend difficile la reproductibilité des mesures. Néanmoins, la dépendance énergétique des paramètres de fittage peut nous permettre de faire quelques hypothèses sur leur nature physique.

► Comme nous l'avons vu au chapitre 1, l'origine de λ_d est le mixage collisionnel. L'évolution de ce paramètre avec R_p correspond bien au modèle du mixage collisionnel, sauf à basse énergie où d'autres phénomènes entrent en jeu.

► Le paramètre σ_g est relié aux cascades de collisions isotropes qui se tiennent à l'intérieur du matériau, et augmente avec l'étendue de celle-ci. Littmarck [14] a montré que même dans des conditions expérimentales supposées idéales ; balayage homogène, fond de cratère plat, pas de rugosité, etc. le sommet arrondi de la DRF existe et dépend de R_p .

► Le paramètre λ_u reste ambigu, le fait qu'il est insensible à l'énergie des ions primaires. Badheka *et al.* [15] ont montré que ce paramètre est principalement relié à la rugosité microscopique de la surface pulvérisée. Turner *et al.* [16] affectent ce paramètre à la profondeur d'échappement des ions secondaires. Dans tous les cas de figures, ce paramètre semble ne pas dépendre du mixage collisionnel.

5.3. Limitation de la résolution en profondeur à basse énergie

Fonction de résolution variante

Généralement, en analyse SIMS, la résolution en profondeur est influencée par le mixage collisionnel qui entraîne une dégradation de celle-ci. Toute la difficulté réside dans la reproduction du profil de concentration en profondeur dégradé par l'analyse. Le mixage collisionnel ne sera guère éliminé, cependant les développements récents visent à le minimiser en utilisant des conditions expérimentales adéquates en minimisant l'énergie des projectiles jusqu'à quelques centaines d'eV. Le comportement de λ_d et σ_g semble être linéaire avec une ordonnée à l'origine nulle. Cette propriété semble être cohérente, puisque lorsque la profondeur de pénétration des ions tend vers zéro, il n'y a plus de mixage collisionnel, donc pas d'érosion ! A basse énergie (< 500 eV) il faut cependant prendre en compte d'autres phénomènes parasites tels que l'apparition d'une rugosité en fond de cratère qui dépend directement de l'angle d'incidence, limitant ainsi la résolution en profondeur.

L'incidence du faisceau primaire conduit souvent au développement de ripples (vagues), îlots, etc., dont la profondeur d'appariation, la forme et l'amplitude dépendent de nombreux paramètres expérimentaux (angle d'incidence, énergie d'impact, pression d'oxygène,...) [17]. Dans notre étude, on peut supposer que ces différents types de rugosité sont uniformes sur le fond de cratère, la sonde ionique érode plusieurs couches en même temps, indépendamment du mixage collisionnel, dont l'effet est à additionner à celui de la rugosité. La dégradation de la résolution en profondeur due à la rugosité peut être modélisée dans une première approximation par une gaussienne que l'on convoluera avec la DRF initiale, ce qui nous donne une nouvelle réponse impulsionnelle tenant compte de la rugosité. Le paramètre de cette gaussienne est généralement croissant avec la profondeur, son évolution peut être mesurée à partir de fittage des deltas-dopage donnant ainsi une DRF variante.

Les rugosités entraînent non seulement une dégradation de la résolution en profondeur, mais aussi une variation du taux d'ionisation et de la vitesse d'érosion. L'angle d'incidence et la pression d'oxygène influencent fortement la formation et l'évolution des rugosités [18, 19].

Les Figures 13 et 14 représentent des images topographiques, avec un même champ imagé ($2 \times 2 \mu\text{m}^2$), obtenues par le Microscope à Force Atomique (AFM) de la rugosité induite en fond de cratère [19] pour deux différentes analyses SIMS (1.5 keV, 49.1°) et (3.5 keV, 38.7°), chaque image correspond à une profondeur de pulvérisation.

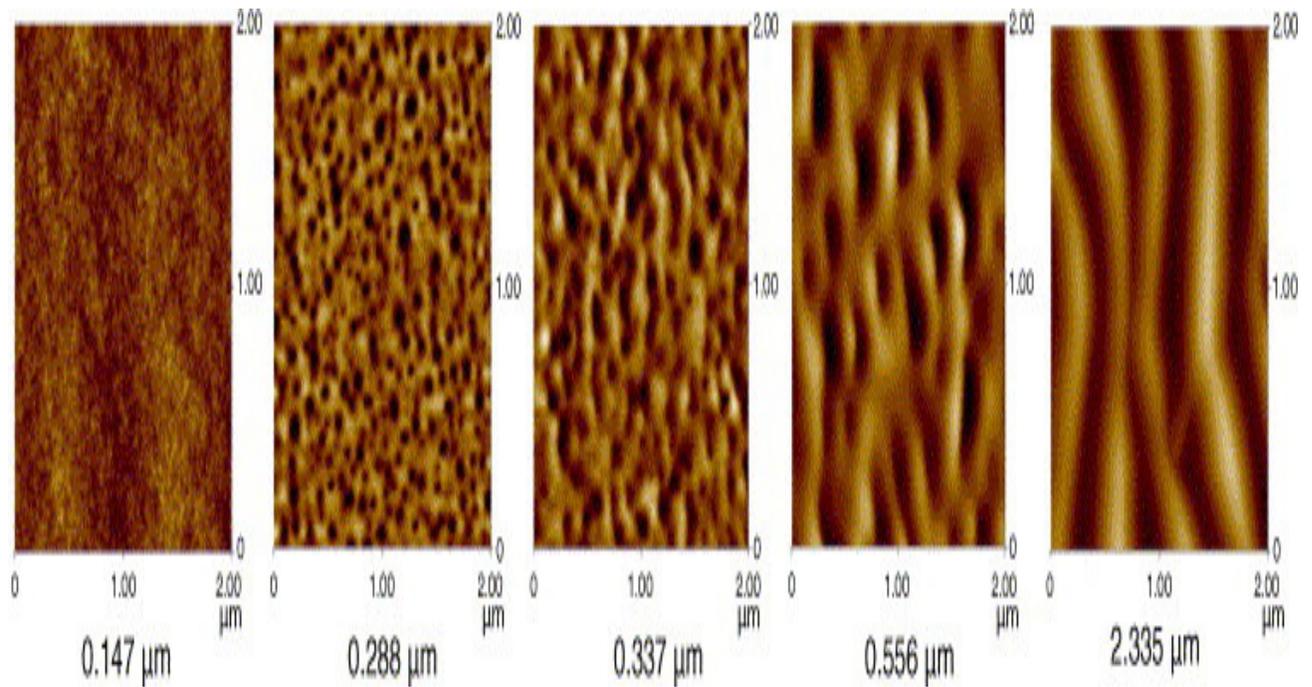


Figure 13 : Image AFM ($2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$) au fond de cratère en fonction de la profondeur après l'analyse SIMS (1.5 keV , 49.1°). Le faisceau incident est perpendiculaire aux ondulations. Les amplitudes des ondulations sont respectivement (de gauche à droite) : 2 nm , 50 nm , 50 nm , 50 nm and 300 nm . D'après [19].

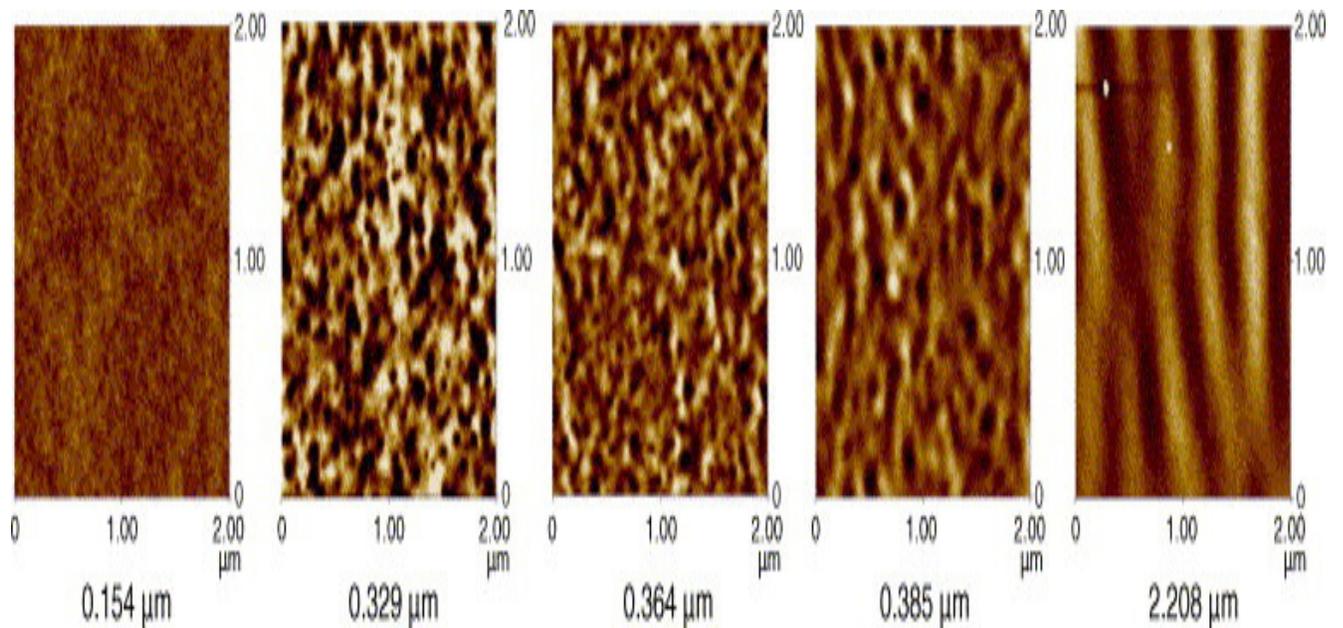


Figure 14 : Image AFM ($2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$) au fond de cratère en fonction de la profondeur après l'analyse SIMS (3.5 keV , 38.7°). Le faisceau incident est perpendiculaire aux ondulations. Les amplitudes des ondulations sont respectivement (de gauche à droite) : 2 nm , 2 nm , 5 nm , 5 nm and 5 nm . D'après [19].

Dans un premier temps la surface de l'échantillon est lisse jusqu'à une certaine profondeur (0.228 μm pour le premier échantillon et 0.329 μm pour le deuxième échantillon), puis elle commence à être rigoureuse ; apparition des ondulations et des vagues sous formes d'ondes rectilignes relativement régulières, qui se développent suivant une direction perpendiculaire au vecteur d'onde. Nous constatons que la rugosité commence à apparaître d'autant plus tôt que l'angle d'incidence augmente, il semble que la rugosité se développe quand la quantité d'oxygène incorporée diminue. A partir d'une profondeur (de 2.335 μm pour le 1^{er} échantillon et 2.208 μm pour le 2^e échantillon) correspondant à la profondeur d'érosion critique. Les images indiquent la présence d'une topographie de section sinusoïdale perpendiculaire au vecteur d'onde qui est aligné avec le faisceau incident. Nous observons que la longueur d'onde augmente avec l'énergie d'impact et avec la profondeur érodée. Quand la profondeur d'érosion augmente, la rugosité se développe d'avantage en certains points pour donner naissances à des triangles isocèles [19, 20].

Hofmann [21, 22] a proposé un modèle MRI (*Mixing Roughness Information Depth*) qui tient en compte l'apparition de la rugosité, ce modèle est basé sur les trois phénomènes : le mixage collisionnel, la rugosité induite et la profondeur d'échappement des ions secondaires. La nouvelle DRF contient alors des paramètres physiques qui déterminent la réponse impulsionnelle du système en terme de profil mesuré. Ces paramètres peuvent être divisés en trois catégories : changement de la surface (mixage, pulvérisation, etc.), changement de la topographie de la surface (rugosité) et la profondeur d'échappement.

L'écart type total σ_{tot} qui donne une estimation de la résolution prend donc la forme quadratique : $\sigma_{\text{tot}}^2 = \sigma_s^2 + \sigma_r^2$, où σ_s et σ_r sont respectivement la largeur du profil sans rugosité et la largeur du profil avec rugosité. Dans ces conditions, l'écart-type de la DRF sans rugosité σ_g va être remplacé par σ_{tot} qui contient l'effet du mixage collisionnel et celui de la rugosité.

CONCLUSION

Dans ce chapitre, une étude détaillée de la fonction de résolution en profondeur (DRF) a été menée depuis sa génération par l'analyse d'un delta-dopage jusqu'au son fittage par une forme analytique. Cette fonction de résolution constitue un moyen très objectif d'évaluation de la résolution en profondeur par le calcul de son moment d'ordre 2. Dans notre travail, la fonction de résolution en profondeur a été déterminée dans le cas du bore dans le silicium, analysé par un faisceau d'oxygène à incidence oblique avec l'analyseur ionique à secteur magnétique CAMECA Ims-6f. Après, cette fonction a été modélisée par une expression analytique résultante de la convolution d'une gaussienne avec une double exponentielle.

Nous avons vu que dans la gamme des hautes énergies, la source principale de dégradation de la résolution en profondeur est de nature balistique, le mixage collisionnel. Le comportement des trois paramètres de fittage en fonction de l'énergie a été déterminé et exprimé en fonction de la profondeur de pénétration des ions primaires afin de permettre les comparaisons avec d'autres résultats obtenus par d'autres appareils. Deux des trois paramètres (la décroissance exponentielle et l'écart-type de la gaussienne) de la DRF ont montré un comportement linéaire en fonction de l'énergie des ions primaires donc avec leur profondeur de pénétration, alors que le troisième (la croissance exponentielle) a montré un comportement chaotique. Nous avons montré que le paramètre qui caractérise le mixage collisionnel est la décroissance exponentielle tant que l'énergie de bombardement n'est pas trop faible.

Dans la gamme des basses énergies des ions primaires, le mixage collisionnel n'est plus le phénomène prépondérant, d'autres phénomènes entrent en jeu et contribuent à la dégradation de la résolution en profondeur, parmi lesquels la rugosité au fond de cratère a été considérée. Dans ces conditions la DRF n'est plus constante, mais devient variable en fonction de la profondeur analysée.

Cette étude nous permet maintenant d'aborder la déconvolution des profils en étant conscient des propriétés de la fonction de résolution et son domaine de validité. En particulier, à basse énergie la déconvolution doit être interprétée avec circonspection, notamment dans cette gamme le bruit de fond présent dans les profils doit inspirer toute la prudence.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **Prudon G.**, *Etude de la sensibilité et de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires : Application à la silice et au silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1990, 299 p.
- [2] **Brice G.**, *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires. Mise au point d'une procédure de déconvolution et applications*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1997, 222 p.
- [3] **Pearson K.**, *On the systematic fitting of curves to observations and measurements*, Biometrika, 1902, Vol. 2, n° 1, pp. 1-23
- [4] **Herzel F., Ehwald K. E., Heunemann B., Kruger D., Kurps R., Ropke W. et Zeindl H. P.**, *Deconvolution of narrow Boron SIMS depth profiles in Si and SiGe*, Surface and Interface Analysis, 1995, Vol. 23, pp. 764-710
- [5] **Dowsett M. G., Rowlands G., Allen P. N., et Barlow R. D.**, *An analytic form for the SIMS response function measured from ultra-thin impurity layers*, Surface and Interface Analysis, 1994, Vol. 21, pp. 310-315
- [6] **Zalm P. C.**, *Ultra shallow doping profiling with SIMS*, Rep. Prog. Phys., 1995, Vol. 58, pp. 1321-1374
- [7] **Littmark U. et Hofer W.**, *Recoil mixing in solids by energetic ion beams*, Nuclear Instruments and methods, 1980, Vol. 168, pp. 329-342
- [8] **Dupuy J. C., Prudent G., Dubois C., Warren P. et Dutartre D.**, *Depth resolution in SIMS study of boron delta-doping in epitaxial silicon*, Nuclear Instruments and method for physic Research, 1994, B85, pp. 379-382
- [9] **Meuris M. et Vandervost W.**, *On the effect of an oxygen beam in sputter depth profiling*, Journal of Vacuum Sciences and technology, 1991, Vol. A9, n°3, pp. 1482-1488
- [10] **Smirnov V. K., Simakin S. G., Potapov E. V. et Makarov V. V.**, *SIMS depth profiling of delta-doped layers in silicon*, Surface and interface analysis, 1996, Vol. 24, pp. 469-475
- [11] **Barlow R. D.**, *Redistribution of Ge in the SIMS altered layer during normal incidence O_2^+ bombardment of SiGe alloy material*, In: SIMS VIII, proceeding of the SIMS International Conference, 1991, A. Benninghoven ed. New York: Wiley, 1992, pp. 359-362
- [12] **Dowsett M. G. et Barlow R. D.**, *Characterization of sharp interfaces and delta doped layers in semiconductors using secondary ion mass spectrometry*, Analytica Chimica Acta, 1994, Vol. 297, pp. 253-275

- [13] **Clegg J.B. et Gale I. G.**, *SIMS profile simulation using delta function distributions*, Surface and Interface Analysis, 1991, Vol. 17, pp. 190-196
- [14] **Littmark U. et Hofer W.**, *The theory of recoil mixing in solids*, In: Topics in current physics, Ed; Springer-Verlag, Berlin, 1984, pp. 159-200
- [15] **Bedheka R., Wadsworth M., Van Den Berg J. A. et Armour D. G.**, *Theoretical calculations of dilute B profiles in Si using IMPETUS*, In: International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry 1993: Yokohama, Japan (SIMS IX), A. Benninghoven ed. New York: Wiley, 1994, pp. 219-222
- [16] **Turner J. E., Keller H. et Mars D. E.**, *High depth resolution SIMS by deconvolution of the instrumental function*, In: International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry 1989: California, USA (SIMS VII), A. Benninghoven ed. New York: Wiley, 1990, pp. 95-98
- [17] **Elst K., Vandervorst W. et Alay J.**, *Influence of oxygen on the formation of ripples on Si*, Journal of Vacuum Sciences B, 1993, Vol. 11 n° 6, pp. 1968-1978
- [18] **Wittmaack K.**, *Effect of surface roughening on secondary ion yields and erosion rates of silicon subject to oblique oxygen bombardment*, Journal of Vacuum Sciences A, 1990, Vol. 8 n° 3, pp. 2246-2250
- [19] **Fares B.**, *Caractérisation par spectrométrie de masse des ions secondaires des zones actives du CMOS ultime: étude de la rugosité en fond de cratère et ses conséquences sur la vitesse d'érosion et sur la résolution en profondeur*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2004, 132 p.
- [20] **Fares B., Gautier B., Holliger Ph., Baboux N., Prudon G. et Dupuy J. C.**, *Surface roughening and erosion rate change at low energy SIMS depth profiling of silicon during oblique O_2^+ bombardment*, Appl. Surf. Sci., 2004, 231/232, pp. 136-140.
- [21] **Hoffman S.**, *Profile reconstruction in sputter depth profiling*, Thin solid films, 2001, pp. 336-342
- [22] **Hoffman S.**, *Ultimate depth resolution and profile reconstruction in sputter depth profiling*, Surface and Interface Analysis, 2000, pp. 228-236

Sommaire du chapitre 3

LA DECONVOLUTION : ETAT DE L'ART ET METHODES

Introduction	64
1. La convolution	65
1.1. Etablissement de la convolution dans le signal SIMS	65
1.2. Rappels théoriques sur la convolution	66
1.2.1. Définition mathématique	66
1.2.2. Linéarité et invariance	66
1.2.3. Stabilité	67
1.2.4. Propriétés du produit de convolution	67
2. La déconvolution dans le domaine continu	67
2.1. Les différents problèmes de la déconvolution	67
2.2. Classification des méthodes de déconvolution	68
2.3. La déconvolution continue en absence du bruit	68
2.3.1. Existence de l'inverse de convolution	69
2.3.2. Non existence de l'inverse de convolution : solution principale	69
2.4. La déconvolution continue en présence du bruit	70
2.4.1. Définition et sources de bruit	70
2.4.2. Différents types de bruit	70
2.4.3. Rapport signal sur bruit	72
2.4.4. Le bruit dans l'analyse SIMS	72
2.4.5. L'équation de convolution en présence du bruit	72
2.4.6. Résolution de l'équation de convolution en présence du bruit : filtrage de Wiener	73
3. La déconvolution dans le domaine discret	75
3.1. Système discret	75
3.2. Réponse impulsionnelle	75
3.3. Convolution discrète	76
3.4. Modélisation matricielle de la convolution	76
3.5. Résolution de l'équation de convolution discrète	78
3.5.1. Cas non bruité	78
3.5.2. Cas bruité	79
4. Méthodes non itératives de la deconvolution	79
4.1. Filtrage inverse et solution des moindres carrés	79
4.2. Filtrage au sens des moindres carrés sous contraintes : Régularisation	80
4.2.1. Philosophie de la régularisation	81
4.2.2. Différentes approches de la régularisation	81
4.2.3. Interprétation géométrique de la régularisation	84
4.2.4. Choix de l'opérateur de régularisation	85
4.2.5. Détermination du paramètre de régularisation	85
4.3. Introduction du modèle de solution dans la régularisation de Tikhonov-Miller	87
5. Méthodes itératives de la déconvolution	89
5.1. Les contraintes dures	89
5.2. L'algorithme de Van Cittert et ses premiers prolongements	91
5.2.1. Introduction des contraintes dures dans l'algorithme de Van Cittert	91

5.2.2.	Introduction de la régularisation de Miller dans l'algorithme de Van-Citter contraint. Approche de Brice	91
5.3.	La régularisation de Tikhinov-Miller avec comme modèle de solution un signal pré- déconvolué. Approche de Mancina	92
6.	Déconvolution sans fonction de résolution	92
6.1.	La déconvolution aveugle « myope »	92
6.2.	La déconvolution partielle	93
	Conclusion	94
	Bibliographie	95

Chapitre 3

LA DECONVOLUTION : ETAT DE L'ART ET METHODES

INTRODUCTION

Nous avons vu, dans le premier chapitre, que l'analyse SIMS atteint des limites physiques qui rendent difficilement envisageable d'autres améliorations techniques de l'appareillage et de la qualité des mesures. Pour obtenir un gain meilleur en résolution, il faut disposer de grands moyens instrumentaux dont le coût est très exorbitant. Diminuer l'énergie d'impact des ions primaires implique un réglage minutieux du faisceau, sa stabilité et sa focalisation deviennent très capricieuses, conduisant fréquemment à la malformation des cratères avec la naissance de rugosités. En plus, la réduction du taux de pulvérisation inhérent à la faible énergie incidente rend les temps d'analyse très longs suite à la diminution de la vitesse d'érosion de l'échantillon.

La déconvolution se propose d'améliorer la résolution en profondeur au-delà de ses limites physiques à partir d'une mesure effectuée d'une manière routinière, ainsi que la restauration des informations perdues lors de cette mesure. Il s'agit de rétablir autant que possible les véritables dimensions des structures géométriques modifiées par l'analyse SIMS. Nous verrons cependant que l'utilisation d'une telle méthode suppose une hypothèse d'invariance en profondeur de la fonction de résolution et suppose a priori la réponse impulsionnelle connue à l'avance. De plus, s'il est évident qu'une déconvolution ne rendra pas excellent un instrument (ou plutôt un couple instrument / conditions d'érosion) de mauvaise qualité, on peut affiner la résolution physique de celui-ci. En d'autres termes, mieux avoir un « bon instrument » qu'à corriger un mauvais ! En aucun cas, il n'est souhaitable d'appliquer la déconvolution à un profil de concentration acquis dans de mauvaises conditions. La qualité et la fiabilité de la mesure de départ reste la condition essentielle pour un bon résultat, tout comme l'amélioration de l'instrumentation reste une voie privilégiée vers l'amélioration ultime de la résolution en profondeur. La déconvolution vient s'ajouter aux performances instrumentales et permet de tirer le maximum de résolution d'un profil expérimental.

Lors de la mise en oeuvre de la déconvolution, il faut prendre garde à chaque élément intervenant dans les calculs, car la déconvolution est une opération délicate qu'il ne faut pas mettre en oeuvre sans précautions, sous peine d'obtenir des résultats aberrants, comme des structures inexistantes dans la réalité ou des résultats qui sont mathématiquement correct, mais physiquement irréalistes. Ce qui nécessite de bien contrôler le processus de restitution et d'en comprendre les mécanismes.

Ce chapitre fait appel aux compétences de deux domaines, le traitement de signal et la caractérisation des matériaux par SIMS. Dont lequel, nous allons exposer les principes de

la déconvolution afin de dégager les méthodes de calcul qui nous permettront de traiter le signal SIMS, ainsi que de déceler leurs limites pour mieux situer l'algorithme utilisé dans notre travail dans la masse des algorithmes existants.

Le problème de la déconvolution d'un signal peut être posé dans un premier temps en des termes purement mathématiques, sans tenir compte des notions de la mesure, d'approximations, d'erreurs de mesure et de bruit, essentielles à la transposition du problème vers des applications concrètes. Les méthodes que nous allons exposer par la suite sont des méthodes générales de traitement du signal, que nous transposerons plus tard au cas très particulier de l'analyse SIMS. Dans ce chapitre, nous resterons donc attachés à des notions générales, sans rapport direct avec l'analyse ionique.

Avant d'entrer dans le vif du sujet, il est important de bien comprendre ce qui nous mène à mettre en œuvre une déconvolution. Une telle opération implique qu'il y'ait d'abord un signal ayant subi une convolution. Ce signal est inconnu, et en général on ne dispose que du résultat de la convolution de ce signal, mais aussi, partiellement ou complètement, du signal convoluant. Ce qui nous amène à étudier la convolution, afin d'utiliser par la suite au mieux ses propriétés.

1. LA CONVOLUTION

1.1. Etablissement de la convolution dans le signal SIMS

Dans le chapitre 1, nous avons vu que l'acquisition d'un profil de concentration d'un élément donné dans une matrice donnée aboutisse à la donnée d'une intensité ionique secondaire $I(t)$ en fonction du temps, constituée d'un nombre donné de coups par secondes. Par la quantification, nous cherchons à connaître le profil de concentration de cet élément en fonction de la profondeur sous la surface de l'échantillon $C(z)$ en at/cm^3 .

L'équation générale que nous cherchons devra donc relier ces deux fonctions:

$$I(t) = H [C(z)] + b(t) \quad (1)$$

Où H est la réponse impulsionnelle qui caractérise la fonction de résolution en profondeur, $b(t)$ représente le bruit qui s'ajoute aléatoirement au signal et dont l'origine est indépendant des processus décrits par l'opérateur H . Ce vecteur b pourra contenir les fluctuations aléatoires de la source d'ions primaires et le bruit Poissonien du multiplicateur d'électrons. L'opérateur H inclut plusieurs mécanismes :

- Déformation du profil interne initial par les phénomènes de mixage collisionnel, apparition ou existence d'une rugosité de surface, défaut de planéité du cratère, diffusion exaltée par la création de défauts du bombardement, profondeur d'échappement des ions, etc.
- Incorporation des ions primaires dans la cible et tous les phénomènes associés : ségrégation, swelling, etc.

D'une manière générale, le problème de la déconvolution peut se ramener au cas simple de la détermination d'un signal modifié par un processus linéaire et invariant H , c'est-à-dire la détermination du vecteur x tel que $y = H[x] + b$. Il sera donc possible de résoudre ce problème à condition de respecter le domaine de validité imposé par l'opérateur H . Pour mieux comprendre la philosophie de cette résolution, nous allons faire quelques rappels sur le produit de convolution.

1.2. Rappels théoriques sur la convolution

Le traitement numérique des signaux suppose la réalisation de certaines opérations telles que : la convolution, la corrélation, la transformée de Fourier, le filtrage, la décimation, l'interpolation des séquences, etc. Par exemple, la convolution s'avère un outil très pratique pour le calcul de la réponse d'un système numérique linéaire et invariant, défini par sa réponse impulsionnelle à une séquence quelconque appliquée à son entrée.

La convolution peut être physiquement définie comme l'effet que produit un instrument de mesure qui donne d'un phénomène non pas une image nette mais une image un peu floue. Par exemple, d'un point de vue optique, l'image d'un point net n'est jamais un point, mais une tâche. Cette tâche sera plus ou moins large selon la qualité de l'appareil. Dans un tel appareil, deux points rapprochés ne pourront donner deux images distinctes que s'ils sont éloignés l'un de l'autre d'une distance minimale qui définit le pouvoir séparateur.

1.2.1. Définition mathématique

Considérons un signal x , le signal d'entrée d'un système, y le signal de sortie et H le processus qui les relie. Ce processus peut représenter par exemple une mesure du signal $x(t)$ à travers un système de mesure, aboutissant à l'observation de $y(t)$. Dans le cas général H est un opérateur fonctionnel qui relie l'entrée x à la sortie y , par la relation :

$$y(t) = H[x(t)] \quad (2)$$

Cette définition n'a de sens que dans le cas des signaux d'énergie finie.

1.2.2. Linéarité et invariance

Le système représenté par H est dit linéaire s'il possède les propriétés d'additivité et d'homogénéités. La formulation mathématique de cette propriété est :

$$x(t) = \sum_{i=1}^n \lambda_i x_i(t) \Rightarrow H[x(t)] = \sum_{i=1}^n \lambda_i H[x_i(t)] \quad (3)$$

L'opérateur H est dit invariant (stationnaire) s'il vérifie :

$$y(t-\tau) = H[x(t-\tau)] \quad (4)$$

C'est-à-dire, l'opérateur H est indépendant de l'origine des temps.

H est appelé opérateur de convolution si les grandeurs d'entrée et de sortie sont fonction de la même variable indépendante, par exemple le temps.

Dans le domaine de l'analyse par SIMS l'intégrale de convolution fut utilisée pour la première fois par King et Tsong [1].

L'équation (2) s'écrit donc sous la forme d'une équation intégrale (équation (2) vue dans le chapitre 2) :

$$y(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(t-\tau) x(\tau) d\tau \quad (5)$$

L'opérateur H est exprimé ici à l'aide de la fonction $h(t, \tau)$ qui définit la réponse impulsionnelle du système linéaire à l'instant t lorsqu'une impulsion unique (d'aire unité) est appliquée à l'entrée à l'instant τ . On la note :

$$y(t) = h(t) * x(t) \quad (6)$$

La réponse impulsionnelle $h(t)$ et le signal d'entrée $x(t)$ interviennent de façon identique dans cette équation.

1.2.3. Stabilité

Si le signal d'entrée d'amplitude bornée produit un signal de sortie également d'amplitude bornée, le système est dit stable. La stabilité d'un système linéaire est un paramètre très important pour la mise en oeuvre de la déconvolution. Cependant, cette condition n'est pas toujours respectée, ce qui nécessite de modifier le système H pour le rendre stable permettant la mise en oeuvre de la déconvolution.

1.2.4. Propriétés du produit de convolution

Les cinq plus importantes propriétés du produit de convolution sont rappelées ci-dessous :

- a) Le produit de convolution est commutatif.
- b) Le produit de convolution est distributif par rapport à l'addition
- c) Le produit de convolution de deux fonctions du temps est une fonction du temps. De même, le produit de convolution de deux fonctions de la fréquence est une fonction de la fréquence.
- d) L'élément neutre de la convolution est l'impulsion de Dirac.
- e) La propriété la plus intéressante du produit de convolution est dans l'espace de Fourier : son image est un produit simple. Si $X(f)$, $Y(f)$ et $H(f)$ désignent respectivement les transformées de Fourier de $x(t)$, $y(t)$ et $h(t)$, alors on peut écrire :

$$y(t) = h(t) * x(t) \Leftrightarrow Y(f) = H(f) \cdot X(f) \quad (7)$$

Un produit de convolution dans l'espace des temps devient donc un produit de fonctions dans l'espace des fréquences et vice versa. Cette propriété importante permet la mise en oeuvre de nombreuses techniques de déconvolution dans l'espace de Fourier. On peut donc distinguer des techniques de déconvolution dans l'espace direct, et d'autres dans l'espace de Fourier.

2. LA DECONVOLUTION DANS LE DOMAINE CONTINU

La déconvolution est le processus de restauration d'un signal dégradé par filtrage linéaire et invariant. La déconvolution était une opération qui, il y a quelques années, nécessitait des temps de calculs très longs. Ceci constituait un argument essentiel dans le refus de l'emploi de cette technique. Aujourd'hui avec l'avènement des techniques numériques et le développement toujours plus performant des moyens de calcul, cette technique est classée au même rang que de nombreuses autres techniques de traitement du signal couramment employées.

2.1. Les différents problèmes de la déconvolution

La déconvolution peut se classer en trois types de problèmes :

- Connaissant les signaux d'entrée et de sortie, nous voulons déterminer la réponse impulsionnelle du système. Cette opération est généralement nommée « identification de

système linéaire ». Ceci est fréquemment rencontré dans la commande automatique des processus industriels.

- L'extrapolation dans l'espace des temps d'un signal. En effet, si nous considérons un signal $x(t)$, de durée finie, connu sur un intervalle T , l'observation $y(t)$ de ce signal est le produit du signal $x(t)$ par une fenêtre d'observation $w(t)$. L'extrapolation donc se ramène à une déconvolution dans l'espace des fréquences.
- Connaissant le signal de sortie et la réponse impulsionnelle du système nous voulons connaître le signal d'entrée. Cette opération correspond au problème général de la mesure. Cette mesure, qui dépend des propriétés de l'appareil de mesure, est le résultat de la convolution de la grandeur à mesurer et la fonction de transfert du système de mesure.

C'est bien le premier et le troisième problème qui correspondent au problème de l'analyse SIMS, l'identification du système (problème 1), la détermination du signal original avant la mesure c'est bien notre objectif (problème 3).

2.2. Classification des méthodes de déconvolution

Le premier réflexe consiste à séparer les méthodes utilisées en méthodes non-itératives et en méthodes itératives. Une sous classification permettrait ensuite de séparer les techniques traitant les signaux dans leur globalité, que nous qualifierons de techniques globales, des techniques traitant les signaux décomposés selon une analyse multirésolution, que nous nommerons techniques à base de multirésolution (chapitre 4). Un niveau de classification plus fin nous amènera, ensuite, à séparer les techniques faisant appel aux caractéristiques globales des signaux traités des techniques faisant appel aux caractéristiques locales des signaux considérés.

Parmi les méthodes non-itératives nous rappellerons les méthodes, aujourd'hui, anciennes du filtrage inverse, du filtre de Wiener et du filtrage sous contraintes au sens des moindres carrés. Pour les méthodes itératives nous exposerons la méthode proposée par Van Cittert en 1931 [2]. Nous évoquerons ensuite les différentes techniques itératives avec contraintes qui peuvent être considérés comme des techniques de prolongements de la méthode de Van-Cittert. L'utilisation de l'information a priori sur le signal cherché nous conduit à définir des contraintes, globales ou locales, sur la solution à notre problème. Ces contraintes peuvent être de deux types, il peut s'agir de contraintes dites « dures » que nous retrouverons, par exemple, lors de l'évocation des ensembles convexes auxquels peut appartenir la solution, ou encore des contraintes dites « douces » que nous rencontrons dans les techniques de régularisation. La mise en œuvre de ces contraintes fait partie intégrante des techniques que nous aurons l'occasion d'exposer en détail tout au long de ce chapitre [4].

2.3. La déconvolution continue en absence du bruit

La déconvolution est une méthode de résolution du problème inverse qui, se pose en ces termes : connaissant le signal de sortie y et l'opérateur linéaire invariant H , est-il possible de retrouver le signal d'entrée x ? Dans l'espace direct, la forme de la convolution (intégrale) rend la déconvolution difficile à se mettre en œuvre. Par contre d'après la propriété (e) de la convolution (équation (7)), la transformée de Fourier donne :

$$Y(f) = H(f) \cdot X(f) \Leftrightarrow X(f) = \frac{Y(f)}{H(f)} \quad (8)$$

Par le calcul de la transformée de Fourier inverse on obtient le signal original $x(t)$:

$$x(t) = \text{TF}^{-1} \left[\frac{Y(f)}{H(f)} \right] \quad (9)$$

Cette solution est formelle, car l'équation (9) nécessite l'existence de *l'inverse de convolution* $H^{-1}(f)$.

2.3.1. Existence de l'inverse de convolution

L'inverse de convolution existe s'il vérifie la relation :

$$H^{*-1}(f) \cdot H(f) = 1 \quad (10)$$

Dans le domaine temporel, l'équation précédente s'écrit :

$$h(t)^{*-1} * h(t) = \delta(t) \quad (11)$$

Où $h(t)^{*-1}$ représente l'inverse de convolution de $h(t)$. Donc l'équation (10) nous donne :

$$H^{*-1}(f) = \frac{1}{H(f)} \quad (12)$$

Il est clair que l'inverse de convolution existe si $H(f)$ ne s'annule pas, c'est-à-dire $H(f)$ est une distribution tempérée satisfaisant les deux conditions suivantes [3] :

- Le module de la transformée de Fourier de l'inverse de convolution est borné :

$$|H^{*-1}(f)| < \infty \quad \forall f \in \mathbb{R} \quad (13)$$

- $H(f)$ est à décroissance lente, c'est-à-dire :

$$|H(f)| \approx |f|^{-\alpha} \text{ quand } f \rightarrow \infty, \quad \alpha \in \mathbb{N}^* \quad (14)$$

2.3.2. Non existence de l'inverse de convolution : solution principale

Si l'inverse de convolution n'existe pas, la solution principale de l'équation de convolution est définie comme la solution sur l'intervalle où le module de $H(f)$ ne s'annule pas [3, 4].

Si $H(f)$ s'annule parfaitement à partir d'une fréquence f_c , alors l'équation (12) n'est pas définie au-delà de cette fréquence de coupure. Dans ce cas, on peut définir une fonction fenêtre dans l'espace des fréquences, de largeur $2f_c$, notée $W(f)$, son équivalent dans l'espace des temps est $w(t)$.

$$W(f) = \begin{cases} 1 & \text{si } |f| < f_c \\ 0 & \text{si } |f| \geq f_c \end{cases} \quad (15)$$

La solution principale est alors définie par :

$$X_p(f) = \frac{Y(f)}{H(f)} W(f) \Rightarrow x_p(t) = \text{TF}^{-1} \left\{ \frac{Y(f)}{H(f)} W(f) \right\} = x(t) * w(t) \quad (16)$$

$$\text{Avec } w(t) = \frac{\sin(2\pi f_c t)}{\pi t}$$

Cette solution représente une solution approchée du problème de la déconvolution [4].

2.4. La déconvolution continue en présence du bruit

2.4.1. Définition et sources de bruit

Le bruit est un terme générique permettant de définir des variations aléatoires ou indésirables d'une grandeur, par exemple, les parasites sur une mesure de tension. Le bruit est considéré comme une nuisance.

Toute une mesure, quelque soit sa nature, est entachée de divers signaux parasites considérés ensemble comme le bruit de mesure. En effet, dans le domaine de l'électronique, le bruit définit les signaux aléatoires et non désirés, voire parasites, se superposant aux signaux utiles. Dans la plupart des cas, il est très difficile, voire impossible de dissocier ce qui dans le signal mesuré appartient au signal utile, et ce qui appartient au bruit. Sa présence a presque toujours comme conséquence de masquer plus ou moins de détails dans le signal original, modifiant ainsi ses caractéristiques temporelles et fréquentielles (limitant l'intégrité et l'intelligibilité du signal sur lequel on cherche à connaître le maximum d'informations).

Les causes physiques des bruits sont variées, mais à l'origine on a toujours un phénomène discontinu. Ce sont les propriétés statistiques du phénomène qui vont permettre d'évaluer le bruit associé. Il peut être d'origine interne au processus de mesure (bruit électronique ou bruit de fond) ou externe, essentiellement composé par la capture d'un signal parasite en même temps que le signal utile. Dans de nombreux cas physiques, le bruit est produit par des phénomènes aléatoires indépendants de probabilité constante.

L'introduction du bruit dans le problème de la déconvolution donne tout son sens physique au problème, en même temps il est l'origine de la plupart des difficultés de sa mise en œuvre. En effet, dans le domaine SIMS, la plupart des méthodes de déconvolution proposées ont prouvé leurs limites face au bruit. Dans ce sens, nous verrons que séparer le signal du bruit est très délicat car la distinction entre signal et bruit reste subjectif et dépend des critères propres à chaque utilisateur : ce qui n'est que du bruit pour certains pourra dans d'autres considéré comme un signal de la plus haute importance !

2.4.2. Différents types de bruit

• Répartition fréquentielle du bruit

Dans cette section nous allons détailler les types standard de bruit qui sont le bruit blanc et le bruit rose. Une description assez exhaustive des différentes répartitions fréquentielles de bruit peut être trouvée dans la référence [5].

❖ Le bruit blanc

C'est le bruit le plus répandu en traitement de signal et largement utilisé dans les modélisations et les simulations, car il correspond au cas le plus simple. Un bruit blanc (par analogie avec la lumière blanche) possède une densité spectrale de puissance constante sur un support de fréquences infini. C'est-à-dire, un bruit blanc contient toutes les fréquences possibles avec la même puissance. Réellement, un bruit blanc n'existe pas car aucun signal ne

possède un spectre à support infini, mais l'hypothèse de bruit blanc sera souvent rencontrée par souci de simplification.

❖ Le bruit coloré (rose)

Un bruit est dit rose si sa représentation fréquentielle est constante sur un intervalle de fréquence assez étendu mais non infini, ce qui correspond mieux à la réalité. La dénomination de bruit rose vient d'une analogie avec la lumière rouge (qui possède les plus basses fréquences).

● *Répartition probabiliste du bruit*

Pour simuler ou analyser des signaux réels, d'autres modèles, basés sur la densité de probabilité du bruit (qui est toujours normée), peuvent être considérés. Ainsi, en particulier, deux modèles de bruit sont assez répandus :

❖ Le bruit gaussien

Un bruit est dit gaussien si sa densité de probabilité possède une répartition de type gaussien caractérisée par une valeur moyenne m et un écart-type σ . La loi de cette répartition s'écrit :

$$p(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(\beta-m)^2}{2\sigma^2}} \quad (17)$$

En traitement du signal, l'hypothèse prise pour le bruit est le caractère gaussien pour les raisons suivantes :

- ✓ La somme de plusieurs processus aléatoires quelconques tend vers un processus gaussien [6].
- ✓ Tous les moments d'une variable aléatoire gaussienne peuvent être calculés à partir des moments du premier et du second ordre.

❖ Le bruit poissonien

Typiquement, on rencontre des variables aléatoires poissoniennes dans tous les phénomènes de comptage. En effet, le bruit poissonien est utilisé lorsqu'on compte le nombre d'événements dans un intervalle de temps donné et suppose que tous les événements sont indépendants les uns des autres, la loi de Poisson est alors par définition une loi discrète.

Par contre dans le cas du bruit gaussien on observe l'évolution de la variable aléatoire en fonction du temps. Le comportement des variables aléatoires poissoniennes est alors bien adapté à celui des ions secondaires en analyse SIMS. La densité de probabilité d'un bruit poissonien est donnée par :

$$p(\beta) = \frac{\lambda^\beta}{\beta!} e^{-\lambda} \quad \beta \in \mathbb{N} \quad (18)$$

Où λ est la variance. La probabilité d'avoir n particules pendant une durée T est :

$$P_{n,T} = \frac{(KT)^n}{n!} e^{-KT} \quad (19)$$

Où K est le paramètre de Poisson (c'est la fréquence moyenne de la loi de Poisson), lorsque K devient grand la loi de poisson tend vers une loi de Gauss. $1/K$ traduit donc le nombre moyen d'événements par unité de temps.

2.4.3. Rapport signal sur bruit

Le rapport signal sur bruit (SNR pour *Signal to Noise Ratio*) est une caractéristique de la dégradation d'un signal, par définition informatif, par un bruit non informatif. C'est un moyen pour caractériser des diverses méthodes de traitement des signaux. Exprimé en décibel dB, le SNR est défini comme le rapport de la puissance du signal y et de la puissance du bruit b exprimé de la manière suivante :

$$\text{SNR (dB)} = 10 \log_{10} \left(\frac{\|y\|^2}{\|b\|^2} \right) \quad (20)$$

2.4.4. Le bruit dans l'analyse SIMS

Il existe deux théories de la source de bruit dans l'analyse SIMS :

Les spécialistes du traitement du signal considèrent que le bruit résulte du système de mesure des ions secondaires : nature statistique de l'émission ionique secondaire (phénomène aléatoire), bruit électronique dans la chaîne de mesure. En effet, le signal SIMS étant recueilli au moyen d'un compteur d'événement discret, on peut penser que le bruit qui se superpose à la mesure est un bruit de comptage de type Poissonien. Ce bruit de comptage pur (erreur due à la non détection, où au contraire à la détection erronée d'un ion) doit être très faible, mais il existe également un bruit, souvent rencontré en fin de profil, correspondant à la détection aléatoire d'un atome d'impureté présent « accidentellement » dans la matrice, ou provenant de la répulvérisation d'atomes d'impuretés présents sur les lentilles, ce bruit en fin du profil est *additif*.

Alors que les spécialistes de l'analyse SIMS (physiciens) considèrent, en plus, une autre source de bruit intervenant avant l'entrée du système de mesure liée aux variations du courant primaire. L'influence de la variation du courant primaire est plus difficile à situer, car le courant primaire agit à la fois sur la densité de dommages déposée et sur la quantité d'ions pulvérisés. La concentration de la surface instantanée est le résultat d'une intégration de l'énergie (les variations du courant primaire ont donc peu d'influence), alors que le nombre d'atomes pulvérisés est proportionnel au courant primaire quasi-instantané. Donc la fluctuation du courant primaire est introduite dans la forme de la DRF [7].

2.4.5. L'équation de convolution en présence du bruit

Dans le cas le plus fréquent, le système linéaire qui dégrade le signal source $x(t)$ est un filtre passe-bas. La forte atténuation des hautes fréquences de ce signal, rend le bruit d'observation non négligeable. Ce bruit par hypothèse additif, est introduit par les capteurs et circuits électroniques d'amplification. Le système en présence de ce bruit additif, peut être représenté par la Figure 1 (a) et (b).

L'équation régissant ce système s'écrit donc sous la forme :

$$y_b(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(t - \tau) x(\tau) d\tau + b(t) \quad (21)$$

Où $b(t)$ est le bruit qui se superpose à la mesure du signal utile. On peut réécrire cette équation sous son formalisme simplifié :

$$y_b(t) = h(t)*x(t) + b(t) = y(t) + b(t) \quad (22)$$

Où $y_b(t)$ est le signal mesuré bruité et $y(t)$ est le signal mesuré pur sans bruit.

Le bruit $b(t)$ est souvent large bande, il peut alors être modélisé par un bruit blanc. Dans le cas où le bruit s'ajoute au signal source recherché, avant son filtrage par le système linéaire, le problème se ramène toujours au cas de l'équation (22), ceci est justifié par le développement suivant :

$$x_b(t) = x(t) + b(t) \quad (23)$$

Où $x_b(t)$ est le signal d'entrée bruité. Le signal mesuré est donc :

$$y_b(t) = h(t) * x_b(t) = h(t) * [x(t) + b(t)] = h(t) * x(t) + h(t) * b(t) \Leftrightarrow y_b(t) = y(t) + b'(t),$$

avec $b'(t) = h(t)*b(t)$, la convolution du bruit avec la fonction de transfert donne toujours un bruit.

Cependant, dans certains cas de figures, le signal source $x(t)$ est également soumis à un bruit mais multiplicatif $b_m(t)$, dans ce cas le bruit ne peut être dissocié du signal source $x(t)$ dans le problème de déconvolution, car il en fait partie d'une manière intégrante (Figure 1 (c)). Dans ces conditions une procédure de débruitage a priori est nécessaire avant la mise en œuvre d'une procédure de déconvolution, autrement le résultat va être aberrant. Ce point est le cœur de notre traitement numérique du signal SIMS, une étude plus exhaustive sera détaillée dans le prochain chapitre.

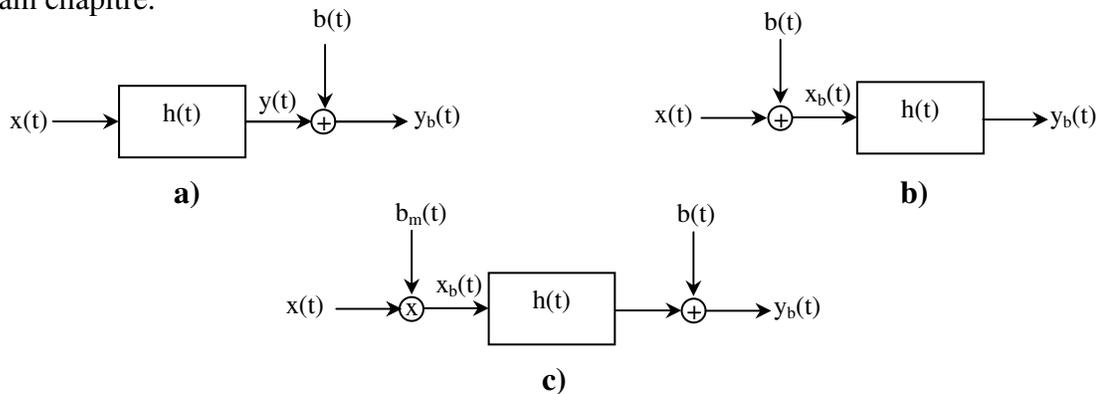


Figure 1 : Système linéaire et invariant en présence de :

- a) Bruit additif à la sortie du système
- b) Bruit additif à l'entrée du système
- c) Bruit multiplicatif et de bruit additif.

2.4.6. Résolution de l'équation de convolution en présence du bruit : filtrage de Wiener

Dans le cas où le bruit est absent dans l'équation de convolution, le terme $Y(f) / H(f)$ est strictement égale à $X(f)$ si l'inverse de convolution existe évidemment. Avec la présence du bruit, on pourrait effectuer une inversion également dans le domaine de Fourier, mais les données de départ ont changé. En effet, le système $h(t)$ est un filtre passe-bas et la multiplication par son inverse de convolution aura donc le même effet que l'application d'un filtre passe-haut, ce qui provoquera l'amplification des hautes fréquences du bruit avec pour résultat un signal noyé dans le bruit.

Dans l'espace de Fourier, l'équation (22) devient :

$$Y_b(f) = H(f).X(f) + B(f) = Y(f) + B(f) \quad (24)$$

En divisant les deux membres de cette équation par $H(f)$, on obtient :

$$\tilde{X}(f) = X(f) + \frac{B(f)}{H(f)} \quad (25)$$

La solution est donc l'application d'un filtre sur le signal déconvolué, tel que cette amplification des hautes fréquences sera minimisée. Il convient alors de trouver un filtre adéquat de telle sorte que l'on retrouve un profil déconvolué le plus proche possible du signal d'entrée $X(f)$ cherché. C'est-à-dire, on cherche le filtre $F(f)$ tel que :

$$X_{\text{est}}(f) = \frac{Y_b(f)}{H(f)} F(f) \quad (26)$$

$X_{\text{est}}(f)$ est l'estimée du signal cherché et qui doit être proche au sens des moindres carrés du signal réel $X(f)$, ce qui nous amène à minimiser la quantité :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |X_{\text{est}}(f) - X(f)|^2 df \quad (27)$$

En combinant l'équation (26) et l'équation (27), on obtient l'équation (28) qui s'écrit sous la forme :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{Y(f) + B(f)}{H(f)} F(f) - \frac{Y(f)}{H(f)} \right|^2 df \quad (28)$$

Le signal mesuré $Y(f)$ et le bruit $B(f)$ sont considérés totalement non corrélés, leurs produit croisés, c'est dire leur fonction d'intercorrélacion intégrée sur f donc est nulle, on a :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{|H(f)|^2} \left(|Y(f)|^2 |1 - F(f)|^2 + |B(f)|^2 |F(f)|^2 \right) df \quad (29)$$

Pour minimiser l'intégrale de l'équation (29), il suffit de le driver par rapport à $F(f)$ et d'égaliser la quantité obtenue à zéro. On a donc à résoudre l'équation :

$$|Y(f)|^2 |F(f) - 1| + |B(f)|^2 F(f) = 0 \quad (30)$$

Cette équation nous donne finalement le filtre optimal de Wiener :

$$F(f) = \frac{|Y(f)|^2}{|Y(f)|^2 + |B(f)|^2} \quad (31)$$

A noter que dans l'expression du filtre de Wiener, la fonction de résolution H n'apparaît pas d'une manière explicite, ce qui implique qu'il n'est pas nécessaire de la connaître pour définir le filtre optimal de Wiener. Cependant, il est nécessaire de discriminer la part du signal utile et la part du bruit, or cette discrimination constitue le cœur du problème de la déconvolution en présence du bruit. Puisque il est difficile d'obtenir l'expression du bruit dans les données mesurées, il est donc nécessaire d'employer des techniques d'estimation du bruit. Une première estimation consiste à calculer la densité spectrale de puissance du signal bruité, à partir du tracé

de la DSP, il est possible d'estimer grossièrement la part du bruit et la part du signal utile tout en essayant plusieurs rapports signal sur bruits (SNR) et de choisir celui qui donne une meilleure solution. Cependant, cette estimation reste relative, car pour les uns les parties du signal considérées comme faisant partie du bruit sont considérées le signal utile à part entière pour les autres. Donc cette méthode contient un certain degré de subjectivité. Nous verrons dans le prochain chapitre la décomposition du signal sur une base d'ondelette qui nous donne une estimation robuste et objective du bruit. Néanmoins, le filtre de Wiener est une méthode rapide et constitue toujours une première approximation de la solution du problème de déconvolution.

3. LA DECONVOLUTION DANS LE DOMAINE DISCRET

Le système d'analyse par SIMS est un système discret qui met en jeu des informations qui ne sont prises en compte qu'à des moments précis. En général, ces instants sont espacés d'une durée constante appelée période d'échantillonnage qui dépend de la vitesse d'érosion, le pas d'échantillonnage qui peut être obtenu est de quelques Å. Dans la plupart des cas, la valeur de ces informations est elle aussi échantillonnée.

L'automatique associée au système d'analyse met de plus en plus en jeu des systèmes échantillonnés. Cela est dû à l'informatisation qui permet de réaliser de nombreux calculs par un ordinateur, un microcontrôleur ou tout autre calculateur numérique. Un ordinateur, de par son principe, fonctionne de manière discontinue. Les informations ne peuvent donc pas être traitées en continu (contrairement à un montage analogique), il est nécessaire de développer un formalisme adapté à la transposition du problème dans un cadre numérique. Il se trouve que le formalisme matriciel se prête bien à la description du problème de la déconvolution sous forme discrète. C'est pour cela qu'il a fallu déterminer des méthodes d'analyse pour ces systèmes discrets.

3.1. Système discret

Un système discret répond à la définition générale des systèmes : ensemble qui introduit une relation entre ses signaux d'entrée et signaux de sortie. Ici, tous ces signaux sont discrets.

Un signal discret $y[n]$ peut être relié à un signal discret $x[n]$ par l'intermédiaire d'un système discret $h[n]$, dont les propriétés de linéarité et d'invariance, de causalité et de stabilité peuvent être définies de manière strictement identique à ce que nous avons déjà défini dans les sections précédentes.

3.2. Réponse impulsionnelle

La réponse impulsionnelle $h[n]$ est une caractéristique d'un système discret et est définie comme étant la réponse de ce système lorsque l'entrée est un signal impulsion (Dirac discret) $\delta[n]$. Défini par le symbole de Kronecker :

$$\delta[n] = \begin{cases} 1 & \text{pour } n = 0 \\ 0 & \text{pour } n \neq 0 \end{cases} \quad (32)$$

Les échantillons de la réponse impulsionnelle sont les coefficients de l'équation récurrente du système mise sous forme non récurrente.

Les avantages de la réponse impulsionnelle sont :

- ❖ Caractérisation complète du système.

- ❖ Permet de calculer la sortie du système discret pour des signaux d'entrée quelconques en utilisant la convolution linéaire de signaux discrets.

3.3. Convolution discrète

L'équation qui permet de calculer les échantillons du signal de sortie est :

$$y_n = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} x_i h_{n-i} = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} h_i x_{n-i}, \quad (33)$$

et constitue la convolution discrète.

Les données à traiter sont des signaux de longueur finie et définies sur un intervalle borné de points. Si N_x et N_h sont respectivement les longueurs du signal x et de la réponse impulsionnelle h , le produit de convolution y_n a une durée plus longue que les deux signaux qui le composent, sa longueur est : $N_y = N_x + N_h - 1$. L'équation (33) devient donc :

$$y_n = \sum_{i=1}^{N_x} x_i h_{n-i} = \sum_{i=1}^{N_h} h_i x_{n-i} \quad (34)$$

Pour les signaux bruités, nous ajoutant à l'équation (34) un vecteur du bruit b_n de longueur $N_b = N_y$. On écrira donc :

$$y_n = \sum_{i=1}^{N_x} x_i h_{n-i} + b_n \quad (35)$$

3.4. Modélisation matricielle de la convolution

Dans les cas que nous traitons, les signaux sont de dimensions finies, les systèmes linéaires invariants considérés auront les réponses impulsionnelles de longueur finie. Nous pouvons alors nous ramener à la notation matricielle suivante :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{b} \quad (36)$$

Ce formalisme matriciel sera par la suite utilisé dans tout ce qui suit.

Les vecteurs \mathbf{y} , \mathbf{x} , \mathbf{b} représentent respectivement le signal observé, le signal source et le bruit additif, et se présentent sous la forme suivante :

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ y_{N_x + N_h} \end{bmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_{N_x} \end{bmatrix} \quad \mathbf{h} = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ h_{N_h} \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ b_{N_x + N_h} \end{bmatrix} \quad (37)$$

La matrice \mathbf{H} construite à partir de la réponse impulsionnelle h du système linéaire s'écrit :

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} h_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ h_2 & h_1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & h_2 & h_1 & \dots & 0 \\ h_{N_h} & \dots & h_2 & h_1 & 0 \\ 0 & h_{N_h} & \dots & h_2 & h_1 \\ 0 & 0 & h_{N_h} & \dots & h_2 \\ 0 & 0 & 0 & h_{N_h} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N_h} \end{bmatrix} \quad (38)$$

Cette matrice comporte N_x lignes et N_y colonnes, c'est une matrice rectangulaire de **Toeplitz**.

A partir de l'équation (33), on voit que la longueur du signal de sortie est plus grande que celles des signaux de départ, de longueur $N_y = N_x + N_h$. Si on veut que nos signaux ne s'allongent pas lors de la convolution, on doit travailler avec la convolution circulaire.

On définit un produit de convolution circulaire (par comparaison avec le produit de convolution linéaire), initialement défini pour la convolution de deux fonctions périodiques de période égale à N échantillons, et noté :

$$y_n = \sum_{i=1}^N x_i h_{n-i} = \sum_{i=1}^N h_i x_{n-i} \quad (39)$$

La convolution circulaire nécessite donc que les deux vecteurs de départ soient de même longueur N et le produit de convolution sera aussi de longueur N qui sera supérieur à N_y . Le produit de convolution circulaire ne prend donc en compte qu'une période du signal périodique afin de rendre l'opération de convolution possible.

Le produit de convolution circulaire peut être utilisé à la place du produit de convolution linéaire dans le cas des fonctions de longueur finie (ce qui est presque toujours le cas puisque les ordinateurs ne peuvent manipuler que des vecteurs de taille limitée) à condition de prendre les précautions nécessaires.

Pour obtenir par convolution circulaire un résultat semblable à celui obtenu par la convolution linéaire, il suffit de supposer que tous les vecteurs ont une longueur égale à N , c'est-à-dire de remplir les vecteurs \mathbf{x} et \mathbf{h} par des zéros pour qu'ils atteignent cette longueur. Le résultat final de la convolution des vecteurs remplis par des zéros sera alors de longueur voulue pour qu'il n'y ait pas de distorsion du signal convolué.

Nous allons maintenant considérer le cas de la convolution circulaire qui nous sera très utile pour réduire le temps de calcul. Les vecteurs \mathbf{y} , \mathbf{x} , \mathbf{b} se présentent dans ce cas sous la forme suivante :

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ y_N \end{bmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_{N_x} \\ 0 \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{h} = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ h_{N_h} \\ 0 \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ b_N \end{bmatrix} \quad (40)$$

La matrice \mathbf{H} est maintenant construite de la façon suivante :

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} h_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & h_{N_h} & \dots & h_2 \\ h_2 & h_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & h_{N_h} & \dots \\ \dots & h_2 & h_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & h_{N_h} \\ h_{N_h} & \dots & h_2 & h_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{N_h} & \dots & h_2 & h_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_{N_h} & \dots & h_2 & h_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_{N_h} & \dots & h_2 & h_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N_h} & \dots & h_2 & h_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N_h} & \dots & h_2 & h_1 \end{bmatrix} \quad (41)$$

Cette matrice est carrée de dimension $N_y \times N_y$. La matrice \mathbf{H} est circulante.

La représentation matricielle de l'équation de convolution va nous permettre, lors de l'établissement des différents algorithmes, de bénéficier de l'ensemble des propriétés des matrices, en particulier les propriétés des matrices circulantes. Cette représentation nous permet aussi l'utilisation d'une notation mathématique compacte.

3.5. Résolution de l'équation de convolution discrète

Après la mise en place du formalisme matriciel de l'équation de convolution, nous allons maintenant voir la résolution de ce problème dans son nouveau contexte.

3.5.1. Cas non bruité

Une solution formelle de l'équation de convolution non bruitée peut être écrite sous la forme suivante :

$$\mathbf{x} = \mathbf{H}^{-1} \mathbf{y} \quad (42)$$

Néanmoins, cette solution existe si seulement le problème posé par cette équation n'est pas *mal posé*, c'est-à-dire lorsque la matrice \mathbf{H} est bien conditionnée. Le conditionnement de la matrice \mathbf{H} est défini par son nombre de conditionnement qui s'exprime par :

$$C(\mathbf{H}) = \|\mathbf{H}\| \|\mathbf{H}^{-1}\| = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}} \quad (43)$$

Où λ_{\max} et λ_{\min} sont les valeurs propres maximale et minimale de la matrice \mathbf{H} . Une matrice sera dite mal conditionnée si $C(\mathbf{H})$ est très grand devant 1, elle sera bien conditionnée si $C(\mathbf{H})$ est proche de 1. Une matrice orthogonale sera telle que $C(\mathbf{H}) = 1$, c'est-à-dire $\mathbf{H}^T = \mathbf{H}^{-1}$.

En fait, un problème est dit mal posé s'il correspond à l'un des trois cas suivants :

- Si la matrice \mathbf{H} n'est pas inversible, c'est-à-dire n'est pas une matrice carrée. On peut y remédier en utilisant la convolution circulaire où la matrice de Toeplitz de \mathbf{h} est carrée et donc inversible.
- La solution est multiple, ce qui nécessite de développer une stratégie de choix parmi toutes les solutions possibles de l'équation de convolution.
- Perturbation des données de départ (données mesurées), par exemple la présence du bruit. Ce qui rend la solution instable donc inacceptable.

3.5.2. Cas bruité

A partir de l'équation (36), l'estimation de la solution aura l'expression suivante :

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{H}^{-1}\mathbf{b} \quad (44)$$

Si la matrice \mathbf{H} possède des valeurs propres très petites, qui lors de l'inversion donneront des valeurs grandes amplifiant ainsi le bruit, ce qui peut être à l'origine de solutions inacceptables à cause de leur instabilité.

En effet, le bruit de mesure ne fait qu'empirer le caractère mal posé du problème. Dans ces conditions l'unicité de la solution sera difficile à garantir. Il en résulte que pour un même signal mesuré, on pourra construire plusieurs signaux d'entrée différents susceptibles d'avoir produit ce signal mesuré à partir d'une fonction de résolution donnée, sans qu'il soit a priori de discriminer parmi toutes les solutions celle qui est la plus susceptible d'avoir engendré le signal mesuré.

Donc on eu recours à des algorithmes de la déconvolution qui peuvent régulariser le problème mal posé ainsi de garantir l'unicité de la solution. Ces méthodes se répartissent en deux catégories ; les méthodes itératives et les méthodes non itératives.

4. METHODES NON ITERATIVES DE LA DECONVOLUTION

4.1. Filtrage inverse et solution des moindres carrés

Cette approche est la base des autres méthodes de déconvolution dans laquelle on cherche une solution estimée $\tilde{\mathbf{x}}$ (sans avoir l'espoir de trouver la solution exacte \mathbf{x}) telle que le signal reconstruit $\mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}$ soit le plus proche possible au sens des moindres carrés des données mesurées \mathbf{y} au bruit près. La solution ainsi obtenue est appelée solution des moindres carrés.

Dans cette approche la fonction que nous cherchons à minimiser est :

$$E = \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \quad (45)$$

Cette fonction représente l'énergie de l'erreur observable.

Cette opération correspond bien à trouver $\tilde{\mathbf{x}}$ telle que $\mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}$ fitte la fonction \mathbf{y} au mieux, selon le critère des moindres carrées.

Minimiser la fonction E revient à trouver $\tilde{\mathbf{x}}$ qui soit la solution de :

$$\frac{dE}{d\tilde{\mathbf{x}}} = 0 \Leftrightarrow \mathbf{H}^T \mathbf{H} \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{H}^T \mathbf{y} \quad (46)$$

La solution de cette équation est :

$$\tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{y} \quad (47)$$

L'équation (47) est appelée « équation normale », $\tilde{\mathbf{x}}$ est appelée la solution des moindres carrées ou solution pseudo-inverse ou encore solution inverse généralisée [8].

Le terme $(\mathbf{H}^T \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T$ est souvent appelé l'inverse généralisé de \mathbf{H} , il est noté \mathbf{H}^G .

L'équation (47) est en quelque sorte l'équation (42) multipliée par \mathbf{H}^T , la multiplication par \mathbf{H}^T de chaque membre de l'équation (42) présente un double intérêt :

- Dans le cas où \mathbf{H} est une matrice non-carrée, la matrice $(\mathbf{H}^T \mathbf{H})$ est carrée, donc normalement inversible.
- Elle permet généralement de filtrer les données \mathbf{y} .

Cependant, si \mathbf{H} est mal conditionnée, $(\mathbf{H}^T \mathbf{H})$ l'est encore plus, la solution est donc fortement dégénérée et pourra n'avoir aucune signification physique. C'est-à-dire il n'existe pas qu'une seule solution qui satisfasse la condition de proximité du signal reconstruit et du signal mesuré. Ces solutions multiples peuvent être physiquement inacceptables, la multiplicité des solutions nous montre que nous manquons d'informations pour justifier du choix de telle ou telle solution parmi celles mathématiquement possibles qui soit conforme à ce que l'on peut savoir de la solution recherchée.

Cette nouvelle notion de solution acceptable ou non introduit une pratique fondamentale en traitement du signal qui ouvre la porte à une série de techniques qui visent à garantir l'unicité de la solution en reconditionnant la matrice \mathbf{H} de manière à rendre la solution stable et unique.

Il nous faut donc définir des critères sur la solution recherchée afin de *stabiliser le problème*, tout en assurant la cohérence des résultats, c'est-à-dire en garantissant la proximité de la solution choisie avec la solution idéale (cherchée).

Cette nouvelle réécriture du problème de la déconvolution en vue de sa stabilisation, qui inclut une connaissance préalable concernant la solution cherchée est très utilisée en traitement du signal, et est désignée sous le nom de *régularisation* du problème de la déconvolution ou filtrage au sens des moindres carrés sous contraintes [9].

4.2. Filtrage au sens des moindres carrés sous contraintes : Régularisation

L'introduction de la notion de la régularisation dans les problèmes de déconvolution peut se justifier selon différentes approches. En effet, si nous considérons la solution inverse généralisée (équation (47)), la solution ne sera pas acceptable si \mathbf{H} est mal conditionnée, ce qui signifie que \mathbf{H} présente de très petites valeurs singulières et dans le pire des cas des valeurs singulières nulles. Son nombre de conditionnement est alors très élevé.

Dans ce cas de figure, il convient de venir modifier ces petites valeurs singulières sans toutefois modifier les autres. Nous éliminerons ainsi les points aberrants qui pourraient apparaître dans la solution $\tilde{\mathbf{x}}$ et cela dans le cas où le signal observé \mathbf{y} est bruité.

La régularisation du problème va alors consister à transformer le problème à l'origine mal posé en un problème bien posé au sens de Hadamard [10]. La solution à ce nouveau problème bien posé sera une « bonne approximation » de la solution au problème mal posé. Les méthodes de la régularisation peuvent se scinder en deux classes. Une première classe où le lien existant entre la famille des solutions admissibles et les données observées suit des lois statistiques [11]. Une deuxième classe, qui sera celle utilisée tout au long de nos développements, consiste à déterminer la solution selon des critères déterministes.

En d'autres termes, le problème de la déconvolution bruité ne pouvait être résolu correctement sans qu'il existe un critère permettant de choisir parmi toutes les solutions possibles du problème celles qui est la plus acceptable. Ce choix de la solution est purement subjectif et dépendra des caractéristiques du signal recherché. Il faut donc introduire dans le processus de résolution une connaissance a priori du signal qui permettra non seulement de faire un choix mais aussi de retrouver des composantes fréquentielles du signal que le bruit de mesure et le filtrage par la réponse impulsionnelle avaient perdus. Cet apport d'informations, par la suite, sera couplé au premier critère que nous avons déjà formulé, à savoir la proximité du profil reconstruit avec le signal mesuré.

4.2.1. Philosophie de la régularisation

Nous définissons deux mesures de distance $L_1(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}_0)$ et $L_2(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}_\infty)$ représentent respectivement la distance entre le signal source \mathbf{x} et les solutions extrêmes $\tilde{\mathbf{x}}_0$ et $\tilde{\mathbf{x}}_\infty$, $\tilde{\mathbf{x}}_0$ correspond à la solution *ultra-rugueuse* au sens des moindres carrées et $\tilde{\mathbf{x}}_\infty$ à la solution *ultra-douce*. Une solution régularisée $\tilde{\mathbf{x}}(\alpha, \mathbf{y})$ est alors simplement définie comme solution au problème à optimiser suivant :

$$L\{ \tilde{\mathbf{x}}(\alpha, \mathbf{y}) \} = \{ L_1(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}_0) + \alpha L_2(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}_\infty) \}_{\mathbf{x} \in X} \quad (48)$$

X représente l'ensemble des solutions au problème. Le choix des mesures L_1 et L_2 est un choix qualitatif qui détermine entièrement la manière selon laquelle la régularisation sera réalisée. Le choix de α , nommé paramètre de régularisation, est quantitatif, ce paramètre permet d'ajuster l'adéquation à l'a priori et aux données mesurées. Une parfaite fidélité aux données mesurées est obtenue pour $\alpha = 0$, on obtient la solution extrême $\tilde{\mathbf{x}}_0$ qui est déterminée uniquement par le critère des moindres carrés, c'est la solution que l'on admet comme satisfaisante lorsque les données sont suffisamment fiables. Alors qu'une parfaite fidélité aux informations a priori est obtenue pour $\alpha \rightarrow \infty$ sans forcément avoir une solution correspondant aux données mesurées. L'objectif de la régularisation consiste donc à faire un compromis entre les deux solutions extrêmes $\tilde{\mathbf{x}}_0$ et $\tilde{\mathbf{x}}_\infty$ en ajustant le paramètre de régularisation α pour que le critère L soit minimal. G. Demoment propose différentes définitions de distances dans la référence [8].

4.2.2. Différentes approches de la régularisation

- Régularisation d'ordre 0

Dans le paragraphe 4.1. nous avons vu que lorsque le problème est mal posé, la solution est multiple et certaines solutions sont inacceptables ou bien dégénérées et qu'il nous fallait

trouver un autre critère pour choisir entre toutes les solutions possibles. Parmi ces solutions, certaines sont de norme non bornée, on peut donc avoir l'idée de choisir la solution des moindres carrés dont la norme est minimale. On peut apporter cette information sous la forme d'une norme à minimiser, ce qui se traduit par :

$$L_2(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}_\infty) = \|\tilde{\mathbf{x}}\|^2 = \sum_k \tilde{\mathbf{x}}_k^2 \text{ est minimale} \quad (49)$$

La minimisation du critère de la régularisation consiste donc à minimiser à la fois la norme de la solution et l'erreur de la déconvolution (l'erreur observable) obtenue par le critère des moindres carrés.

La régularisation se formule dans ce cas par le critère L à minimiser :

$$L = \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 + \alpha\|\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \quad (50)$$

Cette première méthode de régularisation nous permet d'écarter toutes les solutions de normes excessives.

- *Approche de Tikhonov*

Dans cette approche, le problème de la recherche d'une solution à l'équation (48) est remplacé par le problème consistant à :

$$\text{☞ minimiser} \quad \|\mathbf{D}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \quad (51)$$

$$\text{☞ sous la contrainte} \quad \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 = \|\mathbf{b}\|^2 \quad (52)$$

$\|\mathbf{b}\|^2$ est une estimation de la norme du bruit supposé possédant une énergie finie, ou encore la proximité de la solution aux données mesurées. \mathbf{D} est un opérateur linéaire décrivant certaines propriétés du signal original. Différents opérateurs pour \mathbf{D} ont été proposés, ainsi par exemple :

$\mathbf{D} = \mathbf{I}$, dans ce cas on cherche à minimiser $\|\tilde{\mathbf{x}}\|^2$

\mathbf{D} est un filtre passe haut, dans ce cas l'énergie en hautes fréquences de la solution qui est maîtrisée.

En outre, le critère $L_2 = \|\mathbf{D}\tilde{\mathbf{x}}\|^2$ limite l'espace des solutions mathématiquement possibles à un espace particulier dont les propriétés sont imposées par \mathbf{D} [12].

Le problème peut également s'écrire :

$$\begin{aligned} \text{☞ minimiser} & \quad \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \\ \text{☞ sous la contrainte} & \quad \|\mathbf{D}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 = r^2 \end{aligned} \quad (53)$$

r^2 représente la régularité, supposée connue, de la solution. Elle diminuera au fur et à mesure que le profil recherché sera moins accidenté, sans pour autant que cela signifie que le profil ne sera pas autorisé à posséder des hautes fréquences ou des irrégularités : le fait que l'énergie des hautes fréquences soit bornée n'implique pas que certaines très hautes fréquences ne puissent pas être présentes.

Pour résoudre ces deux problèmes de minimisation nous allons utiliser la méthode de multiplicateur de Lagrange [9]. Cette méthode, qui consiste à convertir le problème de minimisation sous contrainte en un problème de minimisation sans contrainte, nous conduit à résoudre :

$$\tilde{\mathbf{x}} = \arg \min (\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 + \alpha(\|\mathbf{D}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 - r^2)) \quad (54)$$

$\tilde{\mathbf{x}}$ est la solution des équations normales obtenue en utilisant les propriétés des produits scalaires et des dérivées, cette solution s'exprime par :

$$\mathbf{H}^T \mathbf{y} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D}) \tilde{\mathbf{x}} \quad (55)$$

Le choix du multiplicateur de Lagrange est réalisé de façon à satisfaire les contraintes. La procédure de détermination de α est itérative, nous reviendrons à ce point pour plus de détails dans les prochaines sections de ce chapitre.

- *Approche de Miller*

Miller [13], propose de remplacer la solution de l'équation (48) par le problème qui consiste à déterminer les vecteurs $\tilde{\mathbf{x}}$ qui vérifient simultanément les contraintes :

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq \varepsilon^2 \quad (56)$$

avec $\varepsilon^2 = \|\mathbf{b}\|^2$

et
$$\|\mathbf{D}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq r^2 \quad (57)$$

ε^2 représente l'énergie du bruit et r^2 une constante qui mesure la douceur ou la régularité de la solution.

Ces deux contraintes peuvent être interprétées comme la définition de deux ensembles convexes fermés. Nous pouvons alors considérer la méthode de projection sur des ensembles convexes en définissant deux opérateurs de projections correspondants à ces « deux informations a priori ».

Miller propose dans [13] de combiner quadratiquement les deux contraintes en une seule qui s'écrit :

$$M(\alpha, \tilde{\mathbf{x}}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 + \alpha \|\mathbf{D}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq 2\varepsilon^2 \quad (58)$$

α est le paramètre de régularisation égal à $\frac{\varepsilon^2}{r^2}$

Miller montre que si la solution $\tilde{\mathbf{x}}$ satisfait à la contrainte (58), alors elle satisfait également aux contraintes définies préalablement à un facteur près.

En fait, la solution de l'équation (36), sera un minimum de $M(\alpha, \tilde{\mathbf{x}})$; ce minimum existe si sa dérivée selon $\tilde{\mathbf{x}}$ s'annule, ce qui se traduit par l'équation : $\mathbf{H}^T \mathbf{y} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D}) \tilde{\mathbf{x}}$.

Soit :

$$\tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{y} = (\mathbf{H}^+)^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{y}, \text{ avec } \mathbf{H}^+ = \mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D} \quad (59)$$

Nous retrouvons ici une expression de la solution déjà rencontrée dans la méthode proposée par Tikhonov. Dans ce cas, la matrice \mathbf{H} caractérisant le problème de la déconvolution avant régularisation est remplacée par la matrice \mathbf{H}^+ mieux conditionnée. Cela est réalisé par la modification des valeurs propres du système \mathbf{H} . On voit en effet que, par rapport à l'équation (47), la solution fait intervenir non pas $(\mathbf{H}^T \mathbf{H})^{-1}$ qui est instable mais $(\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1}$. Le problème de la résolution d'un système linéaire est donc rendu plus stable, et la solution plus acceptable. Le conditionnement de la matrice \mathbf{H}^+ est donné par :

$$C(\mathbf{H}^+) = \sqrt{\frac{\max(\lambda_{\mathbf{H}}^2 + \alpha\lambda_{\mathbf{D}}^2)}{\min(\lambda_{\mathbf{H}}^2 + \alpha\lambda_{\mathbf{D}}^2)}} \quad (60)$$

Où $\lambda_{\mathbf{H}}^2$ et $\lambda_{\mathbf{D}}^2$ représentent respectivement les valeurs propres de $\mathbf{H}^T\mathbf{H}$ et $\mathbf{D}^T\mathbf{D}$. La matrice \mathbf{H}^+ doit conserver les grandes valeurs propres de $\mathbf{H}^T\mathbf{H}$ et remplacer les petites (qui sont la source d'instabilité) par celles de $\alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D}$. Ainsi, \mathbf{H} étant un filtre passe-bas, \mathbf{D} doit être un filtre passe-haut. Selon les caractéristiques de \mathbf{D} et la valeur de α , le système sera ainsi plus ou moins bien régularisé.

Le paramètre de régularisation peut ici être calculé sans la nécessité d'une méthode itérative. Ce calcul nécessite la connaissance de l'énergie du bruit additif et de la régularité de la solution recherchée. Dans le cas général nous n'avons pas accès à ces informations même si parfois une bonne estimation de l'énergie du bruit est possible. L'utilisation de la méthode de Miller nous obligera à recourir à des méthodes d'estimation de ce paramètre α .

4.2.3. Interprétation géométrique de la régularisation

Cet aspect a été développé dans les références [4], [14] et [15].

Les valeurs de $\tilde{\mathbf{x}}$ qui satisfont la contrainte $\|\mathbf{D}\mathbf{x}\|^2 \leq r^2$ appartiennent à une hyper-ellipsoïde Ω_x définie par :

$$\Omega_x = \left\{ \mathbf{x} : \mathbf{x}^T \frac{\mathbf{D}^T\mathbf{D}}{r^2} \mathbf{x} \leq 1 \right\} \quad (61)$$

Le centre de Ω_x est le vecteur nul.

Nous définissons maintenant un ensemble hyper-sphérique Ω_b qui borne l'énergie du bruit défini par :

$$\Omega_b = \left\{ \mathbf{b} : \mathbf{b}^T \frac{\mathbf{I}}{\|\mathbf{b}\|^2} \mathbf{b} \leq 1 \right\} \quad (62)$$

\mathbf{I} est la matrice unitaire. Le centre de Ω_b est également le vecteur nul.

La donnée observée \mathbf{y} permet de définir un ensemble qui doit contenir \mathbf{x} , cet ensemble noté $\Omega_{x/y}$ est défini par :

$$\mathbf{x} \in \Omega_{x/y}, \quad \Omega_{x/y} = \left\{ \mathbf{x} : \mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x} \in \Omega_b \right\} \quad (63)$$

$\Omega_{x/y}$ est un ensemble ellipsoïde défini par :

$$\Omega_{x/y} = \left\{ \mathbf{x} : (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})^T \frac{\mathbf{I}}{\|\mathbf{b}\|^2} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) \leq 1 \right\} \quad (64)$$

La solution appartient alors à l'intersection des deux ensembles ellipsoïdaux définie par :

$$\Omega_s = \Omega_x \cap \Omega_{x/y} \quad (65)$$

Ceci est illustré par la Figure 2.

Le centre de Ω_x qui est le vecteur nul, représente la solution « ultra lisse » qui présente la régularité r^2 la plus faible. Le centre $\Omega_{x/y}$ est la solution qui présente une fidélité parfaite aux données, elle est égale à $(\mathbf{H}^T\mathbf{H})^{-1}\mathbf{H}^T\mathbf{y}$.

Le centre de l'ellipsoïde qui englobe l'intersection des deux ensembles ellipsoïdaux est noté $\tilde{\mathbf{x}}$.

Les solutions notées $\tilde{\mathbf{x}}_{P_1}$ et $\tilde{\mathbf{x}}_{P_2}$ sont les solutions qui seraient obtenues par la méthode de projection sur les ensembles convexes [16], Ω_x et $\Omega_{x/y}$ étant des ensembles convexes [14]. Si nous faisons varier α de 0 à l'infini, la solution appartient à la courbe Γ joignant le centre de Ω_x au centre de $\Omega_{x/y}$.

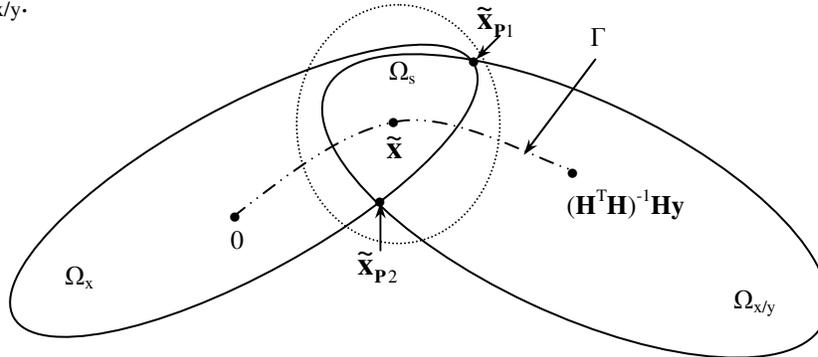


Figure 2 : Interprétation géométrique de la régularisation.

4.2.4. Choix de l'opérateur de régularisation

La simultanéité des phénomènes – observations bruitées et opérateur de convolution présentant de très petites valeurs propres- transforme notre problème de déconvolution en un problème mal posé au sens de Hadamard [10]. Dans ce contexte la solution présente des points aberrants et une grande erreur de reconstruction va très rapidement diverger. L'opérateur de régularisation choisi va devoir modifier les petites valeurs propres de l'opérateur de convolution sans venir trop modifier les valeurs propres les plus significatives.

Les opérateurs de convolution rencontrés sont en général des systèmes passe-bas. L'information que l'on peut introduire par l'intermédiaire de \mathbf{D} est plus précise que dans le cas de la régularisation d'ordre 0, qui n'est finalement qu'un cas particulier de la méthode de Miller avec $\mathbf{D} = \mathbf{I}$. On prend généralement pour l'opérateur de régularisation \mathbf{D} un opérateur de type filtre passe-haut de type gradient (l'opérateur de dérivation (d/dx) par exemple), afin de limiter l'énergie des hautes fréquences contenues dans la solution recherchée. Ce choix résulte de l'observation des solutions instables trouvées par l'inversion directe du problème (non régularisé). Ces dernières contiennent en effet de fortes composantes dans le haut du spectre, dues à l'amplification des hautes fréquences du bruit lors de l'inversion de \mathbf{H} . d'autre part, le spectre des signaux recherchés est généralement assez atténué dans les hautes fréquences.

Le choix de l'opérateur de régularisation ne doit pas constituer une difficulté dès lors que la règle sur la modification des valeurs propres est respectée. Le choix le plus déterminant pour la qualité de la reconstruction sera celui du paramètre de la régularisation.

4.2.5. Détermination du paramètre de régularisation

Nous avons exprimé précédemment le paramètre de régularisation théorique proposé par Miller $\alpha = \|\mathbf{b}\|^2 / r^2$. Le calcul de ce paramètre nécessite la connaissance de l'énergie du bruit présent dans le signal et la connaissance de la régularité de la solution. En pratique, s'il est parfois possible de connaître l'énergie du bruit il est en revanche impossible d'avoir une idée précise de la régularité de la solution.

Le problème de la détermination de ce paramètre α reste un problème ouvert. Plusieurs méthodes d'estimation de ce paramètre, dans le domaine des statistiques théoriques, ont été proposées et

qui tentent à dégager la meilleure solution possible pour tirer un paramètre de régularisation correct d'un ensemble de données bruitées. Nous allons présenter ici brièvement deux méthodes principales d'estimation : la méthode d'adéquation aux données et la méthode de validation croisée. Cette dernière existe sous deux formes : la validation croisée ordinaire et la validation croisée généralisée. Le lecteur intéressé trouvera une littérature abondante sur ce sujet [17-34].

- *La méthode d'adéquation aux données*

Nous n'avons pas utilisé cette méthode au cours de nos expérimentations. Nous allons simplement en donner le principe.

Cette méthode repose sur les propriétés des erreurs résiduels [35]. Elle nécessite la connaissance de la matrice de covariance du bruit additif. Il faut chercher α qui répond au critère composite :

$$\left\{ \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}(\alpha)\|_{\mathbf{R}_b}^2 + \alpha \|\tilde{\mathbf{x}}(\alpha)\|_{\mathbf{Q}}^2 \right\}_{\min} \quad (66)$$

Avec $\tilde{\mathbf{x}}(\alpha) = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{Q})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{y}$

Si le bruit additif est blanc gaussien, de moyenne nulle, on montre alors que le vecteur $(\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}})$ suit une loi normale de moyenne nulle et de matrice de covariance égale à $\sigma_b^2 \mathbf{I}$. Un théorème nous dit alors que la variable aléatoire $(\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}})^T \mathbf{R}_b^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}})$ suit une loi du χ^2 à M degrés de liberté où \mathbf{R}_b est la matrice de covariance.

La méthode d'adéquation aux données consiste alors à chercher la valeur de α telle que :

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}(\alpha)\|_{\mathbf{R}_b}^2 = M \quad (67)$$

Cette méthode conduit à une solution sur-régularisée (trop lisse).

- *La méthode de validation croisée ordinaire*

Cette méthode repose sur l'idée suivante : Notons $\tilde{\mathbf{x}}(\alpha, \mathbf{y}^{-k})$ l'estimée de \mathbf{x} obtenue lorsque la $k^{\text{ième}}$ observation est omise. On étudie alors, pour différentes valeurs de α l'aptitude de $\tilde{\mathbf{x}}(\alpha, \mathbf{y}^{-k})$ à prédire la donnée manquante \mathbf{y}^{-k} . Pour un signal de longueur N_y , le nombre d'omissions possibles est N_y . La valeur de α qui sera choisie sera celle qui donne la meilleure prédiction en moyenne sur ces N_y omissions.

Pour différentes valeurs de α , nous calculons la somme des carrés des prédictions notée :

$$P(\alpha) = \frac{1}{N_y} \left\| \mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}(\alpha, \mathbf{y}^{-k}) \right\|^2 \quad (68)$$

L'estimée de \mathbf{x} est calculé après avoir mis à zéro la $k^{\text{ième}}$ observation $\mathbf{y}(k)$.

$$\tilde{\mathbf{x}}(\alpha, \mathbf{y}^{-k}) = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} \mathbf{H}^T (\mathbf{y})_{\mathbf{y}(k)=0} \quad (69)$$

La valeur de α retenue sera celle qui minimise l'équation (68).

Cette méthode, appelée validation croisée ordinaire, nécessite un volume de calculs très important. Une méthode dite la validation croisée généralisée est proposée pour réduire ce volume de calcul [20].

- *La validation croisée généralisée*

Cette méthode consiste à choisir la valeur de α qui minimise l'expression suivante :

$$V(\alpha) = \frac{\frac{1}{N} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{H}^+ \mathbf{H}^T \mathbf{y}\|^2}{\left[\frac{1}{N} \text{Trace}(\mathbf{I} - \mathbf{H}^+) \right]^2} \quad (70)$$

Avec $\mathbf{H}^+ = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D})$ et N représente la longueur des vecteurs \mathbf{x} et \mathbf{y} .

Thompson et *al.* [35] proposent une solution numérique aisée à mettre en œuvre pour le calcul de ce paramètre :

Notons $\{\lambda_H^i\}$ et $\{\lambda_D^i\}$ les valeurs propres de \mathbf{H} et \mathbf{D} respectivement. Appelons $\{w_i\}$ les vecteurs définis par :

$$w_i = \left[1, e^{\frac{2\pi}{N}ij}, e^{\frac{4\pi}{N}ij}, \dots, e^{\frac{2(N-1)\pi}{N}ij} \right] \quad \text{avec } j = \sqrt{-1} \quad (71)$$

$V(\alpha)$ peut alors s'écrire :

$$V(\alpha) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \left[\frac{\alpha \lambda_D^i}{\alpha \lambda_D^i + |\lambda_H^i|} \right]^2 |w_i^* y|^2}{\left\{ \sum_{i=0}^{N-1} \left[\frac{\alpha \lambda_D^i}{\alpha \lambda_D^i + |\lambda_H^i|} \right] \right\}^2} \quad (72)$$

\mathbf{H} et \mathbf{D} sont des matrices circulantes, leurs valeurs propres sont obtenues par TFD de leur première ligne respective. De façon similaire $w_i^* \mathbf{y}$ est la TFD du vecteur \mathbf{y} .

L'égalité (72) peut encore s'écrire :

$$V(\alpha) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} |y(i)|^2 (P(i))^2}{\left(\sum_{i=0}^{N-1} P(i) \right)^2} \quad (73)$$

Avec $P(i)$ est défini par :

$$P(i) = \frac{\alpha D(i)}{1 + \alpha D(i)} \quad (74)$$

Dans nos applications, le calcul du paramètre de régularisation se fera selon la formule (73). Cet estimateur présente un inconvénient ; c'est que dans le cas d'un bruit non blanc, la fonction $V(\alpha)$ ne présentera pas de minimum. Dans ce cas nous serons amenés à utiliser l'estimateur de validation croisée ordinaire.

Enfin, la régularisation peut garantir l'unicité et la stabilité de la solution mais peut conduire à un résultat peu satisfaisant, la quantité d'information apportée n'est pas suffisante pour obtenir une solution proche de la solution idéale. Pour cela, il faut utiliser d'autres méthodes qui peuvent aider à obtenir une solution de qualité meilleure.

4.3. Introduction du modèle de solution dans la régularisation de Tikhonov-Miller

Nous avons vu que le mauvais conditionnement du système à résoudre entraîne l'existence de nombreuses solutions, dont la plupart sont instables. La régularisation réduit

l'ensemble des solutions possibles à un ensemble de solutions d'amplitude bornée et de spectre relativement lisse, selon l'opérateur de régularisation choisi.

Dans la régularisation de Miller le terme de régularisation fait uniquement référence à la solution recherchée et ceci de manière globale, c'est-à-dire que la propriété que l'on souhaite imposer à $\tilde{\mathbf{x}}$ s'applique sur tout son intervalle de définition, sans distinguer les différentes zones du signal. Barakat et *al.* [36] ont proposé une extension de cette régularisation en introduisant un terme \mathbf{x}_{mod} représentant un modèle d'information a priori :

$$L_2(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}_{\infty}) = \|\mathbf{D}(\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_{\text{mod}})\|^2 \quad (75)$$

Ce modèle traduit les propriétés locales du signal telles que les discontinuités, les zones homogènes, etc.

Ainsi, on peut introduire les informations a priori sur la solution sous forme d'un signal sensé décrire au mieux les variations locales du signal recherché, tout en manipulant les caractéristiques globales de la solution par l'opérateur \mathbf{D} et le paramètre de régularisation α . Cet apport d'informations va encore plus restreindre l'ensemble des solutions. Néanmoins, si les informations introduites manquent de précision ou erronées certainement cet apport dirigera la méthode vers une solution qui ne sera pas en accord avec la réalité, puisque l'équation à résoudre sera fautive. Par contre, si le choix de l'information apportée est pertinent, les résultats de la déconvolution peuvent être considérablement améliorés par rapport aux méthodes classiques. La précision de la solution dépendra directement de la précision du modèle apporté. Le critère à minimiser sera donc :

$$L = \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 + \alpha\|\mathbf{D}(\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_{\text{mod}})\|^2 \quad (76)$$

Et la solution cherchée devient alors :

$$\tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{H}^T\mathbf{H} + \alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D})^{-1} (\mathbf{H}^T\mathbf{y} + \alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D}\mathbf{x}_{\text{mod}}) \quad (77)$$

Si aucune information n'est introduite sous forme d'un modèle de solution \mathbf{x}_{mod} (vecteur nul) on retrouve le cas de la régularisation de Tikhonov-Miller classique.

La principale difficulté consiste à introduire un modèle contenant toutes les propriétés connues a priori sur le signal original recherché. Barakat [36] a proposé une paramétrisation du modèle, qui pourrait donner plus de souplesse à son approche. Ainsi le signal à restaurer est considéré comme un ensemble d'objets à caractère lisse. Chaque objet peut être alors modélisé par une gaussienne, et défini par un jeu de paramètres qui décrivent sa position, son amplitude, sa norme, sa régularité, etc.

On peut alors considérer en premier lieu un modèle tel que l'écart quadratique entre le signal mesuré \mathbf{y} et le signal reconstruit $\mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}$ soit minimal :

$$E_{\text{mod}} = \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 = \left\| \mathbf{y} - \mathbf{H}(\mathbf{H}^T\mathbf{H} + \alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D})^{-1} (\mathbf{H}^T\mathbf{y} + \alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D}\mathbf{x}_{\text{mod}}) \right\|^2 = \left\| \mathbf{y} - \mathbf{H}(\mathbf{H}^+)^{-1}\mathbf{H}^T\mathbf{y} + \mathbf{H}(\mathbf{H}^+)^{-1}(\alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D}\mathbf{x}_{\text{mod}}) \right\|^2 \quad (78)$$

Où E_{mod} est l'erreur entre la reconstruction et la mesure.

D'après la relation (59) le terme $(\mathbf{H}^+)^{-1}\mathbf{H}^T\mathbf{y}$ représente la solution estimée de la régularisation de Miller et en développant le terme quadratique E_{mod} , on aboutit à la relation entre E_{mod} et l'erreur de reconstruction dans le cas classique de Tikhonov-Miller E_{tm} :

$$E_{\text{mod}} - E_{\text{tm}} = -2\alpha \mathbf{y}^T (\mathbf{I} - \mathbf{H}(\mathbf{H}^+)^{-1} \mathbf{H}^T) \mathbf{H} \mathbf{A} \mathbf{x}_{\text{mod}} + \alpha^2 \|\mathbf{H} \mathbf{A} \mathbf{x}_{\text{mod}}\|^2 \quad (79)$$

Avec $\mathbf{A} = (\mathbf{H}^+)^{-1} \mathbf{D}^T \mathbf{D}$.

La minimisation de cette erreur conduit à la détermination du modèle a priori \mathbf{x}_{mod} tel que :

$$\mathbf{x}_{\text{mod}} = \frac{1}{\alpha} ((\mathbf{H} \mathbf{A})^T (\mathbf{H} \mathbf{A}))^{-1} (\mathbf{H} \mathbf{A})^T (\mathbf{I} - \mathbf{H}^T (\mathbf{H}^+)^{-1} \mathbf{H}) \mathbf{y} \quad (80)$$

Cependant, les performances de cette déconvolution sont uniquement améliorées d'environ 10% par rapport à la déconvolution classique de Tikhonov-Miller [37].

5. METHODES ITERATIVES DE LA DECONVOLUTION

Le caractère instable de la déconvolution en présence de bruit peut nécessiter également le choix d'une méthode qui converge pas à pas vers une solution unique, et où il est possible de contrôler à chaque pas cette convergence. La solution au problème est théoriquement atteinte au bout d'une infinité d'itérations mais il peut être intéressant, voire impératif d'arrêter les itérations au bout d'un nombre fini de boucles. La solution obtenue peut être contrôlée aussi par les informations apportées à chaque itération, l'algorithme est ainsi *contraint* et les informations introduites à chaque itération sont appelées *contraintes dures*. Avant de citer quelques méthodes itératives de déconvolution nous allons tout d'abord voir la définition ainsi quelques exemples de contraintes dures.

5.1. Contraintes dures

Avec l'application des contraintes dures nous fixons des hypothèses a priori sur la solution. On peut, par exemple, considérer que la solution est à support borné ou encore que la solution est un signal positif. A partir de cette connaissance a priori nous définissons un opérateur de contrainte \mathbf{C} (linéaire ou non linéaire) que nous appliquons à chaque itération.

Quand nous fixons une information a priori sur la solution à notre problème, il est équivalent de dire que celle-ci appartient à un ensemble de fonctions satisfaisant une certaine propriété. A chaque propriété est associé un ensemble de fonctions. Si ces ensembles sont convexes et fermés, et si leur intersection est non nulle il est alors possible de trouver, par projection, une solution appartenant à l'intersection de ces ensembles [39]. Si nous notons \mathbf{C}_i les opérateurs de contrainte et \mathbf{C}_i $i=1, \dots, m$ les ensembles convexes et fermés correspondants, la solution appartient à :

$$\mathbf{C}_0 = \bigcap_{i=1}^{i=m} \mathbf{C}_i \quad (81)$$

Soit \mathbf{P}_i l'opérateur de projection associé à l'opérateur de contrainte dure \mathbf{C}_i . L'existence de m contraintes dures nous conduit à appliquer une succession de projections définie par :

$$\tilde{\mathbf{x}}^{(k+1)} = \mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 \dots \mathbf{P}_m \tilde{\mathbf{x}}^{(k+1)} \quad (82)$$

La convergence de ce processus est démontrée à l'aide du théorème du point fixe.

L'égalité (82) peut être écrite sous une forme plus simplifiée :

$$\mathbf{x} = \mathbf{C}_0 \mathbf{x} \quad (83)$$

La relation (83) n'est ni plus ni moins que l'expression du fait que le signal \mathbf{x} n'est pas affecté par l'opérateur \mathbf{C}_0 dont la fonction est de forcer un vecteur différent de \mathbf{x} , par exemple $\mathbf{x}^{(k)}$ à respecter

des caractéristiques inhérentes au signal \mathbf{x} . Tout vecteur satisfaisant la contrainte représentée par l'opérateur C_0 sera donc laissé invariant. Le résultat est un signal dit *contraint*.

Nous donnons maintenant quelques exemples d'ensembles convexes et fermés, certains seront utilisés dans nos applications [3, 39, 40] :

❖ *Ensemble des signaux positifs C_1 :*

$$C_1 = \{ \mathbf{x} : \mathbf{x} > 0, 0 \text{ si } \mathbf{x} < 0 \} \quad (84)$$

Dans ce cas, on voit que les composantes positives de x restent inchangées alors que les composantes négatives sont réduites à 0. L'opérateur de positivité \mathbf{P} est alors tel que :

$$\mathbf{P}\mathbf{x} = \frac{\mathbf{x} + |\mathbf{x}|}{2} \quad (85)$$

Si on souhaite plutôt effectuer un repliement des composantes négatives, alors l'opérateur de contrainte de positivité sera l'opérateur valeur absolue :

$$\mathbf{P}\mathbf{x} = |\mathbf{x}| \quad (86)$$

Dans la pratique, c'est la contrainte de positivité qui sera la plus utilisée, car elle est la source d'informations la plus sûre et la plus puissante.

❖ *Ensemble des signaux d'amplitude bornée C_2 :*

$$C_2 = \{ \mathbf{x} : \mathbf{m} < \mathbf{x}(\mathbf{l}) < \mathbf{M} \} \quad (87)$$

Si on souhaite qu'un signal ne dépasse pas une certaine amplitude sur tout son intervalle de définition, l'opérateur d'amplitude sera alors défini par :

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{M}) - |\mathbf{x} - \mathbf{M}|}{2} + \mathbf{M} \quad (88)$$

❖ *Ensemble des signaux à support borné C_3 :*

Supposons que le signal \mathbf{x} soit connu pour être nul en dehors d'un certain domaine, il est alors possible de lui appliquer une contrainte de support, c'est-à-dire de le forcer à être nul en dehors de ce domaine de définition.

$$C_3 = \{ \mathbf{x} : \mathbf{x}(\mathbf{l}) = 0 \text{ hors support} \} \quad (89)$$

❖ *Ensemble des signaux à énergie bornée C_4 :*

$$C_4 = \{ \mathbf{x} : \|\mathbf{x}\|^2 < \rho^2 \} \quad (90)$$

❖ *Ensemble des signaux restaurés sous contrainte d'énergie de bruit bornée C_5 :*

$$C_5 = \{ \mathbf{x} : \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 \leq \|\mathbf{b}\|^2 \} \quad (91)$$

❖ *Ensemble des signaux dont la transformée de Fourier est bornée C_6 :*

$$C_6 = \{ \mathbf{x} : |\mathbf{X}(\mathbf{f})| \leq |\mathbf{c}_6(\mathbf{f})| \} \text{ avec } \mathbf{c}_6(\mathbf{f}) \text{ défini a priori} \quad (92)$$

Les opérateurs de contraintes décrits ci-dessus permettent de réduire l'ensemble des solutions de l'équation de convolution à un ensemble plus petit, dont les éléments satisfont les propriétés imposées par l'opérateur de contrainte. Ces opérateurs sont dits non expansifs. L'application d'un tel opérateur se réduit par la projection de la solution non contraintes sur l'ensemble convexe fermé des signaux qui satisfont la contrainte.

5.2. L'algorithme de Van Cittert et ses premiers prolongements

Van Cittert [2] fut l'un des premiers à proposer une méthode itérative pour résoudre ce problème. Basé sur la méthode de point fixe, la solution à l'étape $k+1$ est obtenue à partir de la solution obtenue à l'étape k :

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}^{(k)}) \\ \mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{y} \end{cases} \quad (93)$$

Le vecteur $\mathbf{x}^{(k)}$ est en quelque sorte une solution intermédiaire entre les solutions initiale $\mathbf{x}^{(0)}$ et finale $\mathbf{x}^{(\infty)}$. On peut montrer que l'algorithme de Van Cittert converge vers une solution $\mathbf{x}^{(\infty)}$ équivalente à celle obtenue par filtrage inverse [3] :

$$\mathbf{x}^{(\infty)} = \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y} \quad (94)$$

On retrouve alors, dans le développement de ces algorithmes itératifs, des résultats déjà utilisés dans les méthodes directes. Ces algorithmes sont maintenant rarement utilisés.

Des algorithmes itératifs sous contraintes furent par la suite développés : la contrainte est appliquée à la solution, cette contrainte étant définie à partir de la connaissance a priori sur la solution.

Après avoir étudié les effets du bruit additif [38] sur la solution au problème de déconvolution, une nouvelle approche fut proposée : la déconvolution itérative sous contrainte.

5.2.1. Introduction des contraintes dures dans l'algorithme de Van Cittert

L'algorithme de Van Cittert intégrant les contraintes dures se formule tout simplement en remplaçant $\mathbf{x}^{(k)}$ par $\mathbf{C}\mathbf{x}^{(k)}$ avant de calculer $\mathbf{x}^{(k+1)}$:

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{C}\mathbf{x}^{(k)} + (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{C}\mathbf{x}^{(k)}) \\ \mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{y} \end{cases} \quad (95)$$

Où \mathbf{C} représente l'opérateur de contrainte choisi.

De nombreux auteurs ont voulu ensuite améliorer la vitesse de convergence de ces algorithmes itératifs sous contraintes [3, 4, 15, 41, 42, 51].

5.2.2. Introduction de la régularisation de Miller dans l'algorithme de Van-Cittert contraint. Approche de Brice

Pour prendre en compte les contraintes douces (la régularisation) dans l'algorithme de Van Cittert, nous pouvons remplacer l'opérateur \mathbf{H} par son équivalent régularisé noté $\mathbf{H}^+ = (\mathbf{H}^T\mathbf{H} + \alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D})$. L'algorithme de Van Cittert contraint régularisé devient alors [42-45]:

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{C}\mathbf{x}^{(k)} + \mu_n [\mathbf{H}^T \mathbf{y} - (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D}) \mathbf{C}\mathbf{x}^{(k)}] \\ \mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{H}^T \mathbf{y} \end{cases} \quad (96)$$

μ_n est un scalaire ajusté à chaque itération de façon à optimiser la rapidité de la convergence [41]. Cet algorithme a prouvé sa fiabilité pour un large éventail de signaux SIMS [42-46].

5.3. La régularisation de Tikhinov-Miller avec comme modèle de solution un signal pré-déconvolué. Approche de Mancina

L'approche de Mancina [7] consiste à itérer la méthode proposée par Barakat et *al.* [36] avec un modèle variant à chaque itération qui se rapproche au mieux de la solution réelle au fil des itérations. Dans cette approche, on utilise comme modèle de solution un signal pré-déconvolué (solution intermédiaire entre la solution idéale c'est-à-dire le signal d'entrée et le signal mesuré). La formulation mathématique de cette approche, dans l'espace de Fourier, est la suivante :

$$\begin{cases} \hat{X}_{n+1} = \frac{\mathbf{H}^* \mathbf{Y} + \alpha |\mathbf{D}|^2 X_{\text{mod}_n}}{|\mathbf{H}|^2 + \alpha |\mathbf{D}|^2} \\ X_{\text{mod}_n} = \mathbf{TF}[C\hat{x}_n] \\ \hat{x}_n = \mathbf{TF}^{-1}[\hat{X}_n] \\ X_{\text{mod}_0} = 0 \end{cases} \quad (97)$$

\mathbf{C} représente l'opérateur de contrainte qui doit être appliqué dans le domaine temporel moyennant une transformation de Fourier inverse. Cet algorithme est très sensible à la valeur de α ainsi qu'au choix du filtre \mathbf{D} , ce qui nécessite une régularisation importante.

D'après Mancina la condition principale d'utiliser cette méthode est d'avoir effectué cette pré-déconvolution dans de bonnes conditions, c'est-à-dire avec une régularisation suffisante. A notre avis, un signal déconvolué précédemment ne sera pas aussi précis pour décrire localement le signal réel, et si la déconvolution est effectuée avec une bonne régularisation, elle sera suffisante d'avoir un bon résultat sans utiliser un modèle de solution !

En plus, dans le cas où le signal pré-déconvolué n'est pas précis ou bien contient des aberrations, le processus itératif ne fait qu'empirer ces aberrations et le résultat est un signal dégénéré. Nous verrons plus tard (chapitres 5 et 6) que les performances de cette méthode sont bonnes mais en présence d'un bruit additif important ou dans le cas de la déconvolution d'une structure présentant un fort gradient de concentration cette méthode s'avère limitée. En particulier, la solution obtenue contient des artefacts avec des composantes négatives qui, en analyse des concentrations, ne sont pas acceptées. Contraindre la solution pour qu'elle soit par exemple positive ne fait que la rendre physiquement acceptable, mais le résultat final est encore nettement insuffisant.

6. DECONVOLUTION SANS FONCTION DE RESOLUTION

6.1. La déconvolution aveugle « myope »

Nous n'avons pas utilisé cette méthode dans notre travail, nous la citons à titre indicatif seulement. Cette méthode est appelée aveugle parce qu'elle se passe en apparence de la mesure de la fonction de résolution. Dans cette méthode nous supposons que nous ayons à notre

disposition un signal original parfaitement connu x_0 , que nous mesurons à travers un système de réponse impulsionnelle h pour aboutir au signal mesuré y_0 . Considérons ensuite un signal mesuré y quelconque que nous proposons de déconvoluer pour retrouver le signal initial x .

Les équations de convolution associées :

$$\begin{cases} y_0 = h * x_0 + b & (1) \\ y = h * x + b & (2) \end{cases} \quad (98)$$

Convoluons l'équation (98-2) à gauche et à droite avec x_0 .

$$\begin{aligned} y * x_0 = h * x * x_0 + b * x_0 &\Leftrightarrow y * x_0 = h * x_0 * x + b' \text{ avec } b' = b * x_0 \\ &\Leftrightarrow y * x_0 = y_0 * x + b' \end{aligned} \quad (99)$$

D'après l'équation (99) il est possible de remplacer le problème de l'équation (98-2) par un autre problème de déconvolution dans laquelle la réponse impulsionnelle h n'apparaît plus. Bien sur il convient de prendre quelques précautions dans le choix du signal connu x_0 car il serait fâcheux que ce signal soit un filtre fréquentiel trop restrictif. En effet, dans l'équation (99) y_0 joue le rôle de la fonction de résolution : il est donc important que ce signal possède une bande passante la plus large possible afin de ne pas aggraver le filtrage déjà effectué par la réponse impulsionnelle h .

L'équation (99) peut être résolue par la suite grâce à n'importe quelle méthode décrite plus haut, itérative ou non.

6.2. La déconvolution partielle

Nous présentons dans cette partie une procédure de déconvolution dite déconvolution partielle proposée par Yang *et al.* [47-49]. Les auteurs montrent qu'un profil mesuré peut être significativement amélioré par un traitement numérique excessivement simple sans l'utilisation de la DRF, cette méthode consiste à ajouter au profil mesuré sa dérivée multiplié par la longueur de la décroissance exponentielle λ_d de la DRF pour les conditions d'analyse correspondantes.

Supposons que la fonction de résolution soit une simple demi-exponentielle décroissante, soit :

$$h(z) = \expd(z) = \frac{1}{\lambda_d} e^{-\frac{z}{\lambda_d}} \quad (100)$$

Soit également x le profil réel et y le profil mesuré, résultant de la convolution de x par la fonction de résolution restreinte h . on note F la transformée de Fourier. Nous allons montrer (de manière alternative mais équivalente à [48]) que l'inversion du problème est alors très simple.

On a :

$$y = h * x \Leftrightarrow F(y) = F(x) \cdot F(h)$$

$$\text{Où } F(h) = \frac{1}{1 + 2\pi f \lambda_d}$$

Donc :

$$F(x) = F(y) + (2\pi \lambda_d f) \cdot F(y)$$

Or

$$F(y') = (2\pi f) \cdot F(y)$$

D'où

$$F(x) = F(y) + \lambda_d \cdot F(y') = F(y + \lambda_d y')$$

$$\Leftrightarrow x = y + \lambda_d y' \quad (101)$$

Où y' représente la dérivée de y par rapport à la profondeur z .

Certes, cette déconvolution n'est pas précise puisque la véritable DRF ne se réduit pas à une simple exponentielle. Cependant elle est partielle dans le sens qu'elle améliore les résultats sans induire d'autres artefacts. En effet, un profil convolué par la DRF réelle décrite dans le chapitre 2 (équation (13)), puis déconvolué par l'équation (101) est équivalent au profil réel convolué par une gaussienne.

Il est intéressant de noter que la déformation exponentielle des profils constitue la part la plus importante de la déformation, et ce d'autant plus que l'énergie augmente, ce qui rend cette procédure d'autant moins partielle que l'énergie diminue. A noter également que cette procédure est bien entendue sensible au bruit : la dérivation numérique de données bruitées génère potentiellement des artefacts et des valeurs négatives. L'emploi d'un filtre ou tout autre procédure de lissage peut s'imposer.

Nous reviendrons sur les potentielles applications de cette méthode à l'analyse SIMS dans le chapitre 6 de ce travail.

CONCLUSION

Dans ce chapitre nous avons donné un état de l'art ainsi que les différentes méthodes de la déconvolution dans le cas des systèmes linéaires et invariants. Hors du milieu de traitement du signal, ces techniques de déconvolution sont très souvent en bute à une incompréhension, voire à une hostilité inhérente au fait qu'il est au premier abord très surprenant de pouvoir retrouver en partie un signal apparemment définitivement altéré par le processus de mesure.

Nous avons vu que l'analyse SIMS présente un cas sévère de déconvolution à cause du mal conditionnement de son système et la présence d'un bruit additif important qui nécessite une attention particulière et implique de prendre des précautions. Pour cela une masse d'algorithmes a été proposée pour mieux conditionner le système ainsi que d'améliorer la résolution en profondeur.

Dans les méthodes non itératives (filtrage inverse), la régularisation de Tikhonov-Miller peut garantir l'unicité et la stabilité de la solution mais peut conduire à un résultat peu satisfaisant, la quantité d'informations apportée n'est pas suffisante pour obtenir une solution proche de la solution idéale. L'introduction du modèle de solution obtenu par minimisation de l'écart quadratique entre la reconstruction et la mesure ne fait qu'améliorer les résultats de 10 %. Un modèle de solution obtenu par une pré-déconvolution n'est pas précis dans la description du signal réel. En outre, si le signal pré-déconvolué n'est pas précis ou bien contenant des aberrations, le processus itératif ne fait qu'empirer ces aberrations et le résultat est un signal dégénéré.

Les méthodes itératives quant à elles permettent de se rapprocher mieux vers la solution réelle, mais ces méthodes sont très sensibles au bruit. L'algorithme de Van cittert avec soustraction terminale du bruit proposé par G. Prudon [51] conduit à une perte d'informations. Même avec la régularisation, ces méthodes ne peuvent pas garantir un résultat satisfaisant à cause de la présence des oscillations (avec des composantes négatives) dans le signal obtenu. Ces oscillations sont dues principalement à la présence du bruit dans la mesure. L'application de

contraintes dures ne fait qu'à rendre la solution physiquement acceptable mais la qualité du signal obtenu reste insuffisante.

La déconvolution sans fonction de résolution en particulier la déconvolution partielle n'est pas aussi précise (on ne prend qu'une partie du signal à déconvoluer et la DRF ne se réduit pas à une simple décroissance exponentielle), et est très sensible au bruit, la dérivation du signal génère des aberrations qui peut fausser l'interprétation des résultats.

Donc le problème majeur dans la déconvolution des profils SIMS est la présence du bruit qui a pour conséquence une solution multiple instable et oscillante. La régularisation soit dans les méthodes directes soit dans les méthodes itératives ne fait qu'à garantir l'unicité de la solution et d'adoucir un peu le signal sans l'obtention d'une solution satisfaisante. Dans le prochain chapitre nous proposons une nouvelle méthode de restauration du signal SIMS qui est la déconvolution multirésolution par décomposition sur une base d'ondelette dont le but est de franchir les limites des différentes méthodes citées.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **King B. V.** et **Tsong I. S. T.**, *Deconvolution of atomic mixing effects from SIMS depth profiles*, J. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., 1985, Vol. B7/B8, pp. 793-797
- [2] **Van Cittert P.H.**, *Zum ein fluß der spalbreit auf die intensitätswerteilung in spektrallinien II*, Zeitschrift für physics, 1931, Vol. 69, pp.298-308
- [3] **Prost R.**, *Contribution à l'élaboration d'algorithmes itératifs discrets super résolvents de déconvolution avec contraintes. Applications*. Thèse de doctorat d'état. INSA de Lyon et Université Claude Bernard Lyon 1, 1987, 278 p.
- [4] **Burdeau J. L.**, *Deconvolution multiresolution par décomposition sur une base d'ondelettes. Applications*, Thèse de doctorat, INSA de Lyon France, 2000, 194 p.
- [5] **De Coulomb F.**, *Traité d'électricité*, Presse polytechniques et universitaires romandes, Lausanne, Vol. 6, 1994, 548 p.
- [6] **Max J.** et **col.**, *Méthodes et techniques de traitement du signal et applications aux mesures physiques*, ed. Masson, Paris, 1972, 351 p.
- [7] **Mancina G.**, *Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse par SIMS par deconvolution : algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la microélectronique silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2001, 184 p.
- [8] **Demoment G.**, *Image reconstruction and Restoration : overview of common estimation structures and problems*, IEEE Transactions on Acoustics, Speech and signal processing, 1989, Vol. 37, n° 12, pp. 2024-2036
- [9] **Hunt B. R.**, *The application of constrained least squares. Estimation to image restoration by digital computer*, IEEE Transactions on computers, 1973, Vol. C-22, n° 9, pp. 805-812
- [10] **Hadamard J.**, *Lectures on the Cauchy problem in linear partial differential equations*, New Haven Yal University Press, 1923, 112 p.
- [11] **Franklin J. N.**, *Well-posed stochastic extensions of ill linear problems*. Journal of math. Anal., 1970, Vol. 31, pp. 682-776

- [12] **Leung C. M.** et **Lu W.-S.**, *On the use of discret Laplacian operators in image restoration*, IEEE Pacific RIM Conference on Communications, Computers and Signal Processing Proceedings, New York, 1995, pp. 411-415
- [13] **Miller K.**, *Least squares methods for ill-posed problems with a prescribed bound*, Journal of math. Anal., 1970, Vol. 1, n° 1, pp. 52-74
- [14] **Katsaggelos A. K.**, **Biemond H. J.**, **Mersereau R. M.** et **Shafer R.W.**, *Regularized iterative image restoration algorithm*, IEEE, Transactions on Signal Processing, 1991, Vol. 39, n° 4, pp. 914-929
- [15] **Prost R.** **Burdeau J. L.**, **GuilLotau S.** et **Goutte R.**, *Regularized Myopic Image Deconvolution. Application to aperture Synthesis in Radio-Astronomy.*, In Poceeding of EUSIPCO 94, Edinburgh Scotland UK, 1994, Vol. 1, pp. 307-310
- [16] **Youla D. C.** et **Webb H.**, *Image restoration by the methode of convex projections: Part 1- Theory*, IEEE Transactions On medical Imaging, 1982, Vol. MI-1, n°2, pp. 81-93
- [17] **Stone M.**, *Cross-validatory Choice and Assessment of Statistical Predictions*. J. Roy. Statist. Soc., 1974, Series B. Vol. 36, pp. 111-147
- [18] **Elden L.**, *Algorithms for the Regularization of Ill-Conditioned Least Squares Problems*, B. I. T., 1977, Vol. 17, pp. 134-145
- [19] **Wahba G.**, *Practical approximate solutions to linear operator equations when the data are noisy*, Journal of Numer. Anal., 1977, Vol. 14, n° 4, pp. 651-666
- [20] **Golub H. G.**, **Heath M.** et **Wahba G.**, *Generalized Cross-Validation as a method for choosing a good ridge parameter*. TECHNOMETRICS., 1979, Vol. 21, n° 2, pp. 215-223
- [21] **Titterington D. M.**, *General Structure of Regularization Procedures in Image Reconstruction*. Astronomy and Astrophysics, 1985, Vol. 144, pp. 381-387
- [22] **Rice J. A.**, *Choice of Smoothing Prameter in deconvolution Problems*. Contemporary math., 1986, Vol. 59, pp. 137-151
- [23] **Girard D.**, *Un algorithme simple et rapide pour la validation croisée généralisée sur des problèmes de grande taille*, Informatique et Mathématiques appliquées de Grenoble, Rapport de recherche n° RR 669-M-, Mai 1987, 23 p.
- [24] **Hall P.** et **Titterington D. M.**, *Common Structure of Techniques for choosing Smoothing Parameters in Regression Problems*, Journal of Royal Statistical Society, 1987, Vol. 49, n° 2, pp. 184-198
- [25] **Desbat L.** et **Girard D.**, *Un nouvel Estimateur d'erreur pour le choix de paramètres dans la régularisation de problèmes de moindres carrés. Application à la déconvolution régularisée*. Informatique et mathématiques appliquées de Grenoble, octobre 1988, Rapport de recherche n ° RR 744-M-, 22p.
- [26] **Girard D. A.**, *A fast Monte-Carlo Cross-validation Pocerure for large least Squares Problèmes with noisy Data*, Numerishe Mathematik, 1989, Vol. 56, pp.1-23
- [27] **Reeves S. J.** et **Merseau R. M.**, *Optimal Regularization "Parameter of estimation for image restoration*, Image Processing Algorithms and techniques II, 1991, Vol. 1452, pp. 121-138
- [28] **Reeves S. J.** et **Higdon A. C.**, *Perceptual Evaluation of the Mean-square error Choice of regularization Parametrers*, IEEE Transactions on Image Processing, 1995, Vol. 4, n° 1, pp. 107-110
- [29] **Galatsanos N. P.** et **Katsaggelos A. K.**, *Methods for choosing the regularization parameter and estimation the noise variance in Image Restoration and their relation*, IEEE Transactions on Image

- Processing, 1992, Vol. 1 n°3, pp. 322-336
- [30] **Kang M. G.** et **Katsaggelos A. K.**, *Simultaneous Iterative Image Restoration and Evaluation of the regularization parameter*. IEEE Transactions on Signal Processing, 1992, Vol. 40, n° 9, pp. 2329-2334
- [31] **Connolly T. J.** et **Lane R. G.**, *Constrained regularized methods for superresolution*, IEEE Signal Processing society, International Conference on Image processing, Chicago Illinois, USA. Los Alamitos, California 1998, pp. 727-731
- [32] **Berger T.**, **Stromberg J. O.** et **Eltoft T.**, *Adaptative regularized constrained least squares images restoration*, IEEE Transactions on Image Processing, 1999, Vol. 8 n°9, pp. 1191-1203
- [33] **Acton S. C.** et **Bovik A. C.**, *Piecewise and local Image models for regularized image restoration using cross-validation*, IEEE Transactions on Image Processing, 1999, Vol. 8 n°5, pp. 652-665
- [34] **Molina R.**, **Katsaggelos A. K.** et **Mateos J.**, *Bayesian and regularization methods for hyperparameter estimation in image restoration*, IEEE Transactions on Image Processing, 1999, Vol. 8 n°2, pp. 231-246
- [35] **Thompson A. M.**, **Brown J. C.**, **Kay J. W.** et **Titterington D. M.**, *A study of methods of choosing the smoothing parameter in Image restoration by regularization*, IEEE Transactions on patern analysis and machine intelligence, 1991, Vol. 13, n° 4, pp. 326-339
- [36] **Barakat V.**, *Contribution à la restauration d'images dégradées par un système spatialement variant. Apport d'un modèle d'image*, Thèse de doctorat, INSA de Lyon, 1998, 149 p.
- [37] **Barakat V.**, **Guilpart B.**, **Goutte R.** et **Prost R.**, *Model-based Tikhonov-Miller Image Restoration*, Proceeding of International Conference on Image Processing, 1997, Santa Barbara CA, Vol. 1, pp. 310-313
- [38] **Shafer R. W.**, **Mersereau R. M.** et **Richards M. A.**, *Constrained iterative restoration algorithms*, IEEE, 1981, Vol. 69, pp. 432-450
- [39] **Sezan I. M.**, **Murat Tekalp A.** et **Cheng-tie Cheng**, *Regularized Signal Restoration using the theory of convex projections*, Proceeding ICASSP, 1987, Dallas, pp. 1565-1568
- [40] **Stark H. B.** et **Olsen E. T.**, *New results in projection-type algorithms of use in image processing and reconstruction*. Proceeding SPIE. Inverse problems in scattering and imaging, San Diego, California, 1992, Vol. 1767, 28 p.
- [41] **Prost R.** et **Goutte R.**, *Discrete Constrained iterative deconvolution algorithms with optimized rate of convergence*, Signal Processing, 1984, Vol. 7 n°3, pp. 229-233
- [42] **Gautier B.**, **Prudon G.** et **Dupuy J. C.**, *Toward a better reliability in the deconvolution of SIMS depth profiles, surface and interface analysis*, 1998, Vol. 26, pp. 974-983
- [43] **Gautier B.**, **Dupuy J. C.**, **Prost R.** et **Prudon G.**, *Effectiveness and limits of the deconvolution of SIMS depth profiles of Boron in Silicon*, surface and interface analysis, 1997, Vol. 25, pp. 464-477
- [44] **Gautier B.**, **Dupuy J. C.**, **Semmache B.** et **Prudon G.**, *SIMS depth profile correction for the study of the first step of the diffusion of boron in silicon*, Nuclear Instruments and Methods for Physic research, 1998, Vol. B 142, pp. 361-376
- [45] **Gautier B.**, **Prost R.**, **Prudon G.** et **Dupuy J. C.**, *Deconvolution of SIMS depth profiles of Boron in Silicon*, surface and interface analysis, 1996, Vol. 24, pp. 733-745
- [46] **Fares B.**, **Gautier B.**, **Dupuy J.C.**, **Prudon G.**, et **Holliger P.**, *Deconvolution of very low primary energy SIMS depth profiles*, Journal of Applied Surface Sciences, 2006, Vol. 252, pp. 6478-6481.

- [47] **Yang M. H., Li Y., Hitzman C. et Odom R.**, *Accurate modelling of residual recoil-mixing during SIMS measurements* J. Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 2001, Vol. J4.16, pp. 669-672
- [48] **Yang M.H. et Goodman G. G.**, *Application of deconvolution of boron depth profiling in SiGe heterostructures*, J. Thin solid films, 2006, Vol. 508, pp. 276-278
- [49] **Kawashima Y., Ide T., Aoyagi S. et Kudo M.**, *Deconvolution analysis of dopant depth profile of Si at AlGa/GaAs interface using Al composition profile as reference*, J. Appl. Surf. Sci., 2004, Vol. 231/232, pp. 800-803
- [50] **Shao L., Liu J., Wang C., Ma K. B., Zhang J., Chen J., Tang D., Patel S. et Chu W-K.**, *Response function during oxygen sputter profiling for deconvolution of boron spatial distribution*, J. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., 2004, Vol. B219/220, pp. 303-306
- [51] **Prudon G.**, *Etude de la sensibilité et de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires : Application à la silice et au silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1990, 299 p.

Sommaire du chapitre 4

LA DECONVOLUTION MULTIREOLUTION PAR DECOMPOSITION SUR UNE BASE D'ONDELETTES

Introduction	99
1. Décomposition en sous-bandes	99
1.1. Principe	99
1.2. Conditions de reconstruction parfaite	100
1.2.1. Solution d'Esteban et Galand	101
1.2.2. Solution de Smith et Barnwell	101
2. Décomposition sur une base d'ondelettes	102
2.1. Principe	102
2.2. Décomposition-Reconstruction d'un signal	103
2.3. Décomposition itérée	104
2.3.1. Décomposition dyadique régulière	104
2.3.2. Décomposition dyadique itérée	104
2.3.3. Décomposition irrégulière	104
3. Déconvolution multirésolution	105
3.1. Modélisation de la déconvolution multirésolution	105
3.2. Algorithme de la déconvolution multirésolution	106
3.3. Formulation matricielle de la déconvolution multirésolution	108
4. Déconvolution multirésolution régularisée	110
5. Seuillage des coefficients d'ondelettes	112
5.1. Principe du seuillage	112
5.2. Différents types de seuillage	114
5.2.1. Seuillage dur	114
5.2.2. Seuillage doux	114
5.3. Estimer l'écart-type du bruit	115
6. Déconvolution par la régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal décomposé sur une base d'ondelette	115
7. Définition des erreurs	117
Conclusion	117
Bibliographie	117

Chapitre 4

LA DECONVOLUTION MULTIREOLUTION PAR DECOMPOSITION SUR UNE BASE D'ONDELETTES

INTRODUCTION

Dans le chapitre précédent, nous avons vu les différentes méthodes de déconvolution ainsi que les limites de chacune. Nous avons conclu que la régularisation dans les problèmes de déconvolution, problèmes en pratique mal-conditionnés, peut garantir l'unicité de la solution, mais sa stabilité et sa qualité sont loin d'être atteintes. Celles-ci sont complètement gouvernées par le paramètre de régularisation α associé à l'opérateur de régularisation \mathbf{D} . En effet, un paramètre α trop faible va conduire à une solution dominée par le bruit présent au sein des données observées, un paramètre α trop élevé conduira à une solution peu sensible au bruit, en contrepartie celle-ci sera très éloignée des données mesurées.

En outre, dans les différentes méthodes de déconvolutions régularisées, le paramètre de régularisation s'applique d'une manière globale, ce qui conduit à traiter les hautes fréquences, dominées majoritairement par le bruit, comme les basses fréquences qui contiennent l'information utile. L'idée consiste donc à adapter localement le paramètre de régularisation dans les différentes bandes de fréquences, ainsi nous serons amenés à déconvoluer les signaux décomposés préalablement en sous bandes ou par projection sur une base d'ondelettes.

Dans ce chapitre, nous allons tout d'abord rappeler le principe de la décomposition en sous-bandes et de la décomposition sur une base d'ondelettes. Nous proposons ensuite deux algorithmes de déconvolution intégrant ces notions de décomposition.

1. DECOMPOSITION EN SOUS-BANDES

1.1. Principe

La décomposition en sous-bandes est introduite pour la première fois en 1976 pour le codage de la parole. Ce principe a ensuite fait l'objet de nombreux prolongements qui lui ont permis d'être utilisé dans de nombreuses applications [1-4].

Le principe de décomposition / reconstruction en deux sous-bandes est présenté sur la Figure 1.

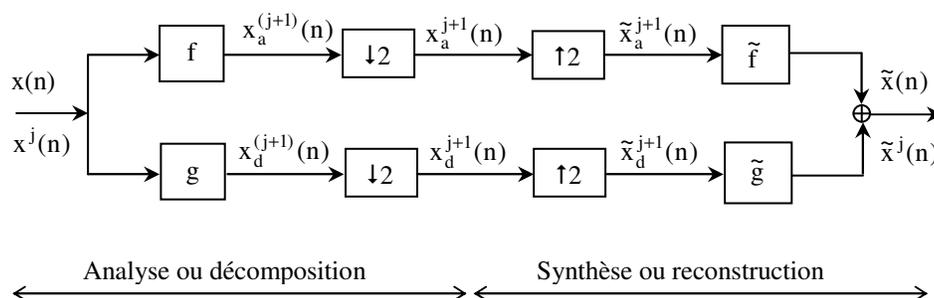


Figure 1 : Décomposition / reconstruction à 2 bandes.

La décomposition en sous-bandes, ou analyse du signal, nécessite un filtrage passe-bas (f) suivi d'une décimation d'un facteur deux, pour obtenir le signal sous-bande basse fréquence et un filtrage passe-haut (g), suivi d'une décimation d'un facteur deux, pour obtenir le signal sous-bande haute fréquence complémentaire du signal basse fréquence. On notera qu'après décomposition nous obtenons deux sous-signaux de taille moitié du signal original $x(n)$.

La synthèse sous-bande consiste à reconstruire le signal original $x(n)$ à l'aide des deux sous-signaux. Ceux-ci sont d'abord interpolés par un zéro puis filtrés par un filtre passe bas (\tilde{f}) pour le signal sous-bande basse fréquence et passe haut (\tilde{g}) pour le signal haute fréquence. La somme de ces signaux filtrés doit permettre la reconstruction exacte de $x(n)$.

Nous allons maintenant rappeler les conditions que doivent satisfaire les différents filtres pour que la reconstruction $\tilde{x}(n)$ de $x(n)$ soit parfaite.

1.2. Conditions de reconstruction parfaite

Considérons le banc de filtres de la Figure 1, dans le cas d'une reconstruction parfaite. On peut alors le représenter d'une manière plus concise par la figure suivante [1]:

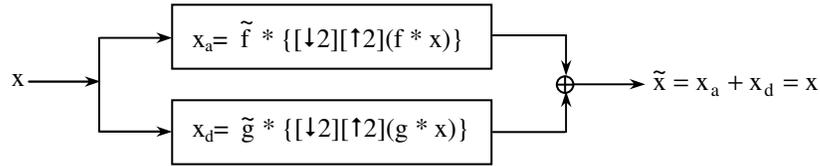


Figure 2 : Banc de filtres à reconstruction parfaite.

Pour établir les conditions de reconstruction parfaite, nous allons exprimer le signal reconstruit en fonction du signal original et des différents filtres. Pour cela nous allons utiliser les transformées en z des signaux et systèmes concernés. Ainsi :

$$\tilde{X}(z) = \frac{1}{2}[X(z)(F(z)\tilde{F}(z) + G(z)\tilde{G}(z))] + \frac{1}{2}[X(-z)(F(-z)\tilde{F}(z) + G(-z)\tilde{G}(z))] \quad (1)$$

On note que la transformée en z d'une suite $s = (s_k)_{k \in \mathbb{Z}}$ est définie formellement par $S(z) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} s_k z^{-k}$, $z \in \mathbb{C}$.

On peut écrire l'équation (1) sous la forme :

$$\tilde{X}(z) = X(z)T(z) + X(-z)S(z) \quad (2)$$

Où

$$T(z) = \frac{1}{2}[F(z)\tilde{F}(z) + G(z)\tilde{G}(z)] \text{ et } S(z) = \frac{1}{2}[F(-z)\tilde{F}(z) + G(-z)\tilde{G}(z)]$$

Le terme 2 de l'équation (2) correspond au recouvrement spectral introduit par l'opération de sous-échantillonnage. La reconstruction sera parfaite si $\left| T(z = e^{2\pi j \frac{f}{f_s}}) \right| = k$ (k : constante réelle) et si $S(z) = 0$ [8]. Ce qui se traduit par :

$$F(z)\tilde{F}(z) + G(z)\tilde{G}(z) = kz^{-R} \quad (3)$$

$$F(-z)\tilde{F}(z) + G(-z)\tilde{G}(z) = 0 \quad (4)$$

La condition (3) assure une reconstruction sans distorsion du module et avec une distorsion linéaire de phase (dans l'usage courant il est dit qu'il n'y a pas de distorsion de phase), le signal est reconstruit avec un décalage de R échantillons. La condition (4) appelée condition *d'anti-aliasing* assure une reconstruction sans recouvrement spectral. Plusieurs types de filtres, vérifiant ou approchant ces conditions, ont été construits.

1.2.1. Solution d'Esteban et Galand

Esteban et Galand [2] ont proposé d'utiliser des filtres à réponse impulsionnelle finie ayant un nombre pair de coefficients. Ces filtres sont liés par les relations suivantes :

$$G(z)=F(-z)\Rightarrow g(n) = (-1)^n f(n) \quad (5)$$

$$\tilde{F}(z) = F(z) \Rightarrow \tilde{f}(n) = f(n) \quad (6)$$

$$\tilde{G}(z) = -G(z) \Rightarrow \tilde{g}(n) = -g(n) \quad (7)$$

Les filtres f et g sont appelés Filtres Miroirs en Quadrature notés QMF. Avec les conditions (5), (6) et (7), le terme $X(-z)$ correspond au recouvrement va disparaître du signal de sortie. La fonction de transfert globale du système devient :

$$T(z) = \frac{1}{2}[F^2(z) - G^2(z)] \quad (8)$$

Les filtres f et g sont à phase linéaire, le système ainsi construit n'introduit pas de distorsion de phase. Pour éliminer la distorsion d'amplitude il faut avoir :

$$|T(z)| = 1 \quad (9)$$

Avec cette condition nous obtiendrons une reconstruction parfaite, soit $\tilde{X}(z) = z^{-R}X(z)$. Le seul filtre qui satisfait cette condition est le filtre de Haar de longueur 2 [5]. Les transformées en z de ce filtre est du filtre passe-haut correspondant sont :

$$F(z) = \frac{1}{2}(1 + z^{-1}) \quad (10)$$

$$G(z) = \frac{1}{2}(1 - z^{-1}) \quad (11)$$

Le retard R est égal à 1. Si la reconstruction obtenue à partir de ce couple de filtres est parfaite, la capacité de séparation spectrale de ces bandes reste quant à elle très faible. Les signaux sous-bandes ainsi obtenus contiennent de l'information commune.

En tolérant une faible distorsion d'amplitude, il est possible de concevoir des filtres ayant de bonne capacité de séparation spectrale [6].

1.2.2. Solution de Smith et Barnwell

Cette solution proposée par Smith et Barnwell en 1984 [7] fut ensuite largement développée par Vetterli [8]. Les filtres proposés permettent d'éliminer le recouvrement, la distorsion de phase et la distorsion d'amplitude introduites par le système de décomposition en sous-bandes. Ces filtres de longueur paire à phase non linéaire sont reliés par les relations suivantes :

$$\tilde{F}(z)=G(-z)\Rightarrow \tilde{f}(n) = (-1)^n g(n) \quad (12)$$

$$\tilde{G}(z) = -\tilde{F}(-z) \Rightarrow \tilde{g}(n) = (-1)^{n+1} \tilde{f}(n) \quad (13)$$

$$G(z) = -F(-z^{-1})z^{-R} \Rightarrow g(n) = (-1)^n f(R - n) \quad (14)$$

Cette dernière relation (14) définit une nouvelle classe de filtres. Ces filtres sont appelés Filtres Conjugués en Quadrature notés CQF. Le filtre f n'est pas à phase linéaire mais il est causal. Pour que le filtre \tilde{f} soit causal on choisit un retard R égal à l'ordre du filtre f .

En introduisant (12), (13) et (14) dans (3) nous obtenons :

$$F(z)F(z^{-1}) + F(-z^{-1})F(-z) = k \quad (15)$$

En utilisant le filtre produit $F_p(z) = F(z).F(-z)$, la relation précédente devient :

$$F_p(z) + F_p(-z) = k \quad (16)$$

Les filtres proposés par Smith et Barnwell correspondent au cas particulier $k = 2$ [7].

2. DECOMPOSITION SUR UNE BASE D'ONDELETTES

2.1. Principe

Nous allons maintenant rappeler la notion de décomposition sur une base d'ondelettes. La notion d'ondelettes a été introduite par le géophysicien Jean Morlet au début des années 80 [9, 10]. Les ondelettes ont ensuite suscité un grand intérêt et font l'objet de nombreuses recherches et développements [11-17].

La décomposition sur une base d'ondelettes repose sur le principe suivant : la transformée de Fourier nécessite la connaissance de tout le signal pour lui associer une représentation fréquentielle. Un échantillon à un instant contribue à tous les échantillons de la représentation fréquentielle par une constante, s'il est en $t = 0$, ou une oscillation complexe d'étendue infinie. Réciproquement, un échantillon de la représentation fréquentielle à la fréquence f_0 correspond à une oscillation temporelle infinie. Ainsi, la transformation de Fourier échoue dans l'analyse instantanée des oscillations comme le fait sans difficulté le musicien. Il est alors devenu utile de donner une représentation temps-fréquence du signal. Cette idée qui conduit à la notion de fréquence instantanée a déjà fait l'objet d'un intérêt particulier à la fin des années 40 [18], un outil mathématique était alors proposé : la Transformée de Wigner-Ville. Cette première démarche induisant des calculs longs et complexes fut dans un premier temps laissée de côté. Une nouvelle orientation apparue à la fin des années 60 à la suite du développement d'outils de calcul rapide de la transformée de Fourier [19]. L'un des premiers outils d'analyse temps-fréquence fut alors la Transformée de Fourier à court terme [20]. Cet outil est encore aujourd'hui très utilisé en analyse de parole. La transformée de Fourier à court terme utilise des fonctions de base qui sont des sinusoides qui vibrent sur un support limité du temps ou de l'espace. Quel que soit la fréquence de la fonction de base, le support temporel ou spatial d'analyse reste de longueur constante. Cela implique que la résolution (pouvoir de séparation des fréquences) reste constante sur tout l'axe des fréquences et du temps.

Intuitivement il paraît logique que ce pouvoir de résolution soit plus important pour les fréquences élevées. Les ondelettes sont des fonctions de base qui vibrent sur une certaine plage, s'amortissent à l'extérieur de cette plage et présentent toujours le même nombre d'oscillations quelque soit la fréquence considérée. Ainsi, aux hautes fréquences le support temporel ou spatial est de faible dimension, ce qui permet une analyse avec une très bonne résolution.

Les fréquences de base dépendent de deux paramètres j et k liés, respectivement, à la fréquence par dilatation / contraction du support et au temps. On retrouve alors la notion de temps-fréquence. Il est plus fréquent de rencontrer la notion temps-échelle quand il s'agit des ondelettes. La notion d'échelle est liée à la notion de contraction / dilatation du support d'analyse. Le paramètre j correspond au niveau de résolution 2^{-j} , ainsi $j = 0$ correspond au signal original. La représentation temps-échelle d'un signal revient à décomposer celui-ci en deux signaux :

- ✚ Un signal détails obtenu en projetant le signal à un niveau de résolution j sur une base de fonctions notées Ψ_j . Ces fonctions Ψ_j sont des fonctions oscillantes de « hautes fréquences ». Ces fonctions Ψ_j sont appelées ondelettes.
- ✚ Un signal approximation obtenu par projection du signal à un niveau de résolution j sur une base de fonctions complémentaires à celle de Ψ_j . Ces nouvelles fonctions notées Φ_j sont appelées fonctions d'échelle.

Mallat donne dans [14] et [15] les relations qui lient les fonctions Ψ_j et Φ_j . Les deux fonctions seront notées $\Psi(t)$ et $\Phi(t)$ pour $j = 0$.

2.2. Décomposition-Reconstruction d'un signal

Mallat a montré [14] que la décomposition d'un signal discret x^j à la résolution 2^{-j} , en un signal d'approximation x_a^{j+1} à une résolution plus grossière $2^{-(j+1)}$ et en un signal de détail x_d^{j+1} correspondant aux détails perdus dans l'approximation se ramène, respectivement, au filtrage du signal par un filtre passe-bas f et par un filtre passe-haut g et par la décimation d'un facteur 2 des signaux obtenus. Si f_s est la fréquence d'échantillonnage des signaux, chaque filtre a une fréquence de coupure $f_s/4$. Les filtres sont construits à partir de la fonction d'échelle génératrice $\Phi(t)$ et de l'ondelette mère $\Psi(t)$.

A un niveau de résolution $2^{-(j+1)}$, le signal approximation noté x_a^{j+1} et le signal de détail x_d^{j+1} sont obtenus de la façon suivante :

$$x_a^{(j+1)}(n) = \sum_k f(n-k)x^j(k) = f(n) * x^j(n) \quad (17)$$

$$x_d^{(j+1)}(n) = \sum_k g(n-k)x^j(k) = g(n) * x^j(n) \quad (18)$$

Après l'opération de sous échantillonnage nous obtenons :

$$x_a^{(j+1)}(2n) = x_a^{j+1}(n) \quad \text{et} \quad x_d^{(j+1)}(2n) = x_d^{j+1}(n) \quad (19)$$

Pour le signal original nous noterons :

$$x^0 = x = x_a^0 = x_d^0$$

Les réponses impulsionnelles des filtres sont construites à partir des fonctions $\Psi(t)$ et $\Phi(t)$:

$$f(n) = \langle \Phi(t), \Phi(t-n) \rangle \quad (20)$$

$$g(n) = \langle \Psi(t), \Psi(t-n) \rangle \quad (21)$$

Où

$$\Phi(t) = 2^{-\frac{1}{2}} \Phi\left(\frac{t}{2}\right) \quad \text{et} \quad \Psi(t) = 2^{-\frac{1}{2}} \Psi\left(\frac{t}{2}\right)$$

Les fonctions de base de l'espace d'approximation V^j sont les fonctions Φ_j^k telles que :

$$\Phi_j^k(t) = 2^{-\frac{j}{2}} \Phi(2^{-j}t - k) \quad (22)$$

Les fonctions de base de l'espace de détails W^j , sous espace de V^{j-1} , sont les fonctions Ψ_j^k telles que :

$$\Psi_j^k(t) = 2^{-\frac{j}{2}} \Psi(2^{-j}t - k) \quad (23)$$

Dans le cas des ondelettes orthogonales nous avons les relations, $\forall k, i \in \mathbb{Z}$, suivantes :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_j^k(t), \Psi_j^i(t) \rangle &= 0 \\ \langle \Phi_j^k(t), \Phi_j^i(t) \rangle &= \delta_{i,k} \\ \langle \Psi_j^k(t), \Psi_j^i(t) \rangle &= \delta_{i,k} \end{aligned}$$

Les filtres construits à partir des fonctions ondelettes orthogonales sont des filtres orthogonaux, ce sont des CQF. Ils vérifient les propriétés (12, 13, 14) de § 1.2.2. Les réponses impulsionnelles de ces filtres sont liées par la relation :

$$\langle f(n-2l), g(n-2k) \rangle = 0 \quad (24)$$

La reconstruction du signal de sortie est alors définie par (voir Figure 1) :

$$\tilde{x}_a^{j+1}(2n+1) = 0 \quad \text{et} \quad \tilde{x}_a^{j+1}(2n) = x_a^{j+1}(n) \quad (25)$$

$$\tilde{x}_d^{j+1}(2n+1) = 0 \quad \text{et} \quad \tilde{x}_d^{j+1}(2n) = x_d^{j+1}(n) \quad (26)$$

$$\tilde{x}^j(n) = 2[\tilde{f}(n) * \tilde{x}_a^{j+1}(n) + \tilde{g}(n) * \tilde{x}_d^{j+1}(n)] \quad (27)$$

2.3. Décomposition itérée

Plusieurs types de décomposition itérée peuvent être envisagés.

2.3.1. Décomposition dyadique régulière

Ce type de décomposition consiste à décomposer itérativement chacune des sous-bandes obtenues après décomposition. Ainsi après N décompositions, 2^N sous-bandes de taille égale sont obtenues.

2.3.2. Décomposition dyadique itérée

Ce type de décomposition est aussi appelé décomposition pyramidale ou en octaves. Introduite par Burt et *al.* [21], elle consiste à ne décomposer que la sous-bande issue du filtrage passe-bas.

2.3.3. Décomposition irrégulière

Il est parfois intéressant de décomposer les signaux de façon adaptative : pour les signaux qui présentent un spectre qui n'est pas plat, il faut adapter la largeur des bandes de fréquences associées aux sous-bandes. Akansu et *al.* [22] proposent un algorithme permettant d'optimiser l'arbre de décomposition en fonction d'un critère de concentration d'énergie.

3. DECONVOLUTION MULTIREOLUTION

La représentation multirésolution, ou décomposition en ondelettes, d'un signal inconnu x permet de lui associer un signal d'approximation basse fréquence (coefficients d'échelle) et un signal de détails haute fréquence (coefficients d'ondelettes).

Le signal d'approximation est, par sa méthode d'obtention, très régulier (lisse) alors que, au contraire, le signal de détails est irrégulier (rugueux). Cette information a priori pourra être exploitée dans l'algorithme de déconvolution. Une base d'ondelettes régulière sera privilégier si l'on veut maîtriser cette régularité, en particulier si des décompositions successives sont utilisées. On notera que l'emploi d'une base d'ondelettes à support borné permet de conserver la connaissance a priori du support du signal x dans sa représentation multirésolution. L'efficacité de la contrainte de support borné sera préservée si le support des ondelettes est petit vis-à-vis de celui du signal.

Dans le cas d'un signal positif, le signal d'approximation sera positif uniquement si tous les coefficients du filtre basse fréquence d'analyse le sont. Le signal de détails est toujours de moyenne nulle, cette information peut être utilisée comme une nouvelle contrainte douce [1].

3.1. Modélisation de la déconvolution multirésolution

Considérons le système de la Figure 1 et considérons l'opération de convolution notée :

$$y = h * x \quad (28)$$

Les signaux x et y peuvent encore s'écrire :

$$x = \tilde{x}_a * \tilde{f} + \tilde{x}_d * \tilde{g} \quad (29)$$

$$y = \tilde{y}_a * \tilde{f} + \tilde{y}_d * \tilde{g} \quad (30)$$

Les équations (28) et (29) permettent également d'exprimer y de la façon suivante :

$$y = h * (\tilde{x}_a * \tilde{f}) + h * (\tilde{x}_d * \tilde{g}) \quad (31)$$

D'après la propriété de commutativité de la convolution, l'équation (31) peut s'écrire :

$$y = (h * \tilde{x}_a) * \tilde{f} + (h * \tilde{x}_d) * \tilde{g} \quad (32)$$

Ou encore

$$y = y_a * \tilde{f} + y_d * \tilde{g} \quad (33)$$

Avec

$$y_a = h * \tilde{x}_a \quad \text{et} \quad y_d = h * \tilde{x}_d$$

En comparant les équations (30) et (33) on serait tenter d'écrire $y_a = \tilde{y}_a$ et $y_d = \tilde{y}_d$. Cependant ces égalités sont manifestement inexactes car la convolution de h , respectivement avec \tilde{x}_a et \tilde{x}_d conduit à :

$$y_a(2n+1) \neq 0 \quad \text{et} \quad y_d(2n+1) \neq 0 \quad (34)$$

Ce résultat est en contradiction avec la définition des signaux d'approximation et de détails. Malgré cette contradiction la reconstruction de y est exacte [1]. Ce résultat est une conséquence

de la non unicité de la reconstruction multirésolution. Les théorèmes (évoqués dans l'annexe 2) ainsi que leurs démonstrations traitent en détail ces propriétés.

La reconstruction de y (équation 33) dans le domaine de la transformée en z s'écrit :

$$Y(z) = Y_a(z)\tilde{F}(z) + Y_d(z)\tilde{G}(z) \quad (35)$$

Rappelons que

$$Y_a(z) = \tilde{Y}_a(z) + \frac{1}{2}F(-z)X(-z)[H(z) - H(-z)] \quad (36)$$

De même

$$Y_d(z) = \tilde{Y}_d(z) + \frac{1}{2}G(-z)X(-z)[H(z) - H(-z)] \quad (37)$$

En substituant (37) et (36) dans (35) nous obtenons :

$$Y(z) = \tilde{Y}_a(z)\tilde{F}(z) + \tilde{Y}_d(z)\tilde{G}(z) + \frac{1}{2}X(z)[H(z) - H(-z)][F(-z)\tilde{F}(z) + G(-z)\tilde{G}(z)] \quad (38)$$

Or, le second terme est nul d'après la relation (4) de suppression de repliement spectral. Le second terme de, respectivement (36) et (37) satisfait les conditions évoquées par le théorème 1 (voir § A de l'annexe 2) de non unicité de la reconstruction multirésolution.

3.2. Algorithme de la déconvolution multirésolution

L'algorithme de la déconvolution multirésolution est basé sur la résolution du problème de la façon suivante [1]:

1. Calcul des signaux de détails (coefficients d'ondelettes) et d'approximation (coefficients d'échelle) de y : \tilde{y}_a et \tilde{y}_d .
2. Identification $y_a = \tilde{y}_a$ et $y_d = \tilde{y}_d$ dans : $y_a = h * \tilde{x}_a$ et $y_d = h * \tilde{x}_d$.
3. Résolution des équations de convolution suivantes :

$$\tilde{y}_a = h * \tilde{x}_a \quad \text{et} \quad \tilde{y}_d = h * \tilde{x}_d \quad (39)$$

On obtient alors : $\hat{\tilde{x}}_a$ et $\hat{\tilde{x}}_d$.

4. Reconstruction de x à l'aide des signaux, obtenus, de détails (coefficients d'ondelettes) et d'approximation (coefficients d'échelle) de x :

$$\hat{x} = \hat{\tilde{x}}_a * \tilde{f} + \hat{\tilde{x}}_d * \tilde{g} \quad (40)$$

Cette méthode introduit une erreur systématique sur les données dans son principe. En effet, les données \tilde{y}_a et \tilde{y}_d disponibles dans la résolution des équations (39) ne sont que des approximations de y_a et de y_d définies, d'après (36) et (37), par :

$$\tilde{Y}_a(z) = Y_a(z) - \frac{1}{2}F(-z)X(-z)[H(z) - H(-z)] \quad (41)$$

$$\tilde{Y}_d(z) = Y_d(z) - \frac{1}{2}G(-z)X(-z)[H(z) - H(-z)] \quad (42)$$

On notera que cette erreur sera faible uniquement si les filtres sont très sélectifs ce qui n'est pas le cas des filtres générés par les ondelettes.

Cette erreur systématique sera éliminée si l'on supprime les opérations de décimation et d'interpolation par des zéros [23, 33]. Le schéma de décomposition et de reconstruction est illustré par la Figure 3.

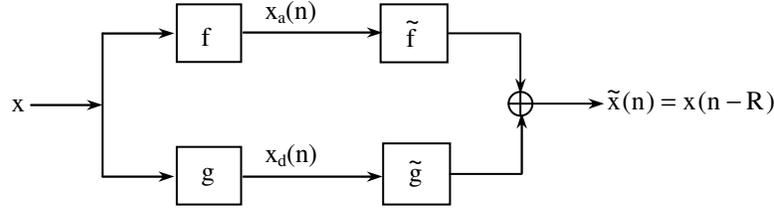


Figure 3 : Décomposition reconstruction multirésolution sans sous échantillonnage.

Dans ces conditions les signaux d'approximation, et de détails de x pour un seul niveau de décomposition, s'écrivent respectivement :

$$\begin{aligned} x_a &= f * x \\ x_d &= g * x \end{aligned} \quad (43 \text{ a, b})$$

La reconstruction est exacte (au retard R près sur x que l'on ignore ici pour des raisons de simplification de la notation) :

$$x = \tilde{f} * x_a + \tilde{g} * x_d \quad (44)$$

Par transformation en z de cette dernière équation, les filtres doivent vérifier uniquement la condition de reconstruction exacte (équation (3)) qui s'écrit maintenant :

$$F(z)\tilde{F}(z) + G(z)\tilde{G}(z) = z^{-R} \quad (45)$$

Les filtres usuels, d'analyse et de reconstruction, seront divisés par un facteur racine de 2 pour éviter un facteur d'échelle $\frac{1}{2}$ dans la reconstruction.

Dans ce cas les signaux d'approximation et de détails de y s'écrivent :

$$\begin{aligned} y_a &= f * y = h * x_a \\ y_d &= g * y = h * x_d \end{aligned} \quad (46 \text{ a, b})$$

Néanmoins, ces résultats sont inexacts en absence de sous échantillonnage. Burdeau et al. [23] ont proposé de résoudre ce problème en calculant les coefficients de détails (coefficients d'ondelette) et d'approximation (coefficients d'échelle) au sous échantillonnage près de y . Après la résolution des équations de convolution de (46 a, b) (mais avec un sous échantillonnage près), on obtient alors \hat{x}_a et \hat{x}_d . Puis on reconstruit x à l'aide des signaux de détails et d'approximation obtenus :

$$x = \tilde{f} * \hat{x}_a + \tilde{g} * \hat{x}_d \quad (47)$$

Cette proposition [23] peut se généraliser pour une profondeur de décomposition dyadique plus importante. Par exemple, le schéma de la Figure 4 illustre une décomposition de profondeur deux et la reconstruction au niveau d'origine.

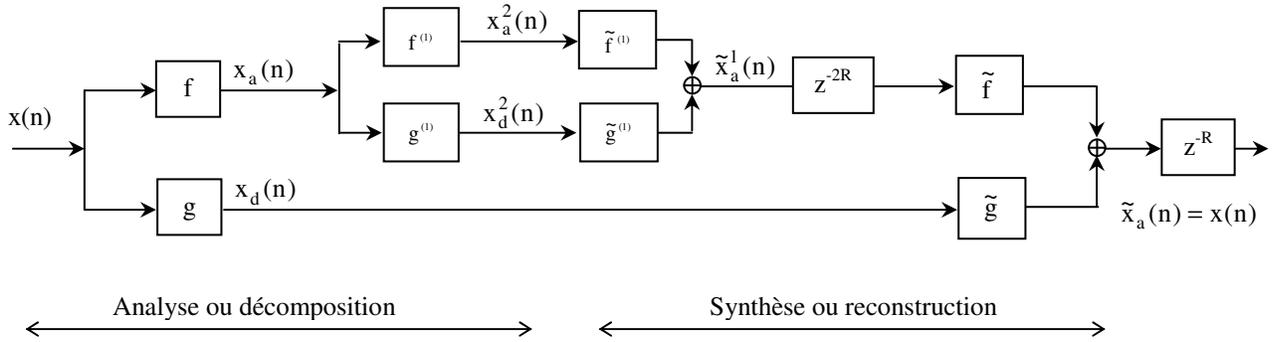


Figure 4 : Décomposition / reconstruction dyadique de profondeur 2.

La suppression du sous échantillonnage dans le schéma multirésolution nécessite la contraction d'un facteur deux (2^j dans le cas général) de la bande passante des filtres à la résolution $2^{-(j+1)}$. On obtient ce résultat en insérant j zéros entre chaque échantillon des réponses impulsionnelle $f(n)$ et $g(n)$. On note ces nouvelles réponses impulsionnelles $f^j(n)$ et $g^j(n)$. Cette opération va modifier la fréquence de coupure de ces filtres : celle-ci notée au niveau de résolution 2^0 , $\frac{f_{\text{éch}}}{4}$ va devenir au niveau de résolution 2^j , $\frac{f_{\text{éch}}}{2^{(j+2)}}$.

Les fonctions de transfert de ces filtres f^j et g^j s'écrivent :

$$F^j(z) = F(z^{j+1}) \text{ et } G^j(z) = G(z^{j+1}) \quad (48)$$

La condition de reconstruction exacte du niveau j à $j-1$ s'écrit :

$$\tilde{F}(z^{j+1})F(z^{j+1}) + \tilde{G}(z^{j+1})G(z^{j+1}) = z^{-R(j+1)} \quad (49)$$

Nous allons inspirer de cette proposition pour l'implantation de notre algorithme de déconvolution multirésolution.

3.3. Formulation matricielle de la déconvolution multirésolution

A partir des équations (46 a et b) nous pouvons écrire la décomposition de y :

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_a &= \mathbf{F}_y \mathbf{y} \\ \mathbf{y}_d &= \mathbf{G}_y \mathbf{y} \end{aligned} \quad (50 \text{ a, b})$$

\mathbf{F}_y et \mathbf{G}_y sont deux matrices de Toeplitz construites respectivement à partir des réponses impulsionnelles f et g .

En incorporant $\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x}$ dans les équations (50 a, b) nous obtenons :

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_a &= \mathbf{F}_y \mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{H}\mathbf{F}_x \mathbf{x} \\ \mathbf{y}_d &= \mathbf{G}_y \mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{H}\mathbf{G}_x \mathbf{x} \end{aligned} \quad (51 \text{ a, b})$$

Les matrices \mathbf{H} , \mathbf{F}_x et \mathbf{G}_x sont des matrices de Toeplitz construites à l'aide, respectivement, des réponses impulsionnelles \mathbf{h} , \mathbf{f} et \mathbf{g} . Leurs dimensions sont adaptées aux vecteurs qu'elles multiplient. La commutation

$$\mathbf{F}_y \mathbf{H} = \mathbf{H}\mathbf{F}_x$$

traduit la commutativité de l'opérateur de convolution : $\mathbf{f}*\mathbf{h} = \mathbf{h}*\mathbf{f}$.

Ces deux équations représentent les équations (46 a, b) sous forme matricielle et peuvent s'écrire également :

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_a &= \mathbf{H}\mathbf{x}_a \\ \mathbf{y}_d &= \mathbf{H}\mathbf{x}_d \end{aligned} \quad (52 \text{ a, b})$$

Avec $\mathbf{x}_a = \mathbf{F}_x\mathbf{x}$ et $\mathbf{x}_d = \mathbf{G}_x\mathbf{x}$.

En résolvant les équations (52 a, b) nous allons obtenir le signal d'approximation \mathbf{x}_a et le signal de détails \mathbf{x}_d qui permettront de reconstruire la solution $\tilde{\mathbf{x}}$. L'équation de reconstruction de la solution \mathbf{x} s'écrit :

$$\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{F}}_x\mathbf{x}_a + \tilde{\mathbf{G}}_x\mathbf{x}_d \quad (53)$$

$\tilde{\mathbf{F}}_x$ et $\tilde{\mathbf{G}}_x$ sont deux matrices de Toeplitz construites respectivement à partir des réponses impulsionnelles $\tilde{\mathbf{f}}$ et $\tilde{\mathbf{g}}$. Elles intègrent le décalage nécessaire à une reconstruction exacte.

Ainsi présenté, le problème de la déconvolution consiste à la résolution simultanée de deux équations dont les solutions seront le signal approximation et le signal détails de la solution \mathbf{x} . Cette démarche peut être généralisée à une analyse multirésolution à plusieurs niveaux.

D'une manière générale, le signal approximation et le signal détails à la résolution $2^{-(j+1)}$ du signal observé sont obtenus à partir du signal approximation à la résolution 2^{-j} :

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_a^{(j+1)} &= \mathbf{F}_y^{(j)}\mathbf{y}_a^{(j)} \\ \mathbf{y}_d^{(j+1)} &= \mathbf{G}_y^{(j)}\mathbf{y}_a^{(j)} \end{aligned} \quad (54 \text{ a, b})$$

Les matrices $\mathbf{F}_y^{(j)}$ et $\mathbf{G}_y^{(j)}$ sont des matrices de Toeplitz construites à l'aide, respectivement, des réponses impulsionnelles $\mathbf{f}^{(j)}$ et $\mathbf{g}^{(j)}$.

De manière similaire à (54 a, b), nous pouvons écrire que :

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_a^{(j+1)} &= \mathbf{F}_x^{(j)}\mathbf{x}_a^{(j)} \\ \mathbf{x}_d^{(j+1)} &= \mathbf{G}_x^{(j)}\mathbf{x}_a^{(j)} \end{aligned} \quad (55 \text{ a, b})$$

Considérons une décomposition à un niveau 2^j , les équations (54 a, b) et (55 a, b) introduites dans (52 a, b) nous amènent à la résolution des équations suivantes :

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_a^{(j)} &= \mathbf{H}^{(j)}\mathbf{x}_a^{(j)} \\ \mathbf{y}_d^{(j)} &= \mathbf{H}^{(j)}\mathbf{x}_d^{(j)} \end{aligned} \quad (56 \text{ a, b})$$

La solution aux équations (56 a, b) est respectivement le signal approximation et le signal détail à la résolution 2^{-j} de la solution \mathbf{x} . La solution à la résolution $2^{-(j+1)}$ est obtenue en appliquant la reconstruction de l'équation (53) à ce niveau :

$$\tilde{\mathbf{x}}_a^{(j-1)} = \tilde{\mathbf{F}}_x^{(j)}\mathbf{x}_a^{(j)} + \tilde{\mathbf{G}}_x^{(j)}\mathbf{x}_d^{(j)} \quad (57)$$

Les matrices $\tilde{\mathbf{F}}_x^{(j)}$ et $\tilde{\mathbf{G}}_x^{(j)}$ sont des matrices de Toeplitz construites à l'aide, respectivement, des réponses impulsionnelles $\tilde{\mathbf{f}}^{(j)}$ et $\tilde{\mathbf{g}}^{(j)}$.

L'étape suivante nous conduira à reconstruire $\mathbf{x}_a^{(j-2)}$ par :

$$\tilde{\mathbf{x}}_a^{(j-2)} = \tilde{\mathbf{F}}_x^{(j-1)} \mathbf{x}_a^{(j-1)} + \tilde{\mathbf{G}}_x^{(j-1)} \mathbf{x}_d^{(j-1)} \quad (58)$$

De manière analogue à (56-b), $\mathbf{x}_d^{(j-1)}$ est solution de :

$$\mathbf{y}_d^{(j-1)} = \mathbf{H}^{(j-1)} \mathbf{x}_d^{(j-1)} \quad (59)$$

Cette démarche sera ainsi poursuivie jusqu'au niveau de résolution $j = 0$.

La résolution du problème nécessite une déconvolution pour le signal approximation à la résolution 2^j et j déconvolutions pour les signaux détails de la résolution 2^j à 2^0 .

4. DECONVOLUTION MULTIREOLUTION REGULARISEE

Les données observées sont maintenant entachées de bruit, les équations (56 a, b) deviennent :

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_a^{(j)} &= \mathbf{H}^{(j)} \mathbf{x}_a^{(j)} + \mathbf{b}_a^{(j)} \\ \mathbf{y}_d^{(j)} &= \mathbf{H}^{(j)} \mathbf{x}_d^{(j)} + \mathbf{b}_d^{(j)} \end{aligned} \quad j=1, \dots, J \quad (60 \text{ a, b})$$

$\mathbf{b}_a^{(j)}$ et $\mathbf{b}_d^{(j)}$ représentent respectivement l'approximation et les détails du bruit à la résolution 2^j et 2^j , respectivement.

Quand les données observées sont bruitées, la déconvolution nécessite l'application de contraintes sur la solution pour obtenir une solution acceptable. Nous appliquons les contraintes suivantes [1, 23]:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{y}_a^{(j)} - \mathbf{H}^{(j)} \tilde{\mathbf{x}}_a^{(j)}\|^2 &\leq \|\mathbf{b}_a^{(j)}\|^2 \\ \|\mathbf{y}_d^{(j)} - \mathbf{H}^{(j)} \tilde{\mathbf{x}}_d^{(j)}\|^2 &\leq \|\mathbf{b}_d^{(j)}\|^2 \end{aligned} \quad j=1, \dots, J \quad (61 \text{ a, b})$$

$$\begin{aligned} \|\mathbf{D}_a^{(j)} \tilde{\mathbf{x}}_a^{(j)}\| &\leq (\mathbf{r}_a^{(j)})^2 \\ \|\mathbf{D}_d^{(j)} \tilde{\mathbf{x}}_d^{(j)}\| &\leq (\mathbf{r}_d^{(j)})^2 \end{aligned} \quad j=1, \dots, J \quad (62 \text{ a, b})$$

$\mathbf{D}_a^{(j)}$ et $\mathbf{D}_d^{(j)}$ sont des filtres passe-haut et $(\mathbf{r}_a^{(j)})^2$, $(\mathbf{r}_d^{(j)})^2$ représentent respectivement l'énergie de la solution approximation et de la solution détails aux résolutions 2^j et 2^j . Ces énergies représentent une mesure de la régularité des solutions à la résolution considérée. Selon Miller, nous pouvons combiner ces contraintes :

$$\begin{aligned} \|\mathbf{y}_a^{(j)} - \mathbf{H}^{(j)} \tilde{\mathbf{x}}_a^{(j)}\|^2 + \frac{\|\mathbf{b}_a^{(j)}\|^2}{(\mathbf{r}_a^{(j)})^2} \|\mathbf{D}_a^{(j)} \tilde{\mathbf{x}}_a^{(j)}\| &\leq 2\|\mathbf{b}_a^{(j)}\|^2 \\ \|\mathbf{y}_d^{(j)} - \mathbf{H}^{(j)} \tilde{\mathbf{x}}_d^{(j)}\|^2 + \frac{\|\mathbf{b}_d^{(j)}\|^2}{(\mathbf{r}_d^{(j)})^2} \|\mathbf{D}_d^{(j)} \tilde{\mathbf{x}}_d^{(j)}\| &\leq 2\|\mathbf{b}_d^{(j)}\|^2 \end{aligned} \quad j=1, \dots, J \quad (63 \text{ a, b})$$

Les solutions sont les résolutions des équations normales :

$$\begin{aligned} [(\mathbf{H}^{(j)})^T \mathbf{H}^{(j)} + \alpha_a^{(j)} (\mathbf{D}_a^{(j)})^T \mathbf{D}_a^{(j)}] \tilde{\mathbf{x}}_a^{(j)} &= (\mathbf{H}^{(j)})^T \mathbf{y}_a^{(j)} \\ [(\mathbf{H}^{(j)})^T \mathbf{H}^{(j)} + \alpha_d^{(j)} (\mathbf{D}_d^{(j)})^T \mathbf{D}_d^{(j)}] \tilde{\mathbf{x}}_d^{(j)} &= (\mathbf{H}^{(j)})^T \mathbf{y}_d^{(j)} \end{aligned} \quad j=1, \dots, J \quad (64 \text{ a, b})$$

Avec

$$\alpha_a^{(j)} = \frac{\|\mathbf{b}_a^{(j)}\|^2}{(\mathbf{r}_a^{(j)})^2} \text{ et } \alpha_d^{(j)} = \frac{\|\mathbf{b}_d^{(j)}\|^2}{(\mathbf{r}_d^{(j)})^2} \quad j=1, \dots, J \quad (65 \text{ a, b})$$

En pratique, dans le cas des profils réels, l'information sur les régularités $(\mathbf{r}_a^{(j)})^2$ et $(\mathbf{r}_d^{(j)})^2$ est absente, ce qui impose d'utiliser la méthode de validation croisée généralisée pour estimer le paramètre de régularisation.

En observant les équations (64 a, b) nous constatons que le paramètre de régularisation se devise en deux paramètres selon qu'il s'agissait des signaux d'approximations ou de détails. Les formulations mathématiques de l'estimation, par la validation croisée généralisée (voir l'équation (70) du chapitre 3), de ces paramètres sont :

$$V(\alpha_a^{(j)}) = \frac{\frac{1}{N} \|\mathbf{y}_a^{(j)} - \mathbf{H}^{(j)} \mathbf{H}^{+(j)} \mathbf{H}^{T(j)} \mathbf{y}_a^{(j)}\|^2}{\left[\frac{1}{N} \text{Trace}(\mathbf{I} - \mathbf{H}^{+(j)}) \right]^2}, \quad V(\alpha_d^{(j)}) = \frac{\frac{1}{N} \|\mathbf{y}_d^{(j)} - \mathbf{H}^{(j)} \mathbf{H}^{+(j)} \mathbf{H}^{T(j)} \mathbf{y}_d^{(j)}\|^2}{\left[\frac{1}{N} \text{Trace}(\mathbf{I} - \mathbf{H}^{+(j)}) \right]^2} \quad (66 \text{ a, b})$$

Pour résoudre les équations (64 a, b), nous devons calculer l'inverse des matrices :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_a^+ &= (\mathbf{H}^{(j)})^T \mathbf{H}^{(j)} + \alpha_a^{(j)} (\mathbf{D}_a^{(j)})^T \mathbf{D}_a^{(j)} \\ \mathbf{H}_d^+ &= (\mathbf{H}^{(j)})^T \mathbf{H}^{(j)} + \alpha_d^{(j)} (\mathbf{D}_d^{(j)})^T \mathbf{D}_d^{(j)} \end{aligned} \quad j=1, \dots, J \quad (67 \text{ a, b})$$

La qualité des solutions $\tilde{\mathbf{x}}_a^{(j)}$ et $\tilde{\mathbf{x}}_d^{(j)}$ dépend du conditionnement des matrices \mathbf{H}_a^+ et \mathbf{H}_d^+ . Les conditionnements des matrices \mathbf{H}_a^+ et \mathbf{H}_d^+ sont données par :

$$C(\mathbf{H}_a^+) = \sqrt{\frac{\max(\lambda_{H^{(j)}}^2 + \alpha_a^{(j)} \lambda_{D_a^{(j)}}^2)}{\min(\lambda_{H^{(j)}}^2 + \alpha_a^{(j)} \lambda_{D_a^{(j)}}^2)}} \quad \text{et} \quad C(\mathbf{H}_d^+) = \sqrt{\frac{\max(\lambda_{H^{(j)}}^2 + \alpha_d^{(j)} \lambda_{D_d^{(j)}}^2)}{\min(\lambda_{H^{(j)}}^2 + \alpha_d^{(j)} \lambda_{D_d^{(j)}}^2)}} \quad (68 \text{ a, b})$$

Où $\lambda_{H^{(j)}}^2$, $\lambda_{D_a^{(j)}}^2$, $\lambda_{D_d^{(j)}}^2$ sont les valeurs propres des matrices $\mathbf{H}^{(j)}$, $\mathbf{H}^{(j)}$, $\mathbf{D}_a^{(j)}$, $\mathbf{D}_d^{(j)}$.

Les opérateurs $\mathbf{D}_a^{(j)}$ et $\mathbf{D}_d^{(j)}$ seront choisis avec des valeurs propres importantes quand les valeurs singulières de $\mathbf{H}^{(j)}$ et $\mathbf{H}^{(j)}$ seront plutôt faibles et réciproquement. Les paramètres $\alpha_a^{(j)}$ et $\alpha_d^{(j)}$ dépendent essentiellement de la distribution de bruit et des opérateurs $\mathbf{D}_a^{(j)}$ et $\mathbf{D}_d^{(j)}$. Le choix des opérateurs de régularisation est guidé par les valeurs singulières de $\mathbf{H}^{(j)}$ et $\mathbf{H}^{(j)}$ et non pas par la bande de fréquence considérée. Il ne paraît pas utile alors de choisir un opérateur pour chaque bande de fréquence. Nous construisons alors $\mathbf{D}_a^{(j)}$ et $\mathbf{D}_d^{(j)}$ à partir de la même réponse impulsionnelle $d(n)$, l'opérateur sera noté $\mathbf{D}^{(j)}$ au niveau de résolution 2^j .

La reconstruction sera rendue optimale en pondérant le signal détail. La nouvelle équation de reconstruction est :

$$\tilde{\mathbf{x}}_{a, \beta_d^{J-1}}^{(J-1)} = \tilde{\mathbf{F}}_x^{(J)} \tilde{\mathbf{x}}_a^{(J)} + \beta_d^{(J-1)} \tilde{\mathbf{G}}_x^{(J)} \tilde{\mathbf{x}}_d^{(J)} \quad (69)$$

$\beta_d^{(J-1)}$ est choisi tel qu'il minimise :

$$E(\beta_d^{(J-1)}) = \left\| \mathbf{H}^{(J-1)} \tilde{\mathbf{x}}_{a, \beta_d^{J-1}}^{(J-1)} - \mathbf{y}_a^{(J-1)} \right\|^2 \quad (70)$$

La dérivée de $E(\beta_d^{(J-1)})$ par rapport à $\beta_d^{(J-1)}$ s'annule pour :

$$\beta_d^{(J-1)} = \frac{(\mathbf{H}^{(J)} \tilde{\mathbf{G}}_x^{(J)} \tilde{\mathbf{x}}_d^{(J)})^T (\mathbf{y}_a^{(J-1)} - \mathbf{H}^{(J)} \tilde{\mathbf{F}}_x^{(J)} \tilde{\mathbf{x}}_a^{(J)})}{\|\mathbf{H}^{(J)} \tilde{\mathbf{G}}_x^{(J)} \tilde{\mathbf{x}}_d^{(J)}\|^2} \quad (71)$$

L'interprétation physique de la contrainte de régularité et de la contrainte d'erreur bornée à chaque niveau de résolution n'est pas évidente. En annexe 2 il est montré que sous certaines conditions, ces contraintes appliquées à chaque niveau de résolution impliquent le respect des contraintes données sur la solution globale.

Burdeau et *al.* [23] considèrent que si les filtres de reconstruction présentent les caractéristiques suivantes :

$$\|\tilde{\mathbf{F}}\|^2 \leq 1 \text{ et } \|\tilde{\mathbf{G}}\|^2 \leq 1$$

Alors le signal reconstruit satisfait aux contraintes :

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{H}^{(0)} \tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq \|\mathbf{b}_a^{(1)}\|^2 + \|\mathbf{b}_d^{(1)}\|^2 \quad (72)$$

$$\|\mathbf{D}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq (r_a^{(0)})^2 + (r_d^{(0)})^2 \quad (73)$$

La démonstration de ces inégalités est bien détaillée dans § B de l'annexe 2.

5. SEUILLAGE DES COEFFICIENTS D'ONDELETTES

Dans les problèmes de déconvolution, la reconstruction des signaux est rendue délicate par la présence d'un bruit additif ou multiplicatif qui vient dégrader le signal observé. La déconvolution multirésolution a permis d'adapter le paramètre de régularisation à chaque niveau de résolution. La valeur théorique de ce paramètre est liée à l'énergie du bruit et à la rugosité de la solution au niveau de résolution concerné. Les données observées dans les niveaux de résolution les plus élevés sont constituées essentiellement du bruit. Dans cette section nous introduisons une nouvelle voie d'investigations en envisageant l'élimination totale ou partielle du bruit par un seuillage adéquat des coefficients d'ondelettes à chaque niveau de résolution, cela tout en préservant l'information utile disponible.

5.1. Principe du seuillage

Pour l'introduction de cette notion, notre démarche est inspirée de celle utilisée par Donoho [24-26] et Nason [27]. Nous introduirons préalablement cette approche dans le cadre de débruitage du signal.

Reprenant la notion matricielle adoptée, considérons le modèle suivant :

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{b} \quad (74)$$

avec \mathbf{y} est le signal observé, \mathbf{x} le signal original et \mathbf{b} le bruit que nous considérons blanc et gaussien de moyenne nulle, les signaux sont de longueur N .

Le débruitage consiste à restaurer un signal utile à partir d'observations corrompues par un bruit additif. D'une manière générale, le problème de débruitage consiste à retrouver le signal \mathbf{x} à partir de \mathbf{y} , pour cela nous allons utiliser le seuillage des coefficients d'ondelettes.

Pourquoi ça marche ?

Citons quelques arguments utiles pour la compréhension de l'effectivité de cette méthode qui sera étayée par la suite :

- la décomposition par ondelettes est additif, par conséquent, l'analyse de \mathbf{y} est égale à la somme des analyses du signal \mathbf{x} et du bruit \mathbf{b} ;
- si l'on suppose que le bruit \mathbf{b} est blanc, alors les coefficients d'ondelettes à toutes les échelles sont des bruits blancs de la même variance ;
- les signaux utiles sont, dans bien des cas, assez réguliers sauf en de rares endroits comme le début et la fin des phénomènes transitoires, ou les ruptures par exemple. Ceci rend la décomposition par ondelettes de \mathbf{y} très creuse et très bien représentée par les coefficients d'une approximation assez grossière auxquels s'ajoutent quelques grands coefficients de détails ;
- dans le cas où les irrégularités du signal engendrent des coefficients plus grands que l'échelle du bruit, la procédure de sélection retient les coefficients liés au signal pourvu que l'on sache estimer convenablement cette échelle ;
- l'analyse est locale, par conséquent l'opération de seuillage conduit à régulariser le signal d'origine.

De nombreux articles traitent en détail le thème le plus vaste de l'estimation fonctionnelle. Les ondelettes ont apporté un coup de fouet aux techniques d'estimation utilisant les bases de fonctions. Elles sont particulièrement efficaces lorsque les fonctions que l'on cherche à estimer se codent de façon parcimonieuse sur la base d'ondelette choisie, c'est-à-dire lorsque peu de coefficients suffisent à décrire chacune des fonctions à estimer.

Considérons la décomposition sur une base d'ondelettes de \mathbf{y} en nous limitant au premier niveau de décomposition :

$$\mathbf{y}_a = \mathbf{F}\mathbf{y} \quad (75)$$

\mathbf{F} est une matrice construite à l'aide de la réponse impulsionnelle du filtre \mathbf{f} associée à la fonction d'échelle utilisée.

Parallèlement à la construction de \mathbf{y}_a , nous construisons le signal de détails noté \mathbf{y}_d orthogonal à \mathbf{y}_a (ondelettes orthogonales) et défini par :

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{G}\mathbf{y} \quad (76)$$

\mathbf{G} est une matrice construite à l'aide de la réponse impulsionnelle du filtre \mathbf{g} associée à l'ondelette correspondante. Le vecteur \mathbf{y}_d obtenu est le vecteur des coefficients d'ondelettes du signal \mathbf{y} à ce niveau de résolution.

L'opération de seuillage consiste à modifier les coefficients d'ondelettes \mathbf{y}_d . Ces coefficients modifiés sont notés $\hat{\mathbf{y}}_d$. Le signal reconstruit sera alors une bonne approximation du signal recherché :

$$\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{F}}\mathbf{y}_a + \tilde{\mathbf{G}}\hat{\mathbf{y}}_d \quad (77)$$

$\tilde{\mathbf{F}}$ et $\tilde{\mathbf{G}}$ sont des matrices construites à partir des réponses impulsionnelles des filtres $\tilde{\mathbf{f}}$ et $\tilde{\mathbf{g}}$ associés à l'ondelette et à la fonction d'échelle respectivement.

Le seuillage doit être effectué sous la contrainte :

$$\|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\|_{\min}^2 \quad (78)$$

La qualité d'estimation est croissante avec la profondeur de l'analyse multirésolution. En effet, il existe de nombreuses variantes des estimateurs par seuillage des coefficients d'ondelettes [28-30]. Elles diffèrent essentiellement par :

- La stratégie de seuillage : globale, niveau par niveau, locale en temps, par bloc ;
- Le choix de la valeur du ou des seuils ;
- Le type de seuillage : dur, doux et d'autres régularisations. Un ingrédient utilisé par les variantes de base est l'usage de seuillage « doux » au lieu du seuillage « dur ».

5.2. Différents types de seuillage

5.2.1. Seuillage dur

Celui-ci est défini par :

$$\begin{cases} \hat{y}_d(\mathbf{k}) = y_d(\mathbf{k}) & \text{si } |y_d(\mathbf{k})| > \lambda, \text{ pour } \mathbf{k} = 1, \dots, N \\ \text{sinon} \\ \hat{y}_d(\mathbf{k}) = 0 \end{cases} \quad (79)$$

5.2.2. Seuillage doux

Le seuillage doux rend cette fonction continue en rétrécissant les coefficients conservés. Il est défini par :

$$\begin{cases} \hat{y}_d(\mathbf{k}) = y_d(\mathbf{k}) - \lambda & \text{si } y_d(\mathbf{k}) > \lambda \\ \hat{y}_d(\mathbf{k}) = y_d(\mathbf{k}) + \lambda & \text{si } y_d(\mathbf{k}) < -\lambda \\ \text{sinon} \\ \hat{y}_d(\mathbf{k}) = 0 \end{cases} \quad (80)$$

Toutes choses égales par ailleurs, il conduit à des estimateurs plus lisses, moins sensibles au bruit. La Figure 5 représente les différents types de seuillage.

λ est le seuil convenablement déterminé en fonction du modèle de bruit. Dans le cas d'un bruit blanc gaussien, Donoho et Johnstone [30] ont modélisé ce seuil par :

$$\lambda = \sigma \sqrt{2 \log(N)} \quad (81)$$

avec N est le nombre des données observées, σ l'écart-type de bruit.

Le seuil λ dépend de σ qui donne le niveau du bruit (l'échelle caractéristique du bruit). Comment estimer σ qui, en pratique, est inconnu ?

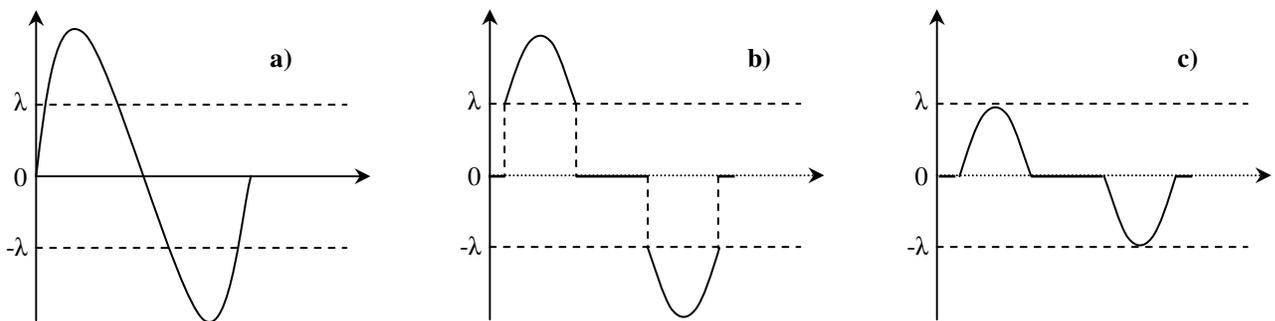


Figure 5 : a) Signal original, b) seuillage dur, c) seuillage doux.

5.3. Estimer l'écart-type du bruit

Dans le contexte du modèle (74), on dispose de nombreux estimateurs. Mais on peut tirer profit de la décomposition en ondelettes qui fournit un estimateur élégant, fondé sur l'idée suivante :

La décomposition de \mathbf{y} est égale à la somme des analyses du signal \mathbf{x} et du bruit \mathbf{b} . Le bruit \mathbf{b} est blanc, donc ses coefficients à toutes les échelles sont des bruits blancs de même variance puisque les ondelettes sont orthonormées.

Enfin, en général, la décomposition de \mathbf{x} est très creuse et seuls quelques grands coefficients de détail de niveau 1 (notés cd^1) ne sont pas attribuables à \mathbf{b} . Par conséquent, les coefficients du détail du niveau 1 sont essentiellement un bruit blanc de variance σ^2 . Il suffit alors d'utiliser un estimateur robuste, c'est-à-dire peu sensible aux grandes valeurs dues à \mathbf{x} , de l'écart-type des coefficients du détail de niveau 1 pour estimer σ . Dans le cas gaussien, l'estimateur est de la forme :

$$\hat{\sigma} = \text{médiane}(|cd^1(k)|) / 0.6754 \quad (82)$$

On exploite ici la relation entre l'écart-type de la médiane pour cette loi des erreurs. En effet, pour l variables aléatoires indépendantes x_1, x_2, \dots, x_l , gaussiennes centrées et d'écart-type σ , on a $E(\text{médiane}(|x_i|, i=1, \dots, l)) \approx 0.6754 \sigma$.

Enfin, le seuillage va être incorporé aux différentes solutions obtenues à chaque itération à chaque niveau de résolution.

6. DECONVOLUTION PAR LA REGULARISATION DE TIKHONOV-MILLER AVEC COMME MODELE DE SOLUTION UN SIGNAL DECOMPOSE SUR UNE BASE D'ONDELETTE

Dans cette section nous allons proposer une autre méthode de déconvolution basée sur l'analyse multirésolution. Dans le chapitre précédent (§ 4.3), nous avons vu que V. Barakat [31] propose d'introduire les informations a priori sur la solution sous forme d'un signal sensé décrire au mieux les variations locales du signal recherché. Néanmoins, si les informations introduites manquent de précision ou erronées certainement cet apport dirigera la méthode vers une solution qui ne sera pas en accord avec la réalité, puisque l'équation à résoudre sera fausse. Par contre, si le choix de l'information apportée est pertinent, les résultats de la déconvolution peuvent être considérablement améliorés par rapport aux méthodes classiques. La précision de la solution dépendra directement de la précision du modèle apporté.

Nous avons vu également qu'un modèle de solution obtenu par une prè-déconvolution (l'approche de Mancina) [32] n'est pas précis dans la description du signal réel. En particulier, si le signal prè-déconvolué contient des aberrations (dues principalement à la présence de bruit dans le signal mesuré) le processus itératif ne fait qu'empirer ces aberrations et le résultat sera un signal dégénéré.

Nous avons suggéré alors que les performances de cette méthode sont pauvres avec la présence d'un bruit additif, ce qui conduit à une solution oscillante contenant des artefacts et des composantes négatives. Le fait de contraindre à posteriori la solution pour qu'elle soit par exemple positive ne fait que la rendre physiquement acceptable, mais le résultat final est encore nettement insuffisant.

Dans cette section nous proposons d'introduire un modèle de solution sous la forme d'un signal décomposé préalablement sur une base d'ondelette. Il s'agit d'un signal débruité et reconstruit en ne conservant que les coefficients d'approximation et les coefficients de détails seuillés.

Le signal dégradé (données du problème) \mathbf{y} est, dans le cas usuel d'un filtre de dégradation passe-bas, proche du signal d'approximation de \mathbf{x} en terme du contenu spectral. La décomposition, sur une base d'ondelette, de \mathbf{y} va conduire à un signal d'approximation qui est très voisin de \mathbf{x} . De ce fait, une faible amplification des hautes fréquences du signal d'approximation du signal dégradé est nécessaire pour restaurer le signal d'approximation de \mathbf{x} . Au contraire, le signal de détails de \mathbf{x} est fortement dégradé par la convolution et le signal de détails de \mathbf{y} contient peu d'informations sur celui de \mathbf{x} . De plus, le signal de détails de \mathbf{y} est fortement affecté par le bruit additif. De ce fait, la reconstruction de \mathbf{x} à partir des signaux d'approximation et de détails estimés, devra donner un faible poids aux détails comme le fait, par exemple, la déconvolution de Wiener dans le domaine de Fourier.

Rappelons le formalisme mathématique de la régularisation de Tikhonov-Miller avec modèle de solution cité dans le chapitre précédent (§ 4.3, équation (77)) :

$$\tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} (\mathbf{H}^T \mathbf{y} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D} \mathbf{x}_{\text{mod}}) \quad (83)$$

Dans notre approche, le modèle de solution est le signal débruité (à la résolution 2^{-j}) de l'équation (77) :

$$\mathbf{x}_{\text{mod}} = \tilde{\mathbf{x}}^{(j-1)} = \tilde{\mathbf{F}}^{(j)} \mathbf{y}_a^{(j)} + \tilde{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{y}}_d^{(j)} \quad (84)$$

Notre algorithme est itératif permettant de se rapprocher de la solution toute en remédiant les limites de l'approche de Mancina [32]. La formulation mathématique de cet algorithme, dans l'espace de Fourier, est la suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\mathbf{X}}_{n+1} = \frac{\mathbf{H}^* \mathbf{Y} + \alpha |\mathbf{D}|^2 \mathbf{X}_{\text{mod}_n}}{|\mathbf{H}|^2 + \alpha |\mathbf{D}|^2} \\ \mathbf{X}_{\text{mod}_0} = \mathbf{TF}[\tilde{\mathbf{x}}^{(j-1)}] = \mathbf{TF}[\tilde{\mathbf{F}}^{(j)} \mathbf{y}_a^{(j)} + \tilde{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{y}}_d^{(j)}] \\ \hat{\mathbf{x}}_n = \mathbf{TF}^{-1}[\hat{\mathbf{X}}_n] \end{array} \right. \quad (85)$$

Avec $\mathbf{y}_a^{(j)}$ et $\hat{\mathbf{y}}_d^{(j)}$ sont, respectivement, le signal d'approximation et le signal de détails seuillé (par le seuil donné par (81)) à la résolution 2^{-j} .

A noter que dans cette méthode l'opérateur de régularisation ainsi le paramètre de régularisation sont fixes, ce qui impose une limite à cette méthode par rapport à la déconvolution multirésolution régularisée dont le paramètre et l'opérateur de régularisation sont variables (adaptés localement dans les différentes bandes de fréquences) à chaque niveau de décomposition. Nous allons voir les performances de cette méthode dans le chapitre 6 de ce travail.

7. DEFINITION DES ERREURS

Afin de vérifier l'efficacité d'une méthode de déconvolution, il est nécessaire de calculer l'erreur commise entre le profil réel et le profil déconvolué, c'est le cas idéal de disposer de l'erreur exacte appelée *erreur non observable*, et définie par :

$$e = \mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}} \quad (86)$$

L'erreur non observable est bien sûr inaccessible dans les conditions normales de la déconvolution, où \mathbf{x} est inconnu. Cette erreur sera accessible uniquement en simulation, elle permet de comparer les performances théoriques des différentes méthodes.

Pour avoir une idée sur la proximité du signal déconvolué avec le profil original, on définit une erreur observable, ou *erreur de reconstruction* (résultat de la convolution du profil déconvolué par la DRF) définie par :

$$E = \mathbf{y} - \mathbf{H}\tilde{\mathbf{x}} \quad (87)$$

Nous reviendrons sur ces paramètres dans le chapitre 5 de ce travail.

CONCLUSION

Dans ce chapitre nous avons présenté deux approches de la modélisation de la déconvolution multirésolution des signaux. Un premier algorithme consiste en la déconvolution multirésolution régularisée avec adaptation locale du paramètre de régularisation et de l'opérateur de régularisation à chaque niveau de décomposition. Nous avons justifié l'idée de ne pas sous-échantillonner le signal d'approximation et les signaux de détails avant leur application dans l'algorithme de déconvolution régularisé. Un deuxième algorithme dont la déconvolution se base également sur la régularisation de Tikhonov Miller avec comme modèle de solution un signal décomposé préalablement sur une base d'ondelette. Le seuillage incorporé dans ces deux algorithmes permet d'éliminer les artefacts dus principalement à la présence de bruit dans les données mesurées ainsi d'améliorer le gain de la déconvolution.

La revue des techniques de déconvolution vues dans le chapitre 3 ou bien dans ce chapitre nous permettra dans les chapitres suivants de les comparer en connaissance de cause pour justifier notre choix.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **Burdeau J. L.**, *Deconvolution multiresolution par décomposition sur une base d'ondelettes. Applications*, Thèse de doctorat, INSA de Lyon France, 2000, 194 p.
- [2] **Esteban D.** et **Galand C.**, *Application of quadrature Mirror Filter to split band voice coding schemes*, IEEE Int. Conference ASSP, 1977, pp. 185-195
- [3] **Vaidyanathan P. P.** et **Hoang P. Q.**, *Lattice structures for optimal design and implementation of two band perfect reconstruction QMF banks*, IEEE Transactions on acoustics, Speech and signal Processing, 1988, Vol. 78, n°1, pp. 81-94
- [4] **Crochiere R. E.**, *Subband coding*, Bell System Technical Journal, 1981, Vol. 60, n°7, pp. 1633-1653
- [5] **Smith M. J. T.** et **Barnwell T. P.**, *Exact reconstruction techniques for tree structured subband coders*, IEEE Transaction on Acoustics, Speech and Signal processing, 1986, Vol. 34 n°3, pp. 434-441

- [6] **Jonhston J. D.**, *A filter family designed for use in quadrature Mirror Filters bank*, IEEE international Conference Acoustics, Speech and Signal processing ICASSP-80, 1980, pp. 291-294
- [7] **Smith M. J. T.** et **Barnwell T. P.**, *A procedure for designing exact reconstruction techniques for tree structured subband coders*, IEEE international conference in Acoustics, Speech and Signal processing ICASSP-80, 1984, pp. 2711-2714
- [8] **Vetterli M.**, *Filter banks allowing perfect reconstruction*, Signal processing, 1986, Vol. n° 10, pp. 219-244
- [9] **Morlet J.**, **Arens G.**, **Fourgeau E.** et **Giard D.**, *Wave propagation and sampling theory*, Geophysics, 1982, Vol. 47, pp. 203-236
- [10] **Kronland-Martinet R.**, **Morlet J.** et **Grossman A.**, *Analysis of sound patterns through wavelet transforms*, Int. J. Rec. and Artif. Intell., 1987, Vol. 4 n°1, pp. 525-538
- [11] **Daubechies I.**, *Orthogonal bases of compactly supported wavelets*, Comm. Pure Appl. Math., 1988, Vol. 41, pp. 909-996
- [12] **Daubechies I.**, *The wavelet transform, time-frequency localization and signal analysis*, IEEE Transaction on Information theory, 1990, Vol. 36 n° 5, pp. 961-1005
- [13] **Daubechies I.**, *Ten lectures on wavelets*, Philadelphia: society for industrial and applied mathematics, 1992, Vol. 41, 357 p.
- [14] **Mallat S.G.**, *A theory for multiresolution signal decomposition: the wavelet representation*, IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 1989, Vol. 11, n°7, pp. 674-692
- [15] **Mallat S.G.**, *Multifrequency channel decompositions of images and wavelet models*, IEEE Transaction on Acoustics, Speech and Signal processing, 1989, Vol. ASSP-37 n°12, pp. 2091-2110
- [16] **Barrat M.** et **Leppetit O.**, *Calcul rapide de la transformée en ondelettes*, Traitement du signal Recherches, 1992, Vol. 8 n° 1, pp. 43-49
- [17] **Bonnet P.** et **Remond D.**, *Une transformée en ondelettes Rapide*, Traitement du signal, 1990, Vol. 8 n° 3, pp. 195-207
- [18] **Ville J.**, *Théories et applications de la notion de signal analytique*, Câbles et Transmission, 1948, Vol. A(1), pp. 61-74
- [19] **Cooly J. W.** et **Tukey J. W.**, *An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series*, Math of computation, 1965, Vol. 19, pp. 297-301
- [20] **Allen J. B.** et **Rabiner L. R.**, *A unified approach to short-time Fourier Analysis and synthesis*, Proc. IEEE, 1977, Vol. 65, pp. 205-219
- [21] **Burt P. J.** et **Adelson E. H.**, *The laplacien pyramid as compact image code*, IEEE Transactions on Communications, 1983, Vol. 31 n° 4, pp. 532-540
- [22] **Akunsu A. N.** et **Liu Y.**, *On signal decomposition techniques*, Optical Engineering, 1991, Vol. 30 n° 7, pp. 912-920
- [23] **Burdeau J. -L.**, **Goutte R.** et **Prost R.**, *Joint nonlinéair-quadratic regularization in wavelet based deconvolution schem*, IEEE Int. Conference on signal processing WCCC-ICSP 2000, 2000, Vol. 1, pp. 77-80
- [24] **Donoho D. L.**, *Denoising by soft-shrinkage*, Université de Stanford, Rapport technique n° 409, 1992, 37 p.

- [25] **Donoho D. L.** et **Johnstone I. M.**, *Ideal spatial Adaptation by wavelet shrinkage*, Biometrika, 1994, Vol. 81 n° 3, pp. 425-455
- [26] **Donoho D. L.** et **Johnstone I. M.**, *Adaptating to unknown smoothness via wavelete shrinkage*, J. Amer. Stat. Assoc. 1995, Vol. 90 n° 432, pp. 1200-1224
- [27] **Nason G. P.**, *Wavelet Shrinkage using Cross-validation*, J. Royal Statistical Society, 1996, Vol. 58 n° 2, pp. 463-479
- [28] **Misiti M.**, **Misiti Y.**, **Oppenheim G.** et **Poggi J.-M.**, *Les ondelettes et leurs applications*, Traitement du signal et de l'image, Hermes Sciences Lavoisier, 2003, 332 p.
- [29] **Antoniadis A.**, **Bigot J.** et **Sapatinas T.**, *Wavelet estimators in nanoparametric regression : a comparative simulation study*, J. Statistical Software, 2001, Vol. 6 n° 6, pp. 81-83
- [30] **Donoho D. L.** **Johnstone I. M.**, **Kerkyacharian G.** et **Picard D.**, *Wavelet shrinkage: Asymptotia*, JRSS, ser. B., 1995, Vol. 57, n° 2, pp. 301-369
- [31] **Barakat V.**, **Guilpart B.**, **Goutte R.** et **Prost R.**, *Model-based Tikhonov-Miller Image Restoration*, Proceeding of International Conference on Image Processing, 1997, Santa Barbara CA, Vol. 1, pp. 310-313
- [32] **Mancina G.**, *Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse par SIMS par deconvolution : algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la microélectronique silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2001, 184 p.
- [33] **Burdeau J. -L.**, **Goutte R.** et **Prost R.**, *Joint nonlinéair-quadratic regularization in wavelet based deconvolution schem*, IEEE Int. Conference on signal processing WCCC-ICSP 2000, 2000, Vol. 1, pp. 77-80

Sommaire du chapitre 5

PERFORMANCES THEORIQUES DE LA DECONVOLUTION MULTIRESOLUTION

Introduction	120
1. Exigences de la déconvolution	120
1.1. Spectre de la DRF et nécessité de la régularisation	120
1.2. Présence des composantes négatives	121
2. Analyse multirésolution d'un signal	123
2.1. Familles d'ondelettes utilisées et filtres associés	123
2.1.1. Les quatre filtres	124
2.1.2. Ondelette de Coiflet	124
2.1.3. Ondelette de Symlet	125
2.2. Décomposition d'un signal SIMS simulé sur une base d'ondelette. Débruitage du signal	126
2.3. Paramètre de régularisation α	131
2.4. Choix de l'opérateur de régularisation	133
3. Mise en oeuvre de la déconvolution multirésolution	134
3.1. Déconvolution des marches de concentration abruptes	134
3.2. Déconvolution des créneaux de concentration	139
3.3. Déconvolution de gaussiennes	142
3.4. Limite de séparation	147
3.5. L'auto - déconvolution	151
3.6. Discussion sur les erreurs	155
Conclusion	156
Bibliographie	157

Chapitre 5

PERFORMANCES THEORIQUES DE LA DECONVOLUTION MULTIREOLUTION

INTRODUCTION

Nous avons vu dans le chapitre 3 que les différentes méthodes de déconvolution proposées dans le domaine SIMS ont montré une certaine invalidité envers le bruit, dont les conséquences sont principalement la limitation de la résolution en profondeur des profils déconvolués et surtout la génération des oscillations et d'artefacts [1]. Pour franchir ces limites nous avons proposé, dans le chapitre 4, une nouvelle méthode basée sur la déconvolution multirésolution par décomposition sur une base d'ondelettes. Cette méthode est plus ou moins complexe mais efficace pour aboutir à une solution stable, unique et lisse sans l'application a posteriori des contraintes dures de toute nature que nous jugeons arbitraires !

Dans ce chapitre nous allons cerner les performances de la déconvolution multirésolution sur des profils simulés susceptibles d'être effectivement rencontrés lors d'une analyse SIMS. En particulier, nous allons comparer ces performances avec celles de la régularisation de Tikhonov - Miller avec comme modèle de solution un signal pré - déconvolué, qui sera notée RT-MMS [2]. Ces performances nous seront des supports pour appliquer notre approche sur des profils SIMS réels.

1. EXIGENCES DE LA DECONVOLUTION

1.1. Spectre de la DRF et nécessité de la régularisation

Dans le chapitre 2 de ce travail, nous avons vu en détail les caractéristiques de la fonction de résolution ainsi que sa détermination expérimentale. Dans ce paragraphe nous allons voir ses caractéristiques fréquentielles pour confirmer si nous sommes en présence d'un problème mal posé ou non ?

La Figure 1 présente le spectre de la DRF déterminée expérimentalement à 9,5 keV / O_2^+ et le spectre de son fittage par une forme analytique. Les deux spectres sont constitués d'un pic principal basse fréquence qui chute brutalement à zéro, à partir d'une fréquence de coupure f_c les composantes du reste des deux spectres sont très faibles, presque nulles. On constate alors que la DRF est un filtre passe bas. L'inversion de ce spectre lors de la résolution de l'équation de convolution amplifie les composantes du bruit situées dans les hautes fréquences du signal mesuré, donnant ainsi un signal noyé dans le bruit. La Figure 2 montre un exemple d'une déconvolution brute, par inversion directe de l'équation de convolution, d'un profil mesuré de bore dans le silicium. La présence de valeurs presque nulles dans le spectre de la DRF justifie le filtrage du bruit du profil mesuré ainsi que l'emploi d'une méthode de régularisation.

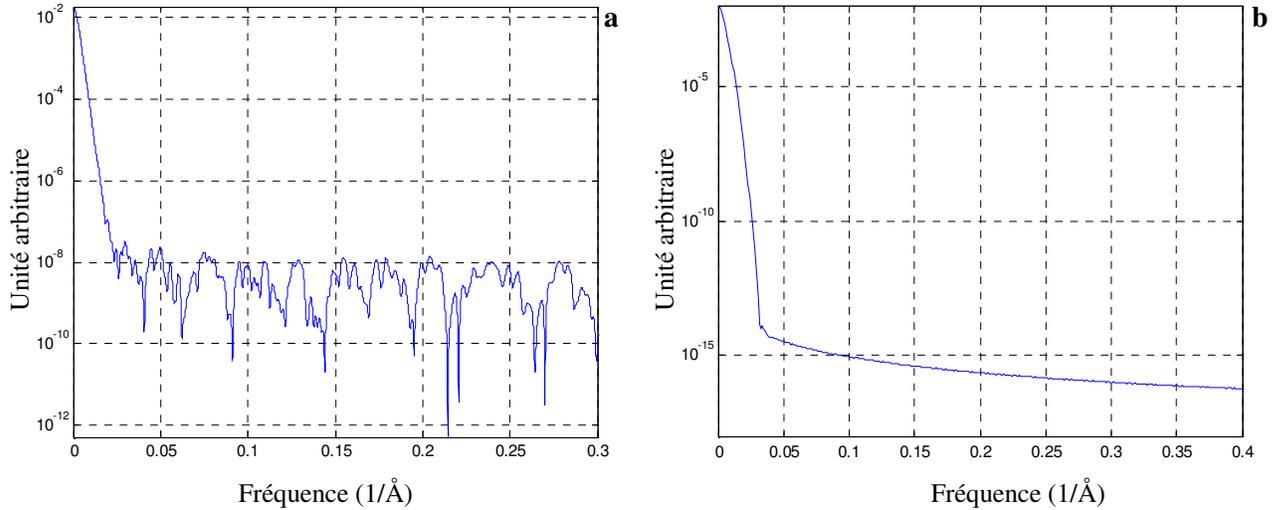


Figure 1 : Spectre de : a) DRF déterminée expérimentalement à $9,5 \text{ keV/O}_2^+$, b) DRF fittée par une forme analytique.

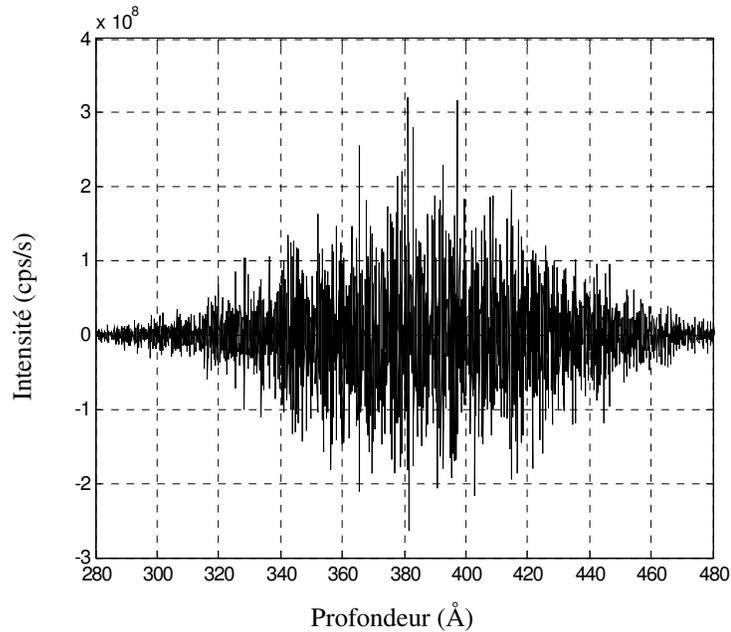


Figure 2 : Déconvolution brute d'un profil mesuré du bore dans le silicium (3 keV/O_2^+ , $56,1^\circ$).

1.2. Présence des composantes négatives

Même avec la régularisation du problème de la déconvolution, la solution ne sera pas unique. Le caractère mal posé du problème et la présence du bruit dans le signal mesuré conduit à une solution qui est physiquement inacceptable. Notamment la présence des oscillations avec des composantes négatives qui, en mesure des concentrations en SIMS, ne sont pas tolérées.

La déconvolution doit impérativement aboutir à un signal déconvolué positif, sans quoi il n'aura aucun sens physique !

Pour remédier à ce problème, les auteurs des références [2, 3] proposent d'appliquer une contrainte de positivité sur le profil déconvolué afin qu'il respecte cette caractéristique physique. A notre avis, positiver le signal après déconvolution nous paraît arbitraire, c'est uniquement diriger la solution pour qu'elle soit positive, sans s'assurer qu'elle est exacte.

En outre, la dose mesurée (nombre d'ions comptés sur toute la mesure) doit être identique pour tous les signaux (original, mesuré, déconvolué) au bruit près, et doit être conservée lors de la résolution de l'équation de convolution. Cette dose doit tenir compte des composantes négatives générées. Avec l'application de la contrainte de positivité (suppression de la dose *négative*), la dose du signal déconvolué et contraint sera supérieure à la dose initiale. Un écart de quelques pour-cent n'est pas toléré lors de la quantification d'un profil SIMS.

La Figure 3 présente un exemple de la génération des oscillations avec des composantes négatives lors de la déconvolution d'un profil multi-deltas-dopage (7 δ -dopage) du B:Si, et leur élimination par l'application de la contrainte de positivité.

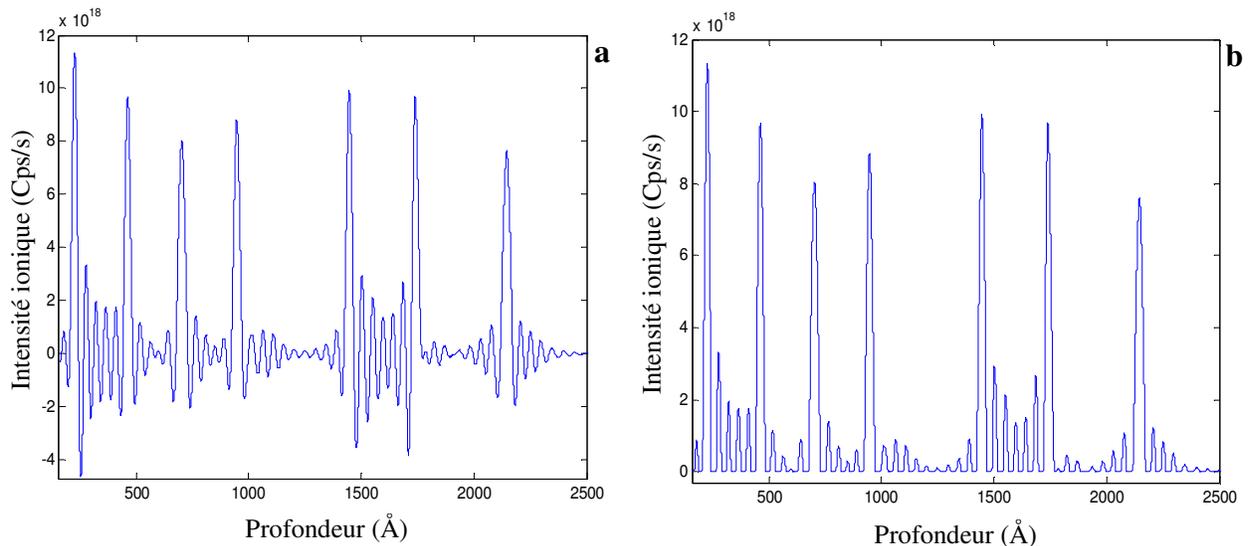


Figure 3 : Exemple d'une déconvolution d'un profil SIMS multi-deltas-dopage du bore dans le silicium ($4,5 \text{ keV/O}_2^+$). a) génération des oscillations avec des composantes négatives, b) élimination des composantes négatives par la contrainte de positivité.

Pour éliminer complètement ces oscillations Gautier [3] propose d'appliquer un niveau de confiance local, empirique et déduit de l'erreur de reconstruction sur les profils déconvolués. Le but est de séparer les parties du signal faisant partie du profil original de celles générées artificiellement par le processus d'inversion (artefacts de déconvolution). D'après cet auteur, lorsque le signal tombe dans le bruit que l'on ne peut plus réellement faire confiance dans le résultat de la déconvolution, c'est de fixer une valeur limite du signal déconvolué au dessous de laquelle il ne faut plus prendre en compte le résultat de la déconvolution comme faisant partie du signal original. A notre avis, un niveau de confiance qui autorise à prendre en compte certaines parties du signal et au dessous duquel le signal ne doit plus être pris en compte n'apporte aucune information sur la qualité de l'information et qui a du mal à trouver une signification parlante dans le cas d'un signal SIMS. L'un des avantages de l'analyse SIMS est

la grande dynamique du signal, restreindre le signal déconvolué à une dynamique qui ne dépasse pas deux décades ne reflète pas le signal original et les parties filtrées par le niveau de confiance peuvent fournir des informations précieuses sur l'échantillon analysé. Mancina [2] a montré que les artefacts ne sont pas toujours des aberrations de la déconvolution, ils peuvent être des structures mais de faibles concentrations. L'interprétation des artefacts doit être mesurée, surtout si leur dose n'est pas négligeable, et on ne peut pas les éliminer des profils. Le critère de niveau de confiance a été laissé par la suite car il est trop restrictif.

A notre égard, ces oscillations sont directement liées à la quantité de bruit. Une partie de l'information en particulier dans les hautes fréquences est masquée par le bruit et ce manque est compensé par la génération d'artefacts. L'origine alors de ces oscillations résiderait dans les fortes concentrations locales des hautes fréquences et qui ne peut être correctement restaurée à cause du bruit. Donc la présence du bruit dans les profils mesurés justifie l'emploi d'une méthode de déconvolution multirésolution régularisée.

Avant d'aborder les performances de la déconvolution multirésolution sur des structures simulées, nous allons voir dans la section suivante l'analyse multirésolution d'un signal, dans laquelle nous allons tout d'abord voir les familles d'ondelettes utilisées dans ce travail ainsi que les filtres associés. Puis une étude sur la décomposition d'un signal sur une base d'ondelette, en un signal d'approximation et en un signal de détails, va être détaillée. Par la suite, nous allons voir l'évolution du paramètre de la régularisation en fonction du niveau de décomposition et du niveau de bruit.

2. ANALYSE MULTIREOLUTION D'UN SIGNAL

2.1. Familles d'ondelettes utilisées et filtres associés

L'analyse en ondelettes, contrairement à l'analyse de Fourier, permet une liberté supplémentaire puisque le choix des atomes de la transformée, déduit de l'ondelette analysante, est laissé à l'utilisateur. En outre, en fonction des objectifs du traitement par ondelettes, on peut préférer la transformée continue à la transformée discrète si la redondance peut être mise à profit pour analyser le signal. On fait le choix contraire si une analyse économique du signal est souhaitée. Dans ce second cas, on doit se restreindre aux ondelettes à filtres alors que, dans le premier cas presque n'importe quelle fonction à intégrale nulle convient.

Comme le signal SIMS est un signal discret, nous avons choisi d'utiliser l'analyse discrète en ondelettes, notamment l'utilisation de l'algorithme rapide de Mallat [4]. Dans la plupart des cas, les ondelettes orthogonales (qui sont à support compact et qui permettent des décompositions discrètes à l'aide de l'algorithme rapide) sont définies par leurs filtres associés. Ainsi, l'ondelette n'est pas directement accessible puisque aucune formule analytique ne la définit. Néanmoins, en utilisant un algorithme déduit très simplement de l'algorithme de reconstruction de Mallat, il est facile d'obtenir d'excellentes approximations de l'ondelette définie implicitement.

Que peut-on vouloir d'une ondelette ?

Il y a plusieurs familles d'ondelettes dont les propriétés diffèrent selon les principaux critères suivants :

- le support des fonctions d'échelle ou d'ondelettes ou les vitesses de convergence vers 0 de ces fonctions à l'infini, qui quantifient respectivement la localisation en temps et en fréquence de l'ondelette ;

- la symétrie, qui est utile pour éviter le déphasage ;
- le nombre de moments nuls, qui est utile pour le débruitage ou la compression ;
- la régularité, qui est utile pour obtenir des signaux reconstruits lisses et réguliers.

Dans notre travail, nous avons choisi d'utiliser les familles d'ondelettes de Coiflet et de Symlet [5] car elles satisfont les critères cités et elles s'adaptent convenablement avec nos signaux SIMS.

2.1.1. Les quatre filtres

Pour une ondelette orthogonale Ψ , la fonction d'échelle associée Φ satisfait une relation fondamentale qui est l'équation aux deux échelles suivante :

$$\frac{1}{2}\Phi\left(\frac{t}{2}\right) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} a_n \Phi_{0,n} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} a_n \Phi(t-n) \quad (1)$$

Les filtres intervenant dans la transformée en ondelette discrète et dans la transformée inverse sont intimement liés à la suite $(a_n)_{n \in \mathbb{Z}}$. Si Φ (et par conséquent Ψ) est à support compact, la suite $(a_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ n'a qu'un nombre fini d'éléments non nuls. On peut alors voir cette suite comme un filtre passe-bas. Ce filtre, noté w , laisse donc passer les basses fréquences et retient les hautes. Il est à réponse impulsionnelle finie (FIR), de longueur notée K , de somme 1 et de norme $\frac{1}{\sqrt{2}}$.

A partir du filtre w , on en définit quatre à réponse impulsionnelle finie, de taille K et de norme 1. On note les filtres de décomposition (repérés par le D final : LoD et HiD). Le premier est un passe - bas (repéré par Lo au début) et le second un passe-haut (repéré par Hi au début). Les deux filtres de reconstruction (repérés par le R final) sont notés LoR et HiR .

Les deux filtres de reconstruction sont liés par :

$$LoR = \frac{w}{\|w\|} \quad (2)$$

et

$$HiR_k = (-1)^k LoR_{K+1-k} \text{ pour } k = 1, \dots, K \quad (3)$$

Ce sont des filtres miroirs en quadrature. Les deux filtres de décomposition sont obtenus par image miroir des filtres de reconstruction :

$$LoD_k = LoR_{K+1-k} \text{ et } HiD_k = HiR_{K+1-k} \text{ pour } k = 1, \dots, K \quad (4)$$

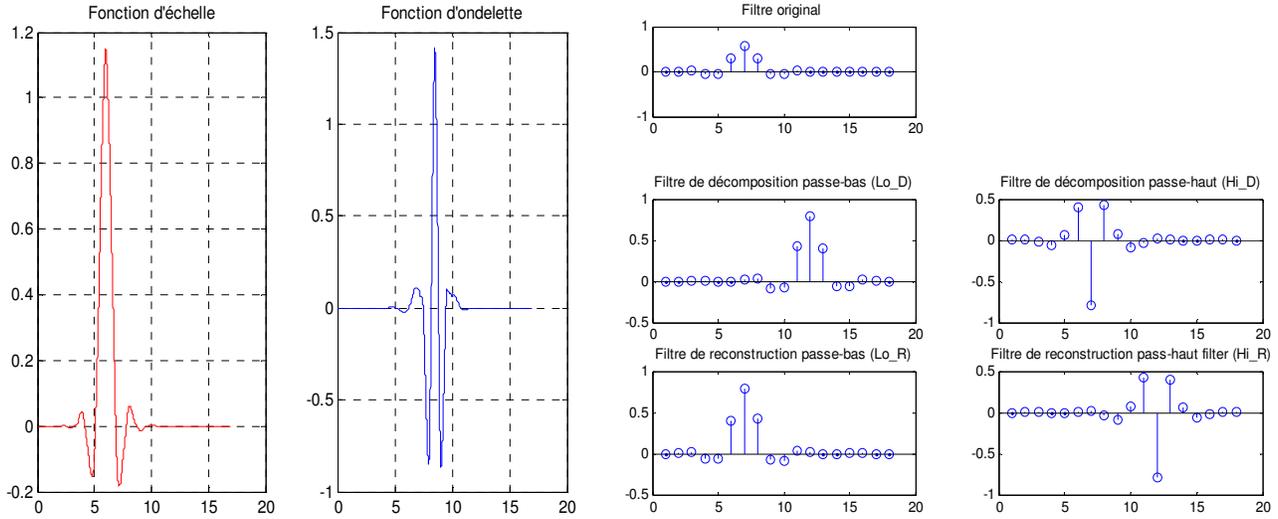
2.1.2. Ondelette de Coiflet

Construites par Ingrid Daubechies sur la demande de R. Coifman [5], les Coiflets constituent une famille d'ondelettes possédant une propriété inhabituelle. Non seulement, l'ondelette Ψ associée à $coifN$ a $2N$ moments nuls, mais en plus la fonction d'échelle Φ , qui est d'intégrale 1, a $2N-1$ moments nuls. Les deux fonctions Φ et Ψ ont un support de longueur $6N-1$. L'avantage des Coiflets ainsi que les fonctions d'échelle associées, sont bien symétriques. L'intérêt principal des Coiflets réside dans la propriété suivante : si f est une fonction assez régulière, alors le coefficient d'approximation $(f, \Phi_{j,k})$ est, pour j suffisamment grand, bien estimé par $2^{-j/2}f(2^{-j}k)$, c'est-à-dire un échantillonnage de la fonction f . De plus, si f est un polynôme de degré au plus égal à $N-1$, alors l'estimation correspond à la valeur exacte. Cette propriété est

utilisée pour contrôler la différence entre le développement d'un signal donné sur $\Phi_{j,k}$ et un échantillonnage de ce signal.

Pour deux d'entre elles (*coif3* et *coif5*), on trouve dans la Figure 4 l'ondelette, la fonction d'échelle et les quatre filtres associés.

a) Coif3



b) Coif5

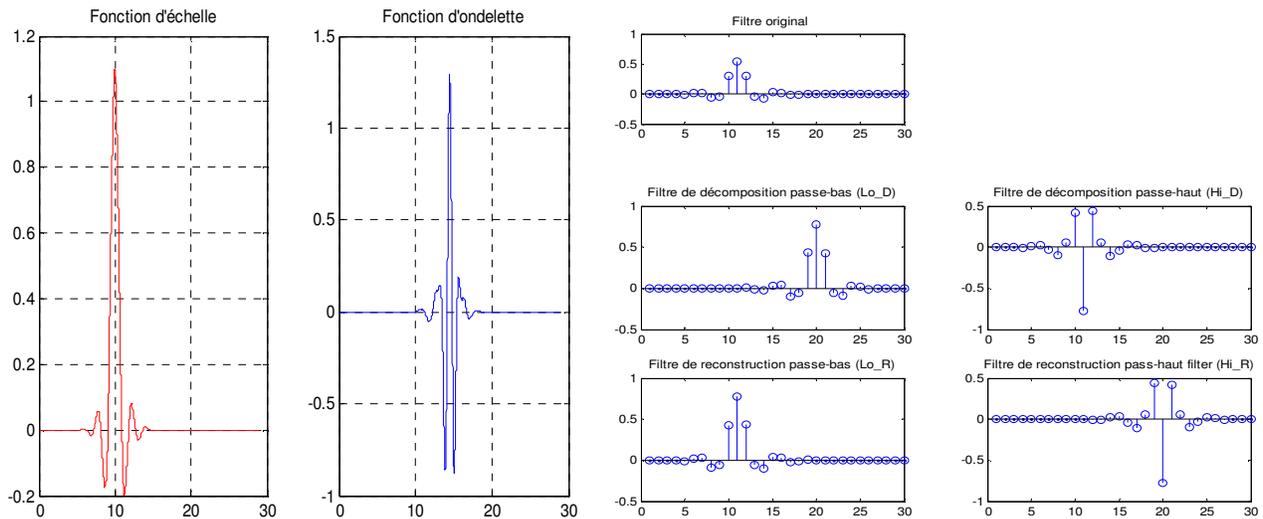


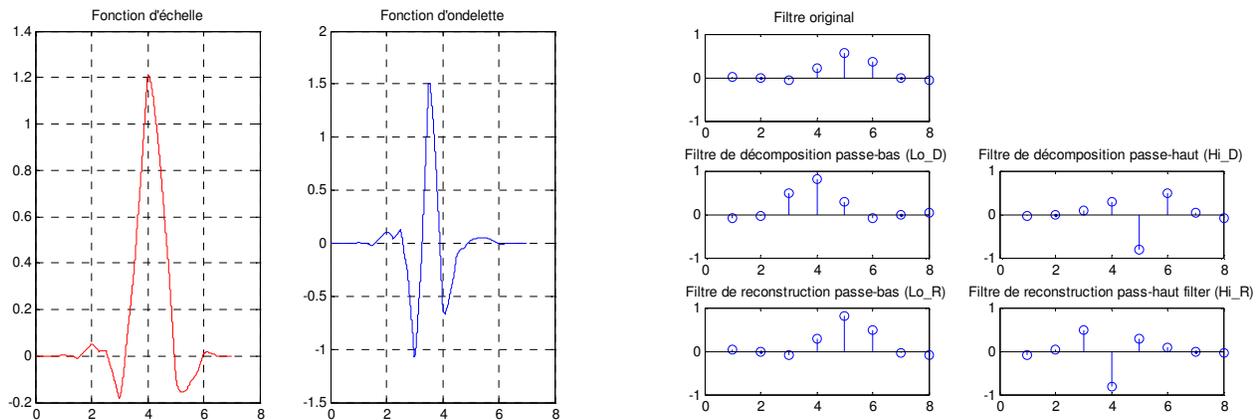
Figure 4 : Ondelette de Coiflet : fonction d'échelle, fonction d'ondelette et filtres associés. a) Coif3, b) Coif5.

2.1.3. Ondelette de Symlet

« Symlet », ondelette créée à partir des ondelettes de Daubechies [5]. Les « symlets » sont des ondelettes orthogonales, donc elles préservent l'énergie du signal d'une résolution à l'autre. Cette propriété est intéressante pour pouvoir interpréter physiquement les coefficients de détails ou d'approximations durant l'analyse et la synthèse. De plus, étant construites à partir des ondelettes de « Daubechies », elles sont à support compact, ce qui réduit la taille des filtres. Enfin, comme leur nom l'indique elles ont l'avantage d'être pratiquement symétriques.

On trouve dans la Figure 5 l'ondelette, la fonction d'échelle et les quatre filtres associés des ondelettes Sym4 et Sym8.

a) Sym4



b) Sym8

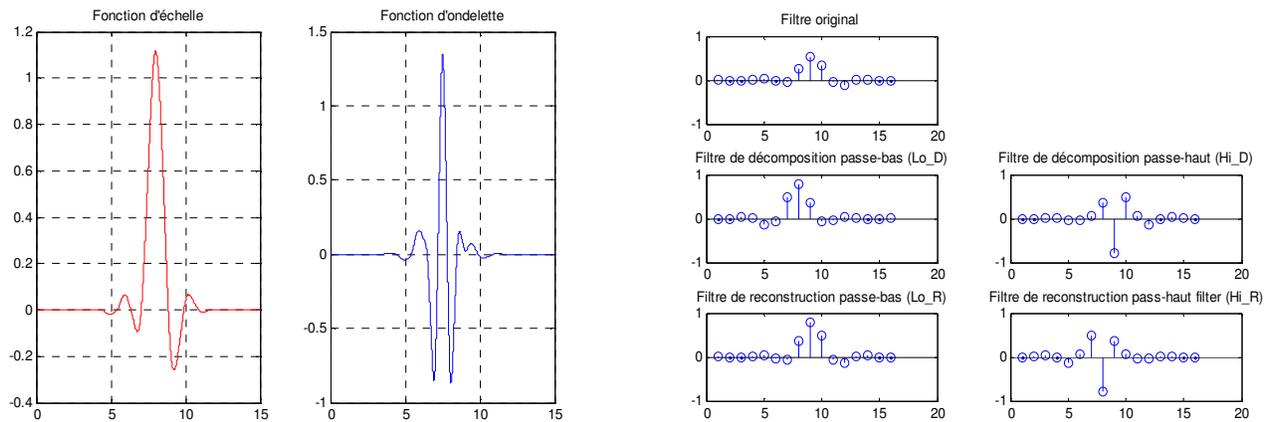


Figure 5 : Ondelette de Symlet : fonction d'échelle, fonction d'ondelette et filtres associés. a) Sym4, b) Sym8.

2.2. Décomposition d'un signal SIMS simulé sur une base d'ondelette. Débruitage du signal

Les ondelettes analysent la répartition locale de l'énergie d'un signal scalaire. Les informations codées dans les coefficients sont alors entièrement déterminées par les valeurs du signal situées dans le champ d'ondelette. Ce travail par zone, présent dans toute technique locale, est complété par un travail de synthèse qui réalise la comparaison des résultats obtenus en différents points. On globalise en quelque sorte les analyses locales en repérant, par exemple, les zones de comportement local similaire déterminant ainsi différentes zones intéressantes.

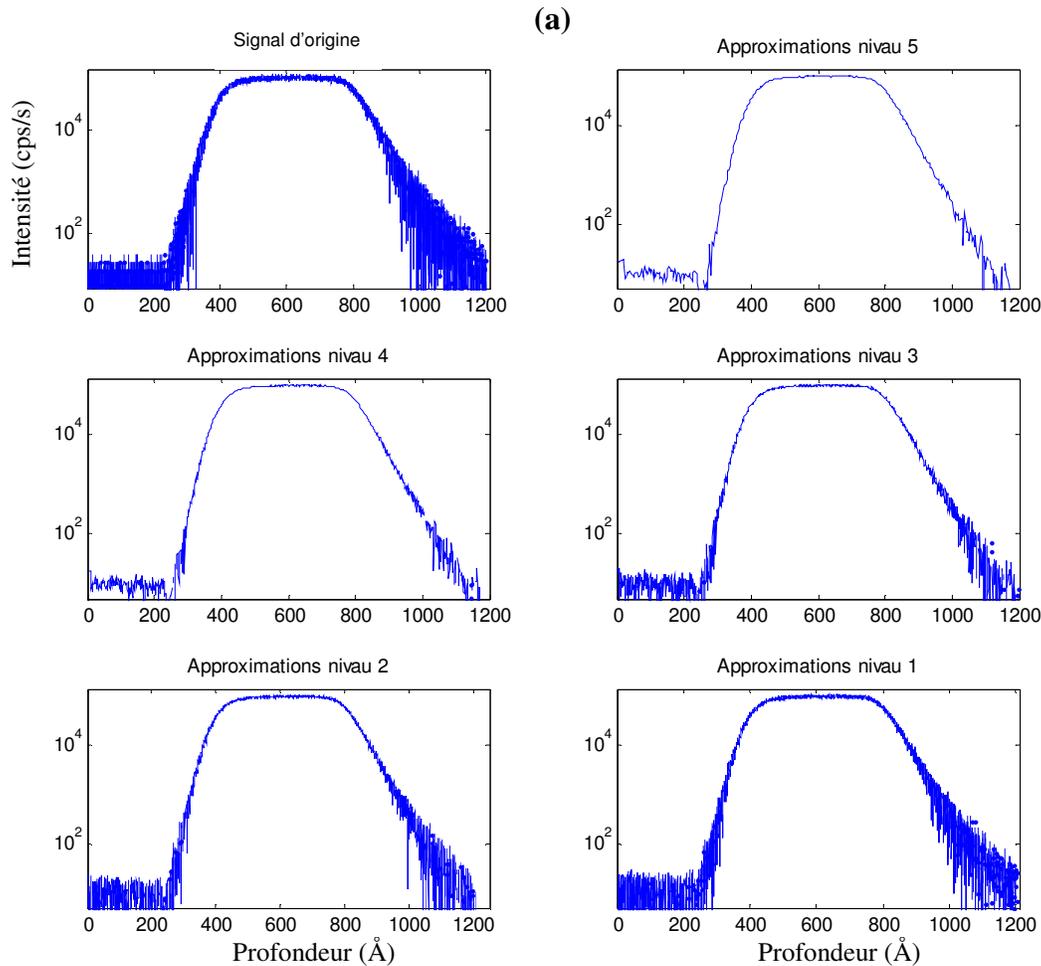
Comme souvent en traitement du signal, peu d'information a priori est utile, tant pour l'analyse que pour des traitements complexes comme le débruitage. Pourvu que les bases des ondelettes soient orthogonales, cela permet une représentation économique et assure en particulier l'inversibilité. Elle autorise à transformer les coefficients, par exemple en supprimant quelques-uns bien choisis, assez pour que l'effet soit visible mais pas trop pour ne pas détruire le contenu principal du signal. Alors la transformation inverse reconstitue un signal qui est souvent plus compréhensible que le signal d'origine. Il est donc possible d'agir sur les coefficients. C'est bien le seuillage des coefficients qui est la base de débruitage.

Le débruitage, qui consiste, selon la belle expression de V. Wickerhauser rapporté dans [6], « à couper les mauvaises herbes en épargnant les marguerites », comprend :

- La suppression de bruit pour repérer les grandes évolutions, souvent lentes, associées à la tendance ou à des zones lisses.
- La recherche et la modélisation de parties non lisses variant rapidement mais assez stables, caractérisées par des spectres plats dont le représentant le plus usuel est le bruit blanc.
- La suppression de la partie non pertinente pour conserver l'interprétable.

En d'autres termes, on décompose le signal sur une base orthogonale d'ondelettes au moyen de la transformée discrète. En suite, on sélectionne une partie des coefficients par seuillage, en conservant intacts les coefficients d'approximation de niveau convenablement choisi. Enfin, en utilisant les coefficients seuillés, on reconstruit le signal en leur appliquant la transformée inverse. Le signal ainsi obtenu est le signal débruité.

Dans la Figure 6 nous présentons la décomposition ainsi que le seuillage du signal SIMS simulé d'un créneau de largeur 400 Å et d'interfaces graduelles (suivant une fonction erreur).



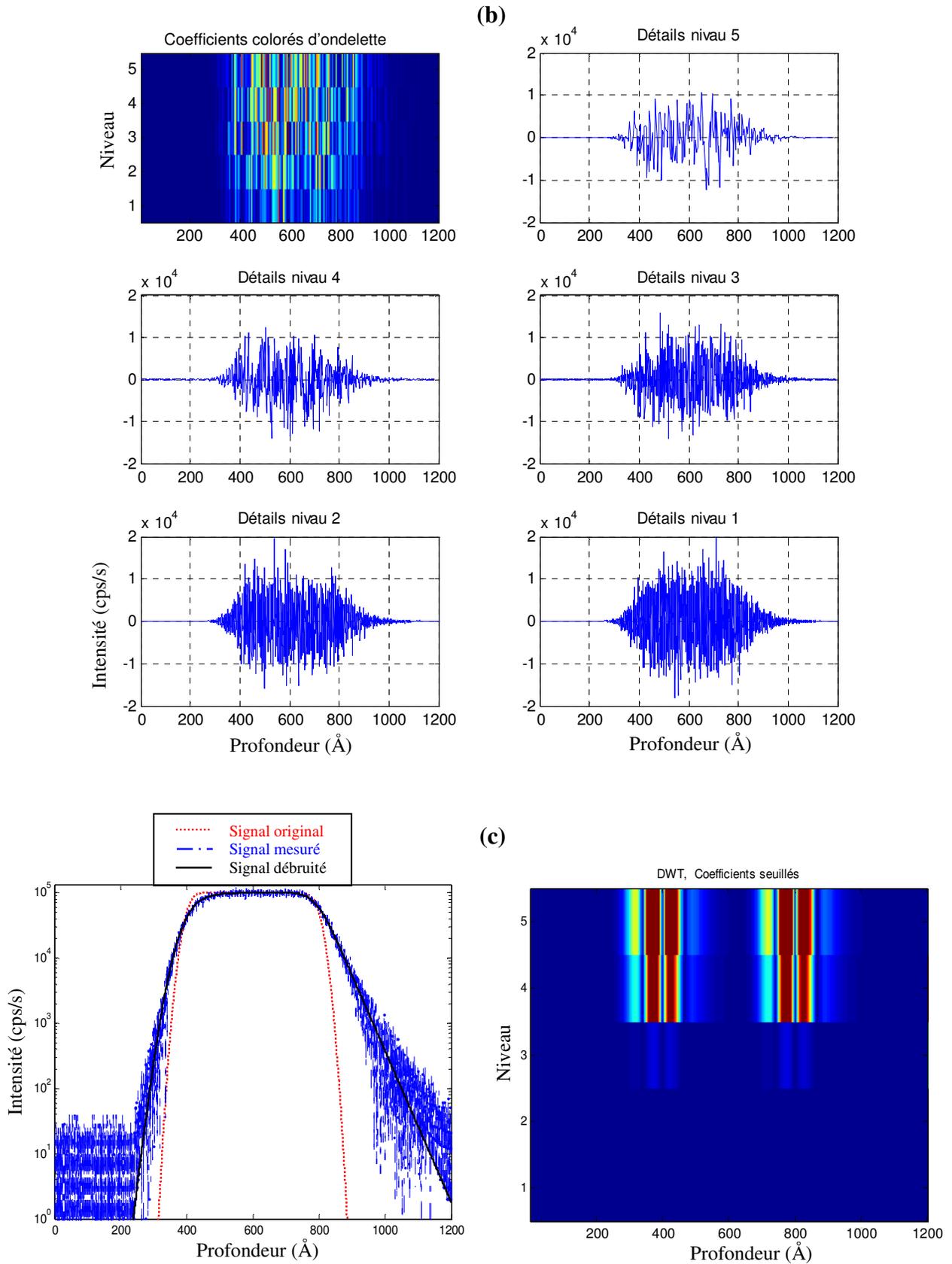


Figure 6 : Décomposition d'un signal SIMS sur une base d'ondelette « Sym4 », niveau de décomposition 5 : a) signal mesuré original avec les signaux d'approximation, b) signaux de détails avec les coefficients colorés d'ondelette, c) signal débruité superposé au signal original avec les coefficients seuillés. SNR = 25 dB.

Le signal d'origine est un signal SIMS simulé et bruité d'un SNR = 25dB. Avec ce niveau de bruit le signal est trop bruité. L'analyse en ondelette de ce signal conduit aux différents signaux de la Figure 6. Le choix de ce signal est arbitraire, il représente un simple exemple de la décomposition d'un signal sur une base d'ondelette.

Dans la Figure 6-a on trouve le signal d'origine et les approximations du niveau 5 (le plus grossier, \mathbf{a}_5) au niveau 1 (le plus fin, \mathbf{a}_1). Dans la Figure 6-b on trouve les détails du niveau le plus grossier (\mathbf{d}_5) au niveau le plus fin (\mathbf{d}_1) et les coefficients colorés d'ondelette. L'ondelette utilisée est une ondelette à support compact presque symétrique d'ordre 4 notée *sym4*.

En négligeant les effets du choix de l'ondelette, un examen rapide de ces résultats montre :

Dans les graphiques des approximations (voir Figure 6-a) partant de \mathbf{a}_1 et recherchons, en remontant, un niveau tel que l'approximation constitue un bon candidat à être un estimateur du signal utile. Les niveaux 4 et 5 sont raisonnables. Néanmoins, les estimateurs associés à ces niveaux sont clairement très mauvais pour le début du signal correspondant aux abscisses 0 à 250 Å. Inversement, une restitution acceptable au début du signal conduirait à choisir \mathbf{a}_3 mais visiblement trop bruité.

Regardons maintenant les détails (voir Figure 6-b). Le détail \mathbf{d}_1 semble composé intégralement de bruit. Les détails \mathbf{d}_2 à \mathbf{d}_5 présentent de fortes valeurs concentrées aux abscisses de 280 et 920 Å. On en déduit que les détails \mathbf{d}_4 et \mathbf{d}_5 contiennent des composantes du signal utile par opposition au bruit non informatif. Ce phénomène est aussi visible sur le graphique des coefficients d'ondelettes du niveau 5 au niveau 1, les plus grands en valeur absolue étant plus colorés en rouge, jaune, vert et bleu ciel.

Cet exemple rapide illustre qu'une simple analyse par ondelette peut donner des pistes nombreuses pour des traitements plus fins et orienter la stratégie de résolution de problèmes classiques comme l'extraction du signal utile ou le débruitage.

Rappelons les arguments clés pour la compréhension de l'effectivité de ces méthodes sont les suivants :

- ✚ La décomposition par ondelette est une analyse additive, par conséquent l'analyse de $y = x + b$ est égale à la somme des analyses du signal x et du bruit b .
- ✚ Si l'on suppose que le bruit b est blanc de variance constante, alors les coefficients d'ondelettes à toutes les échelles sont des bruits blancs de même variance. D'autre part, les signaux réels, sont bien des cas, assez réguliers sauf en quelques endroits ce qui rend la décomposition par ondelette de x très creuse, et très bien représentée par les coefficients d'une approximation assez grossière plus quelques grands coefficients de détail.
- ✚ Dans le cas où les irrégularités engendrent des coefficients plus grands que l'échelle du bruit, la procédure de seuillage sélectionne seulement les coefficients liés au signal pourvu que l'on sache estimer convenablement l'échelle du bruit.

Enfin l'opération de seuillage, conduit toujours à régulariser le signal. Les méthodes classiques de débruitage sont incapables d'une telle adaptation en échelle.

La Figure 6-c montre le signal d'origine bruité superposé au signal débruité avec les coefficients d'ondelettes des niveaux 1 à 5 seuillés par un seuillage (doux) universel qui

est le plus répandu. A partir de ces coefficients seuillés le signal débruité est reconstitué. Pour les rendre plus lisibles, ces coefficients sont « bégayés » 2^n fois au niveau n (ce qui explique les créneaux surtout visibles pour $n > 3$). Voyons maintenant comment les courbes de cette figure sont obtenues :

- ✚ Les coefficients de l'approximation sont tous conservés, ce qui conduit d'emblée à introduire le premier composant du signal débruité \mathbf{a}_5 qui est de la forme :

$$\hat{A}_d = \sum_k \hat{\beta}_{5,k} \Phi_{5,k} \quad (5)$$

Les coefficients estimés $\hat{\beta}_{5,k}$ sont simplement les coefficients obtenus par décomposition du signal initial :

- ✚ Seuls les quelques plus grands coefficients d'ondelettes (c'est-à-dire les coefficients de détail) sont conservés, les autres sont remplacés par zéro. On peut comparer entre les graphiques des coefficients colorés de l'ondelette avant (Figure 6-b) et après (Figure 6-c) l'opération de seuillage pour constater la rareté des coefficients conservés (la zone bleu - nuit correspond aux coefficients annulés). On obtient ainsi le second composant du signal débruité qui est de la forme :

$$\hat{D}_d = \sum_{1 \leq j \leq 5} \sum_k \hat{\gamma}_{j,k} \Psi_{j,k} \quad (6)$$

Les coefficients estimés $\hat{\gamma}_{j,k}$ sont simplement les coefficients $\gamma_{j,k}$ obtenus par décomposition du signal initial puis seuillés.

- ✚ Le signal débruité est donc :

$$\hat{y}_d = \hat{A}_d + \hat{D}_d \quad (7)$$

Il est visible que le résultat obtenu de la Figure 6-c à gauche (signal débruité) est de bonne qualité ; lisse et de bonne régularité, nous permettant ainsi de l'exploiter dans la déconvolution multirésolution sans craindre d'aboutir à des résultats aberrants.

Le seuil obtenu par le seuillage universel en utilisant la formule de Donoho et Johnstone [7] est $\lambda = 2,1433 \cdot 10^3$ cps/s. Cette valeur est relativement grande, c'est tout à fait normal puis que le niveau de bruit est élevé (SNR = 25 dB). Les différents seuils obtenus pour d'autres ondelettes sont :

Pour *Sym8* : $\lambda = 2,2281 \cdot 10^3$ cps/s

Pour *Coif3* : $\lambda = 2,2193 \cdot 10^3$ cps/s

Pour *Coif5* : $\lambda = 2,2102 \cdot 10^3$ cps/s

Nous constatons que la valeur du seuil ne change pas trop avec la famille d'ondelette utilisée. Pour mieux généraliser cette étude (en particulier s'assurer que le seuil ne dépend pas l'ondelette utilisée) nous avons tracé l'évolution de ce seuil en fonction du niveau de bruit pour les différentes ondelettes utilisées dans ce travail.

La Figure 7 résume les valeurs du seuil en fonction du niveau de bruit pour les différentes ondelettes utilisées.

Nous constatons que le seuil de débruitage est proportionnel avec le niveau de bruit. C'est évident car plus le signal est bruité plus le seuil sera grand pour éliminer les détails contenant du bruit, en ne conservant que les grands coefficients qui, normalement, appartiennent au signal utile et les autres sont remplacés par des zéros.

L'indépendance du seuil avec l'ondelette utilisé est matérialisée par la superposition des quatre courbes dont les variations sont décroissantes. La valeur maximale observée pour l'ondelette *Sym4* est égale à $2,7865 \cdot 10^4$ cps/s correspond à un SNR de 3 dB, la valeur minimale est égale à 0,9564 cps/s correspond à un SNR de 100 dB est obtenue par l'ondelette *Coif3*.

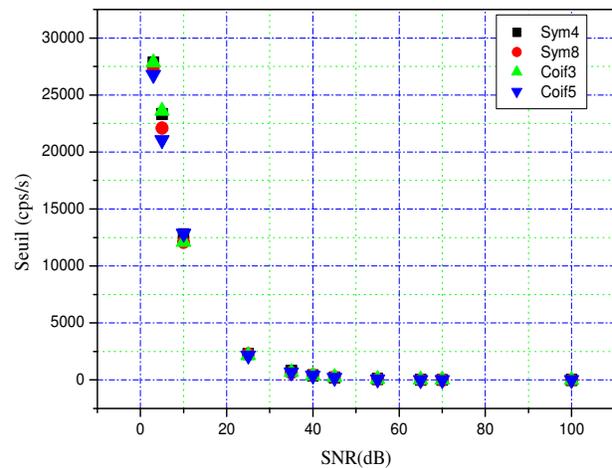


Figure 7 : Variation du seuil de débruitage en fonction du niveau de bruit pour les différentes ondelettes utilisées.

2.3. Paramètre de régularisation α

Lors d'une régularisation classique (monorésolution) par l'algorithme RT-MMS (voir Figure 3) les résultats obtenus sont oscillatoires, les artefacts générés sont principalement dus à la forte présence des composantes hautes fréquences qui ne sont pas compensées par le paramètre de régularisation α associé à l'opérateur de régularisation D . Ce paramètre s'applique d'une manière globale sur toutes les bandes fréquentielles du signal, ce qui conduit à traiter les basses fréquences qui contiennent le signal utile comme les hautes fréquences constituées majoritairement du bruit. Ainsi un paramètre α trop faible va conduire à une solution dominée par le bruit présent au sein des données observées et le modèle introduit n'aura aucune influence sur le résultat final. Un paramètre α trop élevé conduira à une solution peu sensible au bruit, en contrepartie celle-ci sera très éloignée des données mesurées (observées). En plus, avec le processus itératif, de l'algorithme RT-MMS, les oscillations créées lors d'une itération n de l'algorithme sont intégrées dans le nouveau modèle $X_{\text{mod}n}$ et amplifiées à l'itération $n+1$ ce qui dégenère la solution finale. La valeur de α , paramètre de régularisation associé à D , est très importante dans le processus de la régularisation et va déterminer la qualité de la solution finale.

Donc il est nécessaire d'adapter localement le paramètre de régularisation α dans les différentes bandes fréquentielles du signal : basses, moyennes et hautes fréquences. Ce qui nous amène à déconvoluer les signaux décomposés préalablement par projection sur une base d'ondelettes.

Nous avons vu dans le chapitre 4 (§ 4, équations (65 a, b)) que le paramètre de régularisation α global est divisé en deux sous - paramètres locaux selon qu'ils s'agissaient d'un signal d'approximation ou des signaux de détails on obtient un paramètre de régularisation d'approximation $\alpha_a^{(j)}$ ou celui de détails $\alpha_d^{(i)}$. Ces paramètres s'adaptent, en fonction du niveau de décomposition, avec les bandes à traiter. Contrairement à α global qui s'applique sur toutes les fréquences de la même manière. Néanmoins, ces formules s'appliquent uniquement en simulation, puisque l'énergie du bruit et la régularité du signal sont inconnus. En pratique s'il est

possible de connaître l'énergie du bruit, il est en revanche impossible d'avoir une idée précise sur la régularité de la solution.

A partir de la décomposition du signal SIMS simulé précédent (voir Figure 6) ainsi que la déconvolution multirésolution du signal à chaque niveau de décomposition, nous avons calculé les différents paramètres de régularisation des approximations et des détails (en utilisant les équations (65 a, b) de §4-chapitre 4) pour des niveaux décroissants de bruit. Le tableau suivant récapitule les différentes valeurs obtenues :

SNR(dB)	3	5	10	25	35	40	45	55	65	70	100
$\alpha_a^{(1)}$	1,1104	0,8105	0,3594	0,0130	0,0013	$4,3446 \cdot 10^{-4}$	$1,3331 \cdot 10^{-4}$	$1,3713 \cdot 10^{-5}$	$1,3682 \cdot 10^{-6}$	$4,2555 \cdot 10^{-7}$	$5,1216 \cdot 10^{-10}$
$\alpha_a^{(2)}$	2,7560	2,0447	0,7875	0,0260	0,0025	$8,2398 \cdot 10^{-4}$	$2,6085 \cdot 10^{-4}$	$2,6523 \cdot 10^{-5}$	$2,6466 \cdot 10^{-6}$	$8,2043 \cdot 10^{-7}$	$9,8920 \cdot 10^{-10}$
$\alpha_a^{(3)}$	6,7846	4,6820	1,5754	0,0525	0,0053	0,0016	$5,1610 \cdot 10^{-4}$	$5,4060 \cdot 10^{-5}$	$5,4337 \cdot 10^{-6}$	$1,6382 \cdot 10^{-6}$	$1,9772 \cdot 10^{-9}$
$\alpha_a^{(4)}$	14,587	9,2034	3,2758	0,1065	0,0105	0,0032	0,0010	$9,8931 \cdot 10^{-5}$	$1,0314 \cdot 10^{-5}$	$3,2034 \cdot 10^{-6}$	$3,9800 \cdot 10^{-9}$
$\alpha_a^{(5)}$	32,014	19,794	6,5474	0,2112	0,0210	0,0067	0,0021	$2,071 \cdot 10^{-4}$	$2,0562 \cdot 10^{-5}$	$6,3236 \cdot 10^{-6}$	$8,0727 \cdot 10^{-9}$
$\alpha_d^{(1)}$	1,1034	1,1113	1,1039	1,1085	1,1002	1,1053	1,1231	1,1111	1,1134	1,0970	1,1179
$\alpha_d^{(2)}$	2,0407	2,0829	2,4218	2,2940	2,4890	2,0748	2,1090	2,2137	2,3724	2,0986	2,1850
$\alpha_d^{(3)}$	4,8911	4,4854	4,2503	4,1445	4,5410	4,2644	4,4214	4,3897	4,7414	4,5561	4,3669
$\alpha_d^{(4)}$	7,8263	8,4119	10,3678	9,4974	7,6210	9,6830	9,3825	7,6433	7,4246	9,1069	7,9749
$\alpha_d^{(5)}$	18,6795	15,2546	15,9712	19,8163	17,4146	19,1952	18,5054	19,4633	16,0872	19,0701	15,9600
α_c	0,9557	0,5811	0,1876	0,0058	$5,9290 \cdot 10^{-4}$	$1,8580 \cdot 10^{-4}$	$5,8938 \cdot 10^{-5}$	$5,9591 \cdot 10^{-6}$	$6,0131 \cdot 10^{-7}$	$1,9199 \cdot 10^{-7}$	$2,3050 \cdot 10^{-10}$

Tableau 1 : Tableau récapitulatif des valeurs des paramètres de régularisation des approximations, de détails ainsi que celles du paramètre de régularisation classique (global) pour différents niveaux de bruit. L'ondelette utilisée est Coif5.

Tout d'abord nous allons suivre l'évolution des paramètres de régularisation en fonction du niveau de bruit. En observant cette évolution, nous constatons que le paramètre de régularisation d'approximation croît proportionnellement avec le niveau de bruit. C'est évident, plus le niveau de bruit augmente plus ça nécessite un paramètre plus élevé pour compenser l'énergie des hautes fréquences qui se traduisent dans le résultat final sous forme d'oscillations et d'artefacts. La même évolution est remarquée pour le niveau de décomposition mais plus prononcée, ce ci s'explique par la décroissance de la régularité locale avec l'échelle. Cette régularité locale est traduite par le comportement inter-échelle des coefficients d'ondelette, elle détermine l'apparence visuelle de l'information de détails ajoutée, c'est-à-dire le contenu hautes fréquences. Donc, plus d'avoir une grande précision plus d'avoir une meilleure régularité du signal, plus le paramètre de régularisation décroît.

Cependant, le paramètre de régularisation de détails montre un comportement chaotique avec une évolution quasi-constante en fonction du niveau de bruit. Ceci s'explique par la compensation des variations rapides du bruit dans les détails par celles des régularités à chaque

niveau, ce qui donne des valeurs quasi - constantes. La croissance de ces paramètres en fonction du niveau de décomposition, comme les paramètres d'approximation, est matérialisée par la dégradation de la précision avec l'échelle, ce qui diminue la régularité d'un niveau à l'autre, et comme la décomposition est dyadique et régulière ces paramètres doubleront de valeur d'une échelle à l'autre.

Enfin, nous constatons que pour avoir une bonne régularisation il faut que le paramètre de régularisation s'adapte d'une manière locale avec les bandes à traiter, basses fréquences ou hautes fréquences. Cette adaptation conduit à la compensation des hautes fréquences, donnant ainsi un signal lisse dépourvu de toute anomalie qui peut fausser l'interprétation de la solution finale. Contrairement à un paramètre de régularisation global (voir la dernière ligne du Tableau 1) qui traite les hautes comme les basses fréquences, par conséquent le résultat est un signal oscillatoire (voir Figure 3). Dans le prochain paragraphe nous allons voir l'effet du mauvais choix de ce paramètre global sur la matrice généralisée \mathbf{H}^+ et ses conséquences sur le résultat final.

2.4. Choix de l'opérateur de régularisation

Les opérateurs de convolution rencontrés sont des systèmes passe-bas. L'opérateur de régularisation sera alors un filtre passe-haut par exemple de type gradient $d(n) = [1, -1]$, ou de type Laplacien avec $d(n) = [-1, 2, 1]$. Ce filtre doit être très doux, c'est-à-dire que son spectre ne doit pas comporter des zéros ou de zones à très faible niveau, sous peine d'obtenir un signal déconvolué non régularisé.

Dans la régularisation de Tikhonov-Miller la matrice \mathbf{H} caractérisant le problème de la déconvolution avant régularisation est remplacée par la matrice $\mathbf{H}^+ = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D})$ plus ou moins mieux conditionnée. Cela est réalisé par la modification des valeurs propres du système \mathbf{H} . Normalement, le problème de la résolution d'un système linéaire est donc rendu plus ou moins stable.

La Figure 8 montre les spectres de la DRF (\mathbf{H}), du filtre \mathbf{D} et de la matrice généralisée \mathbf{H}^+ .

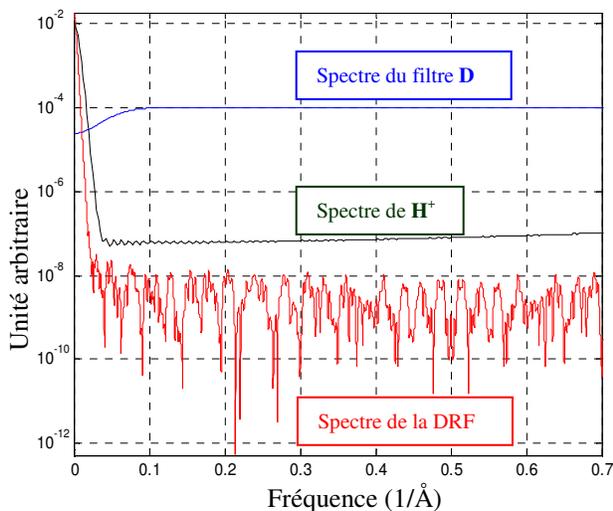


Figure 8 : Spectres : de la DRF (\mathbf{H}), du filtre \mathbf{D} et de la matrice généralisée \mathbf{H}^+ . Ici la matrice \mathbf{H}^+ est sur - régularisée par la multiplication du paramètre de régularisation par un facteur de 100.

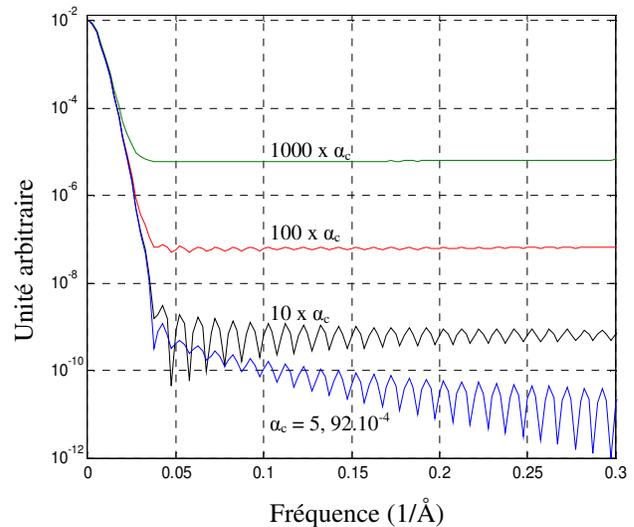


Figure 9 : Evolution du spectre de la matrice \mathbf{H}^+ en fonction de $k\alpha_c$ ($k=1, 10, 10^2, 10^3$).

Le choix de l'opérateur de régularisation ne doit pas constituer une difficulté dès lors que la règle sur la modification des valeurs propres soit respectée. Le choix le plus déterminant pour la qualité de la reconstruction sera celui du paramètre de régularisation. En effet, le mauvais calcul de ce paramètre conduit au mal conditionnement de la matrice \mathbf{H} , par conséquent la solution sera dégénérée. La Figure 9 montre l'évolution du spectre de la matrice \mathbf{H}^+ pour différentes valeurs du paramètre de régularisation α_c .

D'après cette figure, nous constatons que la détermination du paramètre de régularisation classique α_c par la méthode de Tikhonov – Miller conduit à une valeur de $5,9290.10^{-4}$ (voir la dernière ligne du Tableau 1, la colonne qui correspond à un SNR = 35 dB). Avec cette valeur la matrice \mathbf{H}^+ est oscillatoire et sous régularisée, conduisant ainsi à une solution instable. Mancina [2] propose de multiplier le paramètre de régularisation par un facteur entier positif pour mieux conditionner le système et donc rendre la solution plus stable comme le témoigne la Figure 9. Avec la multiplication de ce paramètre par un facteur k ($k = 10, 10^2, 10^3$), la matrice \mathbf{H}^+ se régularise de plus en plus, néanmoins cette multiplication est arbitraire et ne s'appuie sur aucun support physique. Cet exemple nous montre que le paramètre de régularisation doit être déterminé d'une manière précise et qu'il doit s'adapter d'une manière locale avec les différentes bandes traitées sous peine d'avoir un résultat aberrant.

3. MISE EN ŒUVRE DE LA DECONVOLUTION MULTIREOLUTION

Dans les sections précédentes (§1 et §2) nous avons réuni tous les éléments nécessaires à la mise en œuvre d'une déconvolution multirésolution. Dans la suite, nous allons valider cet algorithme sur des structures simulées (pour plus amples informations sur la simulation des profils SIMS voir Annexe 3) ainsi que de comparer les résultats obtenus avec ceux de l'algorithme RT-MMS. Nous essayerons d'en tirer des conclusions quant à la résolution ultime qu'on peut attendre de la méthode.

3.1. Déconvolution des marches de concentration abruptes

Ce type de structure est présent en technologie MOS (réalisé par exemple par LP-CVD pour *Low Pressure Chemical Vapor Deposition* ou MBE pour *Molecular Beam Epitaxy*), pour les dépôts de couches minces avec un contrôle minutieux du processus de dépôt pour obtenir des interfaces abruptes.

Ces structures présentent un cas sévère de déconvolution, car premièrement la grande pente des interfaces abruptes (un grand gradient de concentration) provoque la génération des oscillations dans le résultat final d'une déconvolution régularisée classique. Deuxièmement, la grande dynamique du signal pose une limite pour la récupération du signal sur la totalité du profil, donc une grande dynamique reflète la fidélité de l'algorithme à récupérer toutes les informations présentes dans le signal.

Il ne fait pas de doute que les marches de concentration décroissantes sont plus affectées par la déconvolution que les marches montantes à cause du fait que le mixage collisionnel est le phénomène le plus prépondérant (λ_d est supérieur à λ_u). Notre étude sera donc basée sur les marches de concentration descendantes. La DRF utilisée correspond à une mesure menée à 5,5 keV/O₂⁺, 42,4° dont les paramètres sont : $\lambda_d = 37,54 \text{ \AA}$, $\lambda_u = 3,44 \text{ \AA}$, $\sigma_g = 22,46 \text{ \AA}$, $\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$, où σ_{DRF} est l'écart-type de la DRF, SNR = 40 dB.

La Figure 10 montre les résultats de la déconvolution par l'algorithme RT-MMS d'une telle structure en échelles linéaire (avec et sans l'application de la contrainte de positivité) et logarithmique.

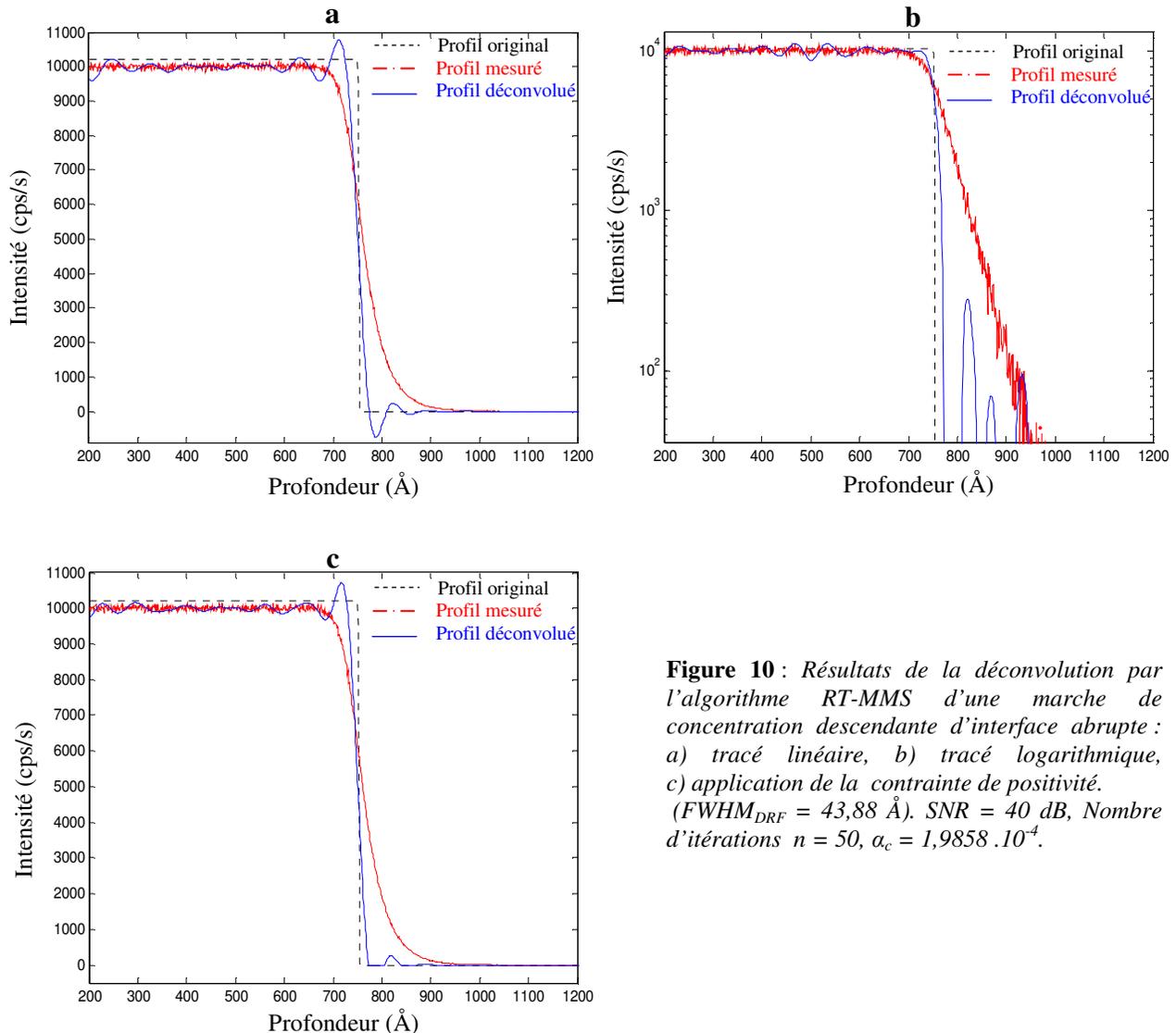


Figure 10 : Résultats de la déconvolution par l'algorithme RT-MMS d'une marche de concentration descendante d'interface abrupte : a) tracé linéaire, b) tracé logarithmique, c) application de la contrainte de positivité. ($FWHM_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$). $SNR = 40 \text{ dB}$, Nombre d'itérations $n = 50$, $a_c = 1,9858 \cdot 10^{-4}$.

D'après ces figures, on constate que la déconvolution est bonne et a conduit à une bonne récupération de la forme du signal sur plus de trois décades. Particulièrement le caractère *abrupte* des interfaces est relativement récupéré (il est clair en échelle logarithmique). La résolution en profondeur est améliorée par un facteur de 4.

Cependant, la présence du bruit dans les signaux mesurés conduit à la génération des oscillations sur les plateaux des profils (visibles en échelle linéaire), elles sont caractéristiques lorsque le processus de déconvolution atteint ses limites, c'est-à-dire lorsque le profil à retrouver contient des fréquences trop hautes pour être restituées par l'algorithme.

On note également que les oscillations avec des composantes négatives se développent dans les bas niveaux du signal (visible en échelle logarithmique), là où le signal est comparable au bruit. L'élimination des composantes négatives de ces oscillations s'effectue par la contrainte

de positivité (que nous la considérons toujours arbitraire) donnant ainsi des ondulations qui handicapent l'interprétation des résultats et donc posent une limite à cet algorithme.

Même si les composantes négatives des oscillations sont éliminées par la contrainte de positivité, les oscillations présentes sur le haut niveau des profils (plateaux) ne peuvent pas être éliminées par l'application de cette contrainte. Ceci nécessite l'application de la contrainte d'amplitude pour tronquer le signal au-delà de l'amplitude réelle de l'échantillon. Celle-ci est rarement utilisée, car elle implique la connaissance de la concentration maximale de l'espèce dans la matrice, ainsi que d'un étalonnage du profil mesuré. De plus, la contrainte d'amplitude ne devrait être appliquée que si l'on est certain d'avoir un plateau parfait, c'est-à-dire sans variations de concentration sur le plateau, sous peine de tronquer arbitrairement. Même dans le cas d'un profil *parfait*, l'application de cette contrainte conduit à la perte de la dose totale contenue dans l'échantillon, et le principe de la conservation de la matière est alors perdue dedans ! Fort heureusement que l'amplitude du signal est connue dans le cas des profils simulés, dans le cas des profils expérimentaux - qu'on ne connaît pas les limites du signal - cette contrainte devient absolument arbitraire. Tout le problème vient du fait que le profil original n'est pas connu lorsqu'on quitte le domaine de la simulation. La validité de cet algorithme est alors relative.

Pour diminuer le niveau de ces oscillations (voir § 2.4.), Mancina [2] propose de multiplier le paramètre de la régularisation par un facteur (entier et positive), il résultera donc une diminution des moyennes et hautes fréquences, et donc diminution des oscillations sur le profil déconvolué. Si le paramètre de régularisation est trop fort, il pourra éventuellement y avoir diminution de la dose totale du profil, ce qui est gênant pour la quantification !

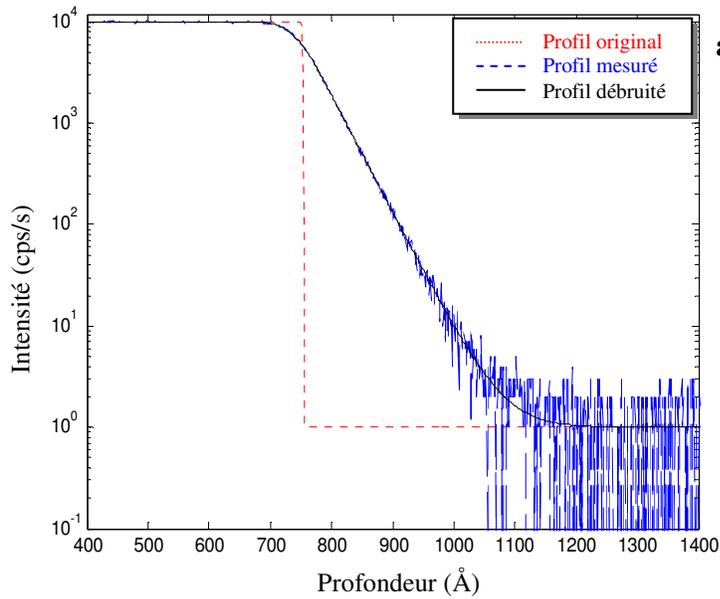
Il est important de signaler que dans le cas d'un signal SIMS, la cohérence physique est un aspect primordial : il est capital que le signal final soit physiquement acceptable. Il est donc important d'adopter une méthode dont le résultat doit être acceptable sous peine d'avoir un résultat mathématiquement juste mais n'à rien avoir avec la réalité physique.

Tous ces arguments font tendre notre préférence vers la déconvolution multirésolution dont la justification physique nous semble plus satisfaisante.

Avant d'aborder les performances de la déconvolution sur ce type d'échantillon, nous allons rapidement voir l'effet du seuillage sur les coefficients d'ondelette et ses conséquences sur le débruitage du signal, sans trop détailler l'étude déjà menée précédemment sur la décomposition du signal sur les bases d'ondelette.

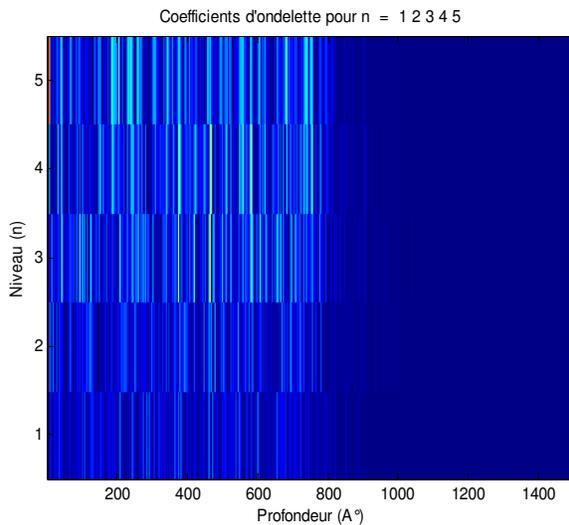
La Figure 11 montre les résultats de débruitage du signal d'une marche de concentration descendante d'interface abrupte. L'ondelette utilisée est l'ondelette à support compact symétrique de la famille Coiflet qui est *coif5*.

Les différents paramètres de régularisation de Tikonov-Miller nécessaires pour la bonne régularisation du système pour un bruit de SNR = 40 dB sont : $\alpha_a^{(1)} = 4,0969 \cdot 10^{-4}$, $\alpha_a^{(2)} = 7,4907 \cdot 10^{-4}$, $\alpha_a^{(3)} = 0,0015$, $\alpha_a^{(4)} = 0,0022$, $\alpha_a^{(5)} = 0,0035$, $\alpha_d^{(1)} = 1,0812$, $\alpha_d^{(2)} = 2,0987$, $\alpha_d^{(3)} = 3,9523$, $\alpha_d^{(4)} = 8,3312$, $\alpha_d^{(5)} = 11,3554$. Cependant le paramètre de régularisation classique est égal à $1,9858 \cdot 10^{-4}$. Le seuil obtenu par seuillage doux égale à 89,8897 cps/s.

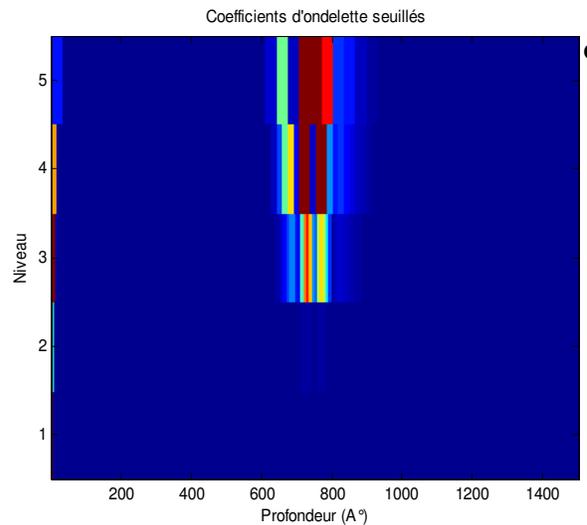


a

Figure 11 : a) Débruitage par seuillage universel du signal marche de concentration descendante d'interface abrupte.
 b) Coefficients d'ondelette avant seuillage.
 c) Coefficients d'ondelette après seuillage.
 SNR = 40 dB.



b



c

Nous n'allons pas détailler l'interprétation de ces résultats déjà vu précédemment (§2.2.), l'élément qui attire toute l'attention est la qualité du débruitage qui est l'obtention d'un signal de très bonne approximation du signal original, lisse et dépourvu du bruit dont les conséquences sur la déconvolution sont maintenant connues. Les coefficients d'ondelette seuillés nous donne une idée sur les détails restants dans l'approximation (signal débruité) comme faisant partie du signal original (voir Figure 11-c). Ces coefficients (« bégayés » 2^n fois au niveau n) sont concentrés dans la zone où le signal est trop bruité (hautes fréquences), après le seuillage ils restent uniquement les détails qui sont supérieurs au seuil déterminé et susceptibles d'appartenir au signal utile.

La Figure 12 montre les résultats de la déconvolution d'une marche de concentration descendante abrupte sur, respectivement, une décade, 2 décades, 3 décades et 4 décades. La déconvolution a été faite avec une DRF correspondant à une analyse expérimentale menée à

5,5 keV/O₂⁺, 42,4° dont l'écart-type est $\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$. Le bruit ajouté correspond à un SNR = 40 dB.

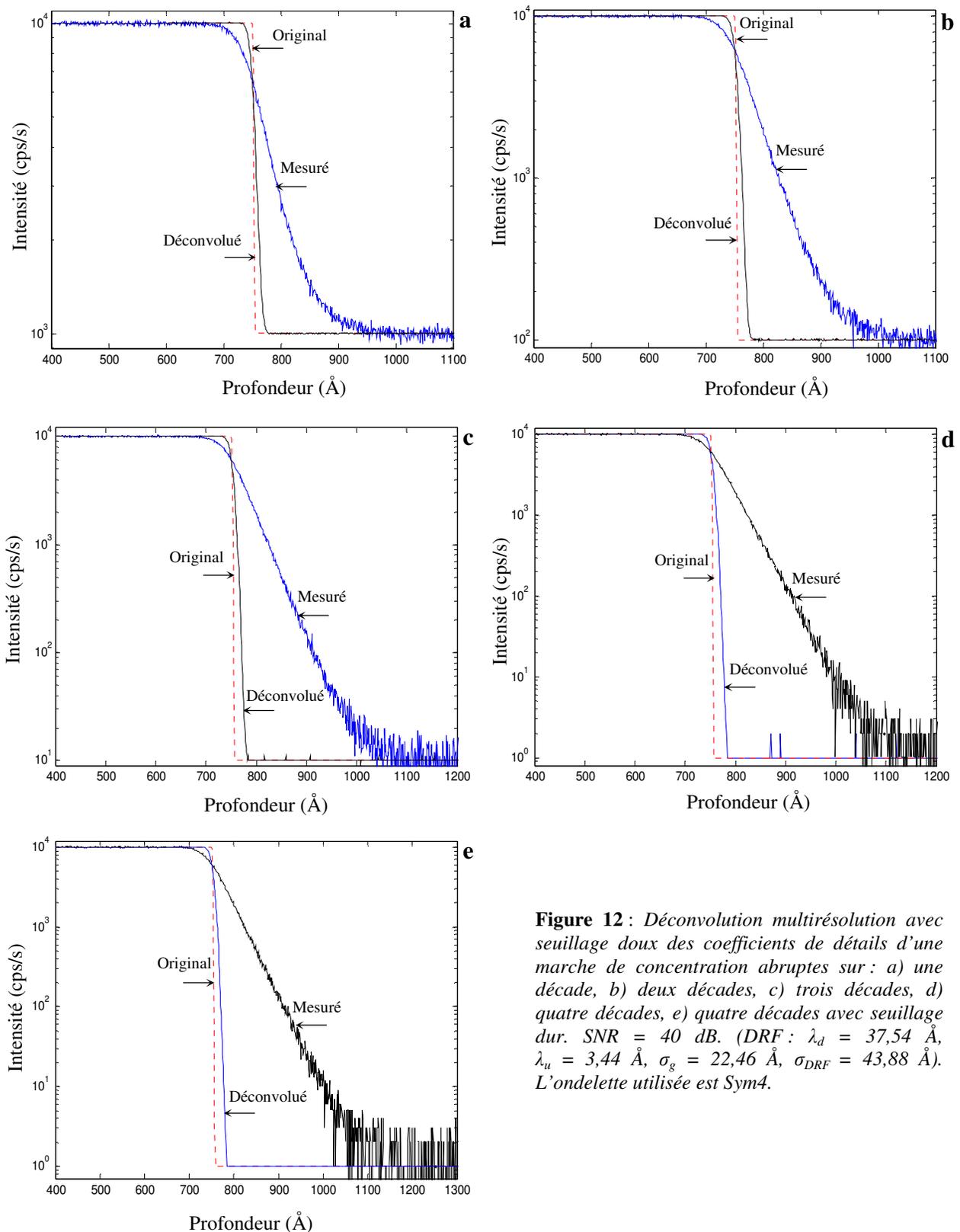


Figure 12 : Déconvolution multirésolution avec seuillage doux des coefficients de détails d'une marche de concentration abruptes sur : a) une décade, b) deux décades, c) trois décades, d) quatre décades, e) quatre décades avec seuillage dur. SNR = 40 dB. (DRF : $\lambda_d = 37,54 \text{ \AA}$, $\lambda_u = 3,44 \text{ \AA}$, $\sigma_g = 22,46 \text{ \AA}$, $\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$). L'ondelette utilisée est Sym4.

Nous constatons que la déconvolution est parfaite sur les différentes dynamiques du signal des différentes marches. Ce ci est matérialisé par la récupération du signal sur la totalité de la dynamique en question. Dans ce type d'échantillon, le moyen le plus utile pour valider le gain de la déconvolution c'est de mesurer la résolution en profondeur par la distance nécessaire pour que le signal décroisse de 84% à 16 % de l'intensité maximale, cette résolution a été mesurée sur le profil de 4 décades pour se placer dans le cas le plus défavorable. Pour le profil mesuré $\Delta z_{(16-84\%)} = 88 \text{ \AA}$, alors que pour le profil déconvolué la résolution en profondeur $\Delta z_{(16-84\%)}$ égale à 16 Å ce qui donne un gain de 5,5. Avec l'algorithme RT-MMS le gain en résolution obtenu est égal à 4.

Néanmoins, nous observons au bas niveau du profil déconvolué (voir Figure 12-a) la naissance à l'échelle microscopique de très petits pics (rugosité) dont l'amplitude augmente avec le nombre de décades du signal, jusqu'ils atteignent un niveau de 0.8 cps/s (voir Figure 12-d). Ceux-ci sont dus au type de seuillage utilisé qui est un seuillage doux. Avec l'application du seuillage dur, ces pics disparaissent complètement donnant ainsi un profil lisse, ce qui valide cette approche de déconvolution (voir Figure 12-e).

En comparant ces résultats avec ceux de la littérature. Brice [3] par exemple, pour simuler une interface abrupte, a utilisé une fonction erreur de pente égale 3 Å, avec l'application de son algorithme (algorithme de Van Cittert régularisé et contraint) il a obtenu une bonne restitution du signal sur seulement une décade avec l'apparition des oscillations à la queue du profil, ce qui pose une limite à son algorithme envers les interfaces abruptes. Pour des profils qui présentent une grande dynamique du signal, les profils déconvolués obtenus contiennent trois zones, la zone la plus nuisible est celle où le profil devient oscillatoire, pour éliminer ces oscillations il a appliqué le niveau de confiance en considérant les composantes du signal au dessous de ce niveau ne font plus parti du signal original. A notre avis, un niveau de confiance qui autorise à prendre en compte certaines parties du signal et au dessous duquel le signal ne doit plus être pris en compte n'apporte aucune information sur la qualité de l'information et qui a du mal à trouver une signification parlante dans le cas d'un signal SIMS. L'un des avantages de l'analyse SIMS est la grande dynamique du signal, restreindre le signal déconvolué à une dynamique qui ne dépasse pas deux décades ne reflète pas le signal original et les parties filtrées par le niveau de confiance peuvent fournir des informations précieuses sur l'échantillon analysé.

L'avantage de la déconvolution multirésolution c'est qu'on a la liberté de manipuler les paramètres qui entrent en jeu, par exemple si on observe lors de la déconvolution des petits pics qu'on trouve du mal à les interpréter, tout simplement on change le type de seuillage utilisé (Figure 12-e) et le problème sera réglé.

D'après ces résultats obtenus sur ce type d'échantillon, qui présente un cas sévère de déconvolution, les performances constatées sont excellentes car le profil est restitué sur toute sa dynamique sans l'apparition des artefacts, en plus avoir un gain en résolution de 5,5 valide convenablement cette approche de déconvolution.

3.2. Déconvolution des créneaux de concentration

L'étude détaillée de la décomposition de ce type d'échantillon sur une base d'ondelette a été faite dans la section 2.2., nous allons nous consacrer uniquement sur les résultats de la déconvolution multirésolution. Dans la section précédente nous avons étudié l'effet de la dynamique du signal sur la solution, dont laquelle nous nous sommes placés dans le cas le plus difficile qui est une marche de concentration avec une interface abrupte. Dans ce paragraphe nous

allons étudier l'effet de la largeur du créneau sur la solution, en particulier à une largeur très faible on peut considérer le créneau de concentration comme un pseudo-dirac, dans le sens où les fronts montant et descendant mesurés s'étendent sur pratiquement toute la largeur du profil.

La DRF utilisée, dans cette étude, est d'écart-type $\sigma_{\text{DRF}} = 85,28 \text{ \AA}$ ($\lambda_u = 20,4 \text{ \AA}$, $\lambda_d = 65,6 \text{ \AA}$, $\sigma_g = 50,8 \text{ \AA}$) correspondant à une mesure menée à $10,5 \text{ keV/O}_2^+$, $36,7^\circ$ d'incidence ($R_p = 121,87 \text{ \AA}$). Avec ces conditions expérimentales on se place devant des profils mesurés à haute énergie dont la dégradation est très prononcée. Le bruit ajouté est d'un SNR égale à 35 dB.

◇ *Créneau de 400 Å de largeur*

L'avantage de déconvoluer des structures larges réside dans la restauration des zones à fort gradient de concentration. Celles-ci sont connues pour générer de fortes oscillations de part et d'autre du créneau et sur le plateau du profil. La Figure 13 illustre les différents résultats obtenus par déconvolution multirésolution comparés avec ceux obtenus par l'algorithme RT-MMS.

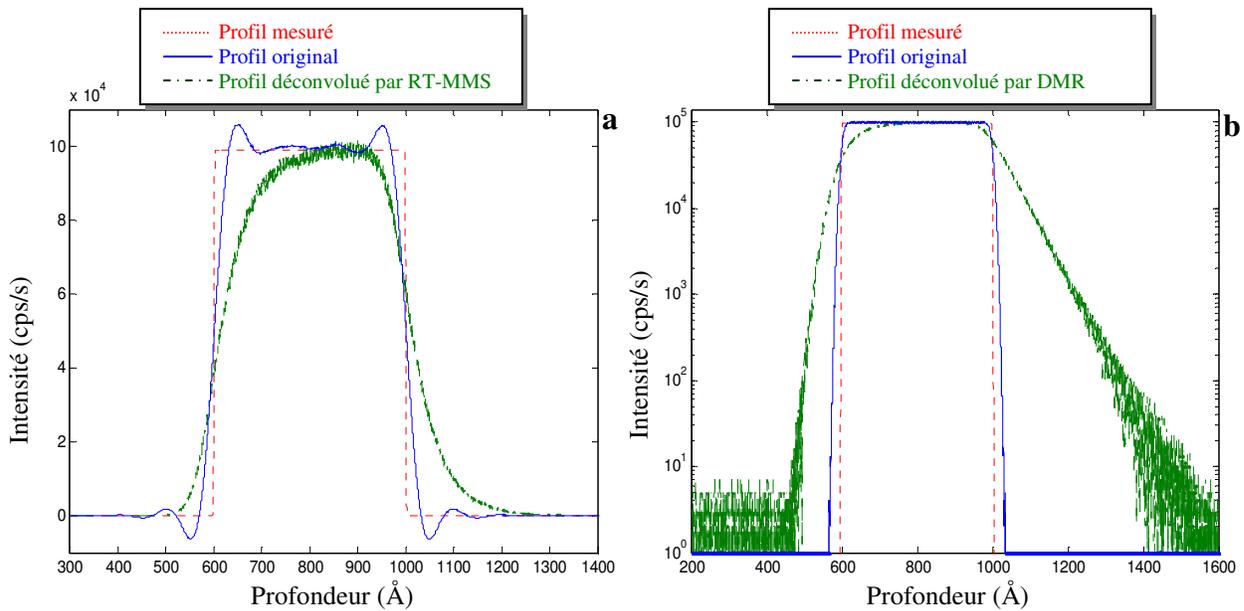


Figure 13 : a) Déconvolution d'un créneau de 400 Å de largeur par :
a) L'algorithme RT-MMS, nombre d'itération $n = 50$, α_c est surestimé = 1.
b) La déconvolution multirésolution (DMR). SNR = 35 dB.

La déconvolution de cet échantillon par l'algorithme RT-MMS est délicate (Figure 13-a) : la génération des oscillations n'étant pas contrôlée soit sur le plateau soit aux queues du profil. Si les oscillations aux bas niveaux du signal peuvent être compensées par la contrainte de positivité, celles du plateau ne peuvent pas être éliminées par la contrainte d'amplitude. On remarque deux pics plus prononcés près des sommets du créneau, alors que les oscillations s'atténuent au centre du plateau. L'origine de ces oscillations résiderait dans la forte concentration locale de hautes fréquences, qui ne peut être correctement restaurée à cause du bruit. Même avec un paramètre de régularisation surestimé, $\alpha_c = 1$ (le vrai paramètre $\alpha_c = 5,9290 \cdot 10^{-4}$), la régularisation est insuffisante pour atténuer ces oscillations car ces dernières sont constituées de moyennes fréquences, et le fait d'augmenter le paramètre de régularisation ne fait qu'empêcher la restauration correcte des fronts du créneau. Les flancs du créneau sont partiellement restaurés. Mancina [2] a vérifié, par cet algorithme, dans le cas d'un créneau de 300 Å de largeur, qu'au-

delà d'une centaine d'itérations, la raideur des fronts du profil déconvolué n'évoluait pas tellement. Les oscillations ont par contre tendance à s'accroître en amplitude et aussi en fréquence.

Par la déconvolution multirésolution (DMR) (Figure 13-b) la restauration du profil est parfaite, celle-ci est justifiée par la récupération du signal sur la totalité de la dynamique du signal (5 décades) sans la génération des oscillations qui ont pour origine le bruit. Fort heureusement, les hautes fréquences du signal sont compensées par le paramètre de régularisation de détails à chaque niveau de décomposition sur la base d'ondelette. Les flancs du créneau sont complètement restaurés et la décroissance exponentielle visible dans le profil mesuré a totalement aussi disparu, donnant ainsi un profil symétrique avec des pentes proches de celles du profil original. Le fait de tracer les courbes en échelle logarithmique permet d'avantage l'apparition des artefacts ou d'aberrations, qui sont absents dans le profil déconvolué. Réellement, le seuillage doux ne permet pas le filtrage total des détails qui sont proches du seuil de débruitage, et qui s'accroissent avec une dynamique du signal plus grande surtout avec des interfaces abruptes (ce cas est bien détaillé dans la section précédente). Avec le seuillage dur la *rugosité* qui peut apparaître sur la *base* du signal disparaît complètement donnant ainsi un profil lisse. Les paramètres de régularisation utilisés pour cet échantillon sont ceux de la colonne correspondant à un SNR = 35 dB du Tableau 1.

◇ *Créneau de 40 Å de largeur*

L'intérêt de déconvoluer des créneaux de faible largeur est de se rapprocher vers des structures fines dans le sens où les fronts montant et descendant mesurés s'étendent sur pratiquement toute la largeur du profil. Nous nous rapprochons donc vers des pseudos-dirac rencontrés dans la microélectronique actuelle. Déconvoluer ce type d'échantillon permet de tester l'algorithme de récupérer les vraies largeurs des créneaux altérées par l'analyse SIMS.

Les résultats de la déconvolution par l'algorithme RT-MMS de cet échantillon sont meilleurs que ceux du premier échantillon (voir Figure 14-a), le signal est quasiment récupéré sur la totalité de sa dynamique avec un paramètre de régularisation surestimé de valeur 5. La largeur du profil déconvolué obtenue est de 49 Å, ceci est mesuré par la largeur à mi hauteur du signal (FWHM), celle du profil mesuré est 110 Å. Ce qui donne un gain de 2,24. Néanmoins la forme du signal obtenue est proche d'une cloche que celle d'un créneau avec l'apparition toujours des oscillations de part et d'autre du profil, les composantes négatives de ces oscillations sont éliminées par la contrainte de positivité, laissant ainsi des lobes ou des ondulations qui ne peuvent pas être éliminées. Le nombre d'itérations est de 5500 itérations, avec ce nombre la concentration est surestimée au centre du plateau qu'on ne peut pas l'éliminer par la contrainte d'amplitude.

Cependant, la déconvolution multirésolution (DMR) a permis de récupérer le signal sur la totalité de sa dynamique sans excès de concentration (Figure 14-b). La forme du signal déconvolué est proche du profil original que celle obtenue par l'algorithme RT-MMS. Celle-ci est matérialisée par les largeurs de la base et du sommet qui sont proches de celles du profil original. Les flancs du créneau sont presque restaurés, la dissymétrie causée principalement par le mixage collisionnel a disparu. Les fronts du créneau ne sont pas complètement restaurés, mais sont suffisamment raides pour que l'on puisse supposer que la largeur du profil déconvolué soit presque la même que celle du profil réel. La largeur du profil déconvolué obtenue est déterminée par la mesure de la FWHM qui est 39,5 Å donnant ainsi un gain de déconvolution de 2,78.

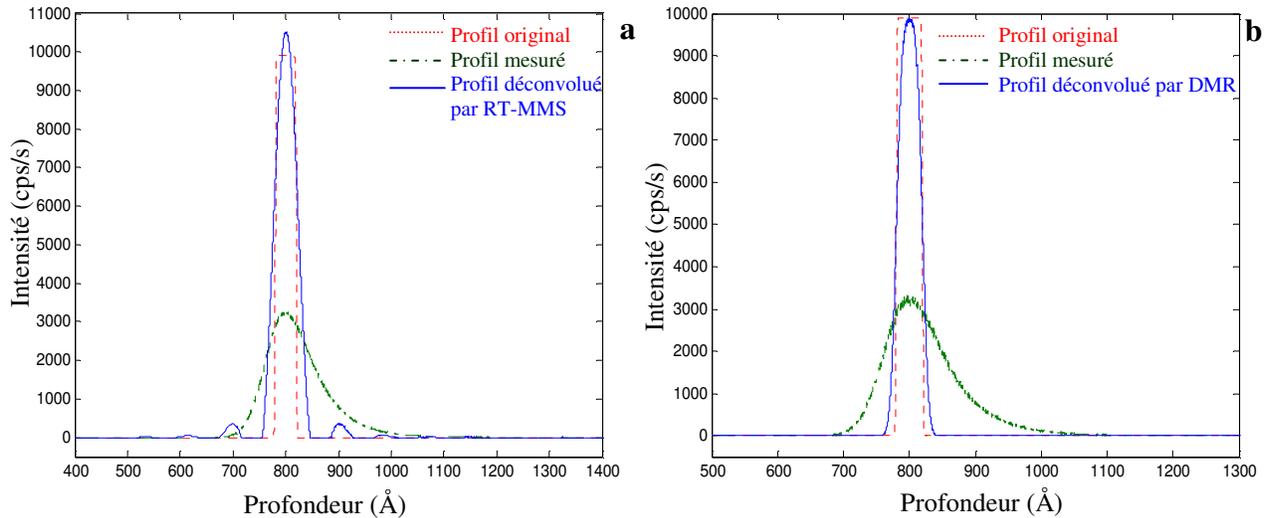


Figure 14 : Déconvolution d'un créneau de 40 Å de largeur par :

a) L'algorithme RT-MMS contraint, $n = 5500$ itérations, α surestimé est égale à 5.

b) L'algorithme DMR, seuillage dur. Ondelette utilisée est *coif5*. $\alpha_a^{(1)} = 0,0013$, $\alpha_a^{(2)} = 0,0027$, $\alpha_a^{(3)} = 0,050$, $\alpha_a^{(4)} = 0,0105$, $\alpha_a^{(5)} = 0,019$, $\alpha_d^{(1)} = 1,0946$, $\alpha_d^{(2)} = 2,2571$, $\alpha_d^{(3)} = 4,1774$, $\alpha_d^{(4)} = 9,5359$, $\alpha_d^{(5)} = 21,6127$. Le seuil $\lambda = 14,8137$. $SNR = 35$ dB. $\sigma_{DRF}(10,5 \text{ keV}/O_2^+, 36,7^\circ) = 85,28 \text{ \AA}$ ($\lambda_u = 20,4 \text{ \AA}$, $\lambda_d = 65,6 \text{ \AA}$, $\sigma_g = 50,8 \text{ \AA}$).

Ce type d'échantillon (créneau de concentration) nous a permis de tester les performances de la déconvolution multirésolution sur des profils larges qui présentent un fort gradient de concentration (créneau de 400 Å de largeur) et sur des structures très fines qui posent une limite pour récupérer leurs largeurs réelles (créneau de 40 Å de largeur) dont les fronts sont complètement altérés par la mesure. Dans toutes les situations la déconvolution multirésolution est excellente, elle nous a permis de récupérer les signaux originaux (soit la forme soit la largeur) sans générer des artefacts ou toute anomalie qui peut fausser l'interprétation des résultats.

L'avantage d'utiliser une DRF mesurée à haute énergie ($R_p = 121,87 \text{ \AA}$) est de se placer dans une situation difficile pour récupérer les informations, vu que les profils sont complètement altérés par la mesure surtout l'effet du mixage collisionnel caractérisé par le paramètre λ_d . Le fait qu'avec ce cas sévère et extrême de déconvolution on a pu obtenir des profils de bonne qualité, alors qu'avec des conditions expérimentales meilleures on aurait certainement des profils déconvolués de qualité meilleure.

3.3. Déconvolution de gaussiennes

La forme gaussienne est l'une des formes les plus intéressantes, elle est fréquemment employée pour modéliser les implantations des dopants dans une matrice, comme on peut la rencontrer dans des cas de diffusion Fickienne. La fonction gaussienne présente l'avantage d'être entièrement caractérisée par son écart-type σ qui définit une largeur à mi-hauteur égale à $2,335 \sigma$. La mesure de cette largeur à mi-hauteur conduit immédiatement au moment centré d'ordre deux sans qu'il soit utile de la calculer de manière numérique.

Dans cette section nous allons tester la déconvolution sur deux gaussiennes d'écart-type différents (10 et 120 Å), l'un est plus petit (on se rapproche donc d'un pseudo-dirac) que celui la DRF et l'autre est plus grand. Ces structures a été convolué avec une DRF ($\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$) correspondant à un $R_p = 73,01 \text{ \AA}$. Le bruit ajouté correspond à un SNR de 35 et 40 dB.

Les Figures 15 et 16 montrent les résultats de déconvolution par l'algorithme RT-MMS des profils gaussiens en échelles linéaire et logarithmique.

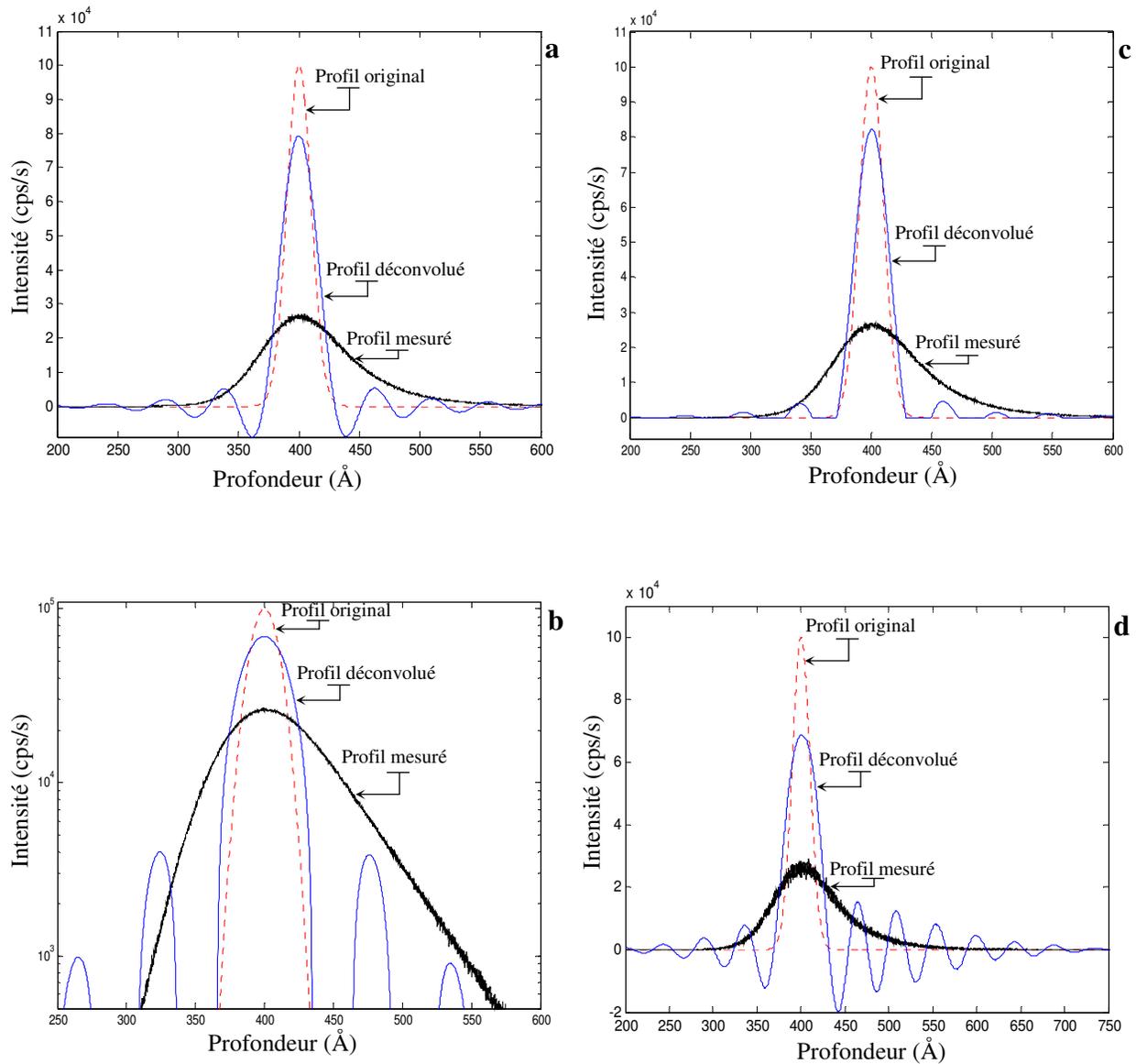


Figure 15 : Résultats de la déconvolution par l'algorithme RT-MMS. Gaussienne de 10 Å ($FWHM = 23,36 \text{ \AA}$), ($FWHM_{DRF} = 97,8317 \text{ \AA}$). SNR = 40 dB.

a) tracé linéaire, b) tracé logarithmique, c) application de la contrainte de positivité (tracé linéaire), d) profil bruité avec un SNR = 35 dB. Nombre d'itérations $n = 100$, $\alpha_c = 1,5312 \cdot 10^{-4}$.

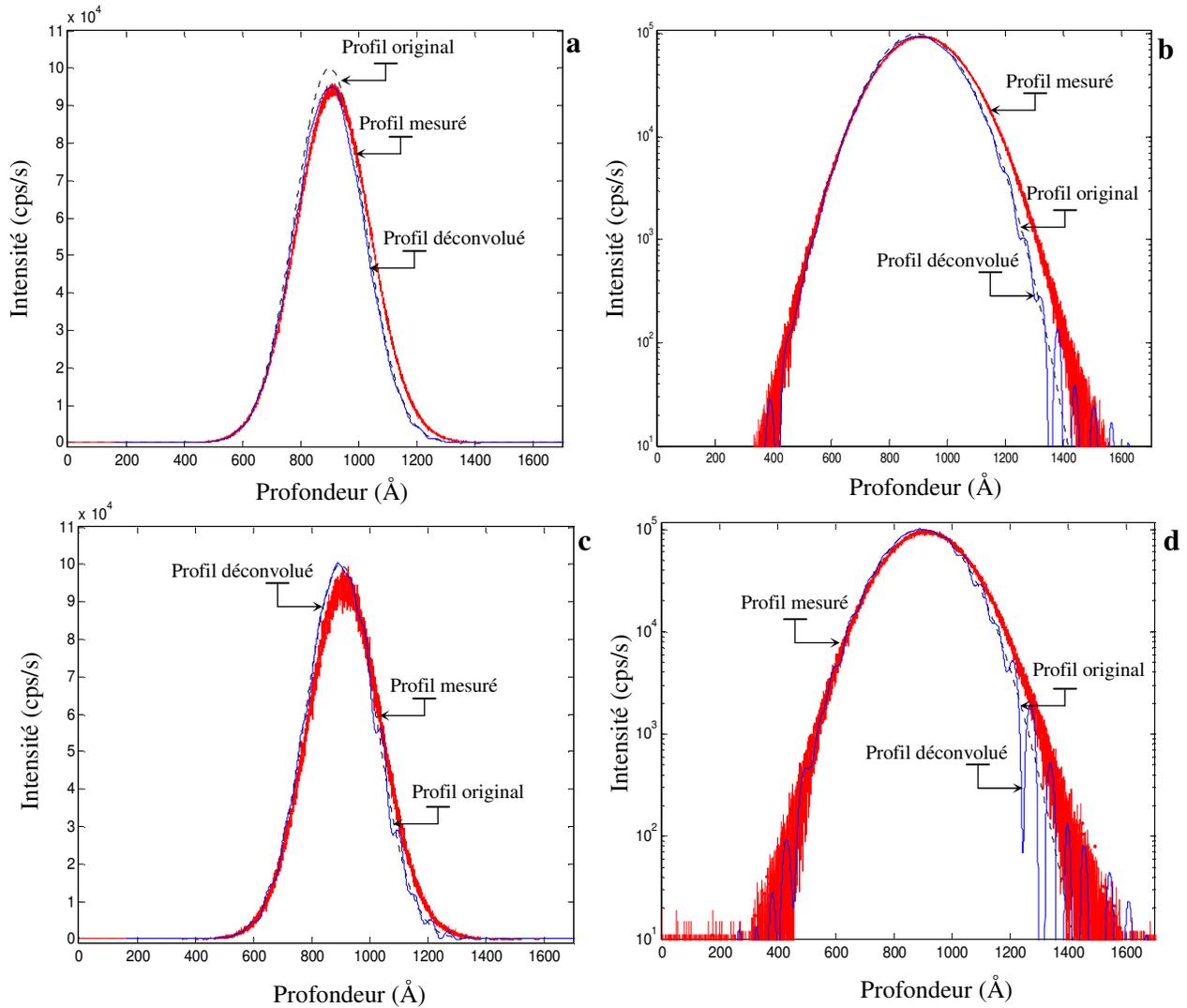


Figure 16 : Résultats de la déconvolution par l'algorithme RT-MMS. Gaussienne de 120 Å ($FWHM = 280,32$ Å), ($FWHM_{DRF} = 97,8317$ Å). $SNR = 40$ dB : a) tracé linéaire, b) tracé logarithmique. $SNR = 35$ dB : c) tracé linéaire, d) tracé logarithmique. Nombre d'itérations $n = 100$, $\alpha = 6,0468 \cdot 10^{-4}$.

En observant les résultats de la Figure 15 qui correspondent à un cas sévère de déconvolution, $\sigma = 10$ Å (gaussienne proche d'un delta-dopage), il apparaît clairement que les profils déconvolués sont oscillants dont l'amplitude dépend directement du niveau du bruit (supposé blanc, mais sa puissance varie localement en fonction de celle du signal de l'espèce analysée). La dilution des hautes fréquences dans le bruit en est la cause principale. Avec l'augmentation du niveau de bruit (de 40 à 35 dB) le nombre et le niveau des oscillations augmentent (Figure 15-d) avec plus de composantes négatives qui ne sont plus acceptables en analyse SIMS (mesure des concentrations). Par l'application de la contrainte de positivité les composantes négatives des oscillations sont complètement éliminées (Figure 15-c). Néanmoins, la présence des ondulations (artefacts restants) impose une limite à cet algorithme surtout si le niveau de ces ondulations est élevé. Cependant, on observe une bonne récupération du signal (récupéré à 80 %). Celle-ci est caractérisée par le gain en amplitude du signal déconvolué qui est de l'ordre de 3,8 et l'amélioration de la résolution en profondeur par un gain de 2,5.

Pour une gaussienne de 120 Å (voir Figure 16) le signal est récupéré à 95 %, il n'y a pas de différence remarquable entre le profil déconvolué et le profil mesuré. D'ailleurs, il n'y a pas de différence entre le profil mesuré et le profil original, l'analyse SIMS ne modifie pas trop les structures larges qui sont trop étalées en profondeur. Comme le premier cas, on observe la présence des oscillations mais moins prononcées que celles générés dans la gaussienne de 10 Å, dont le niveau et le nombre dépendent également du niveau de bruit, cette caractéristique *handicape* l'algorithme.

Les Figures 17 et 18 montrent les résultats de la déconvolution multirésolution de deux gaussiennes d'écart type 10 Å et 120 Å respectivement, convoluées par une DRF de $\alpha_{DRF} = 43,88$ Å, correspondant à une mesure menée à 5,5 keV/O₂⁺, le bruit ajouté est d'un SNR = 35 dB. L'ondelette utilisée dans cette étude est une ondelette symétrique à support compact de la famille Symlet, *Sym8*.

La restauration des profils est parfaite pour les deux gaussiennes ; la forme de la gaussienne est rendue pour les deux profils. Dans le cas d'une gaussienne d'écart-type de 10 Å (Figure 17) qui est inférieur à celui de la DRF, le seuillage utilisé est dur car on se trouve avec un pseudo-dirac dont la répartition spectrale est riche en hautes fréquences. Le seuil obtenu est de 44,4461 cps/s. Quant à la gaussienne d'écart-type 120 Å (Figure 18), le seuillage utilisé est doux (dont le seuil est égal à 208,8350 cps/s) car le profil original n'est pas trop altéré par l'analyse, le profil mesuré est peu différent du profil réel. La distinction de toutes les fréquences est plus facile qu'au premier profil, pourtant les paramètres de régularisations soit d'approximations soit de détails sont très proches. Ceci s'explique par la dépendance du paramètre de la régularisation de la quantité de bruit, qui est la même pour les deux profils, et de la régularité du signal à chaque échelle de décomposition. Les différents paramètres de régularisation sont indiqués dans les légendes des Figures 17 et 18.

Le fait que la gaussienne présente des fronts graduels, en particulier la gaussienne d'écart-type 10 Å qui est cas sévère pour la déconvolution, la récupération du signal est à 100%. Par contre le créneau de largeur supérieure à celui de la gaussienne (40 Å) (voir Figure 14-b) et dont les fronts sont abrupts, la récupération du signal est à 95 %. Cette différence est due en fait à la forme lisse de la gaussienne par rapport à celle du créneau.

En comparant ces résultats avec ceux obtenus par l'algorithme RT-MMS, illustrés dans les Figures 15 et 16, nous constatons que la déconvolution multirésolution est excellente, celle-ci est justifiée par la forme des signaux obtenus qui sont lisses dépourvus des artefacts ou d'aberrations causés principalement par le bruit. Mancina [2], en surestimant le paramètre de régularisation ($\alpha = 1$) pour une gaussienne de 100 Å, a pu obtenir une récupération complète du signal sans la génération des oscillations. Cependant avec une gaussienne de 20 Å (α surestimé et égale à 5) les signaux sont également récupérés mais avec l'apparition des oscillations aux queues des profils déconvolués.

Le *gain en résolution* apporté par la déconvolution est défini par le rapport de la largeur du profil mesuré sur la largeur du profil déconvolué. Ce terme désigne directement de quel facteur est améliorée la résolution en profondeur après déconvolution. Dans ce sens, la mesure du profil réel d'écart-type 10 Å nous a donné un profil mesuré d'écart-type 46,16 Å (FWHM = 107,84 Å), alors que la mesure de la gaussienne d'écart-type 120 Å a donné un profil mesuré d'écart-type de 128,18 Å (FWHM = 299,43 Å). Après déconvolution, l'écart-type du profil déconvolué de la Figure 17 est égal à 10,108 Å (FWHM = 23,6122 Å) alors que celui de la Figure 18 égale à 121,03 Å (FWHM = 282,7260 Å). Ce qui donne un gain en résolution de 4,56

pour le premier profil et un gain de 1,05 pour le deuxième profil, respectivement. Nous concluons donc que la déconvolution multirésolution apporte un gain supérieur à 4,5 si la largeur du profil réel est inférieure à celle de la DRF, dans le cas contraire on obtient un gain proche de 1.

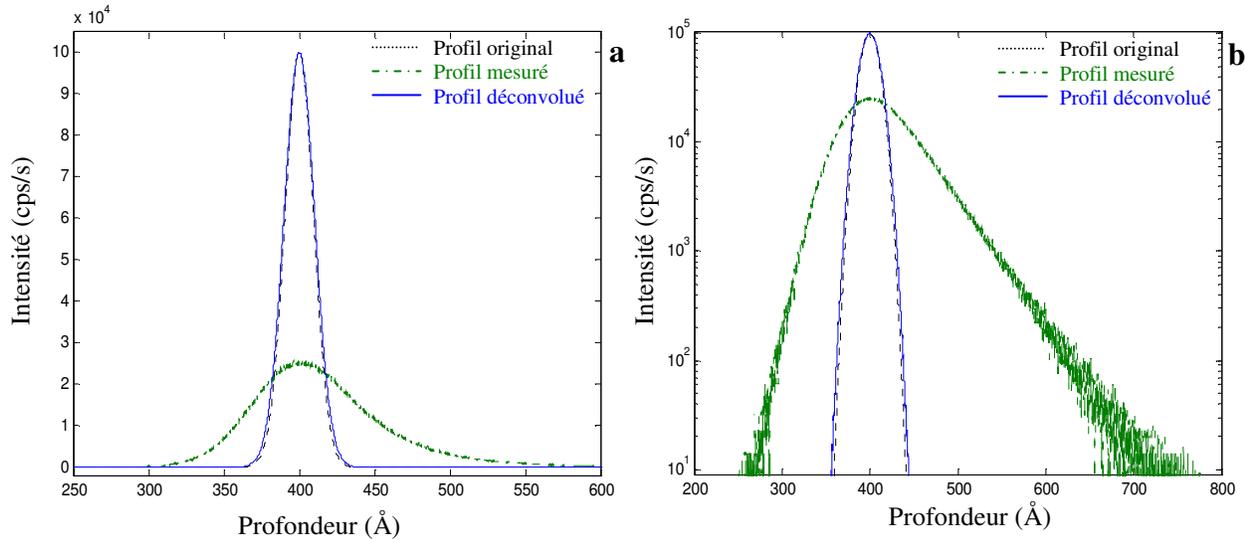


Figure 17 : Résultats de la déconvolution multirésolution d'une gaussienne de 10 \AA ($FWHM = 23,36 \text{ \AA}$), ($FWHM_{DRF} = 97,8317 \text{ \AA}$). $SNR = 35 \text{ dB}$. a) tracé linéaire, b) tracé logarithmique.

$\alpha_a^{(1)} = 0,0013$, $\alpha_a^{(2)} = 0,0024$, $\alpha_a^{(3)} = 0,0500$, $\alpha_a^{(4)} = 0,0095$, $\alpha_a^{(5)} = 0,0185$, $\alpha_d^{(1)} = 1,0833$, $\alpha_d^{(2)} = 1,9506$, $\alpha_d^{(3)} = 4,3371$, $\alpha_d^{(4)} = 8,6589$, $\alpha_d^{(5)} = 17,2410$. Le seuil $\lambda = 44,4461 \text{ cps/s}$. Seuillage dur.

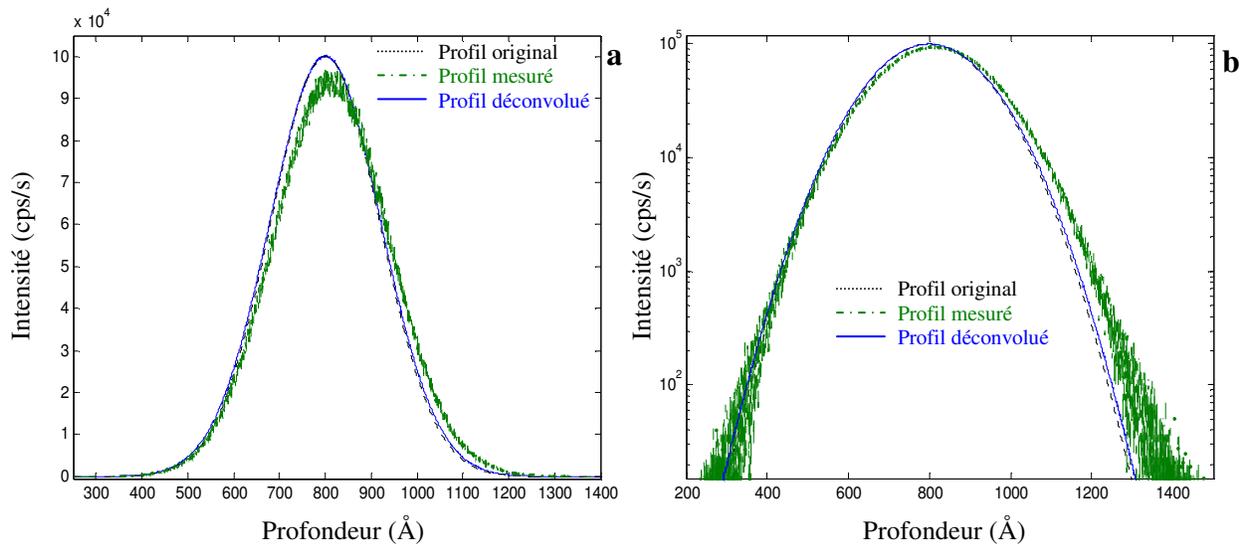


Figure 18 : Résultats de la déconvolution multirésolution d'une gaussienne de 120 \AA ($FWHM = 280,32 \text{ \AA}$), ($FWHM_{DRF} = 97,8317 \text{ \AA}$). $SNR = 35 \text{ dB}$. a) tracé linéaire, b) tracé logarithmique.

$\alpha_a^{(1)} = 0,0012$, $\alpha_a^{(2)} = 0,0024$, $\alpha_a^{(3)} = 0,0047$, $\alpha_a^{(4)} = 0,0096$, $\alpha_a^{(5)} = 0,0194$, $\alpha_d^{(1)} = 1,1074$, $\alpha_d^{(2)} = 2,1722$, $\alpha_d^{(3)} = 4,3690$, $\alpha_d^{(4)} = 8,7044$, $\alpha_d^{(5)} = 15,7605$. Le seuil $\lambda = 208,8350 \text{ cps/s}$. Seuillage doux.

Pour généraliser cette étude nous avons conduit toute une série de déconvolutions des gaussiennes rencontrées afin d'apprécier les performances de l'algorithme en matière de restitution de la largeur du profil initial. La DRF utilisée est toujours menée à une mesure expérimentale à $5,5 \text{ keV/O}_2^+$ dont les paramètres sont : $\lambda_d = 37,54 \text{ \AA}$, $\lambda_u = 3,44 \text{ \AA}$, $\sigma_g = 22,46 \text{ \AA}$, $\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$. Pour chaque profil nous avons repéré les écarts-type et les largeurs à mi-hauteur des profils mesurés et déconvolués afin d'apprécier les performances de l'algorithme en matière

de restitution de la largeur du profil initial. La Figure 19 montre les résultats obtenus des variations des écarts - type ainsi que des largeurs à mi-hauteur des profils mesurés et déconvolués en fonction de ceux du profil original.

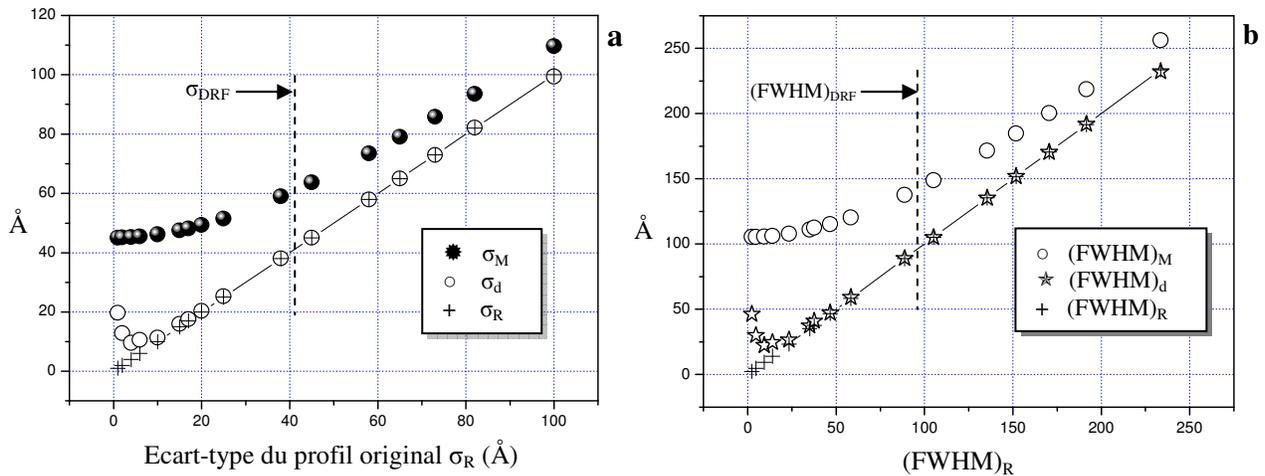


Figure 19 : Récapitulatif des déconvolutions de gaussiennes :

a) l'écart-type des profils mesurés et déconvolués en fonction de l'écart-type original.

b) largeurs à mi-hauteur des profils mesurés et déconvolués en fonction de la largeur à mi-hauteur du profil original.

DRF ($\lambda_d = 37,54$ Å, $\lambda_u = 3,44$ Å, $\sigma_g = 22,46$ Å, $\sigma_{DRF} = 41,88$ Å). SNR = 35dB.

La Figure 19 montre qu'on peut retrouver un profil de largeur à mi-hauteur ou d'écart-type identique au profil initial lorsque la largeur à mi-hauteur ou l'écart-type est quatre fois inférieure à celui de la DRF (nous avons indiqué la largeur de la DRF sur la Figure 19). En dessous de cette largeur de profil initial, la déconvolution n'est que partielle et le profil original ne peut être entièrement retrouvé. On peut alors seulement espérer une amélioration de la résolution en profondeur. Les résultats de cette figure sont relatifs à une énergie donnée. Une étude plus détaillée sur l'influence du rapport des largeurs de la DRF et de la gaussienne est réalisée par Brice (avec l'algorithme de Van Cittert régularisé et contraint) pour différentes énergies incidentes. Le lecteur intéressé pourra se rapporter à la référence [3] pour plus amples informations. On y trouve notamment que la largeur à mi-hauteur du profil déconvolué est identique à celle du profil original si la largeur à mi-hauteur du profil initial est identique ou supérieure à celle de la DRF.

Enfin, les performances de la déconvolution multirésolution en matière de restitution de la largeur d'une gaussienne on peut noter que la plus petite largeur accessible par SIMS après une mesure instrumentale de routine d'un profil dilué de bore dans le silicium sous faisceau d'oxygène ($5,5$ keV/O₂⁺), et qui peut être restituée après déconvolution est portée à 10 Å, qui correspond à une largeur d'un delta-dopage. Cette valeur correspond bien à la limite ultime de la résolution en profondeur atteinte par la déconvolution multirésolution. La limite obtenue par Brice [3] est de 29 Å, ce qui valide bien notre approche de déconvolution.

3.4. Limite de séparation

Nous avons vu dans § 7.3.-chapitre 1 que si deux couches très fines sont très proches, notamment deux deltas-dopage, à partir d'une certaine distance les séparant la mesure ne peut pas distinguer entre eux, le mixage collisionnel entraîne leur superposition. Dans l'annexe 3, § 2.4.

nous avons obtenu que deux deltas – dopage sont séparés par la mesure s'ils sont séparés initialement par une distance de 115 \AA . Ils sont distingués par la mesure s'ils sont séparés par une distance de 75 \AA , cette limite constitue une résolution en profondeur instrumentale au-delà de laquelle la mesure ne fait apparaître qu'un seul pic. Selon les conditions de mesure et le niveau de bruit, la déconvolution aboutira ou non à la distinction des deux couches (séparation complète ou partielle). Dans cette section nous allons exprimer la capacité de l'algorithme à séparer ces deux deltas-dopage séparés d'une certaine distance d variable. La DRF utilisée correspond à une mesure expérimentale menée à $5,5 \text{ keV/O}_2^+$ (car cette énergie correspond à une mesure SIMS de routine) dont les paramètres sont : $\lambda_d = 37,54 \text{ \AA}$, $\lambda_u = 3,44 \text{ \AA}$, $\sigma_g = 22,46 \text{ \AA}$, $\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$. Les profils ont été bruités avec un bruit gaussien de 35 dB .

Nous allons rapidement voir l'effet du débruitage sur ce type d'échantillon (pour $d = 115 \text{ \AA}$) qui présente la particularité d'être composé de deux structures adjacentes. La Figure 20 montre le signal original superposé au signal débruité et les coefficients d'ondelette avant et après seuillage. L'ondelette utilisée est l'ondelette à support compact de la famille Symlet d'ordre 8 notée $\text{Sym}8$.

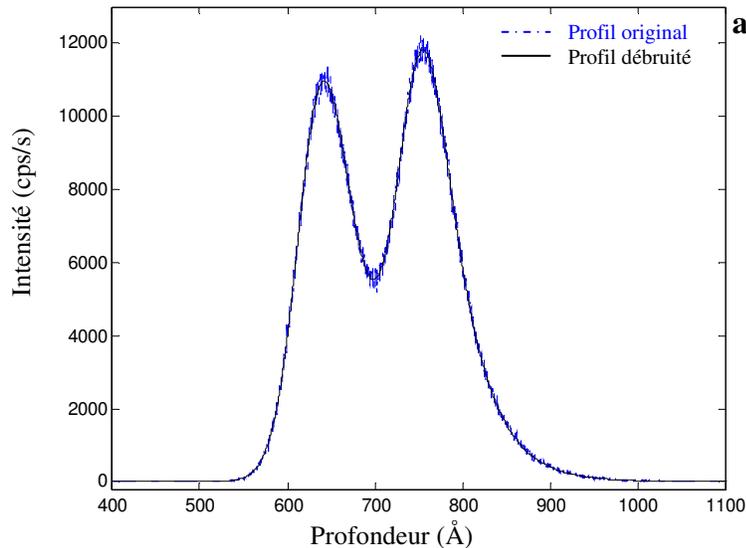
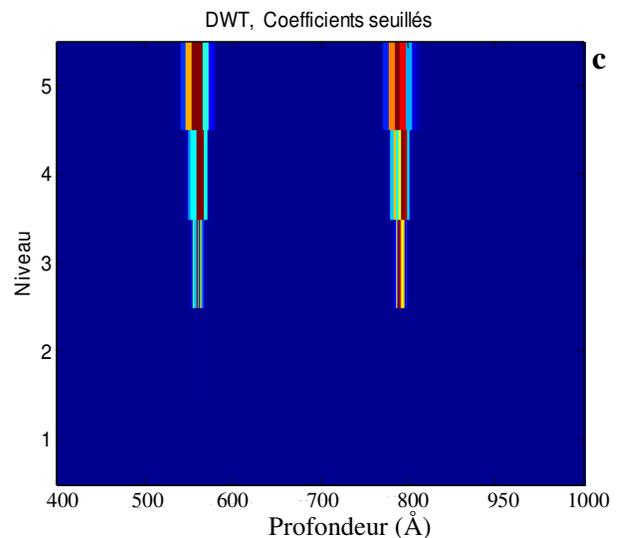
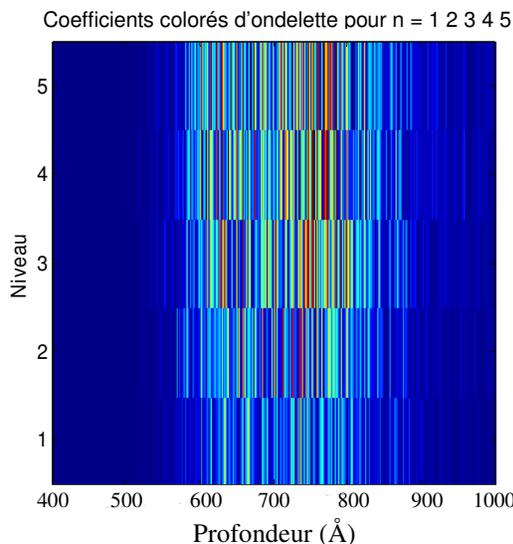


Figure 20 : a) Débruitage d'un signal composé de deux deltas-dopage adjacents séparés par une distance de 115 \AA . Ondelette utilisée est $\text{Sym}8$. Le seuil $\lambda = 10,5876 \text{ cps/s}$.
b) Coefficients colorés d'ondelette.
c) Coefficients seuillés et bégayés 2^n fois au niveau n .



Nous constatons que le signal débruité est manifestement bien seuillé, tant dans les deux deltas-dopage que dans l'interface autour de l'abscisse 700 Å. Le point qui attire toute l'attention ici est la continuité du signal débruité dans l'interface là où il est sensé d'être discontinu, les méthodes classiques de débruitage sont incapables d'une telle adaptation en échelle. En effet, les approximations au niveau 5 de décomposition sont conservées telle que le bruit soit absent ou très atténué, complétées par les détails plus fins clairement attribuables au signal utile. Ceux-ci sont visibles sur le graphique des coefficients d'ondelettes interférés, seuls les quelques plus grands coefficients sont conservés ; les autres sont remplacés par zéro. Ceci est visible sur la Figure 20-c pour constater la rareté des coefficients conservés.

La Figure 21 donne des exemples de séparation de δ -dopages obtenus par déconvolution multirésolution. On peut apprécier le gain en séparation obtenu par l'intermédiaire du contraste défini par l'équation (8) du chapitre 1.

On constate que deux pics séparés de 55 Å et présentant un contraste de 3,43 % avant déconvolution sont parfaitement séparés (contraste 100%) après déconvolution (voir Figure 21-a). De la même façon, deux pics séparés de 20 Å, complètement indistincts avant déconvolution (contraste 0%) peuvent être distingués après déconvolution par un contraste de 13,67 % (voir Figure 21-c). Par un contraste de 41,20 % après déconvolution deux pics séparés de 25 Å peuvent être séparés partiellement (voir Figure 21-b). Il existe cependant une distance limite au dessous de laquelle la distinction des deux pics n'est pas possible, comme le montre la Figure 21-d, où le profil déconvolué ne laisse pas soupçonner plus que le profil mesuré l'existence de deux gaussiennes.

Outre l'amélioration du contraste c'est-à-dire la détection pure de la présence de deux pics, les pics sont quasiment replacés à leurs positions initiales alors que l'analyse SIMS les avait décalés substantiellement et ils trouvent une hauteur similaire. En particulier, la descente exponentielle du premier ne vient plus rehausser de manière artificielle le second pic.

Pour garder à l'esprit les performances de la déconvolution multirésolution en matière de séparation de couche fines on peut noter que deux δ -dopage séparés initialement d'une distance de 55 Å peuvent être complètement découplés. Et d'obtenir leur détection pour une distance initiale de 20 Å. Brice [3] a obtenu une résolution de 65 Å pour découpler entièrement deux deltas-dopage avec l'algorithme de Van-Cittert régularisé et contraint, la détection des deux pics est obtenue pour une distance de 46 Å (contraste de 15 %), avec une DRF d'écart-type de $\sigma_{DRF} = 45,1$ Å. Dans la référence [8] Cook a obtenu une résolution de 50 Å ($C = 80,2\%$) pour une DRF d'écart-type de $\sigma_{DRF} = 23,0$ Å en utilisant un algorithme de régularisation par maximum d'entropie. Certainement avec une telle DRF menée à de très bonnes conditions expérimentales dans une analyse de bore dans le silicium en utilisant un analyseur ionique à Quadripôle dont l'incidence est normale sur la surface de l'échantillon (énergie primaire de 2 keV/O₂⁺) on peut aboutir à une très bonne résolution en profondeur. Bien que la comparaison des performances expérimentales n'ait pas de sens, mais il soit possible quand même de comparer les performances théoriques entre les algorithmes.

En réalité, dans ces comparaisons – dont on a pris en considération uniquement la DRF et ses conditions opératoires - sont relatives. Pour faire une comparaison totale et se faire une idée sur les capacités de chaque algorithme, de séparer deux δ -dopage, on doit tenir en compte l'effet du bruit sur la limite de séparation. En d'autres termes, on doit fixer le niveau de bruit puis on compare entre les différentes résolutions ultimes. En effet, La résolution ultime obtenue par

l'algorithme RT-MMS pour un SNR de 45 dB est de 50 Å, à rappeler que notre résolution est 55 Å mais pour un SNR de 35 dB. Pour se mettre dans le même niveau de bruit c'est-à-dire SNR = 35 dB, la limite de séparation obtenue par l'algorithme RT-MMS est égale à 60 Å. Pour généraliser cette étude et voir l'effet du bruit sur la limite de séparation ainsi que sur la résolution ultime de la déconvolution, nous avons calculé cette distance limite pour une série de déconvolutions en fonction du niveau de bruit.

La Figure 22 montre les résultats obtenus, du contraste en fonction du niveau de bruit, par la déconvolution multirésolution (Figure 22-b) et par l'algorithme RT-MMS (Figure 22-a).

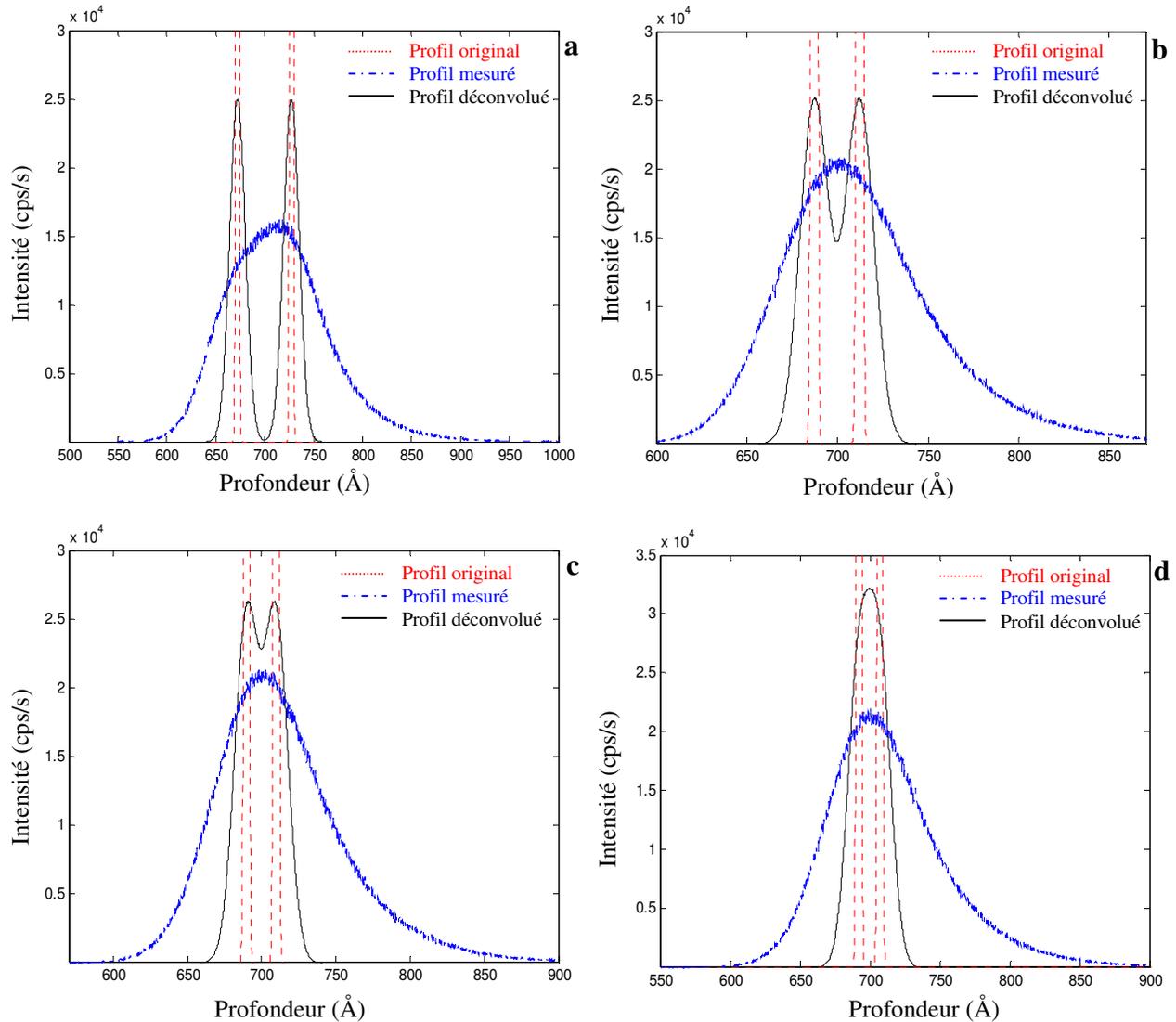


Figure 21 : Déconvolution de deltas-dopage séparés d'une distance d , convolués par une DRF de $\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ Å}$. SNR = 35 dB.

a) $d = 55 \text{ Å}$: séparation totale, b) $d = 25 \text{ Å}$, séparation partielle : contraste $C = 41,20 \%$
c) $d = 20 \text{ Å}$ distinction entre les δ -dopage : contraste $C = 13,67 \%$, d) $d = 15 \text{ Å}$ recouvrement total des δ -dopage.

$\alpha_a^{(1)} = 0,0013$, $\alpha_a^{(2)} = 0,0024$, $\alpha_a^{(3)} = 0,0045$, $\alpha_a^{(4)} = 0,0097$, $\alpha_a^{(5)} = 0,0183$, $\alpha_d^{(1)} = 1,1060$,
 $\alpha_d^{(2)} = 1,8260$, $\alpha_d^{(3)} = 4,3961$, $\alpha_d^{(4)} = 6,9557$, $\alpha_d^{(5)} = 20,1933$. Seuillage dur.

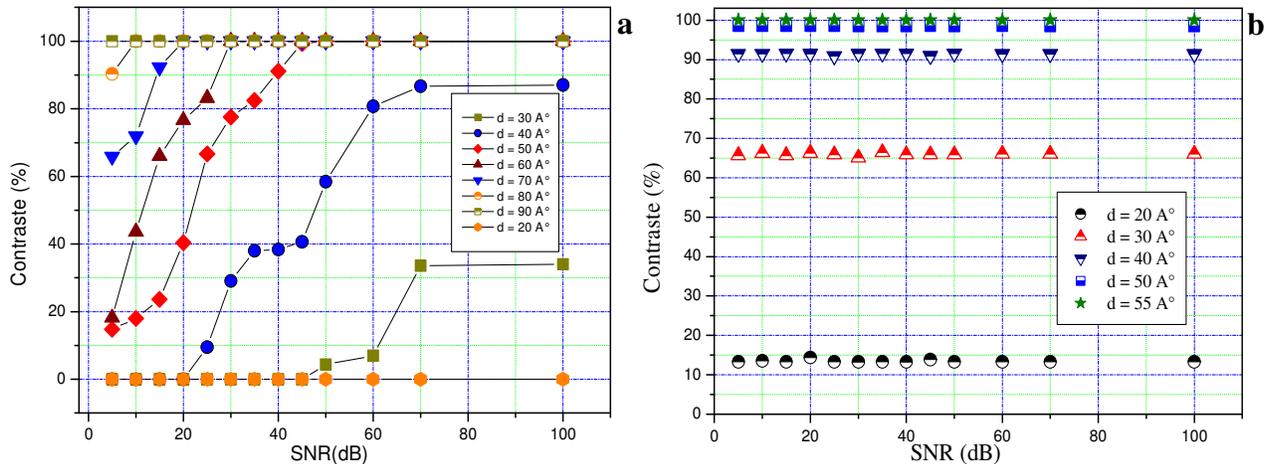


Figure 22 : Evolution du contraste en fonction du niveau du bruit pour différentes distances séparants deux δ -dopage :

- Déconvolution par l'algorithme RT-MMS, $\alpha_c = 2,5741 \cdot 10^{-5}$, $n = 1500$ itérations.
- Déconvolution multirésolution, seuillage dur, ondelette utilisée est Sym8, les différents paramètres de régularisation sont indiqués dans la légende de la Figure 21.

Nous constatons que la limite de séparation est fortement influencée par le niveau du bruit, celle-ci est justifiée par la croissance du contraste en fonction du rapport signal / bruit (voir Figure 22-a). Par exemple, pour une distance de 20 Å le contraste est nul, il commence à évoluer pour une distance de 30 Å et pour un SNR de 50 dB. Ensuite, il évolue avec la distance d d'une manière remarquable mais cette évolution est toujours gênée par le bruit. Pour une mesure effectuée dans de mauvaises conditions de bruit, le contraste obtenu après déconvolution sera évidemment très faible et par conséquent la résolution en profondeur sera limitée. Ce qui pose une limite à cet algorithme de déconvolution dans les hauts niveaux de bruit. Dans une mesure de routine en SIMS, SNR = 35 dB, on obtient une séparation complète pour une distance de 60 Å.

Cependant, le contraste obtenu par déconvolution multirésolution montre un comportement chaotique en fonction du niveau de bruit pour chaque distance (voir Figure 22-b). Cette constance est due en fait aux effets spectaculaires du seuillage de détails et par la suite la limitation de l'énergie du bruit. Pour chaque niveau de bruit, l'énergie des détails est limitée par le seuillage, on ne conserve que les détails censés d'appartenir au signal utile, les autres (cause de limitation de la résolution) sont rejetés, ce qui donne un comportement constant en fonction du niveau de bruit. Par conséquent, la distinction entre les pics est obtenue pour une distance de 20 Å avec un contraste de 13,36 % pour un SNR de 5 dB, cette valeur est maintenue pour les différents niveaux de bruit. Pour une distance de 30 Å le contraste obtenu est d'une valeur moyenne, pour tous les niveaux de bruit, égale à 66,43 %. Cependant pour la même distance le maximum du contraste obtenu par l'algorithme RT-MMS est localisé à 33,54 % pour un SNR de 70 dB. Ce qui donne un gain de 2 sans tenir en compte la qualité des profils déconvolués (déjà vue dans les sections précédentes).

3.5. L'auto - déconvolution

L'auto - déconvolution consiste à déconvoluer un delta - dopage tout en utilisant ce dernier comme une réponse impulsionnelle. En fait, un delta - dopage est la plus petite structure qu'on peut trouver dans un couple matrice - impureté, au même temps c'est la plus difficile structure à restaurer. La mesure SIMS de cette structure avec ses altérations engendrées est une

des raisons qui ont motivé l'utilisation de la déconvolution dans ce domaine, puisque elle représente la résolution ultime accessible par l'ensemble SIMS – traitement des données. Dans cette partie nous allons voir les performances de l'algorithme de déconvolution multirésolution sur un pseudo-dirac. En effet, le delta-dopage considéré est un créneau (pseudo-dirac) de largeur 6 Å qui correspond approximativement à un échantillon idéalement épitaxie avec une seule monocouche dopée bore, l'épaisseur de cette couche correspondrait en fait à deux distances inter - plans pour le silicium (100), c'est-à-dire à 2,72 Å.

Dans cette section nous allons quantifier les performances de la méthode dans des différentes conditions opératoires qui correspondent à diverses énergies d'impact et divers niveaux de bruit, tout en comparant les caractéristiques des profils mesurés et déconvolués par la déconvolution multirésolution et par l'algorithme RT-MMS. Dans ce sens, nous avons comparé les largeurs et les maximums des pics des différents profils ; la largeur des profils déconvolués reflète la résolution en profondeur accessible par déconvolution, ainsi que le maximum des pics donne une idée sur la capacité de la méthode de récupérer les informations perdues lors de l'analyse. Cette étude va nous servir par la suite, dans le chapitre 6, de déconvoluer des structures réelles en forme de multi - deltas - dopage

Les différents paramètres de régularisation d'approximation, de détails et global obtenus par la méthode de Miller sont groupés dans le tableau ci-dessous.

SNR (dB)	20	35	40	50
$\alpha_a^{(5)}$	0,6487	0,0199	0,0063	$7,0157 \cdot 10^{-4}$
$\alpha_a^{(4)}$	0,3328	0,0103	0,0033	$3,6356 \cdot 10^{-4}$
$\alpha_a^{(3)}$	0,1677	0,005	0,0017	$1,71877 \cdot 10^{-4}$
$\alpha_a^{(2)}$	0,0847	0,0025	$8,2848 \cdot 10^{-4}$	$8,5678 \cdot 10^{-5}$
$\alpha_a^{(1)}$	0,03880	0,0014	$4,2031 \cdot 10^{-4}$	$4,3686 \cdot 10^{-5}$
$\alpha_d^{(5)}$	18,0715	17,0696	15,4802	14,5821
$\alpha_d^{(4)}$	9,5710	8,0252	9,4588	7,6113
$\alpha_d^{(3)}$	4,3954	4,5868	4,3646	4,4531
$\alpha_d^{(2)}$	1,9587	2,2073	2,4204	1,9470
$\alpha_d^{(1)}$	1,1170	1,1042	1,1073	1,1169
α_c	0,0010	$3,044 \cdot 10^{-5}$	$9,8607 \cdot 10^{-6}$	$1,1592 \cdot 10^{-6}$

Tableau 2 : Tableau récapitulatif des différents paramètres de régularisation en fonction du niveau de bruit, utilisés pour la déconvolution d'un delta-dopage :

- Paramètres d'approximation $\alpha_a^{(j)}$ et de détails $\alpha_d^{(j)}$ utilisés dans DMR. L'ondelette est Sym8.

- Paramètre de régularisation global α_c utilisé dans RT-MMS.

Le tableau ci-dessous compare les largeurs à mi-hauteur et les maximums des profils mesurés et des profils déconvolués par DMR et par RT-MMS pour différentes profondeurs de pénétration des ions primaires (R_p) et pour différents niveaux de bruit (SNR).

R_p = 40,5 Å					
SNR (dB)		20	35	40	50
Mesure	FWHM(Å)	61,8091	61,7512	61,7512	60,8295
	Max(x10 ³)	0,9930	0,9954	0,9958	0,9990
RT-MMS	FWHM(Å)	31,1060	27,4194	24,1935	23,5023
	Gain en FWHM	1,9870	2,2521	2,5524	2,5882
	Max(x10 ³)	3,0066	3,4795	3,9006	3,9934
	Gain en Max	3,0278	3,4956	3,9171	3,9974
DMR	FWHM(Å)	15,1296	15,1151	15,1149	14,8895
	Gain en FWHM	4,0853	4,0854	4,0855	4,0854
	Max(x10 ³)	4,4108	4,4295	4,4296	4,4356
	Gain en Max	4,4419	4,4500	4,4483	4,4400
R_p = 61,18 Å					
Mesure	FWHM(Å)	70,9678	70,0461	69,1472	68,2028
	Max(x10 ³)	0,8611	0,8611	0,8642	0,8650
RT-MMS	FWHM(Å)	35,2535	29,4930	26,7281	24,1935
	Gain en FWHM	2,0131	2,3750	2,5871	2,8191
	Max(x10 ³)	2,6250	3,2171	3,4934	3,9408
	Gain en Max	3,0252	3,7360	4,0424	3,5770
DMR	FWHM(Å)	16,8166	16,5944	16,3813	16,1572
	Gain en FWHM	4,2201	4,2211	4,2211	4,2212
	Max(x10 ³)	3,8319	3,8409	3,8468	3,8499
	Gain en Max	4,4500	4,4605	4,4513	4,4507
R_p = 73,01 Å					
Mesure	FWHM(Å)	75,5760	74,5960	73,7327	73,3210
	Max(x10 ³)	0,7905	0,7953	0,7967	0,7967
RT-MMS	FWHM(Å)	38,2211	32,1014	31,3521	30,9833
	Gain en FWHM	1,9773	2,3238	2,3518	2,3665
	Max(x10 ³)	2,0592	3,0047	3,1165	3,2200
	Gain en Max	2,6049	3,7781	3,9118	4,0417
DMR	FWHM(Å)	16,7861	16,5526	16,3607	16,2693
	Gain en FWHM	4,5023	4,5066	4,5067	4,5067
	Max(x10 ³)	3,5234	3,5512	3,5514	3,5512
	Gain en Max	4,4572	4,4652	4,4576	4,4574
R_p = 83,89 Å					
Mesure	FWHM(Å)	82,9493	81,1060	79,2627	79,1830
	Max(x10 ³)	0,7322	0,7363	0,7383	0,7384
RT-MMS	FWHM(Å)	40,0922	34,4102	31,1060	29,2627
	Gain en FWHM	2,0690	2,3570	2,5481	2,7059
	Max(x10 ³)	2,2961	2,8224	3,0329	3,2434
	Gain en Max	3,1359	3,8332	4,1080	4,3925
DMR	FWHM(Å)	19,2453	18,8155	18,3857	18,3685
	Gain en FWHM	4,3101	4,3106	4,3111	4,3108
	Max(x10 ³)	3,2581	3,2835	3,2989	3,2926
	Gain en Max	4,4498	4,4595	4,4683	4,4591

$R_p = 112,37 \text{ \AA}$					
SNR (dB)		20	35	40	50
Mesure	FWHM(\AA)	94,9309	92,9309	91,9493	90,3226
	Max($\times 10^3$)	0,6247	0,6278	0,6278	0,6280
RT-MMS	FWHM(\AA)	45,3927	38,2488	37,7880	36,6359
	Gain en FWHM	2,0913	2,4296	2,4333	2,4654
	Max($\times 10^3$)	2,1118	2,4934	2,5001	2,5855
	Gain en Max	3,3805	3,9716	3,9823	4,1170
DMR	FWHM(\AA)	21,6648	21,2079	20,9839	20,6131
	Gain en FWHM	4,3818	4,3819	4,3819	4,3818
	Max($\times 10^3$)	2,7757	2,7888	2,7945	2,7998
	Gain en Max	4,4433	4,4421	4,4512	4,4583

Tableau 3 : Tableau récapitulatif des gains en résolution en profondeurs et en maximum des pics portés par déconvolution multirésolution et par l'algorithme RTM-MS pour différentes profondeurs de pénétration et différents niveaux de bruit.

En observant les gains obtenus par l'algorithme RT-MMS, nous constatons que les gains en résolution et ceux en maximum des pics évoluent en fonction du rapport signal / bruit, c'est-à-dire que les résultats de déconvolution, par cet algorithme, sont influencés par le niveau de bruit. Les plus faibles gains sont obtenus pour les forts niveaux de bruit : par exemple pour une profondeur de pénétration ($R_p = 83,89 \text{ \AA}$) le gain en résolution en profondeur, mesuré à partir de la FWHM, est de 2,0690 pour un SNR de 20 dB, cette valeur varie jusqu'au 2,7059 pour un SNR de 50 dB. La même variation est observée pour le gain en maximum des pics, pour la même profondeur de pénétration ($R_p = 83,89 \text{ \AA}$) ce gain varie de 3,1359 à 4,3925. Si on augmente la plage de variation du niveau de bruit, ces différents gains varient plus.

Cette série de déconvolution par l'algorithme RT-MMS (obtenue pour un nombre d'itérations de 5000) nous montre l'effet du bruit sur le résultat final de déconvolution qui est l'instabilité de la solution ainsi que sa limitation dans les forts niveaux de bruit, sans citer la qualité de la solution qui est trop oscillatoire nécessitant l'application de la contrainte de positivité ou de la contrainte de maintien à zéro. Réellement, ce cas de profil est le plus difficile en terme de restauration car son spectre est riche en hautes fréquences qui limitent la qualité de la solution finale, le paramètre de régularisation obtenu est ainsi faible (voir la dernière ligne du Tableau 2) pour assurer une solution de meilleure qualité. Après un certain nombre d'itérations, avec ces valeurs du paramètre de régularisation, les profils déconvolués sont trop déformés, alors un compromis a été fait pour aboutir à des solutions de bonne qualité mais avec des gains relativement bons.

Cependant, les résultats obtenus par déconvolution multirésolution montrent de toute évidence une certaine constance dans les résultats ; les différents gains obtenus sont indépendants du bruit car tout simplement les composantes de ce dernier (source de tout anomalie) ont été éliminées par seuillage. Par exemple pour la même profondeur de pénétration précédente ($R_p = 83,89 \text{ \AA}$) le gain en résolution moyen pour la plage de bruit considérée est de 4,3106 qui est le double par rapport au gain obtenu par RT-MMS, celui du maximum des pics est d'une valeur moyenne de 4,4592, ces valeurs varient peu d'une mesure à une autre. Ce qui reflète la stabilité du résultat obtenu ainsi que la robustesse et l'invariance de la déconvolution multirésolution, les performances de l'algorithme RT-MMS sont donc moins bonnes.

Cette étude, comme l'étude précédente (limite de séparation), met en relief l'effet du bruit sur non plus la qualité des profils déconvolués mais aussi sur la résolution en profondeur ultime à chaque algorithme de déconvolution [2, 3, 8-19]. Par conséquent, il met en valeur la capacité de la déconvolution multirésolution de restaurer les profils et de récupérer les informations perdues, et donc de se rapprocher d'avantage vers les vraies distributions des espèces altérées par la mesure.

3.6. Discussion sur les erreurs

Il y'a plusieurs critères de validation d'une solution obtenue par déconvolution, l'idéale serait de pouvoir mesurer l'erreur entre le profil déconvolué et le profil réel (l'erreur non observable ou erreur vraie) et d'arrêter la décomposition à l'échelle où cette erreur atteint sa petite valeur. Ce critère n'est bien sur valable qu'en simulation, puisque le profil réel est censé être inconnu dans les profils expérimentaux. Une alternative consiste à mesurer l'erreur observable (erreur de reconstruction) entre le profil mesuré et le profil reconstruit. Normalement, plus le profil déconvolué se rapproche du profil réel, plus l'erreur observable diminue. La qualité de reconstruction rassure relativement l'existence de la solution mais ne reflète pas la qualité de la solution.

Si on observe l'évolution de l'erreur vraie et celle de l'erreur de reconstruction (voir Figure 23) on constate qu'elles ne diminuent pas de la même manière. L'erreur de reconstruction décroît plus rapidement et normalement sa courbe tend vers une asymptote horizontale proche de l'énergie du bruit. Or ce dernier est éliminé par seuillage de ses composantes, alors la courbe de cette erreur s'atténue à zéro à l'échelle 3, après ce niveau de décomposition elle ne décroît pratiquement plus. Alors que la courbe de l'erreur vraie continue à décroître et prend sa valeur minimale à l'échelle 5 tout en gardant la même valeur après ce niveau de décomposition.

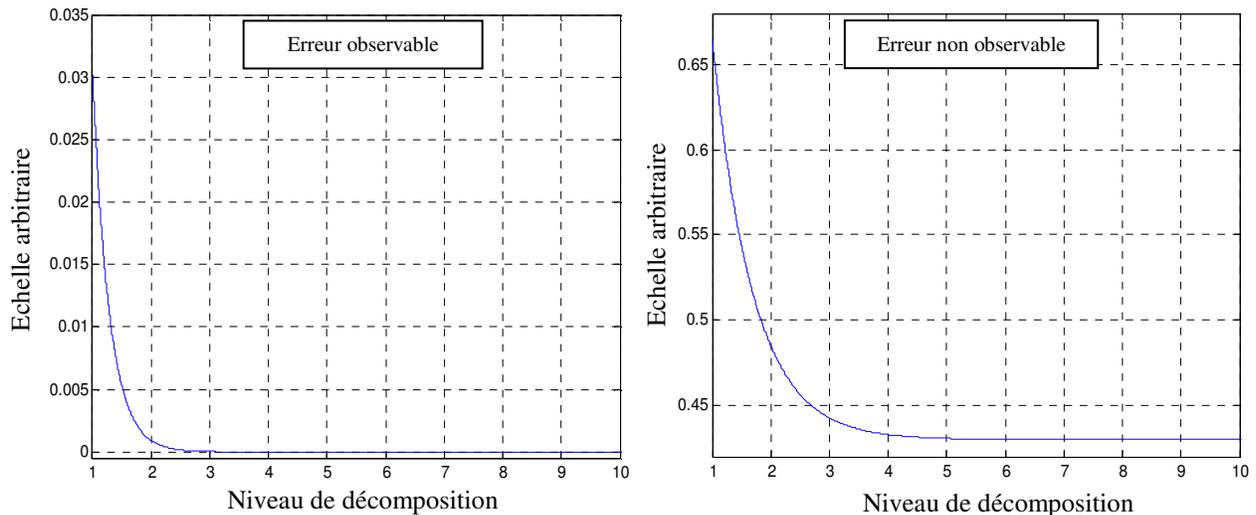


Figure 23 : Evolution des erreurs vraie et de reconstruction en fonction du niveau de décomposition lors de la déconvolution d'un pseudo-dirac.

Dans les simulations effectuées, la décroissance de l'erreur observable indique que le profil déconvolué se rapproche de la solution idéale, mais ça ne reflète pas que la solution est meilleure. Pour cette raison nous avons choisi le niveau de décomposition qui correspond à une valeur faible de l'erreur vraie qui est supérieur ou égale à 5. Les différentes structures utilisées

dans nos simulations nous ont conduit à la conclusion que la valeur à atteindre pour l'erreur vraie oscille autour de $3,45 \cdot 10^{-5}$ alors que celle de l'erreur de reconstruction est très faible et varie autour de $5,01 \cdot 10^{-7}$.

CONCLUSION

Dans ce chapitre nous avons tout d'abord présenté les exigences de la déconvolution. En particulier la naissance des artefacts ou des oscillations gêne l'interprétation des résultats et handicape les algorithmes proposés dans le domaine SIMS. Bien évidemment, l'origine de ces artefacts résiderait dans les fortes concentrations locales des hautes fréquences, ce qui a justifié l'emploi d'une méthode de déconvolution multirésolution.

Nous avons ensuite mis en œuvre la déconvolution multirésolution sur différents types de profils simulés, susceptibles d'être effectivement rencontrés lors d'une analyse SIMS, afin de tester les performances de la méthode. Ces performances ont été comparées avec celles de la régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal pré - déconvolué (RT-MMS). En particulier dans cette dernière (comme toutes les méthodes de déconvolution monorésolution), le paramètre de régularisation s'applique d'une manière globale sur toutes les bandes fréquentielles du signal, ce qui conduit à traiter les basses fréquences qui contiennent le signal utile comme les hautes fréquences constituées majoritairement du bruit. Nous avons également évoqué que si le modèle de solution soit trop bruité ou contienne des aberrations, alors le processus itératif ne fait qu'empirer ces aberrations, ce qui dégénère la solution finale. L'idée conductrice s'était donc d'adapter localement le paramètre de régularisation dans les différentes bandes du signal, ce qui nous a amené à déconvoluer les signaux décomposés préalablement par projection sur une base d'ondelette.

Les résultats obtenus montrent clairement la qualité des profils déconvolués ainsi que les gains obtenus par la déconvolution multirésolution par rapport à ceux obtenus par l'algorithme RT-MMS. Evidemment, ces gains sont proportionnels à la profondeur de l'analyse multirésolution préalablement mise en œuvre. Outre la bonne qualité des profils obtenus, il ressort de cette étude les résultats essentiels suivants :

- La déconvolution est parfaite sur des grandes dynamiques du signal (4 à 5 décades) et sur des interfaces hyper - abruptes sans la génération d'artefacts.
- La récupération des vraies largeurs des petites structures altérées par l'analyse SIMS.
- La largeur à mi-hauteur qu'il est possible de retrouver, calculé à partir de la déconvolution des gaussiennes, est égale à 10 \AA dans des conditions de routine.
- Deux deltas-dopage initialement séparés par une distance de 55 \AA peuvent être complètement découplés après déconvolution et d'obtenir leur détection pour une distance initiale de 20 \AA .
- Les gains en résolution en profondeur obtenus pour les différentes structures varient entre $2,78$ et $5,5 \text{ \AA}$. Ceux des maximums des pics pour les deltas - dopage oscillent autour de $4,45$.

Un inconvénient de la déconvolution multirésolution est l'accroissement du nombre d'opérations. Cet inconvénient peut être contourné par une mise en œuvre sur machines parallèles. Un algorithme sans reconstruction à chaque étape se prête bien à ce type d'implantation.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **Boulakroune M., Eloualkadi A., Benatia D. et Kezai T.,** *New approach for improvement of secondary ion mass spectrometry profile analysis*, Japanese Journal of applied physics, 2007, Vol. 46 n° 11, pp. 7441-7445
- [2] **Mancina G.,** *Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse par SIMS par déconvolution : algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la microélectronique silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2001, 184 p.
- [3] **Brice G.,** *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires. Mise au point d'une procédure de déconvolution et applications*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1997, 222 p.
- [4] **Mallat S.G.,** *A theory for multiresolution signal decomposition: the wavelet representation*, IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 1989, Vol. 11, n°7, pp. 674-692
- [5] **Daubechies I.,** *Ten lectures on wavelets*, Philadelphia: society for industrial and applied mathematics, 1992, Vol. 41, 357 p.
- [6] **Burke Hubbard B.,** *Ondes et ondelettes : la saga d'un outil mathématique, pour la science*, Diffusion Berlin, 1995.
- [7] **Donoho D. L. Johnstone I. M., Kerkyacharian G. et Picard D.,** *Wavelet shrinkage: Asymptotia*, JRSS, ser. B., 1995, Vol. 57, n° 2, pp. 301-369
- [8] **Cooke G. A., Dowsett M. G. et Phillips P.,** *Experimental investigation of the increase in depth resolution obtained through the use of maximum entropy deconvolution of SIMS depth profiles*, Journal of Vacuum Sciences and Technology, 1996, B14 n° 1, pp. 283-286
- [9] **Fares B., Gautier B., Dupuy J.C., Prudon G. et Holliger P.,** *Deconvolution of very low primary energy SIMS depth profiles*, Applied Surface Science, 2006, Vol. 252 n° 19, pp. 6478-6481
- [10] **Yang M. H. et Goodman G. G.,** *Application of deconvolution to boron depth profiling in SiGe heterostructures*, Thin Solid Films, 2006, Vol. 508 n° 1-2, pp. 276-278
- [11] **Kawashima Y., Ide T., Aoyagi S. et Kudo M.,** *Deconvolution analysis of dopant depth profile of Si at AlGaAs/GaAs interface using Al composition profile as reference*, Applied Surface Science, 2004, Vol. 231-232, pp. 800-803
- [12] **Barakat V.,** *Contribution à la restauration d'images dégradées par un système spatialement variant. Apport d'un modèle d'image*, Thèse de doctorat, INSA de Lyon, 1998, 149 p.
- [13] **Egerton R.F., Wangb F., Malac M., Moreno M.S. et Hofer F.,** *Fourier-ratio deconvolution and its Bayesian equivalent*, Micron journal, 2007, article in press,
- [14] **Egerton R.F., Qian H. et Malac M.,** *Improving the energy resolution of X-ray and electron energy-loss spectra*, Micron journal, 2006, Vol. 37, pp. 310-315
- [15] **Garcia-Talaveraa M., et Ulicnyb B.,** *A genetic algorithm approach for multiplet deconvolution in g-ray spectra*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A , 2003, Vol. 512, pp. 585-594

- [16] **Zhanga J.D., Zhoua T.J., Cheunga C.K., Belinga C.D., Funga S. et Ngb M.K.**, *Deconvolution of 2D coincident Doppler broadening spectroscopy using the Richardson–Lucy algorithm*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 2006, Vol. A 560, pp. 552–557
- [17] **Malyarenkoa D.I., Chena H., Wilkersona A.L., Tracya E.R., Cookea W.E., Manosa D.M., Sasinowskib M., et Semmesc O.J.**, *Gap TOF-SIMS line shape analysis for resolution enhancement of MALDI MS spectra of a peptide mixture*, Applied Surface Science, 2004, Vol. 231–232, pp. 357–361
- [18] **Starcks J-L., Nguyenb M. K. et Murtaghc F.**, *Wavelets and curvelets for image deconvolution: a combined approach*, Signal Processing, 2003, Vol. 83, pp. 2279 – 2283
- [19] **Iqbal M.**, *Deconvolution and regularization for numerical solutions of incorrectly posed problem*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 2003, Vol. 151, pp. 463–476

Sommaire du chapitre 6

APPLICATION DE LA DECONVOLUTION AUX PROFILS SIMS REELS

Introduction	159
1. Nécessité de la déconvolution des profils SIMS	159
2. Déconvolution des deltas – dopages	160
2.1. Déconvolution des profils multi deltas – dopages	160
2.2. Déconvolution de deux deltas-dopage séparés de 70 Å	170
3. Déconvolution des créneaux de concentration	172
3.1. Créneau de concentration de largeur 120 Å	172
3.2. Deux créneaux de concentration de largeur 400 Å	174
4. Déconvolution de triple marches de concentration	178
5. Déconvolution sans DRF. La déconvolution partielle	179
Conclusion	188
Bibliographie	189

Chapitre 6

APPLICATION DE LA DECONVOLUTION AUX PROFILS SIMS REELS

INTRODUCTION

Après avoir validé et cerné les performances de la déconvolution multirésolution sur des profils SIMS simulés, nous allons maintenant appliquer cette approche sur des profils SIMS réels. La plupart des profils ont été mesurés avec l'appareil Cameca Ims-6f, d'autres mesures nous ont été fournies par d'autres laboratoires.

Les mesures, faites avec l'analyseur Cameca Ims-6f, ont été effectuées en ions primaires O_2^+ (en incidence oblique), avec et sans soufflage d'oxygène.

1. NECESSITE DE LA DECONVOLUTION DES PROFILS SIMS

Nous avons vu, dans le premier chapitre, que l'analyse SIMS atteint des limites physiques qui rendent difficilement envisageable d'autres améliorations techniques de l'appareillage et de la qualité des mesures. Pour obtenir un gain meilleur en résolution, il faut disposer de grands moyens instrumentaux dont le coût est très exorbitant. Diminuer l'énergie d'impact des ions primaires implique un réglage minutieux du faisceau, sa stabilité et sa focalisation deviennent très capricieuses, conduisant fréquemment à la malformation des cratères avec la naissance de rugosités. En plus, la réduction du taux d'ionisation inhérent à la faible énergie incidente rend les temps d'analyse très longs suite à la diminution de la vitesse d'érosion de l'échantillon. Même si la mesure est conduite dans des bonnes conditions l'amélioration instrumentale (physique) de la résolution en profondeur sera désormais limitée.

La Figure 1 montre un exemple de l'amélioration instrumentale de la résolution en profondeur par la diminution de l'énergie d'impact des ions primaires d'un échantillon multi deltas - dopage du bore dans le silicium.

Nous constatons que la résolution en profondeur est améliorée par seulement un gain de 1,1 alors que la dynamique du signal est améliorée uniquement par un facteur de 1,3. Ce qui prouve que l'amélioration physique reste limitée et on est encore loin des vraies répartitions des espèces dans l'échantillon. Pour cela nous avons eu recours à la déconvolution pour aider la résolution en profondeur de franchir ses limites physiques.

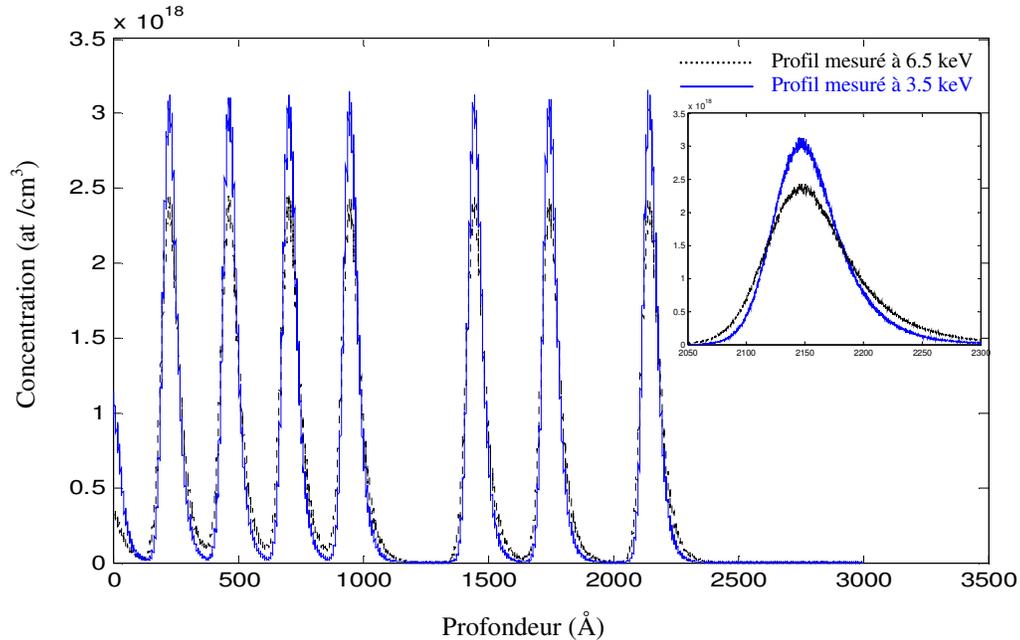


Figure 1 : Exemple d'une amélioration physique de la résolution en profondeur par diminution de l'énergie d'impacte des ions primaires d'un échantillon multi deltas – dopage du bore dans le silicium.

2. DECONVOLUTION DES DELTAS - DOPAGE

2.1. Déconvolution des profils multi deltas - dopage

La première série d'échantillons que nous allons appliquer la déconvolution comporte des profils en forme de δ -dopage. Comme nous avons évoqué dans le chapitre 5 (§ 3.5.), un delta-dopage constitue une structure idéale pour appliquer une méthode de déconvolution puisque c'est la structure la plus affectée par la convolution lors de l'analyse SIMS. La déconvolution de ce type d'échantillons donne une idée directe de ce qu'on peut attendre de la résolution en profondeur autant sur le plan expérimental qu'après déconvolution. C'est pourquoi nous avons choisi de nous intéresser à ce type de profils en premier lieu.

Nous disposons de trois échantillons comportant des deltas-dopage, de bore dans le silicium, plus ou moins espacés et analysés dans des différentes conditions d'analyse. Le premier échantillon comportant quatre deltas-dopage, le deuxième comporte sept deltas-dopage, le troisième en comportant dix. On peut considérer que les paramètres de la DRF obtenus à partir de ces échantillons sont valables dans les conditions opératoires que nous avons menées nos analyses. Cette acquisition va nous permettre de tester l'auto - déconvolution ainsi que la séparabilité des deltas dopage. Ces échantillons seront notés respectivement MD4, MD7, MD10 selon qu'ils s'agissaient de quatre, sept ou dix deltas-dopage.

Avant d'appliquer la déconvolution multirésolution sur les profils SIMS réels, nous allons voir les performances et les limites de la méthode proposée dans le chapitre 4, § 6, qui est la régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal débruité par ondelettes que nous allons noter RT-MMSDO. Dans cette méthode nous avons proposé d'introduire un modèle de solution sous la forme d'un signal décomposé préalablement sur

une base d'ondelette. Il s'agit d'un signal débruité et reconstruit en ne conservant que les coefficients d'approximation et les coefficients de détails seuillés.

Cette méthode se base sur le débruitage par décomposition du signal sur une base d'ondelette, puis sa reconstruction en ne conservant que l'approximation à un niveau bien choisi et quelques détails susceptibles d'appartenir au signal utile.

Dans cette méthode le paramètre de régularisation α s'applique d'une manière globale. Nous allons étudier l'effet de cette application sur le résultat de déconvolution. Nous allons appliquer cette méthode sur uniquement un seul échantillon, soit par exemple MD4 pour cerner ses performances et ses limites.

La Figure 2 montre le résultat de la déconvolution par la méthode RT-MMSDO du profil MD4 mesuré à $8,5 \text{ keV/O}_2^+$, $38,1^\circ$. L'ondelette utilisée est l'ondelette à support compact presque symétrique de la famille Symlet qui est *Sym8*.

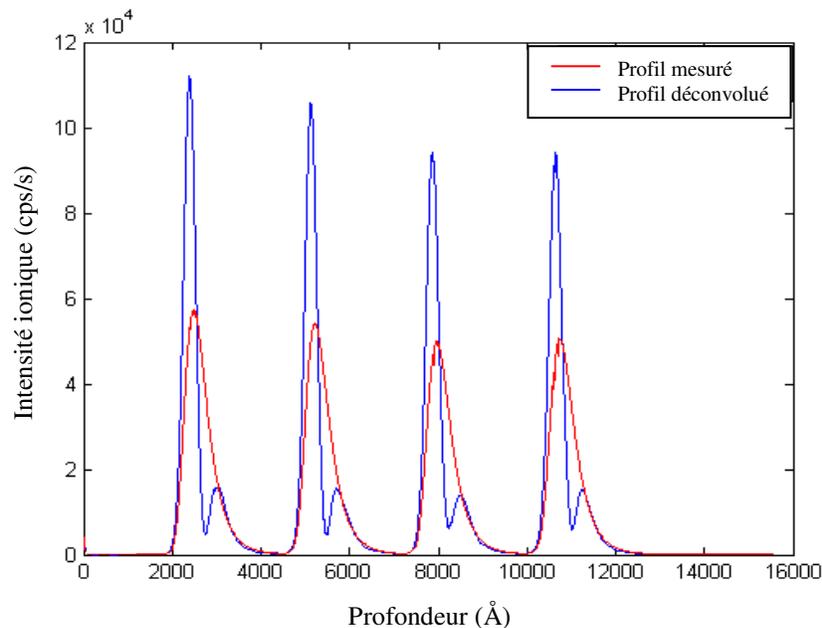


Figure 2 : Résultats de la déconvolution par l'algorithme RT-MMSDO de l'échantillon MD4. $\alpha = 5,6552 \cdot 10^{-6}$.

Nous constatons que la déconvolution a conduit à une certaine amélioration de l'analyse tant de la résolution en profondeur que de la dynamique du signal. A noter que les pics déconvolués sont décalés un peu vers la gauche, ce phénomène est appelé le *Shift différentiel* et qui doit être pris en compte lors de la déconvolution. En d'autres termes les pics doivent être replacés à des endroits qui correspondent à la valeur moyenne de la DRF, c'est-à-dire aux endroits où ils ont le plus de chance de se trouver réellement. Ce positionnement ne tient pas compte d'un éventuel effet de shift, que nous n'avons pas par ailleurs étudié quantitativement.

Brice [1] a étudié en détail ce phénomène et a pu estimer qu'à 5,5 keV/O₂⁺, l'erreur commise sur la position réelle du delta - dopage ne dépasse pas 50 Å. Le lecteur intéressé pourra se rapporter à la référence [1] pour plus amples informations. Par la suite et pour plus de clarté, nous placerons le résultat de la déconvolution à la valeur moyenne de la DRF qui est très proche de son sommet.

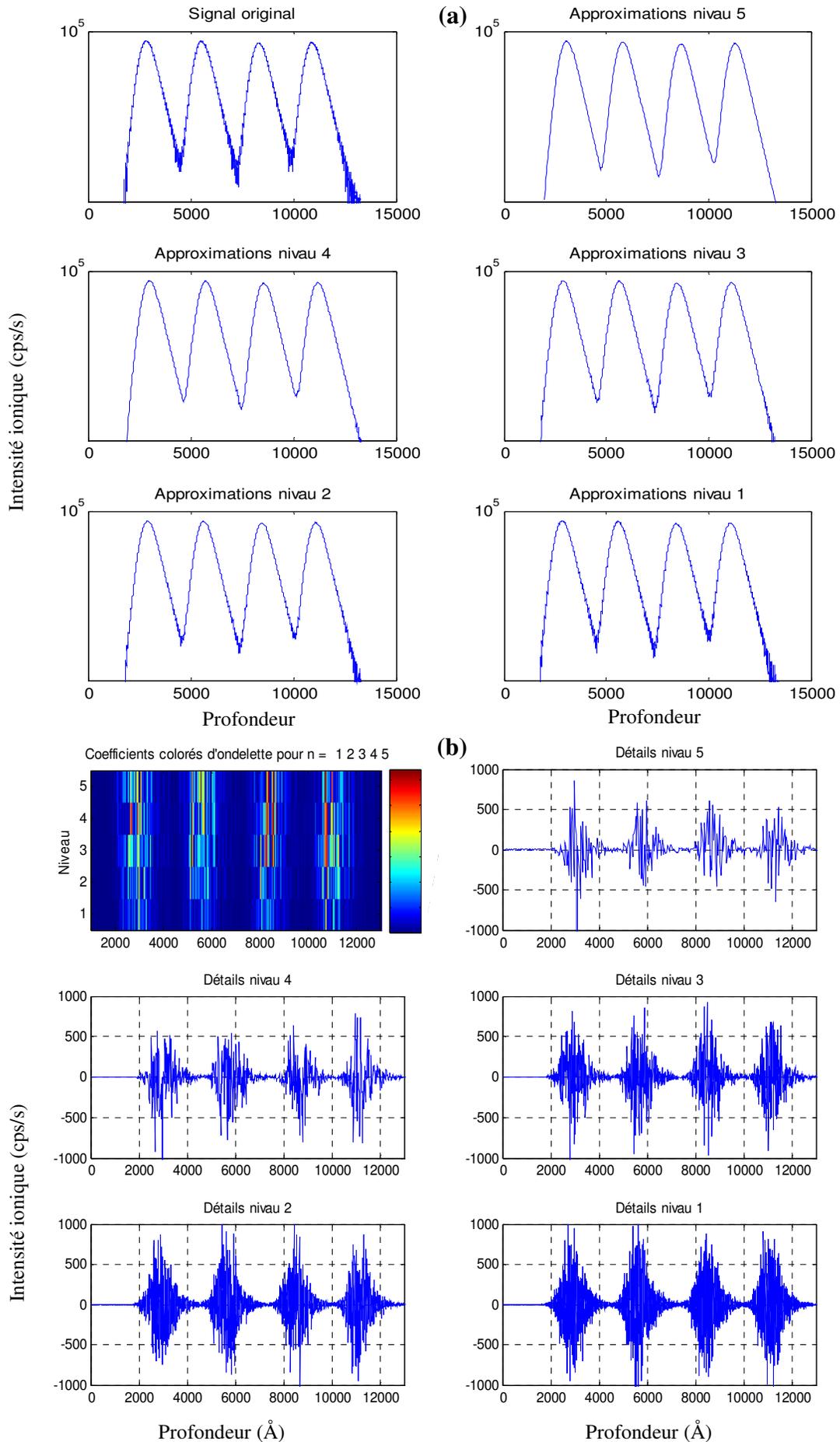
Aux pieds des profils déconvolués on voit des oscillations périodiques *positives* mais sans des composantes négatives dont la source est éliminée par débruitage. Cependant la présence des oscillations *positives* dans le profil, et qui ne peuvent être éliminées que par l'application de la contrainte de maintien à zéro déconvolué, limite cette approche. Néanmoins, l'avantage de cette méthode, par rapport à l'algorithme RT-MMS, est que le profil déconvolué ne contient pas des composantes négatives qui, en mesure des concentrations en SIMS, ne sont plus acceptables.

Cet exemple de déconvolution nous montre clairement que le débruitage seul, a priori, du signal mesuré est insuffisant pour avoir un bon résultat, car le paramètre de régularisation qui s'applique d'une manière globale sur toutes les bandes fréquentielles du signal est incapable pour régulariser le système. Une adaptation de ce paramètre dans les différentes bandes du signal est nécessaire pour limiter la génération des artefacts. Comme nous l'avons signalé dans le chapitre 5 une partie de l'information en particulier dans les hautes fréquences est masquée par le bruit dont les composantes ne sont pas totalement seuillées. Ce manque est compensé par la génération d'artefacts. L'origine de ces oscillations résiderait dans les fortes concentrations locales des hautes fréquences et qui ne sont pas complètement restaurées. Ce qui justifie l'emploi d'une méthode de déconvolution multirésolution régularisée dont le paramètre de régularisation s'applique d'une manière locale sur les différentes bandes fréquentielles.

Dans le cas des profils réels, l'information sur la régularité du signal est absente ce qui impose d'utiliser la méthode de validation croisé généralisée pour estimer le paramètre de régularisation (équations (66 a, b) du chapitre 4). Nous rappelons que ce paramètre se devise en deux paramètres selon qu'il s'agissait des signaux d'approximations ou de détails on obtient donc un paramètre de régularisation d'approximation $\alpha_a^{(j)}$ ou celui de détails $\alpha_d^{(i)}$. Ces paramètres s'adaptent, en fonction du niveau de décomposition, avec les bandes à traiter. Contrairement à α_c global qui s'applique sur toutes les fréquences de la même manière.

Nous allons maintenant voir un exemple de décomposition de ce type de profils sur une base d'ondelette. Nous n'allons pas présenter l'analyse multirésolution de tous les échantillons car c'est la même stratégie d'analyse et on aura toujours presque les mêmes graphiques, vu que c'est la même méthodologie de décomposition et de reconstruction.

La décomposition ainsi que le débruitage de l'échantillon MD4 sur une base d'ondelette sont illustrés sur la Figure 3. L'ondelette utilisée est à support compact de la famille Symlet qui est Sym8. L'interprétation des graphiques de cette analyse est déjà détaillée dans le chapitre 5 (§ 2.2.), nous allons uniquement rappeler le principe et les points essentiels susceptibles d'être discutés dans cette section.



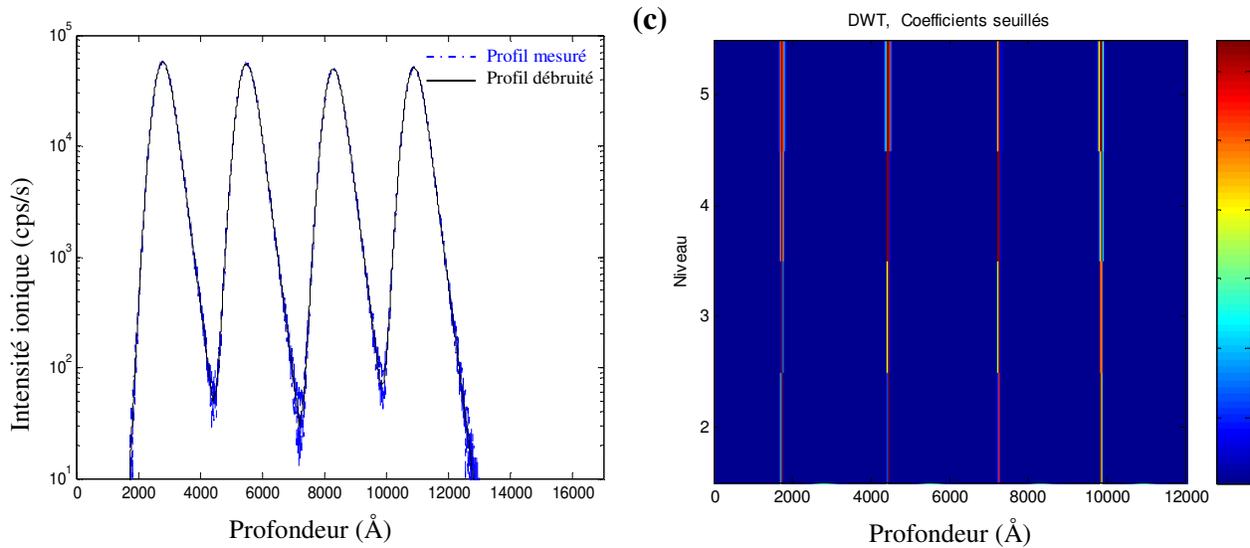


Figure 3 : Décomposition de l'échantillon MD4 ($8,5 \text{ keV/O}_2^+$, $38,1^\circ$) sur une base d'ondelette « Sym8 », niveau de décomposition 5 : a) signal mesuré original avec les signaux d'approximation, b) signaux de détails avec les coefficients colorés d'ondelette, c) signal débruité superposé au signal original avec les coefficients seuillés.

Rappelons l'interprétation des graphiques déjà vue dans le chapitre 5 (§ 2.2.). Dans les graphiques des approximations (voir Figure 3-a) partant de \mathbf{a}_1 et recherchons, en remontant, un niveau tel que l'approximation constitue un bon candidat à être un estimateur du signal utile. Les niveaux 4 et 5 sont raisonnables, dont les estimateurs associés sont de très bonne qualité, d'être des bons candidats pour le signal utile.

Regardons maintenant les détails (voir Figure 3-b). Le détail \mathbf{d}_1 semble composé intégralement de bruit. Les détails \mathbf{d}_2 à \mathbf{d}_5 présentent de fortes valeurs concentrées aux abscisses qui correspondent aux positions des deltas - dopage. On en déduit que les détails \mathbf{d}_4 et \mathbf{d}_5 contiennent des composantes du signal utile par opposition au bruit non informatif. Ce phénomène est aussi visible sur le graphique des coefficients d'ondelettes du niveau 5 au niveau 1.

Le point qui attire toute l'attention ici est la continuité du signal débruité entre les deltas - dopage là où il est sensé d'être discontinu, les méthodes classiques de débruitage sont incapables d'une telle adaptation en échelle (voir Figure 3-b). En effet, l'approximation au niveau 5 de décomposition est conservée telle que le bruit soit absent ou très atténué, complétée par les détails plus fins clairement attribuables au signal utile. Les coefficients d'ondelette seuillés nous donne une idée sur les détails restants dans l'approximation (signal débruité) comme faisant partie du signal original (voir Figure 3-b). Ces coefficients (« bégayés » 2^n fois au niveau n) sont concentrés dans la zone où le signal est trop bruité (hautes fréquences), après le seuillage il reste uniquement les détails qui sont supérieurs au seuil déterminé et susceptibles d'appartenir au signal utile. Le seuil obtenu par le seuillage universel dur en utilisant la formule de Donoho et Johnstone vue dans le chapitre 4 (équation 81) est $\lambda = 55,7831 \text{ cps/s}$. Le niveau de bruit estimé, en utilisant l'équation 82 du chapitre 4, est d'un $\text{SNR} = 40,9212 \text{ dB}$.

Les différents paramètres de régularisation estimés par les équations (66 a, b) de la validation croisée généralisée nécessaires pour la bonne régularisation du système sont :

$\alpha_a^{(1)} = 3,34789 \cdot 10^{-4}$, $\alpha_a^{(2)} = 6,7835 \cdot 10^{-4}$, $\alpha_a^{(3)} = 0,0013$, $\alpha_a^{(4)} = 0,0026$, $\alpha_a^{(5)} = 0,0048$,
 $\alpha_d^{(1)} = 1,1012$, $\alpha_d^{(2)} = 2,3287$, $\alpha_d^{(3)} = 4,0211$, $\alpha_d^{(4)} = 9,1654$, $\alpha_d^{(5)} = 16,0773$. Cependant le paramètre de régularisation classique est égal à $6,6552 \cdot 10^{-5}$.

En observant ces valeurs, on constate que l'évolution des paramètres d'approximations et de détails est la même évolution lorsqu'on utilise la méthode de Miller. C'est-à-dire ils doublent de valeur en passant d'une échelle à une autre et que les valeurs les plus élevées sont obtenues pour un niveau de décomposition le plus élevé. Car la régularité du signal à ce niveau est très faible et comme le bruit en analyse SIMS est un bruit gaussien d'écart-type constant donnant ainsi des paramètres de régularisation relativement grands.

La Figure 4 montre les résultats de déconvolution multirésolution de l'échantillon MD4 en échelle linéaire et en échelle logarithmique et la reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué et la DRF.

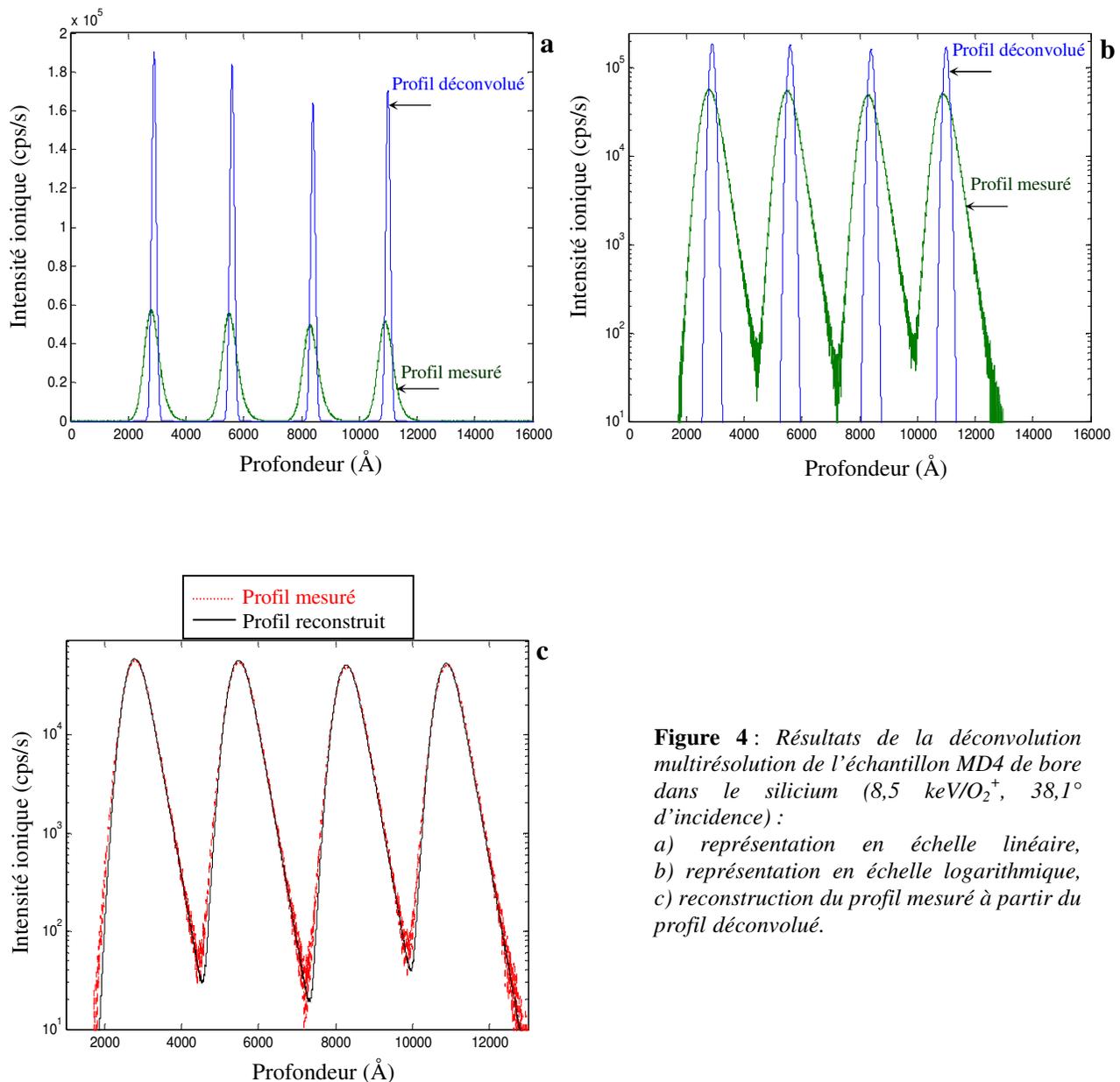


Figure 4 : Résultats de la déconvolution multirésolution de l'échantillon MD4 de bore dans le silicium ($8,5 \text{ keV/O}_2^+$, $38,1^\circ$ d'incidence) :

a) représentation en échelle linéaire,
 b) représentation en échelle logarithmique,
 c) reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué.

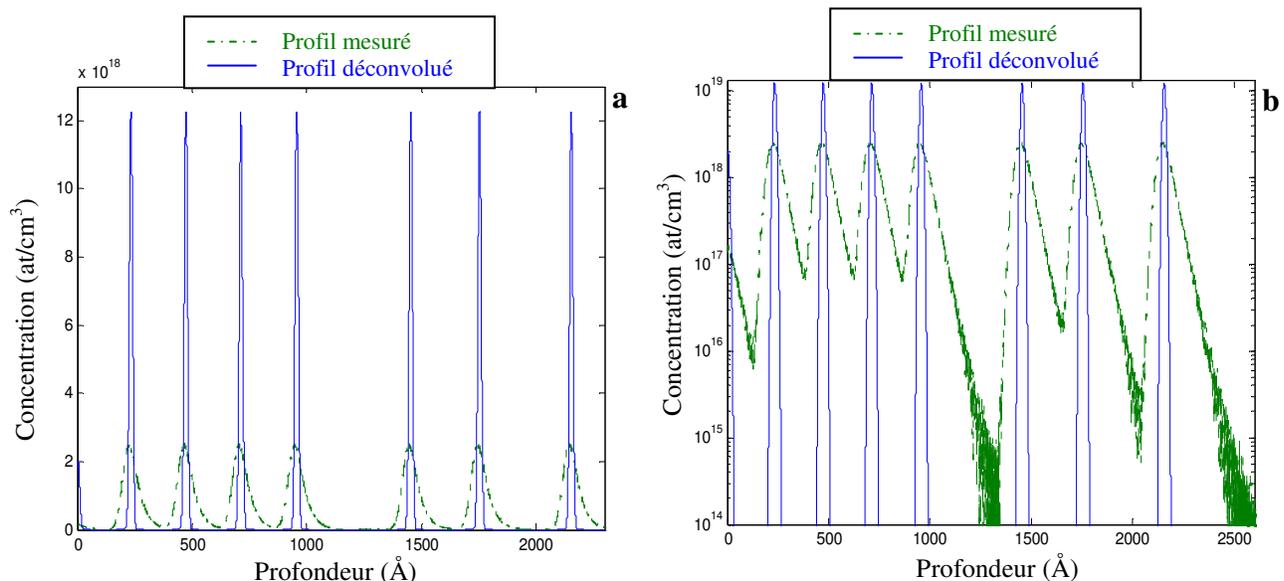
Nous constatons, d'après ces résultats, que la déconvolution est excellente sur toute la dynamique du signal, le profil déconvolué montre une nette amélioration de la résolution en profondeur. La largeur à mi-hauteur des pics déconvolués est égale à 189 Å alors que celle des pics mesurés est 597 Å, ce qui représente un gain de 3,1587. La largeur des pics mesurés et des pics déconvolués nous indique que les pics ne sont pas des vrais deltas – dopage, sont proches des gaussiennes plus que des δ -dopage. Les profils déconvolués ne montrent aucune asymétrie. En particulier le comportement exponentiel asymptotique a entièrement disparu sur le front de montée comme sur le front de descente. Ce qui prouve que l'effet du mixage collisionnel engendré par la mesure sur ce dernier a été éliminé complètement.

L'avantage de cette déconvolution est l'absence des oscillations avec des composantes négatives qui apparaissent avec l'algorithme RT-MMS et qui sont dus principalement à l'effet du bruit (dans le prochain exemple nous allons voir l'application de cet algorithme sur ce type d'échantillon). Même les oscillations *positives* engendrées lors de la déconvolution par l'algorithme RT-MMSDO sont inexistantes car le paramètre de régularisation s'applique d'une manière locale dans les différentes bandes du signal. Ce qui compense les hautes fréquences présentes dans le signal à chaque niveau de décomposition.

La reconstruction du profil est quant à elle excellente surtout dans les hauts niveaux du signal. Le profil reconstruit ne s'éloigne du profil mesuré qu'à la jonction entre les pics de concentration (voir Figure 4-c). Ce qui valide cette approche de déconvolution.

Nous allons maintenant appliquer la déconvolution multirésolution sur les échantillons MD7 et MD 10 mesurés tout les deux à basse énergie. Ces échantillons vont nous donner une idée sur la capacité de la déconvolution multirésolution de restaurer des vrais deltas-dopage c'est-à-dire des pics très fins constitués uniquement de quelques plans atomiques.

Les résultats de la déconvolution multirésolution de l'échantillon MD7 en échelles linéaire et logarithmique sont illustrés dans la Figure 5. Cette figure montre en plus la reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué et, à titre comparatif, les résultats de la déconvolution par l'algorithme RT-MMS de cet échantillon.



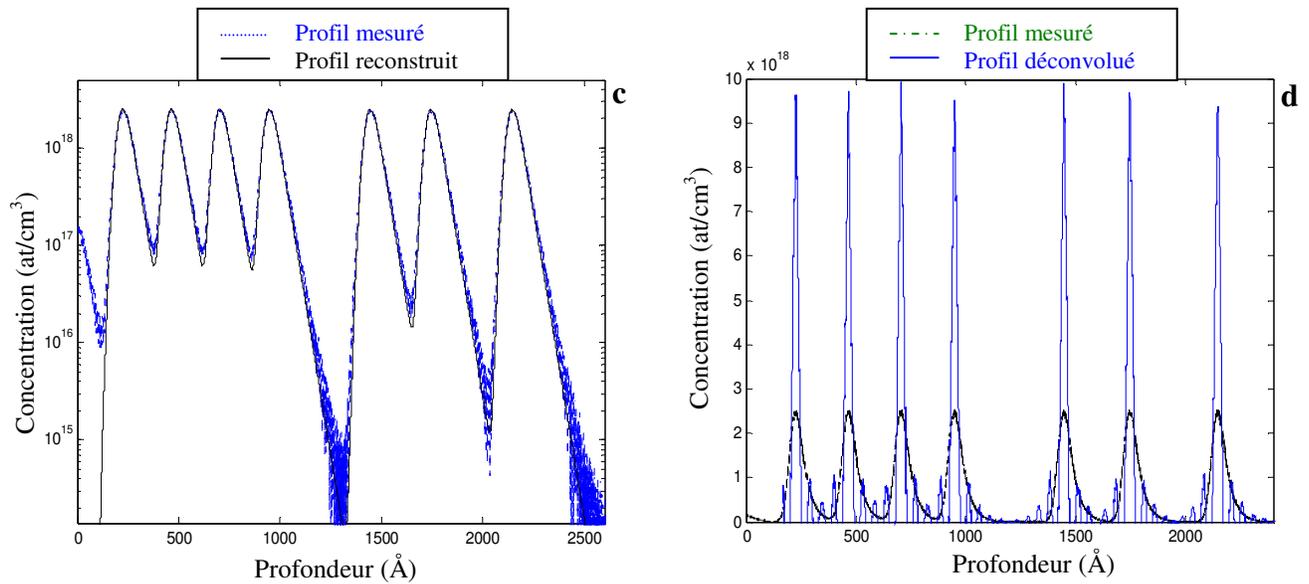


Figure 5 : Résultats de la déconvolution multirésolution de l'échantillon MD7 de bore dans le silicium ($3,5 \text{ keV/O}_2^+$, $49,1^\circ$ d'incidence). L'ondelette utilisée est Coif5, seuillage dur, $\lambda = 1,3846 \cdot 10^{12} \text{ cps/s}$: a) représentation en échelle linéaire, b) représentation en échelle logarithmique, c) reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué. Le niveau de bruit estimé, en utilisant l'équation 82 du chapitre 4, est d'un $\text{SNR} = 37.0451 \text{ dB}$.

$\alpha_a^{(1)} = 6,7669 \cdot 10^{-4}$, $\alpha_a^{(2)} = 0,0013$, $\alpha_a^{(3)} = 0,0026$, $\alpha_a^{(4)} = 0,0052$, $\alpha_a^{(5)} = 0,0099$, $\alpha_d^{(1)} = 1,1106$,
 $\alpha_d^{(2)} = 2,1665$, $\alpha_d^{(3)} = 4,6728$, $\alpha_d^{(4)} = 8,2416$, $\alpha_d^{(5)} = 17,6184$.
d) Déconvolution par l'algorithme RT-MMS, $\alpha = 2,4330 \cdot 10^{-5}$, $n = 250$ itérations.

La déconvolution multirésolution de cet échantillon a également conduit à une excellente amélioration de la résolution en profondeur et de la récupération de la forme originale du signal. Les pentes exponentielles ont été complètement supprimées donnant ainsi des pics symétriques et bien séparés. Les deltas - dopage ne font plus que quelques dizaine d'angströms de large ($14,30 \text{ \AA}$), la largeur des pics mesurés est de l'ordre de $72,90 \text{ \AA}$ ce qui donne un gain de $5,0979$, le gain des maximums des pics obtenu est égale à $5,680$. C'est paradoxalement lors de la déconvolution des deltas -dopage que l'on observe les gains les plus grands alors que sont les structures les plus difficiles à déconvoluer !

Par comparaison avec les résultats de la déconvolution par l'algorithme RT-MMS (Figure 5-d), les profils obtenus par déconvolution multirésolution sont lisses et dépourvus des artefacts. Ces derniers sont très nombreux aux pieds des pics déconvolués par l'algorithme RT-MMS. Bien qu'un compromis ait été fait entre le nombre d'itérations et la qualité des pics obtenus, si on augmente le nombre d'itération avec un paramètre de régularisation relativement faible le nombre et le niveau de ces oscillations augmentent plus, ce qui renforce les limites de cet algorithme.

De son côté, la reconstruction du profil est excellente dans les hauts niveaux du signal. Les écarts entre le profil mesuré et le profil reconstruit se situent principalement aux jonctions des pics de concentration. La qualité de la reconstruction vient renforcer la confiance sur la solution obtenue en confirmant le fait que cette solution a pu engendrer le profil mesuré puisqu'elle est capable de le reconstruire avec une bonne précision.

A noter que dans le profil mesuré, dans une position très proche de la surface on trouve un pic de concentration enterré à $\approx 10 \text{ \AA}$ de profondeur qui n'est pas négligeable (bien clair en échelle logarithmique), et la déconvolution a pris en considération ce pic. Bien évidemment, ce pic ne doit pas être pris en compte, puisque à cette énergie d'impact, il se situe à la limite du régime transitoire de l'analyse. D'ailleurs, la reconstruction n'a pas pris en compte cette couche superficielle. A titre indicatif, la profondeur nécessaire à l'installation du régime permanent d'analyse représente à $5,5 \text{ keV/O}_2^+$ deux fois la profondeur de pénétration moyenne des ions primaires dans la matrice, soit $2R_p$ [1]. Dans le cas d'un faisceau primaire d'oxygène dans le silicium, cela représente environs 140 \AA , ce qui place théoriquement le début du régime permanent.

Nous allons maintenant voir la déconvolution multirésolution de l'échantillon MD10 mesuré à basse énergie $2,5 \text{ keV/O}_2^+$ ($63,1^\circ$ d'incidence). La Figure 6 montre les résultats de la déconvolution multirésolution de cet échantillon en échelle linéaire et en échelle logarithmique.

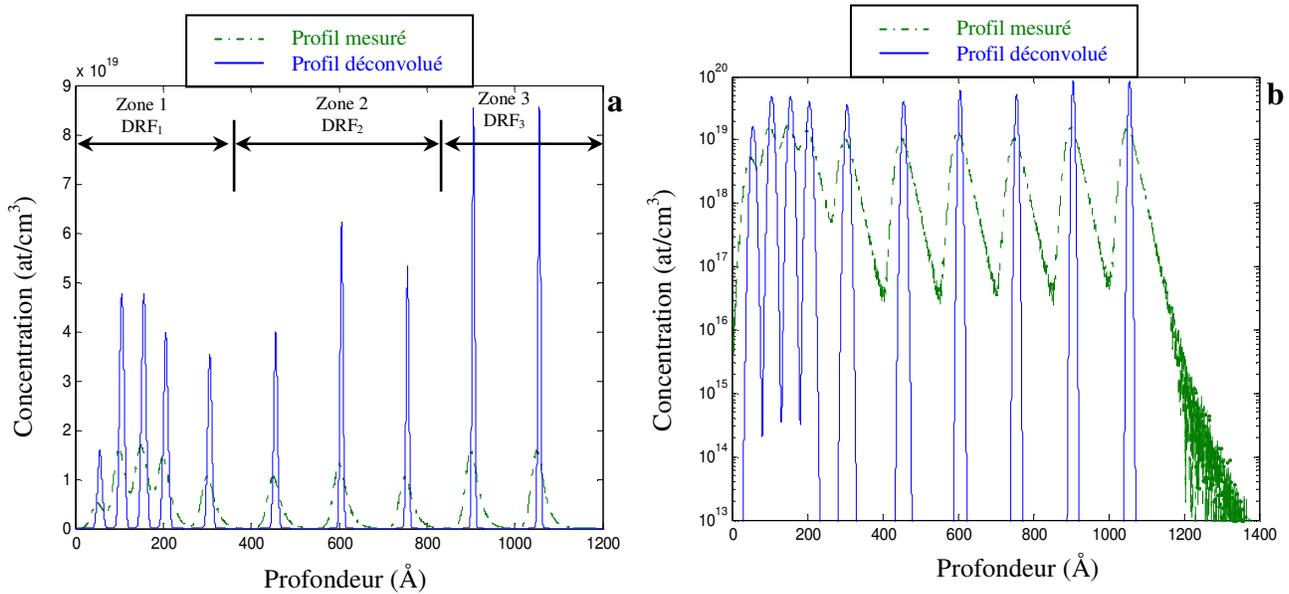


Figure 6 : Résultats de la déconvolution multirésolution de l'échantillon MD10 de bore dans le silicium ($2,5 \text{ keV/O}_2^+$, $63,1^\circ$ d'incidence). L'ondelette utilisée est Coif3, seuillage dur, $\lambda = 1,5793 \cdot 10^8 \text{ cps/s}$:

a) représentation en échelle linéaire, b) représentation en échelle logarithmique. Le niveau de bruit estimé, en utilisant l'équation 82 du chapitre 4, est d'un $\text{SNR} = 42,35 \text{ dB}$.

$\alpha_a^{(1)} = 3,3898 \cdot 10^{-4}$, $\alpha_a^{(2)} = 6,4819 \cdot 10^{-4}$, $\alpha_a^{(3)} = 0,0013$, $\alpha_a^{(4)} = 0,0024$, $\alpha_a^{(5)} = 0,0043$,
 $\alpha_d^{(1)} = 1,1052$, $\alpha_d^{(2)} = 2,3095$, $\alpha_d^{(3)} = 3,9965$, $\alpha_d^{(4)} = 9,3338$, $\alpha_d^{(5)} = 19,5822$.

A part la qualité des pics déconvolués déjà discutée précédemment, la déconvolution de cet échantillon montre une certaine spécificité. Les pics déconvolués sont de plus en plus larges au fur et à mesure qu'on se rapproche de la surface de l'échantillon. Il ne faut pas voir là une dérive du processus de déconvolution. Il est normal que le pic le plus profond sur lequel a été fittée la DRF, et possédant la dynamique la plus grande, soit le mieux déconvolué, c'est-à-dire le plus fin. Le gain en résolution obtenu pour ce pic est de 5,33, alors que le gain obtenu pour le deuxième pic est égal à 2,71, celui du sixième pic est de 3,60. Comme le premier pic se situe à une profondeur qui appartient au régime transitoire il n'est donc pas pris en compte.

Pour remédier à ce problème nous avons choisi de faire la déconvolution « par zone » proposée par Mancina [2], c'est-à-dire de partager le profil en trois zones différentes, chaque zone contient les pics déconvolués qui ont presque la même largeur. La première zone contient les cinq premiers pics, la deuxième comporte trois et la dernière zone en comportant les deux derniers. Après, on fait la déconvolution par zone, donc chaque partie a sa propre DRF. Cependant, couper le profil à une profondeur où le signal n'est pas nul revient à le fausser puisque la dose de la structure « isolée » n'est pas complète. De plus on créerait une structure avec un front abrupte, ce qui est impossible à obtenir par la mesure, la DRF agissant comme un filtre passe-bas. Il faut donc commencer la déconvolution sur tout le profil, jusqu'à ce qu'entre deux zones successives, une plage de signal nul assez grande apparaisse. Puis on remplace la DRF propre à chaque zone.

La Figure 7 montre les résultats de la déconvolution multirésolution par zone de l'échantillon MD10 en échelle linéaire et en échelle logarithmique. Cette figure montre en plus la reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué et les différentes DRFs.

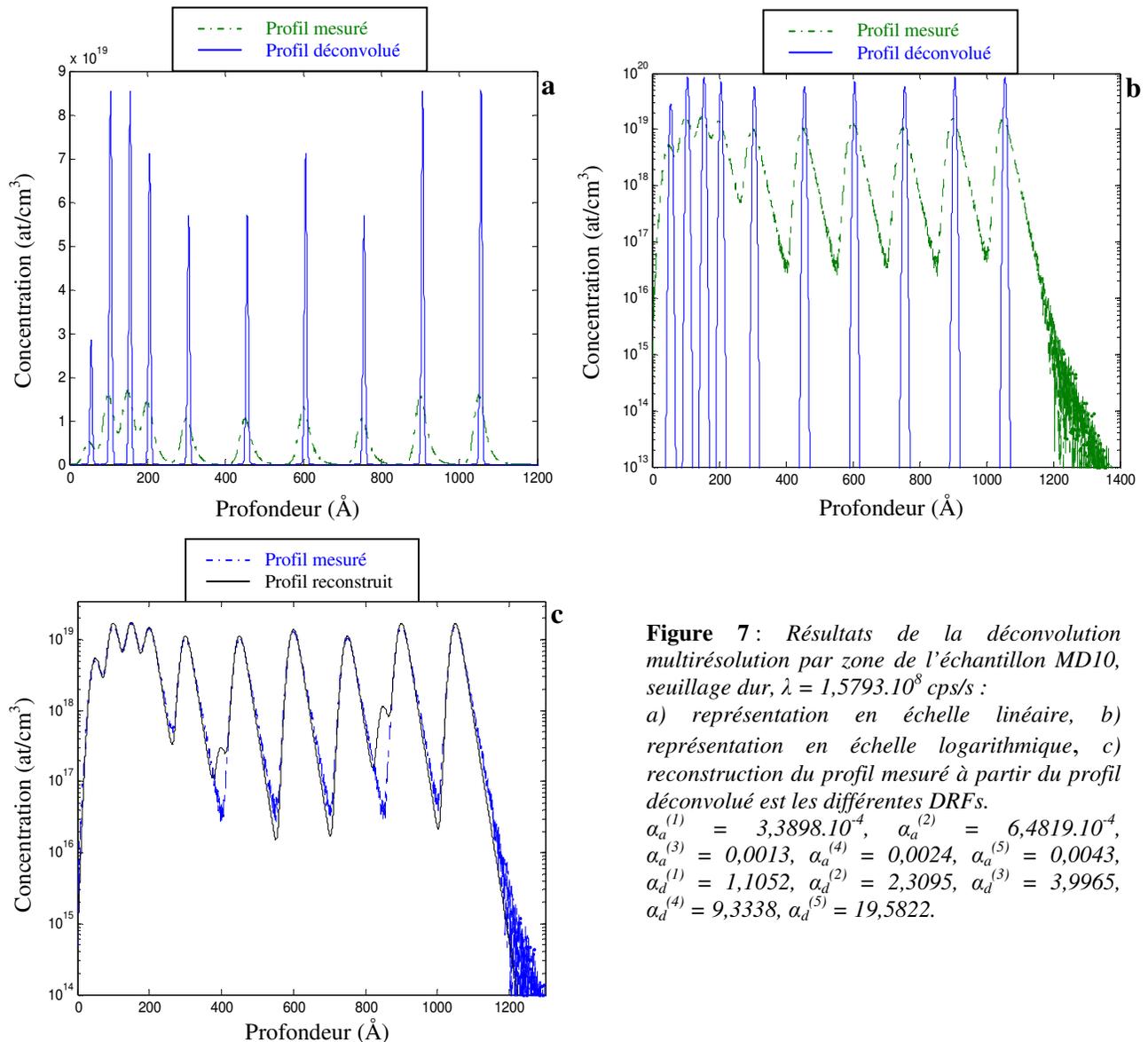


Figure 7: Résultats de la déconvolution multirésolution par zone de l'échantillon MD10, seuillage dur, $\lambda = 1,5793 \cdot 10^8$ cps/s :

a) représentation en échelle linéaire, b) représentation en échelle logarithmique, c) reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué est les différentes DRFs.

$$\begin{aligned} \alpha_a^{(1)} &= 3,3898 \cdot 10^{-4}, & \alpha_a^{(2)} &= 6,4819 \cdot 10^{-4}, \\ \alpha_a^{(3)} &= 0,0013, & \alpha_a^{(4)} &= 0,0024, & \alpha_a^{(5)} &= 0,0043, \\ \alpha_d^{(1)} &= 1,1052, & \alpha_d^{(2)} &= 2,3095, & \alpha_d^{(3)} &= 3,9965, \\ \alpha_d^{(4)} &= 9,3338, & \alpha_d^{(5)} &= 19,5822. \end{aligned}$$

Nous constatons que la déconvolution par zone est excellente sur la totalité des deltas-dopage. Les pics déconvolués ont tous presque la même largeur, bien séparés alors que les quatre premiers pics dans la déconvolution « globale » (voir Figure 6-b) ne sont pas complètement dissociés. Les hauteurs des pics de la première zone sont récupérées alors dans le premier cas (voir Figure 6-a) sont sous-estimés. Le tableau suivant récapitule les différents gains en résolution et en maximum des pics obtenus pour les deux déconvolutions : globale et par zone.

		Pic#1	Pic#2	Pic#3	Pic#4	Pic#5	Pic#6	Pic#7	Pic#8	Pic#9	Pic#10
Déconvolution globale	Gain en FWHM	2,701	2,710	2,725	2,912	2,842	3,600	3,681	3,784	5,330	5,330
	Gain en Max	3,041	2,926	2,815	2,791	3,363	3,788	4,699	5,0748	5,440	5,442
Déconvolution par zone	Gain en FWHM	5,258	5,116	4,921	4,865	5,311	5,271	5,387	5,309	5,329	5,330
	Gain en Max	5,369	5,2235	5,0249	4,968	5,423	5,382	5,501	5,408	5,440	5,442

Tableau 1 : Récapitulation des gains en résolution et en maximum des pics obtenus par déconvolution globale et déconvolution par zone.

En observant les différentes valeurs des gains obtenus, nous constatons que la déconvolution par zone conduit à des gains quasi-constants autant pour le gain en résolution que pour le gain en maximum des pics, et prennent tous presque les mêmes gains portés sur le dernier pic. La colonne qui correspond au premier pic n'est pas prise en compte car, comme c'est déjà signalé, ce pic appartient au régime transitoire, dont les différents paramètres inhérents à la mesure (taux d'ionisation, vitesse d'érosion, taux de pulvérisation, etc...) sont non linéaires et en perpétuelle variation jusqu'au l'établissement du régime permanent.

On peut considérer que la reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué et les différentes DRFs est bonne notamment dans les hauts niveaux de signal et dans chaque zone à part. Les écarts entre le profil mesuré et le profil reconstruit se situent principalement aux jonctions des pics relativement distants, dans la première zone la reconstruction est excellente. Entre les différentes zones c'est-à-dire après le pic#5 et le pic#8 on remarque un renflement dont le niveau augmente avec la profondeur. C'est évident car chaque zone a été déconvoluée séparément avec sa propre DRF.

Nous pouvons ainsi conclure à un résultat très satisfaisant à la fois pour la mesure, la déconvolution et la reconstruction du profil.

2.2. Déconvolution de deux deltas-dopage séparés de 70 Å

Le deuxième type d'échantillons deltas-dopage est un échantillon bi-deltas-dopage constitué de deux couches très fines de bore dans le silicium, séparées d'une distance nominale de 70 Å. L'analyse de cet échantillon a été menée à 5,5 keV/O₂⁺, 42,4° d'incidence avec soufflage d'oxygène.

La Figure 8 montre les résultats de la déconvolution en échelle linéaire et en échelle logarithmique. La reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué de la DRF est aussi présentée sur cette figure. Dans cette section nous avons choisi de placer les pics déconvolués à une position qui n'est pas la position réelle probable des deltas - dopage. Les pics sont placés comme si les deltas - dopage qui engendrent la DRF étaient positionnés au maximum de la DRF car cela permet une représentation plus claire des résultats de déconvolution. A noter

que la position du profil déconvolué est totalement indépendante de sa forme. Pour replacer les pics au bon endroit, il suffit de décaler les profils de la distance qui sépare le maximum de la DRF à sa valeur moyenne. Brice [1] a trouvé que le décalage est égale à environ 13 \AA à $5,5 \text{ keV/O}_2^+$.

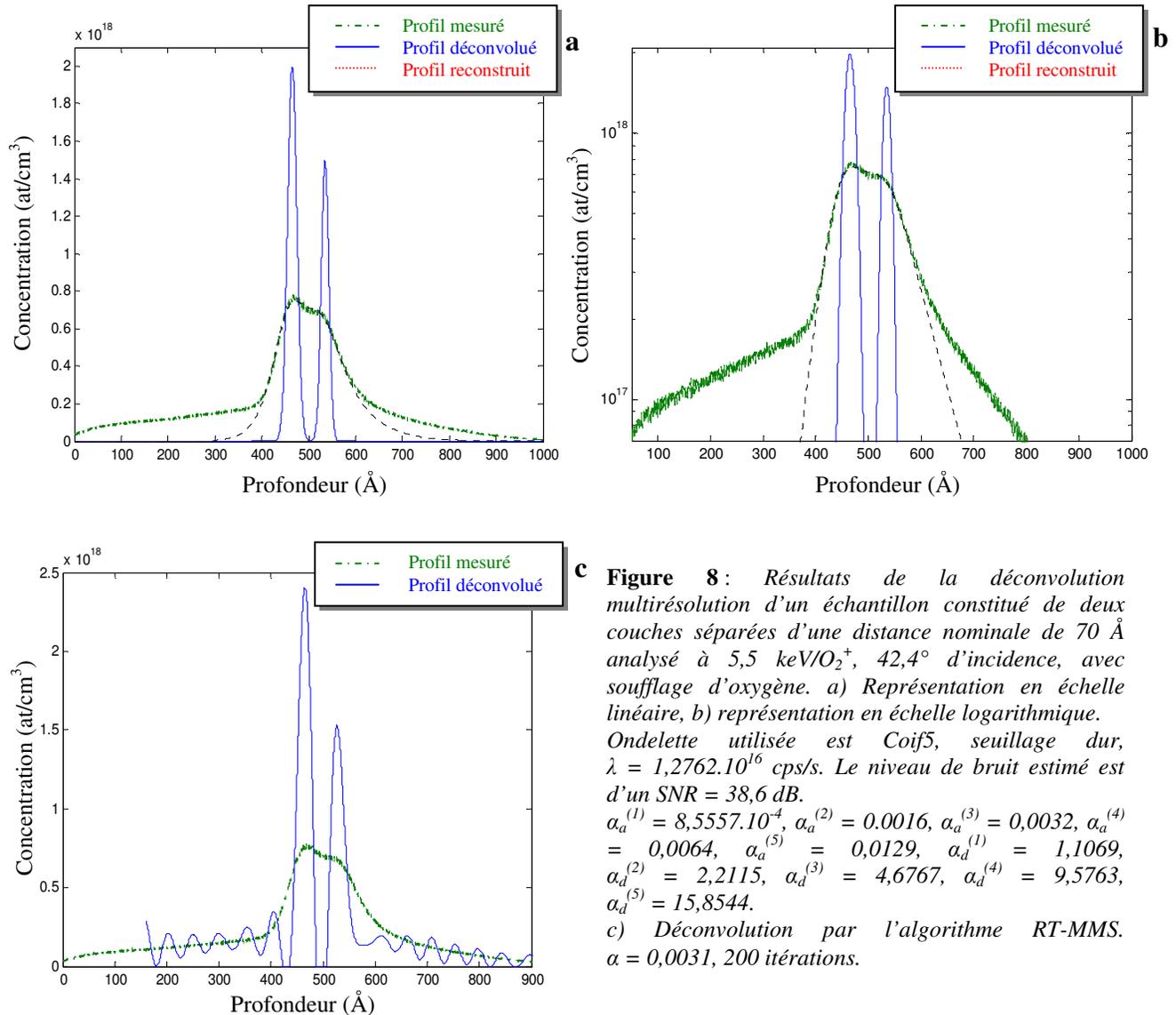


Figure 8 : Résultats de la déconvolution multirésolution d'un échantillon constitué de deux couches séparées d'une distance nominale de 70 \AA analysé à $5,5 \text{ keV/O}_2^+$, $42,4^\circ$ d'incidence, avec soufflage d'oxygène. a) Représentation en échelle linéaire, b) représentation en échelle logarithmique. Ondelette utilisée est *Coif5*, seuillage dur, $\lambda = 1,2762 \cdot 10^{16} \text{ cps/s}$. Le niveau de bruit estimé est d'un $\text{SNR} = 38,6 \text{ dB}$.
 $\alpha_a^{(1)} = 8,5557 \cdot 10^{-4}$, $\alpha_a^{(2)} = 0,0016$, $\alpha_a^{(3)} = 0,0032$, $\alpha_a^{(4)} = 0,0064$, $\alpha_a^{(5)} = 0,0129$, $\alpha_d^{(1)} = 1,1069$, $\alpha_d^{(2)} = 2,2115$, $\alpha_d^{(3)} = 4,6767$, $\alpha_d^{(4)} = 9,5763$, $\alpha_d^{(5)} = 15,8544$.
 c) Déconvolution par l'algorithme RT-MMS. $\alpha = 0,0031$, 200 itérations.

Après la déconvolution multirésolution (Figures 8-a et 8-b), on peut cerner et apprécier le gain en séparation obtenu : les pics sont totalement séparés alors que la mesure donne un contraste très faible. Les largeurs à mi-hauteur du premier et deuxième pic déconvolués sont respectivement $23,40 \text{ \AA}$ et $18,60 \text{ \AA}$, alors que dans le profil mesuré, les pics sont largement superposés (on ne distingue pas de minimum entre eux). La distance séparant les maxima des pics est de $70,10 \text{ \AA}$, cette valeur est très proche de la distance attendue qui est 70 \AA . Cette valeur est loin de la limite ultime de la résolution obtenue en simulation qui est 55 \AA (voir § 3.4. du chapitre 5), donc cet algorithme dissocie les pics facilement. La déconvolution restaure la hauteur des pics qui passent environ de $7,858 \cdot 10^{17} \text{ at/cm}^3$ à $1,995 \cdot 10^{18} \text{ at/cm}^3$ pour le premier pic et de $6,96 \cdot 10^{17} \text{ at/cm}^3$ à $1,496 \cdot 10^{18} \text{ at/cm}^3$ pour le second, ce qui donne des gains en maximums

des pics de 2,85 pour le premier pic et de 2,14 pour le deuxième. Le rapport des hauteurs des pics est donc également corrigé et passe de 1,12 à 1,33. En plus, les pics déconvolués sont symétriques, ce qui n'est pas non plus une information connue à l'avance. L'information selon laquelle les deux pics ne possèdent pas la même intensité n'est également pas connue à l'avance. Le profil déconvolué, lui, ne laisse aucun doute à ce sujet, d'autant plus que les pics sont totalement séparés après déconvolution. Par ailleurs nous avons vu dans le cas des simulations de déconvolution des deltas - dopage séparés d'une faible distance (voir § 3.4. du chapitre 5), que deux profils possédant la même intensité sont restitués de manière que leurs maximums apparaissent à la même hauteur, ce qui n'est pas le cas ici. La reconstruction de sa part est très excellente dans les hauts niveaux du signal où le profil reconstruit est complètement superposé au profil mesuré.

Quant à la déconvolution par l'algorithme RT-MMS (voir Figure 8-c) est aussi parfaite en matière de séparation des deux pics : les deux pics sont totalement dissociés, les largeurs des pics déconvolués sont supérieures que celles obtenues par déconvolution multirésolution. En effet, les largeurs à mi-hauteur des premier et deuxième pics déconvolués sont respectivement de 28,60 Å et 30 Å. Les hauteurs des pics déconvolués sont de $2,402 \cdot 10^{18}$ at/cm³ pour le premier pic et de $1,532 \cdot 10^{18}$ at/cm³ pour le second, ce qui donne des gains de 2,59 pour le premier pic et de 2,20 pour le second. En basant sur l'étude menée dans § 3.2. du chapitre 5 (la déconvolution d'un créneau de largeur 40 Å) on peut déduire que les hauteurs obtenues par cet algorithme peuvent ne pas être exactes, et c'est possible que la concentration obtenue est surestimée. Là encore l'absence des informations sur les concentrations des pics laisse des doutes sur ces résultats. De part et d'autre du profil déconvolué, on observe d'importants artefacts dont l'origine, à ce stade est bien connu, résiderait dans les limites de cet algorithme de restaurer les informations présentes dans les hautes fréquences. Ces oscillations ne peuvent pas être éliminées ni par la contrainte de positivité ni par la contrainte de support. Si nous basons uniquement sur les résultats de cet algorithme, une grande question se posera si ces artefacts font partie du signal original ou non. Fort heureusement que la réponse à cette question se trouve dans le résultat de la déconvolution multirésolution où ces artefacts sont complètement absents dont l'origine est compensée par les paramètres de régularisation locaux.

3. DECONVOLUTION DES CRENEAUX DE CONCENTRATION

3.1. Créneau de concentration de largeur 120 Å

Nous disposons d'un échantillon contenant un créneau d'une couche de bore dans du silicium d'environ 120 Å d'épaisseur, enterré à une profondeur d'environ 300 Å. La concentration de ce créneau est $3 \cdot 10^{19}$ at/cm³. La mesure est effectuée à 5,5 keV/O₂⁺, 42,4° d'incidence sans soufflage d'oxygène.

L'observation principale à propos du profil mesuré concerne la forme du plateau supérieur du créneau. On voit clairement que cette partie supérieure n'est pas plane et présente un penchant ascendant qui révèle un gradient de concentration positif. On peut penser qu'il s'agit d'une caractéristique réelle de l'échantillon et est dû aux défauts de croissance de la couche. Pour confirmer cette supposition nous avons deux solutions ; la première c'est de mesurer l'échantillon à différentes énergies notamment en basses énergies où les altérations de la mesure sont minimales. La deuxième solution est de déconvoluer cet échantillon par plusieurs algorithmes car nous avons vu dans les simulations qu'une des propriétés de la déconvolution est de restaurer la forme réelle des créneaux c'est-à-dire leur symétrie et leur hauteur. C'est cette solution que nous avons optée

dès le début de ce travail qui est la déconvolution par la déconvolution multirésolution et par l'algorithme RT-MMS ainsi la comparaison entre les performances des deux algorithmes.

La Figure 9 montre, en échelle linéaire et en échelle logarithmique, les résultats de la déconvolution multirésolution comparés avec ceux de l'algorithme RT-MMS. La reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué est aussi présentée dans les résultats de la déconvolution multirésolution.

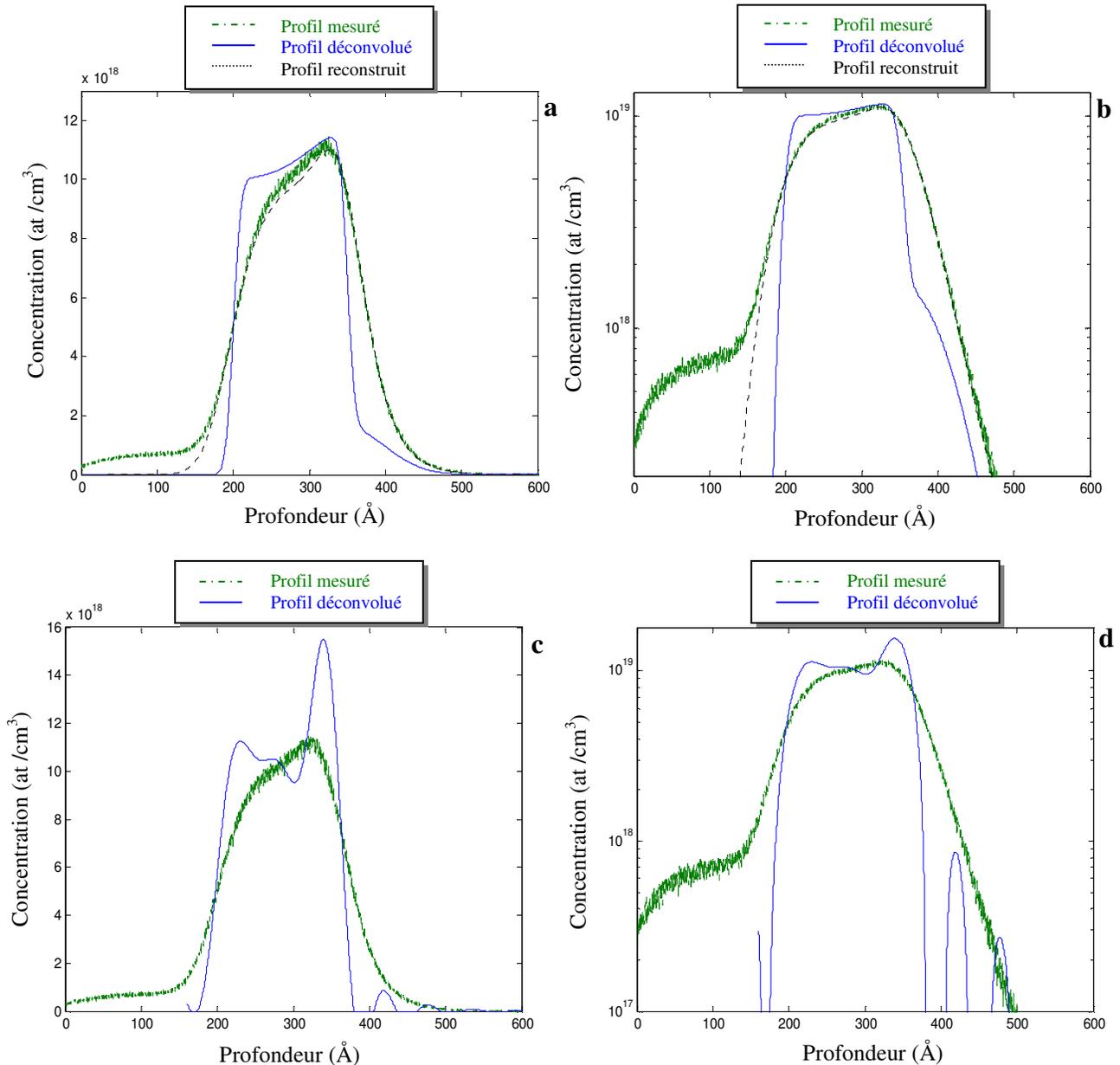


Figure 9 : - Résultats de la déconvolution multirésolution d'un créneau de concentration de bore dans le silicium de largeur 120 Å (5,5 keV/O₂⁺, 42,4° d'incidence). L'ondelette utilisée est Sym4, seuillage doux, $\lambda = 3,9166 \cdot 10^{16}$ at/cm³ : a) représentation en échelle linéaire, b) représentation en échelle logarithmique. Le niveau de bruit estimé, en utilisant l'équation 82 du chapitre 4, est d'un SNR = 39,15 dB.

$\alpha_a^{(1)} = 6,6183 \cdot 10^{-4}$, $\alpha_a^{(2)} = 0,0013$, $\alpha_a^{(3)} = 0,0026$, $\alpha_a^{(4)} = 0,0051$, $\alpha_a^{(5)} = 0,0103$,
 $\alpha_d^{(1)} = 1,1032$, $\alpha_d^{(2)} = 2,3983$, $\alpha_d^{(3)} = 4,2174$, $\alpha_d^{(4)} = 8,4124$, $\alpha_d^{(5)} = 17,6793$.

- Résultats de la déconvolution par l'algorithme RT-MMS : c) représentation en échelle linéaire, d) représentation en échelle logarithmique. $\alpha = 2,3056 \cdot 10^{-4}$, 400 itérations.

Il est clair que la déconvolution multirésolution a apporté une nette amélioration du profil mesuré. La forme du profil déconvolué est plus proche d'un créneau alors que celle du profil mesuré ne l'est pas. La présence du penchant de concentration rend caduque la caractérisation des profils déconvolués par leurs largeurs à mi-hauteur et peut conduire à des fausses estimations. Même si on caractérise la largeur du profil à partir du support du créneau déconvolué on est gêné par le gonflement ou l'étalement de sa base. Alors un compromis doit se faire : comme les flans du profil déconvolué sont presque abrupts, on prend la moyenne entre le maximum et le minimum du penchant puis on mesure la largeur à mi-hauteur. Par ce procédé, la largeur du créneau déconvolué obtenue est de 153,1 Å, cette valeur est relativement loin de la largeur attendue qui est 120 Å. Cependant, si on prend en compte la largeur du profil mesuré qui est environ 167,4 Å, on constate que la déconvolution a apporté un bon gain en résolution.

On peut penser que l'étalement de la base est dû à une perte d'une certaine dose lors de l'analyse, ou bien à un déplacement des atomes du bore, par exemple par diffusion, vers le haut du créneau à cause du procédé de croissance de la couche, donnant ainsi ce penchant de concentration. Dans toutes les situations la déconvolution multirésolution nous a aidé à trouver une explication physique à ce gradient positif de concentration.

On peut considérer que la reconstruction du profil mesuré est très bonne dans les hauts niveaux du signal, sauf dans la pente du penchant où le profil reconstruit n'est pas superposé au profil mesuré.

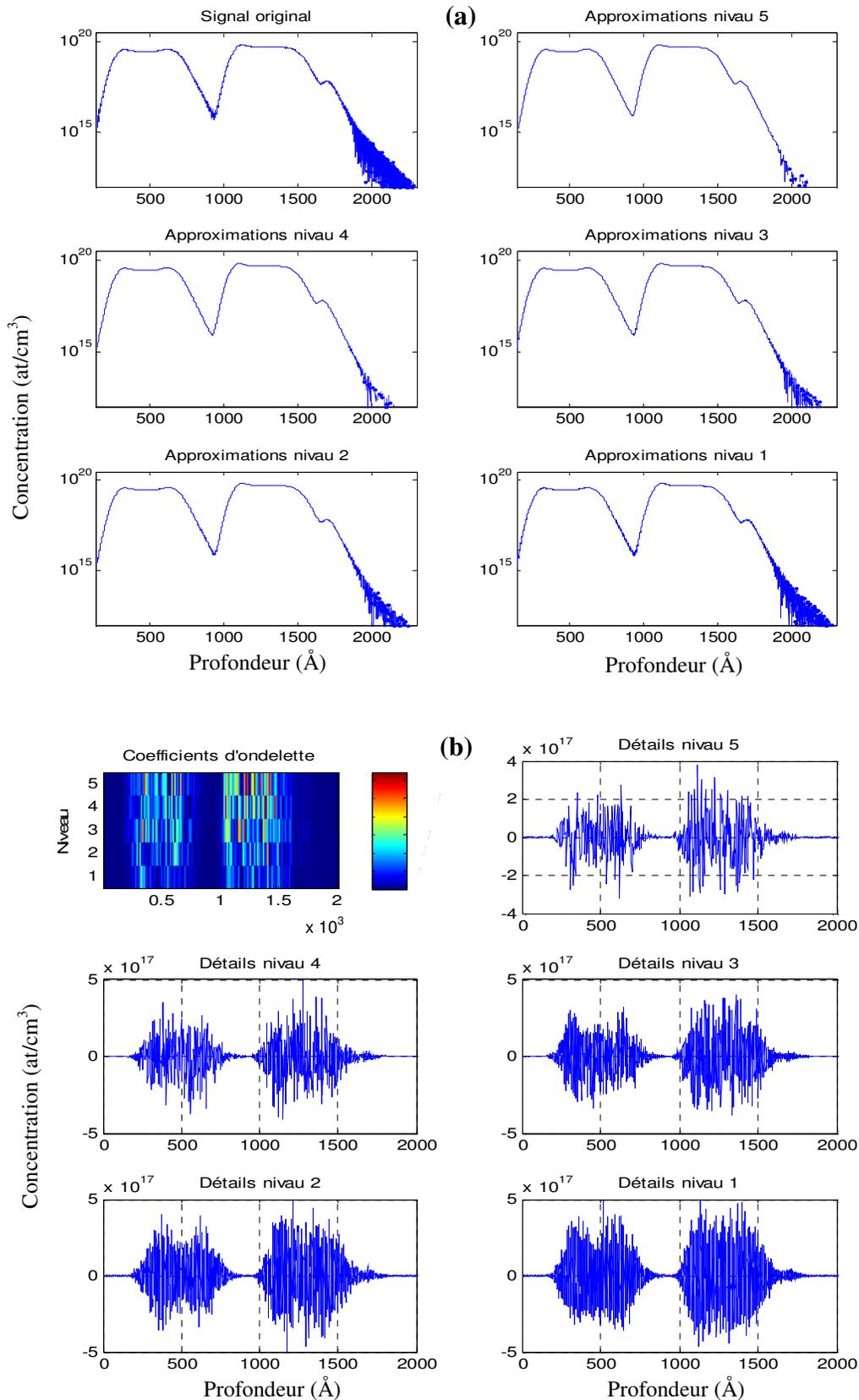
La déconvolution par l'algorithme RT-MMS (voir Figures 9-c et 9-d) confirme que le gradient de concentration positif observé sur le plateau du profil mesuré n'est pas engendré par l'analyse mais c'est une caractéristique intrinsèque de l'échantillon. Ce ci est justifié par le grand pic qui apparaît sur le maximum du penchant. En basant uniquement sur ce résultat on ne peut pas confirmer si ce pic est engendré par le traitement numérique ou bien il est propre à l'échantillon, surtout que d'après les résultats de la simulation (§ 3.2., chapitre 5) cet algorithme conduit toujours à la naissance des oscillations sur le plateau des créneaux. D'une manière globale on peut considérer que les résultats de cet algorithme sont satisfaisants dans la mesure où la forme du créneau est relativement récupérée (très claire en échelle logarithmique). La largeur du créneau déconvolué mesurée sur son support vaut 180,3 Å qui est tout à fait loin de la largeur attendue du créneau.

Comme les autres échantillons déconvolués précédemment, cet algorithme est handicapé par la présence des artefacts dont la source est bien évidemment le bruit. Bien que cet échantillon nous ait montré que la source des oscillations n'est pas toujours les composantes hautes fréquences du signal qui ne sont pas compensées, et ait révélé l'importance de faire les deux déconvolutions pour trouver (ou confirmer) des explications physiques des phénomènes.

3.2. Deux créneaux de concentration de largeur 400 Å

L'échantillon suivant est constitué de deux créneaux de concentration successifs assez, épais (environ 400 Å de large pour chacun) de bore dans une matrice de silicium. Les concentrations respectives du premier et deuxième créneau sont 3.10^{19} at/cm³ et 5.10^{19} at/cm³. La distance nominale qui sépare les deux couches est de 200 Å. Cet échantillon a été analysé à 6,5 keV/O₂⁺, 40,6° d'incidence, sans soufflage d'oxygène. Avant d'aborder les résultats de la déconvolution de cet échantillon, nous allons tout d'abord voir la décomposition de ce type d'échantillons sur une base d'ondelette.

La Figure 10 montre la décomposition, ainsi que le seuillage, sur une base d'ondelette de cet échantillon. L'ondelette utilisée est à support compact presque symétrique de la famille Symlet qui est Sym4.



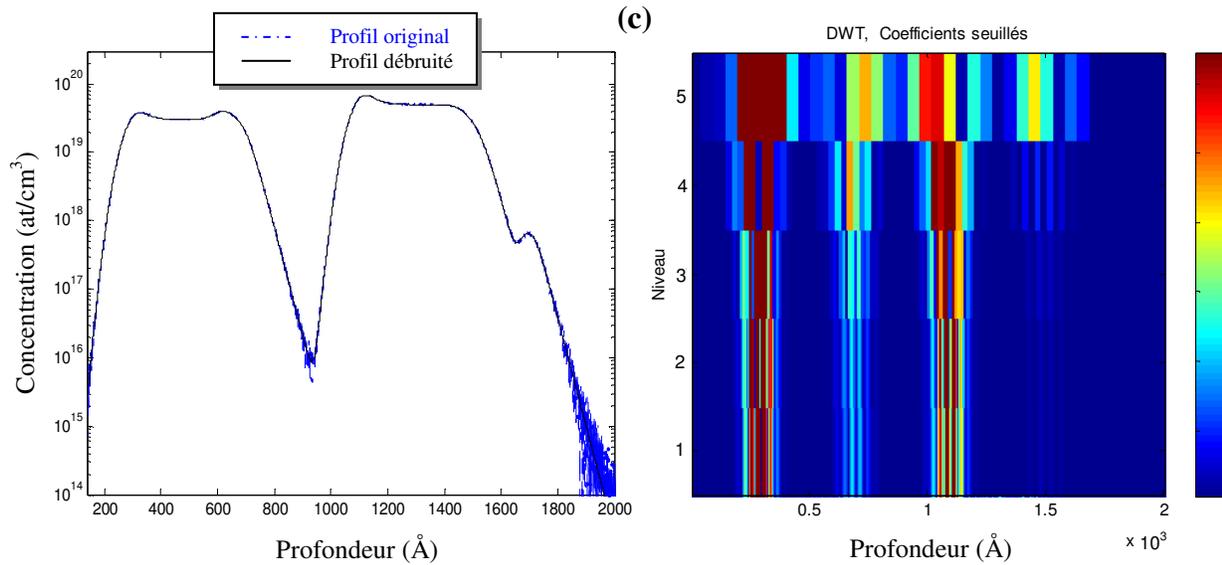


Figure 10 : Décomposition d'un échantillon constitué de deux crêneaux de concentration de bore dans le silicium analysé à $6,5 \text{ keV/O}_2^+$, $40,6^\circ$) sur une base d'ondelette « Sym4 », niveau de décomposition 5 : a) signal mesuré original avec les signaux d'approximation, b) signaux de détails avec les coefficients colorés d'ondelette, c) signal débruité superposé au signal original avec les coefficients seuillés.

Nous n'allons pas détailler l'interprétation de ces résultats déjà vue précédemment. Nous allons uniquement confirmer un point remarqué dans l'analyse en ondelette de l'échantillon MD4, c'est qu'il y a une différence remarquable entre les coefficients seuillés d'ondelette pour les profils réels et ceux pour les profils simulés. En effet, les coefficients d'ondelettes pour les profils réels sont présents dans tous les niveaux de décomposition (évidemment jusqu'à l'échelle choisie) d'une manière continue (voir Figures 10-c et 3-c). Alors que pour les échantillons simulés, ces coefficients sont présents uniquement dans les niveaux 5, 4 et 3 de décomposition (voir Figures 6-c, 11-c et 20-c du chapitre 5). Ce ci est expliqué par la richesse en détails des profils réels par rapport aux profils simulés. Même si on augmente d'une manière arbitraire le seuil de débruitage pour seuiller les détails aux niveaux 1 et 2, cette opération n'aura aucun sens physique et n'apporte pas un plus dans le résultat de déconvolution. Car, les détails présents dans les signaux et qu'on risque d'engendrer des anomalies seront compensés par les paramètres de régularisation locaux. C'est bien l'avantage de la déconvolution multirésolution.

Les résultats de la déconvolution multirésolution comparés avec ceux de l'algorithme RT-MMS sont illustrés dans la Figure 11. Dans cette section l'étude sera qualitative car la déconvolution des structures relativement large n'apporte pas des grands gains en résolution ou en amplitude. Bien que son effet soit remarquable sur des corrections minimales des profils.

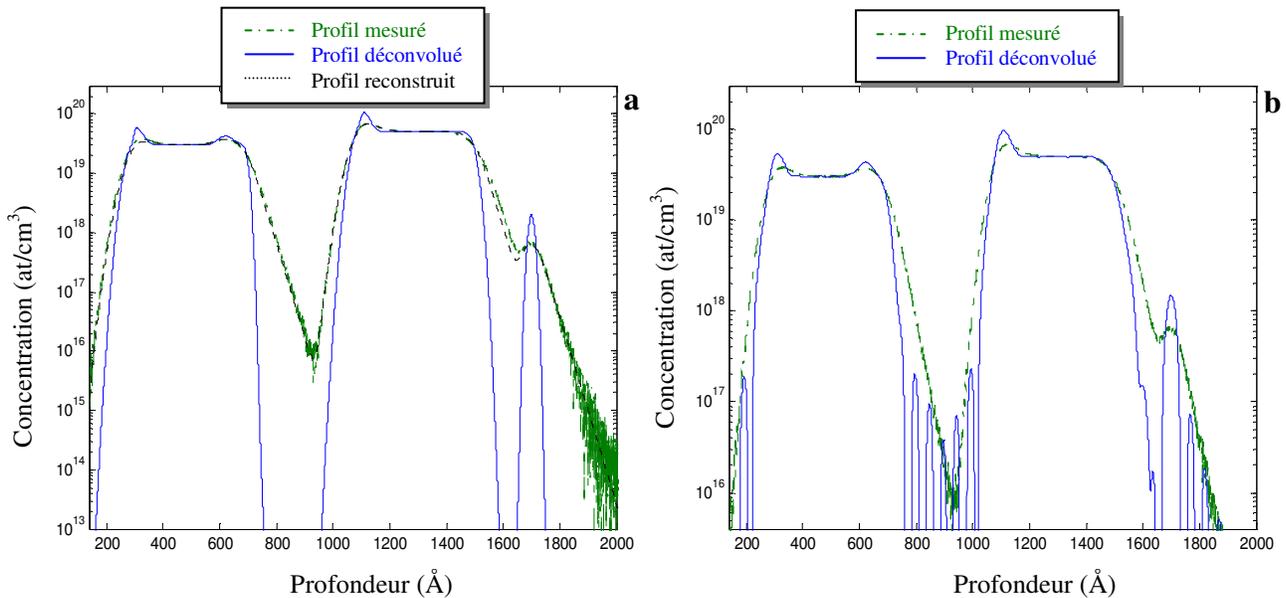


Figure 11 : a) Résultats de la déconvolution multirésolution de deux créneaux de concentration de bore dans le silicium de largeur d'environ 400 Å (6,5 keV/O₂⁺, 40,6° d'incidence). L'ondelette utilisée est Sym4, seuillage doux, $\lambda = 1,4647 \cdot 10^{16}$ at/cm³. Le niveau de bruit estimé, en utilisant l'équation 82 du chapitre 4, est d'un SNR = 33,21 dB.

$$\alpha_a^{(1)} = 4,3296 \cdot 10^{-5}, \alpha_a^{(2)} = 8,3632 \cdot 10^{-5}, \alpha_a^{(3)} = 1,9682 \cdot 10^{-4}, \alpha_a^{(4)} = 3,3334 \cdot 10^{-4}, \alpha_a^{(5)} = 6,3941 \cdot 10^{-4},$$

$$\alpha_d^{(1)} = 1,1041, \alpha_d^{(2)} = 23380, \alpha_d^{(3)} = 4,7574, \alpha_d^{(4)} = 9,1273, \alpha_d^{(5)} = 18,1054.$$

b) Résultats de la déconvolution par l'algorithme RT-MMS. $\alpha = 1,8530 \cdot 10^{-5}$, 50 itérations.

Il est clair, sur la Figure 11-a, que malgré la grande épaisseur des créneaux, la déconvolution multirésolution apporte des corrections non négligeables au profil, surtout au voisinage des pentes montantes et descendantes, corrigeant la raideur de ces pentes. L'amélioration apportée par la déconvolution protège également sur l'affinement de la séparation totale des deux créneaux. La forme supposée originale est donc restaurée de manière satisfaisante. Comme la simulation, la déconvolution n'apporte pas un grand gain sur les largeurs des structures relativement larges. Ainsi le gain obtenu pour le premier créneau est de 35 % alors que pour le deuxième est de 30 %. En plus, La déconvolution a permis de déceler la présence des bosses de concentration sur les plateaux des créneaux dont les hauteurs ne sont pas négligeables. Ces augmentations des doses sont probablement dues à des défauts de croissance des couches ou bien à une migration des atomes du bore vers les fronts des créneaux.

L'élément qui attire toute l'attention est la détection par la mesure d'une structure à part entière à la fin du deuxième créneau. La déconvolution a permis de mettre en relief cette structure et de déceler sa forme, qui est une gaussienne, ainsi de la placer à sa propre position (1700 Å). Nous n'avons pas d'information à l'avance sur cette structure si c'est un Dirac de concentration ou bien un pseud-Dirac constitués de quelques dizaines de plans atomiques ou bien carrément un profil implanté de forme gaussienne. Dans tous les cas de figures, la déconvolution a pu apporter une correction minime sur le profil et a pu faire sortir ce qui a été caché et nous réserve toujours des surprises.

La reconstruction de son côté est excellente sur la majorité du profil sauf dans la pente descendante du deuxième créneau où le profil reconstruit s'éloigne légèrement du profil mesuré.

La déconvolution par l'algorithme RT-MMS a aussi apporté une correction considérable sur le profil. Ce-ci est justifié par la correction des raideurs des pentes des créneaux et la détection de la présence d'une couche mince après le deuxième créneau. Néanmoins, comme le

cas précédent (d'un seul créneau), cette couche mince peut être considérée comme un artefact surtout si elle n'est pas décelée par la mesure. Rappelons que ce que nous avons vu dans la section précédente : pour identifier les artefacts générés au cours de la déconvolution si sont dus au processus de calcul ou bien sont des structures à part entière dans l'échantillon, nous avons deux solutions : soit analyser l'échantillon dans différentes conditions opératoires notamment en faibles énergies (qui n'est toujours pas évident), soit de déconvoluer le profil avec deux algorithmes ou plus. Dans cette dernière solution, les deux algorithmes ont confirmé la présence d'une couche mince après le deuxième créneau (à une position 1700Å). Sans les oscillations générées de part et d'autres des créneaux de concentration, la déconvolution par cet algorithme est considérée parfaite et qu'on pourrait qualifier de facile dans le sens que le profil déconvolué n'est pas très éloigné du profil réel, et réalisée avec un nombre faible d'itérations (environ 50 itérations, soit une vingtaine de minutes).

4. DECONVOLUTION DE TRIPLE MARCHES DE CONCENTRATION

Le dernier échantillon que nous disposons est constitué de trois couches de silicium dopées bore à différentes concentrations qui s'étendent entre 5.10^{19} at/cm³ et 5.10^{18} at/cm³ environ. L'analyse de cet échantillon a été menée à 9,5 keV/O₂⁺, 37,8° d'incidence, sans soufflage d'oxygène.

A noter que le profil mesuré est trop bruité d'un SNR de 23,8215. La déconvolution par l'algorithme RT-MMS avec un paramètre de régularisation obtenu de $7,1.10^{-3}$ conduit à un profil déconvolué trop oscillatoire dans la mesure qu'on ne peut pas distinguer les différentes couches. Sauf si on surestime le paramètre de régularisation à une valeur arbitraire entre 1 et 5 on obtient un profil peu oscillatoire. Mais cette opération de surestimation ne s'appuie sur aucun support mathématique ou physique. Pour cela nous avons préféré de ne pas présenter les résultats de déconvolution de cet algorithme.

Les profils mesuré, déconvolué et reconstruit de cet échantillon peuvent être trouvés sur la Figure 12.

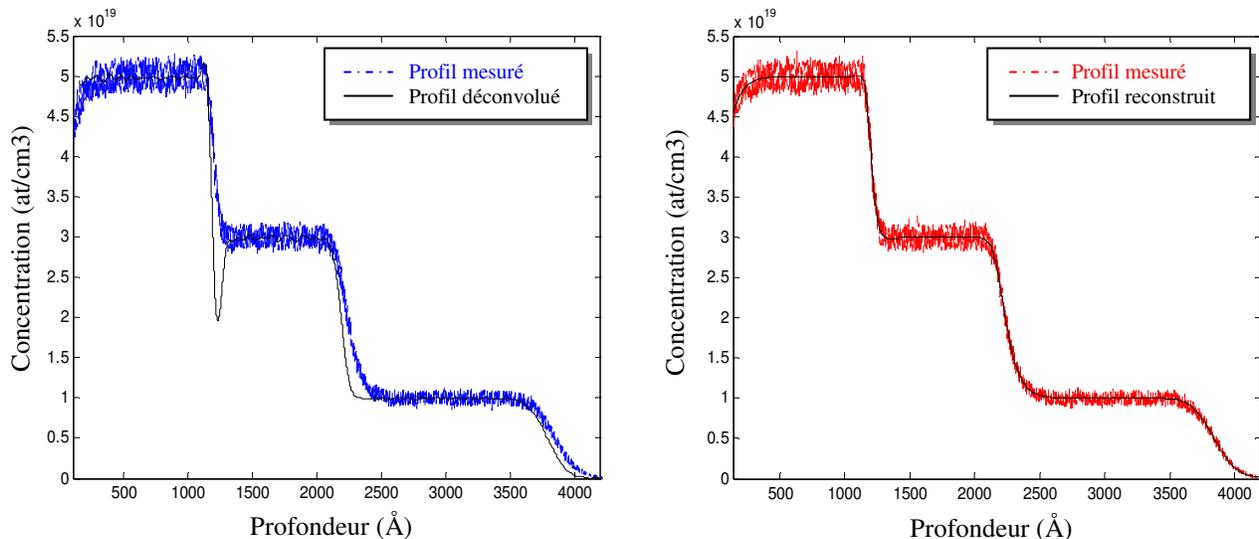


Figure 11 : - Résultats de la déconvolution multirésolution de triple marche de concentration de bore dans le silicium (9,5 keV/O₂⁺, 37,8° d'incidence). L'ondelette utilisée est *coif3*, seuillage dur, $\lambda = 4,1782.10^{18}$ at/cm³. Le niveau de bruit estimé, est d'un SNR = 23,8215 dB.

$\alpha_a^{(1)} = 0,0168$, $\alpha_a^{(2)} = 0,0319$, $\alpha_a^{(3)} = 0,0652$, $\alpha_a^{(4)} = 0,1312$, $\alpha_a^{(5)} = 0,2592$, $\alpha_d^{(1)} = 1,1085$, $\alpha_d^{(2)} = 2,1495$, $\alpha_d^{(3)} = 4,4360$, $\alpha_d^{(4)} = 8,9194$, $\alpha_d^{(5)} = 19,0710$.

Nous constatons, d'après ces résultats, que le profil déconvolué est globalement de la même forme que le profil mesuré. C'est tout à fait normal que la déconvolution n'apporte pas beaucoup de corrections sur les profils relativement larges. D'ailleurs les structures larges ne sont pas trop sensible voir invariants par la convolution, ceci est en accord avec les simulations menées dans le chapitre 5.

Malgré l'étendue des plateaux de cet échantillon en moyenne supérieurs à 1000 Å pour chacun, la déconvolution a conduit à une réduction minimale des pentes décroissantes des paliers de concentration. Le gain obtenu est minime, de l'ordre de 17 % uniquement. Entre le premier et le deuxième plateau, en profondeur 1200 Å, le profil déconvolué montre l'absence de bore sous forme d'un pic *néгатif*. On peut se poser une question sur l'origine de ce « trou » de concentration notamment qu'il n'est pas compensé par un pic positif qui reflète une certaine migration des atomes de bore. La seule explication qui nous reste c'est que la déconvolution a pu détecter un certain défaut de croissance du deuxième palier qui n'est pas tout à fait adjacent au premier, et de placer le deuxième palier à sa vraie place, c'est-à-dire une bonne séparation des couches déjà vue précédemment que la mesure les a rassemblées. Si cet échantillon a été mesuré à basse énergie, certainement on peut déceler la présence de ce trou de concentration. On note qu'encore une fois, la reconstruction du profil mesuré est parfaite sur la totalité de la dynamique du signal et sur l'étendue du profil, le profil reconstruit est complètement superposé au profil mesuré.

5. DECONVOLUTION SANS DRF. LA DECONVOLUTION PARTIELLE

Nous reproduisons ici dans son intégralité notre contribution dans ce domaine. Ce papier a fait l'objet d'une publication au Japanese journal of applied physics [3].

New Approach for Improvement of Secondary Ion Mass Spectrometry Profile Analysis

M'hamed Boulakroune^{1,2*}, Ahmed El Oualkadi³, Djamel Benatia², and Tahar Kezai³

¹ Telecom Laboratory, Electrical Engineering Department, Bt Stevin, Université Catholique de Louvain, Place de Levant 2, B-1348, Louvain-la-Neuve, Belgium

² Electronics Department, Faculty of Engineer sciences, Université colonel Hadj-Lakhdar de Batna, Batna (05000), Algeria

³ Microelectronics Laboratory, Electrical Engineering Department, Université Catholique de Louvain, Bt Maxwell, place de Levant 3, B-1348, Louvain-la-Neuve, Belgium

* E-mail address: Boulakroune@tele.ucl.ac.be

In this paper, we describe the improvement of secondary ion mass spectrometry (SIMS) profile analysis by a new approach based on partial deconvolution combined with scale-frequency shrinkage. The SIMS profiles are obtained by analysis of the delta layers of boron doped silicon in a silicon matrix, analyzed using Cameca-*Ims6f* at oblique incidence. These profiles can be approximated closely by exponential-like tail distributions with decay length, which characterizes the collisional mixing effect. The partial deconvolution removes the residual ion mixing effect. The contributions of high-frequency noise are removed by shrinkage to a great extent of the profiles. It is shown that this approach leads to a marked improvement in depth resolution without producing artifacts and aberrations caused principally by noise. Furthermore, it is shown that the asymmetry of the delta layers, caused by the collisional mixing effect, is completely removed, the decay length is decreased by a factor of 4 compared with that before deconvolution.

KEYWORDS: SIMS, multilayers, in-depth resolution, scale-frequency shrinkage, partial deconvolution

1. Introduction

Secondary ion mass spectrometry (SIMS) is widely used in the semiconductor industry, particularly for the development of advanced integrated circuits and devices. It is a versatile technique that can be applied to any problem requiring in-depth analysis ¹⁾.

Nowadays, device size is scaled down, which requires considerable effort on the improvement of SIMS apparatuses, in order to realize high sensitivity, high lateral resolution and in-depth resolution ^{1-2, 2)}. However, depth resolution is governed by several phenomena inherent to the action of the primary ion in the substrate and their incorporation in the matrix. The main physical mechanism responsible for the degradation of depth resolution is collisional mixing. This results from the collision cascades following the loss of the primary ion energy in the target, and greatly limits the accuracy of depth profile determinations at nanometer depth resolutions. This phenomenon cannot be completely removed, but it can be reduced by lowering the primary ion energies ³⁾. In addition to this physical phenomenon, noise is an instrumental parameter that cannot be eliminated by the improvement of operative conditions. Moreover, the development of more sophisticated instrumentation might enhance the skills of SIMS operators ⁴⁾. Fortunately, the experimental depth resolution, as well as the shape of the SIMS profile, can be improved by deconvolution. Nevertheless, recent years have seen the development of several deconvolution algorithms that show an improvement in depth resolution without taking into account noise effects ^{3-6, 2)}. Indeed, the consequence of noise in numerical processing is the generation of artifacts and oscillations that limit the accuracy of results and their interpretations. Moreover, none of these algorithms have been used widely because the calculations are typically complicated and time-consuming ¹⁾. These algorithms require specific and detailed knowledge of response functions from the measurements of delta-doped samples, which are often not available. The obtained results using almost of these algorithms show aberrations and negatives concentrations, which are not physically acceptable ^{1, 3, 5, 6)}.

In this paper, we propose a new deconvolution algorithm based on partial deconvolution ^{1, 5)} combined with an algorithm widely used in speech processing for noise compensation, which is called scale-frequency shrinkage ⁸⁾. Partial deconvolution is used to remove the collisional mixing effect. Shrinkage is used to remove artifacts and oscillations from the analyzed results to provide more accurate measurements of depth profiles. The case of multilayer boron-doped silicon, analyzed using Cameca-*Ims6f* at oblique incidence, is considered. The obtained results using this approach are presented and discussed.

2. Principle of Proposed Algorithm

The two principle mechanisms responsible for the broadening of the shape and depth resolution of SIMS profiles are collisional mixing and noise. Indeed, it is important to eliminate these phenomena to retrieve the shape and spatial resolution of SIMS profiles. To improve the quality of SIMS profiles, we propose a new algorithm based on scale-frequency shrinkage combined with partial deconvolution. This algorithm depends only on local depth information and does not require detailed knowledge of the entire profile (Fig. 1).

2.1 Scale-frequency shrinkage

In the signal processing theory, denoising is a major issue, which is widely reported in the literature^{8,9}. If the observed noisy signal is $y_n(z) = y(z) + n(z)$ (where y is the *perfect* signal and n is the noise added independently to the perfect signal) the main question is how to obtain the estimated $\hat{y}(z)$ of the perfect signal $y(z)$. In probabilistic terms, y and n are regarded as achievements of the random variables Y and N . According to the used model for these random variables, several denoising methods were proposed^{8,9,10,11}. In this paper, scale-frequency shrinkage has been used. This algorithm is largely used in signal wavelet transform⁸.

The soft shrinkage corresponds to the maximum a posteriori (MAP) estimation of y , with the assumption that N is a white-Gaussian noise, which is a type of noise in SIMS analysis. The estimation is carried out using soft shrinkage as follows:

$$\text{If } |y_n(z, f)| > \beta(f), \quad (1)$$

then,

$$\hat{y}(z, f) = \frac{y_n(z, f)}{|y_n(z, f)|} (|y_n(z, f) - \beta(f)|); \quad (2)$$

else, $\hat{y}(z, f) = 0$.

where, f is the frequency, z is the scale, and $B(f)$ is the threshold of shrinkage defined by

$$\beta(f) = \alpha \frac{\sigma_n^2(f)}{\sigma_y^2(f)}, \quad (3)$$

where α is a parameter that controls the amount of removed noise. σ_n and σ_y are, respectively, the standard deviation of the noise and the perfect signal. The estimation of $\sigma_n^2(f)$ and $\sigma_y^2(f)$ is carried out by estimating power spectral density, considering the value of SNR (signal to noise ratio) that gives the best result. By using this procedure, the noise can be smoothed out; thus, artifacts and oscillations resulting from deconvolution can be avoided.

2.2 Partial deconvolution

Yang *et al.*^{1,5} have identified the artificial tailing observed in SIMS profiles as primarily caused by the residual collisional mixing effect, characterized by an exponential decay of the peak concentration. The decay length λ_d generally depends on the tracer element and matrix, primary ion beam characteristics, and particularly impact ion energy (Fig. 2).

To remove the residual ion mixing effect, Yang *et al.* proposed an algorithm based on partial deconvolution. The SIMS response function $h(z-z')$ is the normalized response at any given depth (z) of a delta-doped layer at (z') depth, when the analysis process is linear and invariant. A real concentration $x(z)$ will result in a measured profile $y_n(z)$ defined by

$$y_n(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} x(z') h(z-z') dz' + n(z), \quad (4)$$

where $n(z)$ is the noise that is added independently to the perfect measured signal $y(z)$. After denoising, the estimation of the denoisy signal $\hat{y}(z)$ is expressed by

$$\hat{y}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} x(z') h(z-z') dz'. \quad (5)$$

The collisional mixing effect is an exponential decay function that is modeled by

$$\begin{cases} dec(z - z') = \frac{1}{\lambda_d} \exp\left(-\frac{z - z'}{\lambda_d}\right) & z > z'; \\ dec(z - z') = 0 & z < z'. \end{cases} \quad (6)$$

The general SIMS response function $h(z)$ (depth resolution function, DRF) can be expressed as a convolution of the collisional mixing function [$dec(z-z')$] with different convolution functions [$g(z-z')$];

$$h(z - z') = \int_{-\infty}^{+\infty} dec(\tau).g(z - z' - \tau)d\tau. \quad (7)$$

The differentiation of both sides of eq. (5) with respect to z , then substitution into eqs. (6) and (7) yields

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x(z').g(z - z')dz' = \hat{y}(z) + \lambda_d \frac{\partial \hat{y}(z)}{\partial z}. \quad (8)$$

Considering the approximation at the zeroth order (i.e., assuming $g(z)$ as a delta function that can be generalized in the next paragraph) then

$$x(z) \approx \hat{y}(z) + \lambda_d \frac{\partial \hat{y}(z)}{\partial z}. \quad (9)$$

From this relation, the deconvolved signal [$x(z)$] depends only on the measured signal [$\hat{y}(z)$] and its derivate multiplied by the exponential decay length. It does not require specific and detailed knowledge of DRF, which is often not available.

2.3 Reconstruction of SIMS profiles

To generalize and validate the proposed algorithm, it is important to reconstruct SIMS profiles by simulation. The simulation procedure is as follows: Let us consider y_1 and y_2 to be the two experimental measurements of profile x analyzed respectively at two different energies, E_1 and E_2 .

By definition,

$$\begin{aligned} \hat{y}_1 &= h(z, \lambda_{u1}, \sigma_{g1}, \lambda_{d1}) \otimes x(z); \\ \hat{y}_2 &= h(z, \lambda_{u2}, \sigma_{g2}, \lambda_{d2}) \otimes x(z). \end{aligned} \quad (10)$$

By substituting the two equations of eq. (10), we obtain

$$\hat{y}_2 = h(z, \lambda_{u2}, \sigma_{g2}, \lambda_{d2}) \otimes (\hat{y}_1 \ominus h(z, \lambda_{u1}, \sigma_{g1}, \lambda_{d1})), \quad (12)$$

where operators \otimes and \ominus are, respectively, the convolution and deconvolution operators. λ_u and σ_g , are, respectively, the rising exponential decay and standard deviation of the Gaussian function.

Since the partial deconvolution is used, then we have $\tilde{x} = x \otimes g(\lambda_{u1}, \sigma_{g1})$ rather than x . The function $g(\lambda_u, \sigma_g)$, which has been considered in subsection 2.2 as Dirac function [approximation at the zeroth order, eq. (7)], contains the Gaussian and exponential rising contributions. This function is the result of the convolution of a rising exponential function (of the parameter λ_u) with a Gaussian function (of parameter σ_g). The relation to be verified then is

$$\hat{y}_2 = h(z, \lambda_{u2}, \sigma_{g2}, \lambda_{d2}) \otimes (\tilde{x}(z) \ominus g(z, \lambda_{u1}, \sigma_{g1})); \quad (13)$$

then,

$$\hat{y}_2 = h(z, \sqrt{\sigma_{g2}^2 - \sigma_{g1}^2}, \lambda_{d2}) \otimes \tilde{x}(z) . \quad (14)$$

From the deconvolved profiles, this simulation procedure has been applied to reconstruct SIMS profiles analyzed at different energies.

3. Results and Discussion

Samples of boron doped in silicon are multilayers analyzed using Cameca-*Ims6f* magnetic sector instrument, corresponding to 3.5 keV / O⁺₂ primary beam (49.0° incidence) and 6.5 keV / O⁺₂ primary beam (40.3° incidence). The SIMS profiles are shown in Figs. 3 and 4. The total sputter depth was determined from the crater measurements.

The distorted tail shape observed in the boron profile is due to a significantly larger ion mixing effect. This is characterized by the decay length λ_d , which is the most important and sensitive parameter. It is equal to 30 Å for the profile analyzed at 3.5 keV (Fig. 3) and to 40.7 Å for the profile analyzed at 6.5 keV (Fig. 4). This parameter has been determined by fitting the exponential decay function to the decay tail. At high frequencies, the noise affects the low levels of signals [this appears clearly in the logarithmic scale of Figs. 3(b) and 4(b)].

By using the proposed algorithm, the results are quite satisfactory suggesting that this approach is indeed self-consistent. A clear improvement in the contrast is observed; the delta layers are more separated. The shape of the results is symmetrical for all layers, indicating that the exponential features caused by SIMS analysis are removed. The new values of λ_d are, respectively, 6.7 and 9 Å for the profiles corresponding to 3.5 (Fig. 3) and 6.5 keV (Fig. 4). These values give a gain approximately equal to 4.5. The in-depth resolution is characterized by the full width at half maximum (FWHM) of the deconvolved delta layers. The in-depth resolutions are 58.65 Å for the profile corresponding to 3.5 keV (Fig. 3) and 91.46 Å for the profile corresponding to 6.5 keV (Fig. 4) thus, the FWHMs of the measured deltas of each profile are, respectively, 118.03 and 174.98 Å, which give a gain of in-depth resolution of 2. The dynamic range is improved by a factor of 1.5 for both profiles [clearly observed in the linear scale of Figs. 3(a) and 4(a)]. The heights of the delta layers have been corrected so that all the layers have approximately the same height, as modified by SIMS analysis. Moreover, the obtained results show the conservation of the rising part and round form of the deconvolved peaks due to the absence of the correction of the rising exponential and the Gaussian part of the depth resolution function.

Indeed, partial deconvolution is sensitive to noise, because it is not regularized; the numerical derivation of the noisy data generates values potentially aberrant and the final result can contain negative values, oscillations and artifacts. For this reason, it was essential to use a procedure of denoising before any numerical processing. By using scale-frequency shrinkage, there are no artifacts and oscillations (which are the consequences of noise) at the end of the deconvolved peaks; fortunately the noise is removed before deconvolution. The estimated SNR values are equal to 40 and 35 dB, for the profiles measured at 3.5 and 6.5 keV, respectively. The accuracy of this algorithm depends on the precision of the SNR obtained from the measurement, and the accuracy and applicability of the fitting parameters of the depth resolution function.

On the other hand, the first-order moment of $h(z)$ is equal to $\lambda_d - \lambda_u \approx \lambda_d$ (λ_u is practically negligible in the DRF; it is approximately equal within 4 to 5 Å). Thus, a profile treated by using this procedure must be shifted towards the right-hand side^{1, 12)}, except if one allots to the phenomena a conservative character of the average position of the profiles. In this study, it is supposed, implicitly, that the depth resolution function is invariant; this procedure, like any other

procedure of deconvolution based on this assumption, can be applied only in the part of the profile that corresponds to the steady state of the analysis.

Indeed, this deconvolution is not complete because the true DRF is not reduced to a simple exponential. However, it is partial deconvolution in a sense that improves the result without introducing additional artifacts. Note that the failing exponential deformation of the profiles constitutes the most significant part of deformation as the primary ion energy increases. Moreover, a profile convolved by the true DRF, then partially deconvolved, is equivalent to the original profile convolved by the Gaussian and rising exponential functions.

Figures 5 and 6 (in logarithmic scale) show the reconstructed and the measured profiles. The reference profile (y_1) (measured at 3.5 keV) is partially deconvolved using eq. (9), and then the profile (measured at 6.5 keV) is reconstructed from the deconvolved reference using eq. (14) (Fig. 5). By using the same process and from the reference profile (y_2) (measured at 6.5 keV), the profile (y_1) (measured at 3.5 keV) is then reconstructed (Fig. 6).

A good agreement has been obtained between the reconstructed and measured profiles over most of the profile depths. The simulation and measured profiles are practically superimposed. The reconstructed profiles cannot be distinguished from the measured profiles.

4. Conclusions

The aim of using deconvolution in SIMS profiles is to retrieve the shape and to improve depth resolution broadened by the analysis. A more appropriate and flexible method is the restitution of profiles taking into account the main mechanisms governing the analysis. These mechanisms are collisional mixing and noise. By using the proposed algorithm, these phenomena are removed leading to smooth and accurate results. It is shown that the shape of all delta layers is partially retrieved in a very satisfactory manner. The exponential behavior, caused by the collisional mixing, has been completely removed and the heights of the delta layers have been corrected. The distance between peaks and their symmetry have been restored and in-depth resolution has been improved by a factor close to 2. Moreover, the proposed algorithm allows the removal of artifacts and oscillations at the end of the delta peaks, which are smoothed by denoising. By reconstructing the profiles, the obtained results are validated and they show good agreement between the simulation and measured profiles.

References

- [1] M. H. Yang, Y. Li, C. Hitzman, and R. Odom: Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **J4.16** (2001) 669.
- [2] Y. Kawashima, T. Ide, S. Aoyagi, and M. Kudo: Appl. Surf. Sci. **231-232** (2004) 800.
- [3] B. Fares, B. Gautier, J. C. Dupuy, G. Prudon, and P. Holliger: Appl. Surf. Sci. **252** (2006) 6478.
- [4] S. Hofmann: Thin Solid Films **398-399** (2001) 336.
- [5] M. H. Yang and G. G. Goodman: Thin Solid Films **508** (2006) 276.
- [6] L. Shao, J. Liu, C. Wang, K. B. Ma, J. Zhang, J. Chen, D. Tang, S. Patel and W-K. Chu: Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. **B219-220** (2004) 303.
- [7] A. T. Wu: Physica C **441** (2006) 79.
- [8] D. Donoho: IEEE Trans. Inf. Theory **41** (1995) 613.
- [9] J. -L. Gauvain and C. -H. Lee: IEEE Trans. Speech and Audio Process. **2** (1994) 2.
- [10] J. N. Flores and S. Young: IEEE Conf. Acoustic Speech and Signal Process. **832** (1994) 829.
- [11] S. Boll: IEEE Conf. Acoustic Speech and Signal Process. **28** (1994) 2.

[12] N. Baboux: Dr. Thesis, INSA of Lyon, France (2001).

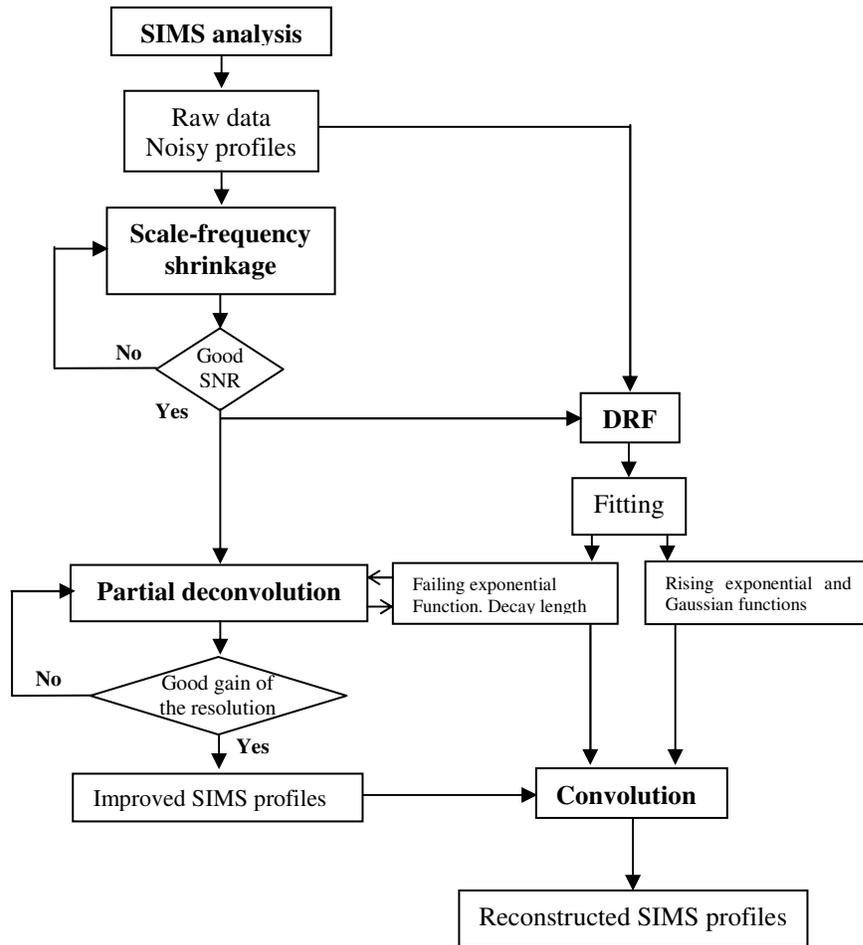


Fig. 1. Algorithm of proposed approach.

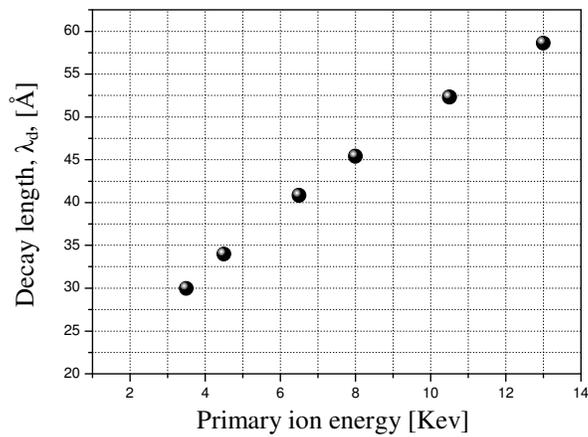


Fig. 2. Evolution of exponential decay (λ_d) versus primary ion energy.

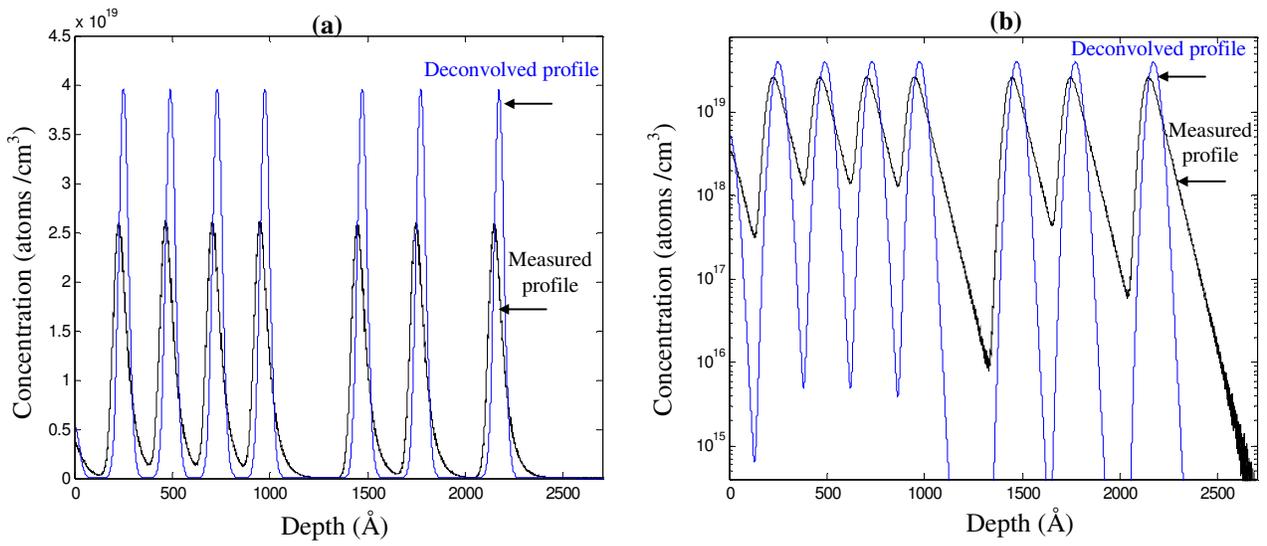


Fig. 3 : Deconvolution results of SIMS profile measured at 3.5 keV / O₂⁺ (49.0°): (a) linear scale and (b) logarithmic scale.

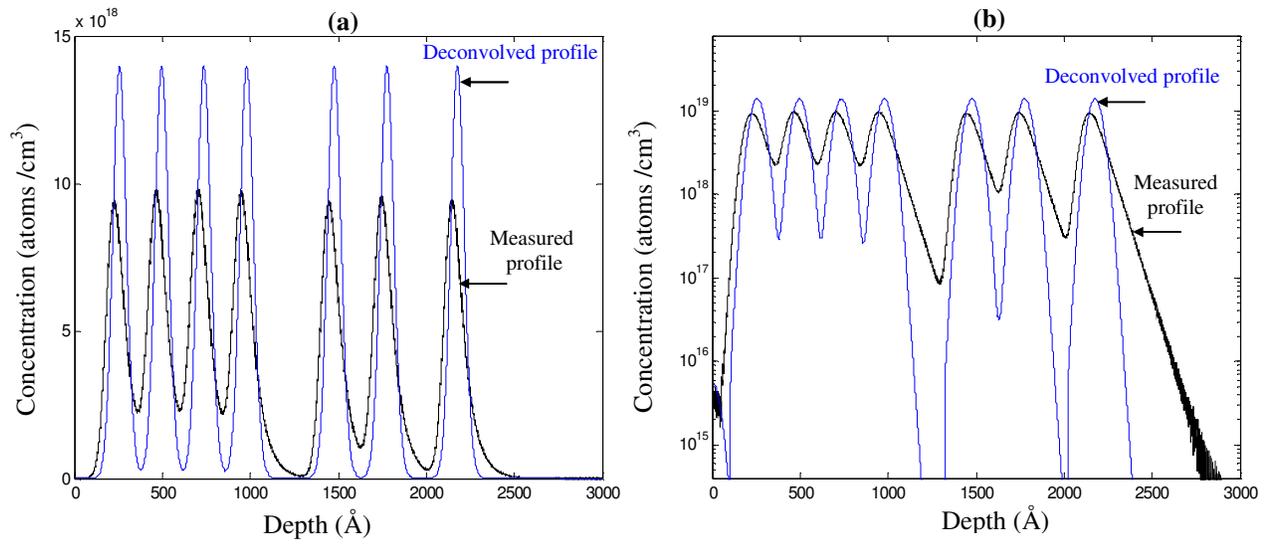


Fig. 4 . Deconvolution results of SIMS profile measured at 6.5 keV / O₂⁺ (40.3°): (a) linear scale and (b) logarithmic scale.

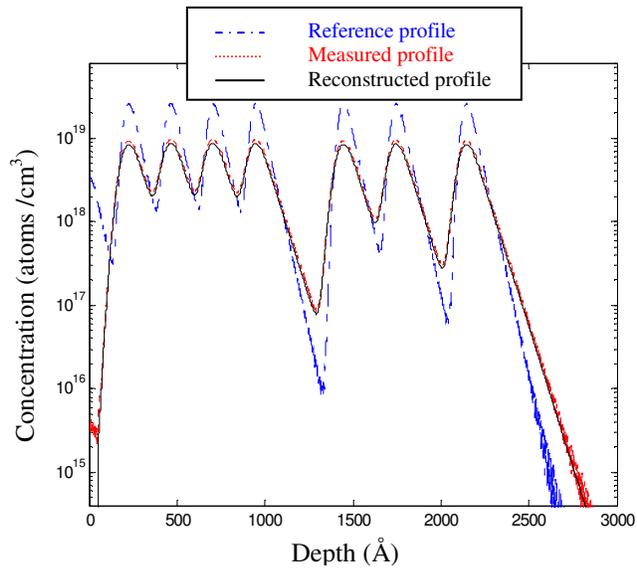


Fig. 5. Reconstruction of SIMS profile measured at 6.5 keV from reference profile measured at 3.5 keV. Plain line: simulated profile; dotted line: measured profile; noisy line: reference profile.

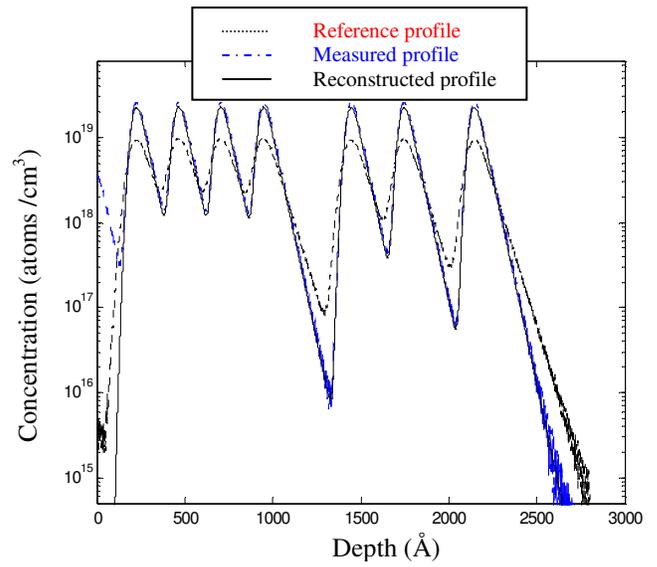


Fig. 6. Reconstruction of SIMS profile measured at 3.5 keV from reference profile measured at 6.5 keV. Noisy line: measured profile; plain line: reconstructed profile; dotted line: reference profile.

CONCLUSION

Ce chapitre a mis en lumière l'application de la déconvolution à des profils de bore dans du silicium analysés par SIMS. Plusieurs structures mesurées dans différentes conditions expérimentales ont été étudiées. Nous avons ainsi pu montrer le rôle déterminant de la déconvolution dans l'amélioration de la résolution en profondeur au-delà de ses limites expérimentales.

Nous avons débuté, ce chapitre, par la nécessité d'adapter localement le paramètre de régularisation dans les différentes bandes du signal. Dans cette optique, la mise en oeuvre d'une régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal débruité, par décomposition sur une base d'ondelette notée RT-MMSDO, a prouvé ses limites. En particulier, la génération d'oscillations *positives* qui ne sont pas compensées par l'application d'un paramètre de régularisation globale. Les performances de la déconvolution multirésolution sont comparées par la suite avec celles de l'algorithme RT-MMS.

Les premiers échantillons que nous avons appliqués la déconvolution sont des structures multi-deltas-dopage mesurés en basses et hautes énergies dans lesquels un gain en résolution de l'ordre de 5,33 sur les largeurs à mi-hauteur est obtenu. Le gain en maximum des pics obtenu est de l'ordre de 5,44. Pour un type particulier d'échantillon, la déconvolution multirésolution par zone a prouvé également ses capacités. La déconvolution d'un échantillon bi-deltas-dopage a aboutit à la séparation complète des δ -dopage et les replacé à leurs bonnes positions.

Nous avons ensuite déconvolué des créneaux de concentration dans lesquels la forme des profils déconvolués est elle aussi très modifiée, ce qui montre l'utilité de la déconvolution lorsqu'on veut disposer de la forme exacte du profil analysé. Dans ce sens, la déconvolution d'un créneau de concentration d'épaisseur 120 Å a permis d'estimer sa vraie largeur et de récupérer sa vraie forme qui est altérée par la mesure. La déconvolution de deux créneaux épais de concentration a permis également de remonter à leurs formes avant la mesure et d'estimer leurs vraies largeurs. En particulier, de trouver des explications à des phénomènes physiques à partir des profils déconvolués qui ne sont pas accessibles dans les profils mesurés.

Par la suite nous avons appliqué la déconvolution sur un profil trop bruité de type triple marches de concentration. Nous avons pu constater que malgré les grandes dimensions de cet échantillon, la déconvolution a pu corriger les pentes des différents paliers et de déceler les défauts de croissance des couches.

Une deuxième fois, la déconvolution multirésolution a prouvé ses capacités incomparables avec celles de l'algorithme RT-MMS. A part les excellents gains obtenus, la qualité des profils déconvolués nous permet une bonne interprétation des résultats.

Dans un second temps, nous avons étudié la déconvolution sans DRF dans laquelle nous avons proposé notre troisième algorithme. Dans cette étude nous avons montré que lorsque la DRF n'est pas disponible, la déconvolution partielle se prête bien à améliorer la résolution en profondeur par l'élimination de l'effet du mixage collisionnel. Surtout lorsqu'on sait a priori, à haute énergie, la majorité de l'altération engendrée par l'analyse est due à l'effet de ce phénomène. Cette méthode est limitée par la dérivation des données bruitées, ce qui donne un profil trop oscillatoire, d'où la nécessité d'un seuillage des données mesurés avant la mise en oeuvre de cette technique. Les résultats obtenus par cette technique ont montré un bon gain en résolution en profondeur et en maximum des pics. Bien que les performances de cette méthode restent incomparables avec celles de la déconvolution multirésolution.

Nous avons essayé de mesurer les échantillons multi-deltas-dopage à très basse énergie (de l'ordre de 0,5 keV) pour déceler l'influence d'autres phénomènes sur la résolution en profondeur. Notamment la rugosité induite au fond de cratère. Cette étude nous permet d'appliquer la déconvolution multirésolution avec une DRF variante en profondeur. Dans ces conditions, une calibration d'échelle est indispensable pour corriger le décalage engendré par la rugosité. Malheureusement, aux très basses énergies, dans l'analyseur ionique à secteur magnétique, l'angle d'incidence devient rasant et la focalisation de la sonde ionique s'avère très difficile. Ce qui a empêché de mettre à terme cette partie, mais ça sera une perspective pour valider la déconvolution multirésolution sur ce type d'analyse.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **Brice G.**, *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires. Mise au point d'une procédure de déconvolution et applications*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1997, 222 p.
- [2] **Mancina G.**, *Amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse par SIMS par déconvolution : algorithmes spécifiques et application aux couches dopées ultra-minces de la microélectronique silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2001, 184 p.
- [3] **Boulakroune M., Eloualkadi A., Benatia D. et Kezai T.**, *New approach for improvement of secondary ion mass spectrometry profile analysis*, Japanese Journal of applied physics, 2007, Vol. 46 n° 11, pp. 7441-7445
- [4] **R. Prost**, *Communication personnelle*, 2004, Laboratoire CREATIS, INSA de Lyon, France
- [5] **P. Bertrand**, *Communication personnelle*, 2007, Unité Physico-Chimie et de Physique des Matériaux (PCPM), Université catholique de Louvain, Belgique
- [6] **L. Venderdrop**, *Communication personnelle*, 2007, Laboratoire de traitement de signal et télécommunication, Université catholique de Louvain, Belgique
- [8] **A. El Oualkadi**, *Communication personnelle*, 2007, Laboratoire de microélectronique, Université catholique de Louvain, Belgique
- [9] **N. Wehbe**, *Communication personnelle*, 2007, Unité Physico-Chimie et de Physique des Matériaux (PCPM), Université Catholique de Louvain, Belgique

CONCLUSION GENERALE

Ce travail de thèse est consacré à l'étude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires du bore dans le silicium, ainsi que son amélioration par un traitement numérique post-érosion qui est la déconvolution.

Nous avons débuté ce travail par une présentation générale de l'analyse SIMS en mode dynamique. Nous avons tenté de mettre en relief les paramètres tant instrumentaux que physiques qui interviennent lors d'une analyse SIMS. A partir de la relation phénoménologique générale entre le profil initial et la mesure SIMS, nous avons mis en évidence les deux étapes qui devraient constituer la démarche complète de quantification d'une mesure à savoir la calibration en profondeur et la calibration en concentration. Ensuite, nous avons passé en revue les différents phénomènes et mécanismes qui interviennent dans la dégradation ou dans l'amélioration de la résolution en profondeur. Nous nous sommes intéressés en particulier au mixage collisionnel qui contrôle la résolution en profondeur lorsque les autres causes de dégradation sont maîtrisées. Nous nous sommes attachés également à la description de l'analyse en ions réactifs, et en particulier aux phénomènes de gonflement de la matrice sous l'effet de l'incorporation des ions primaires dans l'échantillon bombardé.

La fonction de résolution, qui est à la base de toute tentative de déconvolution, est déterminée expérimentalement à partir de la mesure des deltas-dopage de bore dans le silicium, réalisés par MBE. Ses propriétés et ses caractéristiques sont examinées par une forme analytique qui est utilisée pour rendre son utilisation plus souple et qui permet la déconvolution des profils expérimentaux. Le modèle de cette fonction choisi est composé de la convolution d'une gaussienne avec une double exponentielle. Cette forme semi-empirique a conduit à une modélisation aussi complète du mixage collisionnel et devient ainsi la réponse impulsionnelle du couple système de mesure- conditions expérimentales.

Nous avons procédé par la suite à une mise au point théorique sur les fondements de la déconvolution, à ce sujet plusieurs méthodes ont ainsi été présentées. Le problème de la restitution des profils dégradés par l'analyse SIMS fait partie de la famille nombreuse des problèmes mal posés pour lesquels la solution de l'équation de convolution bruitée n'est ni stable, ni unique. La plupart des méthodes de déconvolution conduisent à la génération d'oscillations ou d'artefacts dans les profils déconvolués. Ces oscillations sont directement liées à la quantité de bruit, une partie de l'information en particulier dans les hautes fréquences est masquée par ce bruit et ce manque d'informations est compensé par la génération d'artefacts. Les différentes approches proposées, qui s'appuient sur la régularisation quadratique de Tikhonov-Miller avec une résolution itérative des équations normales, ont prouvé leurs limites face au bruit dans l'analyse SIMS. Après avoir essayé une de ces méthodes qui intègre un modèle numérique de la solution issu d'une déconvolution précédente dans un processus itératif régularisé (noté RT-MMS), ainsi déceler ses performances et ses limites, nous avons définitivement choisi d'utiliser la déconvolution multirésolution par décomposition sur une base d'ondelette. Un seuillage des coefficients d'ondelette du signal, en fonction du niveau de bruit dans les données mesurées, est introduit de façon à accroître la qualité du profil déconvolué. En effet, le paramètre de régularisation s'applique donc d'une manière locale à chaque niveau de décomposition dans

chaque bande fréquentielle du signal, permettant ainsi de compenser les composantes hautes fréquences entachées au bruit.

Nous avons par la suite procédé à la mise en œuvre de la déconvolution multirésolution sur des profils simulés susceptibles d'être effectivement rencontrés lors d'une analyse SIMS, et ainsi de cerner ses performances en matière de restitution des largeurs des structures, de la séparation de deux couches fines très proches, la dynamique du signal, pentes abruptes des interfaces, etc. Dans cette optique, la décomposition des signaux sur une base d'ondelette nous a permis de voir l'évolution des approximations et des détails en fonction du niveau de bruit. L'étude de la séparation des δ -dopage nous a permis de déceler l'influence du bruit non seulement sur la qualité des profils déconvolués mais sur la résolution en profondeur. Une étude quantifiée de la déconvolution d'un pseudo-dirac a été dégagée par la suite.

Après avoir prouvé les capacités de la déconvolution multirésolution sur des profils simulés, nous avons appliqué la déconvolution à des profils SIMS expérimentaux où beaucoup de paramètres entrent en jeu.

La structure la plus difficile à déconvoluer est celle qui est constituée des couches ultrafines ou des deltas-dopage. Pour mettre à l'épreuve la déconvolution multirésolution, nous avons procédé à la déconvolution des deltas-dopage de bore dans le silicium présents dans quelques échantillons. Le gain en résolution, mesuré sur les largeurs à mi-hauteur, atteint est de l'ordre de 5,33. Avec les profils SIMS simulés des pseudos-dirac qui ne sont pas assez fins que les deltas-dopage réels, le gain obtenu est de 4,54. Cette légère différence reflète la capacité de la déconvolution multirésolution de récupérer les vraies largeurs des structures réelles ultrafines. Ce qui place la déconvolution multirésolution des deltas-dopage au tout premier plan des performances de l'analyse SIMS en matière de résolution en profondeur.

Egalement, dans ce type d'échantillons nous avons procédé à la séparation complète de deux couches séparés de 70 Å. La simulation montre par ailleurs que deux deltas-dopage initialement séparés de 55 Å à 5,5 keV/O₂⁺ pour un bruit d'un SNR = 35 dB, peuvent être découplés complètement et d'obtenir leur détection pour une distance initiale de 20 Å pour le même niveau de bruit.

Nous avons procédé par la suite à la déconvolution des créneaux de concentration et des marches de concentration. Dans la première catégorie, les pentes exponentielles ayant pour origine le mixage collisionnel sont pratiquement supprimées, permettant ainsi de récupérer les vraies largeurs des créneaux. La déconvolution des marches de concentration a abouti à la correction des pentes des paliers malgré les grandes dimensions de la structure. Dans tous les cas de figures, il apparaît que la déconvolution apporte non seulement des informations fiables sur les structures analysées mais de nous permettre aussi d'identifier les défauts de croissance des couches et de déceler la présence des structures cachées par la mesure. Donc une meilleure interprétation des analyses.

Les performances de la déconvolution multirésolution en simulation et en mesures expérimentales ont été comparées avec celles de l'algorithme RT-MMS. Les résultats obtenus par ce dernier algorithme ont montré la forte dépendance de la solution obtenue de la qualité de mesure, notamment de la quantité de bruit présente dans le profil. En effet, les profils déconvolués sont entachés des oscillations dont la conséquence est la limitation de résolution en

profondeur et de la qualité de la solution. En particulier, les composantes négatives de ces oscillations ne sont plus tolérées en analyse des concentrations par SIMS. L'application des contraintes dures, notamment la contrainte de positivité a une forte action sur les composantes négatives du signal, alors qu'elle n'aura aucune influence sur les oscillations générées au niveau du plateau des crêneaux de concentration ou bien sur les composantes positives des oscillations rencontrées lors de la déconvolution de l'échantillon bi-deltas-dopage. L'application de la contrainte d'amplitude ou de support risque de tronquer le signal là où il est censé d'être présent dans les zones tronquées. Surestimer le paramètre de régularisation conduit à minimiser ces oscillations sans les éliminer complètement quelle que soit la valeur attribuée à ce paramètre. Donc cette surestimation du paramètre de régularisation ou l'application des contraintes dures ne font que projeter la solution dans un ensemble convexe pour qu'elle soit positive sans s'assurer qu'elle soit exacte. Pour cette raison nous jugeons que ces deux opérations soient purement arbitraires ! Les exemples étudiés illustrent que la déconvolution par cet algorithme doit être subordonnée à une analyse de très bonne qualité : bruit aussi faible que possible, paramètres instrumentaux constants, etc. Ces conditions en analyse SIMS ne sont guère garanties.

Enfin, nous avons mis en évidence la possibilité d'employer avec succès une technique de déconvolution sans la fonction de résolution, dite déconvolution partielle. Lorsque la fonction de résolution en profondeur n'est pas directement accessible par la mesure d'un delta-dopage. La mise en œuvre de cette technique sur des échantillons multi-deltas-dopage a montré une nette amélioration de la résolution en profondeur par l'élimination des pentes exponentielles des deltas-dopage qui sont dues principalement à l'effet du mixage collisionnel. Cette technique est partielle dans le sens qu'elle s'applique uniquement sur une partie du signal censé à contenir toutes les fluctuations causées par le mixage collisionnel. Cette technique est bien évidemment très sensible au bruit, car la dérivation des composantes bruitées conduit à la génération des oscillations de haut niveau. Pour cela un seuillage a priori des composantes du signal s'est imposé pour franchir cette limite. Malgré la qualité des profils déconvolués et le bon gain en résolution obtenu par cette méthode, ses performances restent incomparables avec celles obtenues de la déconvolution multirésolution.

Il est possible d'élargir cette étude lorsque d'autres mécanismes entrent en jeu, notamment le développement d'une rugosité sur le fond de cratère dans une mesure menée à très basse énergie. Dans ce cas, la réponse impulsionnelle du système ne sera pas constante mais variante en profondeur. On aura donc deux régimes permanents d'analyse ; régime permanent plan et régime permanent rugueux. Une calibration de l'échelle des profondeurs est donc nécessaire pour éliminer le décalage qui peut être engendré par le deuxième régime. Si tous les phénomènes, dans le régime rugueux, pouvaient être modélisés par des simples variations de la DRF, on pourrait appliquer la déconvolution multirésolution avec une DRF variante de la même façon que celle appliquée avec une DRF constante.

Il faut mettre à l'esprit que la déconvolution nous permet toujours d'aboutir à une solution intermédiaire entre la solution finale et les données mesurées quelque soit la robustesse de l'algorithme utilisé. Dans toutes les circonstances, nous pouvons conclure que la déconvolution s'avère un outil puissant et efficace qui nous permet de tirer le maximum des résultats expérimentaux, à condition de veiller à rester toujours dans le domaine de validité de la méthode et du caractère réel des solutions.

ANNEXE 1

ANALYSE QUANTITATIVE DES PROFILS EN PROFONDEUR

De part de la petitesse de la profondeur d'émission des espèces pulvérisées (1 à 3 monocouches), l'émission ionique permet de sonder pas à pas la composition en profondeur d'une espèce atomique donnée, d'un alliage, d'un solide dopé, etc. Donc pour une analyse idéale, le nombre des ions d'une espèce pulvérisée donnée est linéairement relié à sa concentration dans le solide. Pour cela l'analyse doit être indépendante de l'élément à analyser (pas de variation de la sensibilité avec les éléments), de la matrice à analyser (pas d'effet de matrice) et des espèces primaires. Dans ces conditions, la mesure du courant ionique secondaire pour chaque espèce conduit à une quantification absolue des profils. Malheureusement, pour l'analyste aucune de ces conditions n'est accomplie dans l'analyse SIMS. Une dépendance linéaire du signal avec la concentration est observée pour les éléments traces (dilués) [1-7], dans ce cas le pourcentage de ces éléments ne dépasse pas quelques %.

Plusieurs approches ont été développées pour la quantification des données SIMS. La plus ancienne (modèle LTE *Local Thermal Equilibrium*) se base sur l'aspect physicochimique du processus d'émission ionique secondaire et fournit des informations semi-quantitatives [4]. La deuxième approche utilise le facteur de calibration et nécessite des étalons dont les compositions sont similaires aux celles des structures d'étude [5]. La troisième approche se base sur l'extrapolation du taux d'ionisation à une vitesse infinie d'émission ionique secondaire [6]. Toutes ces approches nécessitent des conditions spécifiques et des applications très particulières. Dans ce travail nous proposons une méthode de quantification, que nous jugeons plus générale, basant sur le facteur de sensibilité relatif (RSF) [2, 9, 11].

1. Facteurs limitant la quantification des profils en profondeur

1.1. L'effet de matrice

L'un des problèmes majeurs dans l'analyse SIMS est la variation du taux d'ionisation et du rendement de pulvérisation avec le changement des matrices. En plus, le taux d'ionisation d'un même élément peut varier avec la variation de son environnement chimique ; c'est ce qu'on appelle *l'effet de matrice*. La présence de cet effet est un grand problème pour l'analyse quantitative des distributions des éléments à travers les multicouches, tandis que dans les couches homogènes, l'analyse quantitative peut s'avérer bonne et précise.

1.2. La pulvérisation préférentielle

Ce phénomène se trouve dans l'analyse des systèmes multiples dont les constituants ont des vitesses de pulvérisation différentes, la surface s'enrichit par les éléments qui ont les plus faibles vitesses de pulvérisation et s'appauvrit donc en celles qui se pulvérisent le plus rapidement. Ce phénomène est néfaste en régime transitoire limitant ainsi la quantification, à l'équilibre (régime permanent) les taux de pulvérisation apparents des différentes espèces sont égaux. Ce qui nécessite, pour l'interprétation des concentrations en surface, une autre technique d'analyse comme Rx, AES, etc.

1.3. Problème d'interférence

Le problème d'interférence se trouve dans l'analyse des éléments qui ont la même masse nominale. Ce phénomène est plus aigu dans l'analyse des éléments traces dont

l'intensité des pics est directement proportionnelle aux concentrations dans le solide. Cette linéarité est conservée sur quatre décades, le choix de la dilution permet de se placer dans une gamme convenable. Le problème d'interférence affecte surtout les limites de détection des éléments dans les matrices. Ce problème peut être éliminé soit par filtrage en masse soit par filtrage en énergie, dans certains cas les deux filtrages avec un grand pouvoir de résolution sont nécessaires pour aboutir à une séparation complète des profils.

2. Quantification des profils SIMS

Généralement les données brutes dans une expérience SIMS, de profil en profondeur, consistent en données de l'intensité ionique secondaire I_m (échantillonnée) d'un élément déterminée en fonction du temps t ; c'est ce qu'on appelle le profil de pulvérisation mesuré $I_m(t)$. Ce courant ionique secondaire dépend du flux des particules pulvérisées relatifs au même élément, ce dernier étant lui même sensible à la composition de surface à l'instant t .

L'objectif de la quantification est d'obtenir le profil de concentration mesuré (dit aussi profil apparent ou externe) $C_m(z)$ ou $n_m(z)$ suivant la profondeur z érodée. Classiquement, on a l'habitude d'exprimer les concentrations atomiques d'un élément k donné de deux façons différentes :

- soit la densité atomique exprimée en atomes par unité de volume, notée $n_k(z)$,
- soit la fraction atomique souvent exprimée en % notée $C_k(z)$ ou $X_k(z)$.

Cette quantification des profils SIMS ($I_m(t) \rightarrow C_m(z)$) se décompose donc en deux étapes :

1. Conversion du courant ionique secondaire en concentration.
2. Conversion du temps d'érosion en profondeur érodée.

2.1. Conversion courant-concentration

- *Courant ionique secondaire*

Dans § 5.4. du chapitre 1, nous avons aboutit à l'équation SIMS de base (équation (5)) reliant l'intensité ionique d'un élément k et la concentration de surface à l'instant t . Cette équation peut être réécrite moyennant un certain nombre d'hypothèses [8, 9] :

$$I_m(k^{\pm n}, t) = I_p \eta(k^{\pm n}) \alpha(k^{\pm n}) Y^c(k, t) C_m^s(k, t) \quad (1)$$

1. l'émission ionique monoatomique monochargée k^{\pm} est dominante devant tous les autres modes d'émission,
2. la répartition suivant les différents modes d'émission ionique ne dépend pas de la concentration de surface en k ,
3. la transmission de l'instrument ne dépend pas de la concentration de surface en k ,
4. le taux d'ionisation est invariant avec la profondeur érodée, donc avec la concentration de surface en k .

L'hypothèse 3 suppose que le spectre angulaire d'émission ne change pas de forme au cours de l'érosion. Alors que l'hypothèse 4 impose une dilution suffisante de l'espèce k dans la matrice, pour ne supposer aucune variation du taux d'ionisation consécutive à la variation d'environnement chimique (effet de matrice). Cet effet est aussi inexistant dans le cas d'un mélange isotopique d'atomes majoritaires.

Lorsque l'équilibre de pulvérisation est atteint ou lorsque la variation de la concentration réelle dans l'échantillon est lente devant le temps de réponse du transitoire de concentration de surface, alors le rapport du flux pulvérisé en k -atomes par ion incident $Y(k)$

sur le flux pulvérisé total par ion incident est égal à la concentration réelle de l'échantillon (qu'on aurait obtenu par érosion idéale à l'instant t correspondant à la profondeur z), soit :

$$\frac{Y(k)}{Y_t} = \frac{Y_k^c C_m^s(k, t)}{Y_t} = C_r(k, t) \quad (2)$$

D'après les équations (1) et (2), on obtient alors l'équation SIMS de base donnée par de nombreux auteurs [1, 8] :

$$\forall z \text{ ou } t \quad I_m(k^\pm) = I_p \eta(k^\pm) \alpha(k^\pm) Y_t C_r(k) \quad (3)$$

Notons que $I_p = J_p \cdot A = (v \cdot n_0 / Y_t)$, où A est l'aire analysée, n_0 dénote la densité totale de la matrice et v la vitesse d'érosion de la cible, l'équation (3) prend aussi la forme suivante :

$$\forall z \text{ ou } t \quad I_m(k^\pm) = v A \eta(k^\pm) \alpha(k^\pm) n(k) \quad (4)$$

Avec $n(k)$ la densité atomique de l'espèce k (en atomes/cm³) à l'instant t , et est égale à $n_0 C(k, t)$.

Dans le cas de plusieurs isotopes relatifs à un élément chimique donné, une correction d'abondance isotopique est nécessaire pour remonter au signal SIMS qu'on aurait dû avoir en présence d'un seul représentant de l'élément chimique :

$$\forall z \text{ ou } t \quad I_m(k^\pm, S) = a(k, S) v A \eta(k^\pm) \alpha(k^\pm) n(k) \quad (5)$$

Avec $I_m(k^\pm, S)$ le courant détecté pour l'isotope s de l'élément k , $a(k, S)$ est l'abondance isotopique c'est à dire la fraction naturelle d'atomes k sous la forme isotopique S .

Pour avoir un fort courant ionique secondaire I_m (une sensibilité élevée) pour une concentration donnée, les différents paramètres dans l'équation du courant ionique doivent être maximisés. L'accroissement de la densité du courant ionique primaire ou bien de l'aire analysée peut augmenter le courant ionique secondaire ; la première proportionnalité se fait dans la mesure de faire un compromis entre la sensibilité et la résolution en profondeur [8, 10]. La réduction de l'aire analysée conduit à la réduction du courant ionique secondaire, par conséquent à l'accroissement de la concentration minimale détectable (limite de détection) pour une transmission donnée de l'instrument. Le taux d'ionisation peut prendre des valeurs élevées par saturation de la surface de l'échantillon par des espèces réactives comme l'oxygène ou le césium. La transmission de l'instrument dépend du système d'analyse (l'analyseur ionique).

Finalement, l'équation (5) nous sert à quantifier les profils en profondeur après la détermination du facteur de conversion entre le courant ionique secondaire et la concentration.

- *Détermination du facteur de conversion*

Le problème consiste en premier lieu à déterminer le coefficient de conversion δ (appelé constante de calibration), tel que :

$$n = \delta \cdot I \quad (6)$$

Où nous prenons provisoirement les notations simplifiées suivantes :

n : densité atomique réelle en élément k , exprimée en at/cm³,

I : intensité du courant ionique détectée relative à l'élément k .

La dose implantée de l'élément k s'exprime à partir du profil en profondeur (on suppose préalablement une conversion temps d'érosion-profondeur érodée). On a en effet :

$$\text{Dose} = \int_0^{\infty} n(z).dz = \int_0^{\infty} \delta.I(z).dz \quad (7)$$

Soit :

$$\delta = \frac{\text{Dose}}{\int_0^{\infty} I(z).dz} = \frac{\text{Dose}}{\text{Aire sous la courbe } I(z)} = \frac{1}{v.A.\eta(k^{\pm}).\alpha(k^{\pm})} \quad (8)$$

La relation de proportionnalité entre l'intensité ionique et la concentration peut être confirmée de manière expérimentale en vérifiant l'invariance de δ , pour plusieurs étalons de doses croissantes ceci est généralement le cas pour les systèmes dilués. En pratique un seul étalon suffit.

Connaissant la constante de calibration, il serait aisé de convertir à toute profondeur z l'intensité ionique $I(z)$ de la structure d'étude en concentration $n(z)$, à condition de rester dans le domaine de validité de la dépendance linéaire donnée par l'équation (6).

La nécessité de s'affranchir de toutes les causes de fluctuations du courant primaire (fluctuation du duoplasmatron, fluctuation de la pression près de l'échantillon) et des courants secondaires (effet de matrice) impose d'effectuer la quantification avec une masse de référence et de travailler en courant réduit $I_{\text{impureté}} / \text{masse de référence}$. Cette masse de référence est généralement un élément majeur de la matrice, par exemple l'élément ^{30}Si dans une matrice de Silicium.

Nous avons donc :

- Pour l'impureté k ; $I_m(k^{\pm}) = v A \eta(k^{\pm}) \alpha(k^{\pm}) n(k)$
- Pour l'élément de la matrice M ; $I_m(M^{\pm}) = v A \eta(M^{\pm}) \alpha(M^{\pm}) n(M)$

Avec $n(M) \approx n_{\text{tot}}$, d'où ;

$$n(k) = \left(\frac{\eta(M^{\pm}).\alpha(M^{\pm})}{\eta(k^{\pm}).\alpha(k^{\pm})} n_{\text{tot}} \right) \cdot \frac{I(k^{\pm})}{I(M^{\pm})} = \delta' \cdot \frac{I(k^{\pm})}{I(M^{\pm})} \quad (9)$$

On voit que la concentration de l'impureté k est proportionnelle au courant réduit $I(k^{\pm}) / I(M^{\pm})$ avec un coefficient de proportionnalité δ' (appelé facteur de sensibilité relatif). Ce facteur est indépendant des conditions d'analyse, de plus il est modérément influencé par de possibles effets de matrice.

De manière analogue à l'équation (8), le calcul de δ' se fait suivant la formule :

$$\delta' = \frac{\text{Dose}}{\int_0^{\infty} \frac{I(k^{\pm}, z)}{I(M^{\pm}, z)}.dz} = \frac{\text{Dose}}{\int_0^{\infty} I_{\text{réduit}}(z).dz} \quad (10)$$

Par la connaissance de la dose implantée, le facteur de sensibilité relatif (RSF) δ' est calculé par la mesure de l'aire sous la courbe $I(k^{\pm}, z) / I(M^{\pm}, z)$. Par conséquent, la conversion $I(k^{\pm}, z)$ en concentration $n(k, z)$ est alors immédiate.

2.2. Conversion temps-profondeur érodée

- *Vitesse d'érosion*

Dans de nombreux cas de profils en profondeur, il apparaît qu'une simple relation de proportionnalité entre le temps t et la profondeur z suffit pour déterminer l'échelle des profondeurs :

$$z = v.t \quad (11)$$

Avec v est la vitesse d'érosion constante.

Une vitesse d'érosion invariante avec la profondeur est possible seulement si le rendement total de pulvérisation demeure constant tout au long du profil ; à proprement parler, ce cas de figure se rencontre que :

- pour des alliages homogènes dans lesquels les constituants ont le même rendement de pulvérisation,
- ou pour une matrice uniforme avec des concentrations très faibles d'éléments étrangers (typiquement des semi-conducteurs dopés).

A y regarder de plus près, la vitesse d'érosion peut changer suivant la profondeur même dans ce dernier cas. L'implantation des ions primaires, en changeant la concentration des espèces en présence sous la surface instantanée, en est la cause. Le domaine des profondeurs, sur lequel la concentration tend vers un profil stationnaire des projectiles a lieu, est estimé au double du parcours moyen projeté des ions primaires, soit environs de 50 à 200 Å [1, 2, 8, 10, 11] dans les conditions SIMS habituelles. Cette phase initiale dite « mise en équilibre » rend plus difficile la quantification dans cette zone.

Dans le cas des alliages où les constituants possèdent des rendements de pulvérisation élémentaires différents, la surface de l'échantillon tend à s'enrichir, au cours du temps, en l'espèce de plus faible rendement. Ces modifications de composition superficielle conduisent à faire varier la vitesse d'érosion de façon continue et provoque par conséquent des distorsions des profils (non linéarité de la profondeur érodée). A coté de ces limitations de nature plutôt fondamentale, des causes expérimentales peuvent se rajouter pour expliquer la non linéarité temps-profondeur. Par exemple, une contamination en surface ou aux interfaces (souvent une oxydation) peut changer notablement le rendement de pulvérisation, donc la vitesse d'érosion. La notion de vitesse d'érosion suppose a priori un fond de cratère plat, or ce dernier ne l'est pas au moins à l'échelle atomique et souvent à l'échelle macroscopique (cas des métaux pulvérisés par des gaz rares). Plus exactement, nous sommes toujours en présence d'une distribution des profondeurs érodées à l'intérieur du cratère. Par conséquent, il est plus juste de définir une vitesse d'érosion moyenne instantanée ($v = d\langle z \rangle / dt = Y_{\text{tot}} \cdot J_p / n_0$) à partir de la profondeur moyenne érodée $\langle z \rangle$. Donc cette vitesse d'érosion moyenne pour un matériau homogène, dépend des paramètres suivants :

- la densité du flux des ions primaires (ions/cm²) : J_p ,
- du rendement total de pulvérisation (grandeur moyenne car la pulvérisation est un phénomène statistique) : Y_{tot} ,
- du volume atomique moyen occupé par les atomes cibles $V_0 = 1/n_0$ (n_0 ; densité atomique).

Cette relation doit néanmoins être considérée comme une première estimation de la vitesse d'érosion ; elle permet simplement de cerner les ordres de grandeurs mis en jeu. L'ignorance relative des rendements de pulvérisation, l'imprécision des mesures absolues de densité de courant justifie une mesure directe de la vitesse d'érosion pour chaque profil enregistré. L'échelle des profondeurs est déterminée directement par la mesure de la profondeur du cratère.

- *Détermination expérimentale de l'échelle des profondeurs*

Nous faisons référence, ici, aux méthodes les plus courantes utilisées pour déterminer l'échelle des profondeurs. A défaut de posséder une mesure de profondeur *in-situ* (par

exemple interférométrie, intensité des rayons X générés, ellipsométrie pour des couches optiquement transparentes et d'indice de réfraction connu, etc.) capable d'enregistrer la profondeur instantanée du cratère, on se limite à la détermination de la profondeur finale, à condition d'avoir une vitesse d'érosion constante avec la profondeur et avec une bonne approximation, ceci n'est pas toujours évident (faiblesse évidente de ces méthodes de mesure post-érosion).

La technique que nous avons effectivement utilisée pour déterminer l'échelle des profondeurs est la profilométrie mécanique. Cette technique consiste à déplacer une pointe diamant ($\rho \approx 5$ à $15 \mu\text{m}$) le long d'une ligne du cratère (direction latérale, x ou y). On associe souvent à cette mesure de profil de cratère les noms commerciaux des instruments utilisés : mesure *Alphastep* ou bien mesure *Talystep*.

2.3. Applications aux profils du bore dans le silicium

Des exemples de quantification des profils SIMS de bore dans le silicium sont illustrés dans les Figures 1 et 2. Le premier échantillon est un profil gaussien de dose $4.10^{16} \text{ at/cm}^2$, représenté par l'intensité ionique en fonction du temps. Alors que, le deuxième échantillon est un profil multi-delta dopage de dose $5.10^{15} \text{ at/cm}^2$, semi-quantifié représenté par l'intensité en fonction de la profondeur. Les conditions d'analyse SIMS sont : O_2^+ , 5.5 keV, 43.1° pour le premier profil et O_2^+ , 3.5 keV, 56.3° pour le deuxième profil. Les profondeurs de cratères sont mesurées par profilométrie. La quantification met en évidence les faits suivants :

- La précision sur la valeur de la concentration atteinte est de 3%.
- La dynamique des profils (ou étendue de mesure), définie comme étant le nombre de décades séparant n_{max} de n_{min} , se situe dans le domaine des 4 à 5 décades. A noter que la valeur n_{min} dépend de la valeur n_{max} (déterminée par la dose d'implantation) à cause d'effets de rédéposition, ce qui relativise d'une certaine manière la notion de dynamique du signal.
- La concentration minimale détectable (ou limite de détection) n_{min} , définie pratiquement comme la valeur moyenne du « bruit » en queue du profil est de l'ordre de $4.10^{15} \text{ at/cm}^3$, confirmant l'excellente sensibilité de l'analyse SIMS.
- Comme les matrices sont homogènes donc l'effet de matrice est minimale (y'a pas de variation des taux d'ionisation et de pulvérisation avec la matrice), permettant ainsi une bonne quantification.

A titre de comparaison, nos résultats s'accordent relativement bien à ceux de Prudon [8] (même ordre de grandeur).

Outre la « guerre » des chiffres annoncés par les fabricants d'instruments, il convient de mentionner que les détections limites obtenues dépendent dans une large mesure des conditions d'analyse utilisées : énergie et angle d'incidence des projectiles, vitesse d'érosion, compatibilité avec une résolution en profondeur acceptable, etc. Par conséquent, nos valeurs ne sont données qu'à titre indicatif.

D'une manière générale, cette quantification nous a donné une vision quantitative tout à fait cohérente des profils en profondeur de l'analyse SIMS.

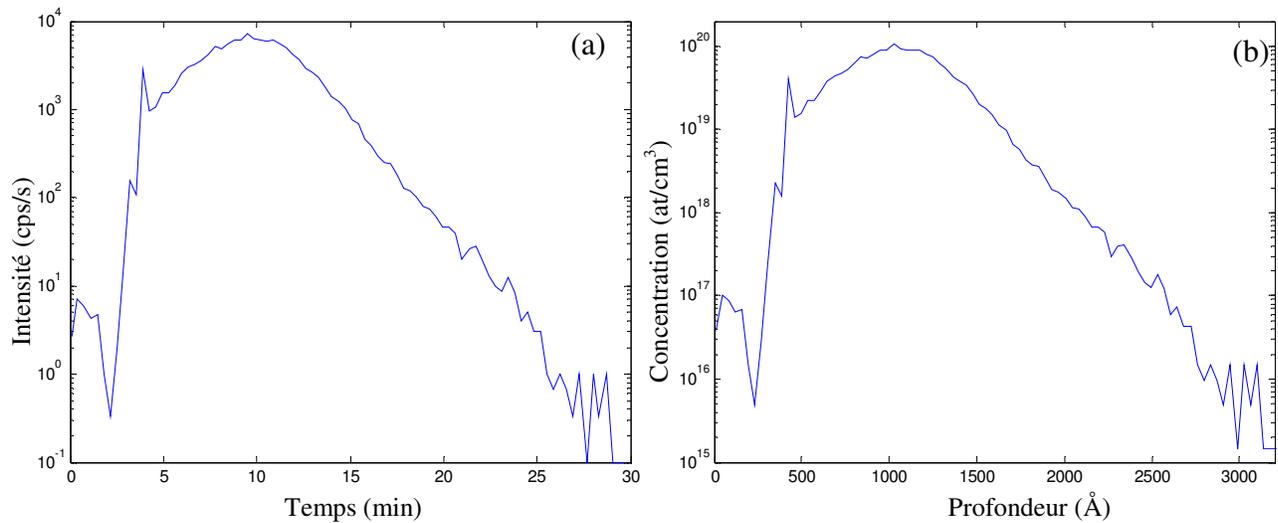


Figure 1 : a) Profil d'implantation du bore dans le silicium, analysé avec O_2^+ , 5.5 keV, 43.1° . b) Profil quantifié.

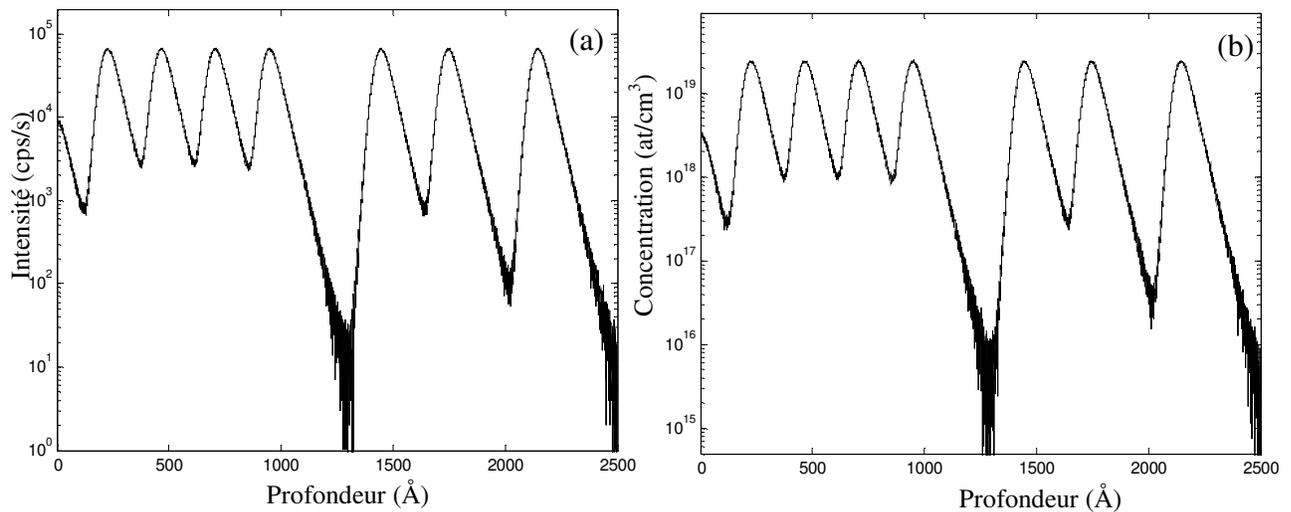


Figure 2 : a) Profil multi-deltas dopage du bore dans le silicium, analysé avec O_2^+ 3.5 keV, 56.3° . b) Profil quantifié.

- [1] **Brice G.**, *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires. Mise au point d'une procédure de déconvolution et applications*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1997, 222 p.
- [2] **Ait-Kaki A., Boulakroune M., Boukezatta M., M. Berrabah, Djahli F., Bellatreche M. S. et Bielle-Daspet D.**, *Characterization of sub-micrometre silicon films (Si-LPCVD) heavily in-situ boron-doped and submitted to treatments of dry oxidation*, Journal of semiconductor sciences and technology, 2002, vol. 17, pp. 983-992
- [3] **Botter R. et Bouchoux G.**, *Spectrométrie de masse*, Techniques de l'ingénieur, 1995, Vol. P3, n° 2615, pp. 1-39
- [4] **Galuska A. A. et Marquez S.**, *Elemental quantification through thin films and interfaces*, Materials sciences laboratory, the aerospace corporation, El Segundo, USA, 1982, pp. 363-365
- [5] **Lux G. E., Stevie F. A., Kahora M., Wilson M. et Cochran W.**, *Secondary ion mass spectrometry quantification of elements in $TiSi_2$, TiN and TiW matrices*, American Vacuum society, 1993, Vol. 11, n° 4, pp. 22-28

- [6] **Vanderheide P. A., Zhang M., Mount G. R. et MC-Intyre N. S.**, *The infinite velocity method for SIMS quantification*, Journal Surface & interface analysis, 1994, Vol. 21, pp. 747-757
- [7] **Wittmaack K.**, *The use of secondary ion mass spectrometry for studies of oxygen absorption and oxidation*, Surface Sciences, 1977, Vol. 68, pp. 118-129
- [8] **Prudon G.**, *Etude de la sensibilité et de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires : Application à la silice et au silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1990, 299 p.
- [9] **Boulakroune M.**, *Traitement numérique des mesures par sonde ionique*, Thèse de magister, Département d'électronique, Université Mentouri de Constantine, 1999, 78 p.
- [10] **Benninghoven A., Rüdenauer F. G. et Werner H. W.**, *Secondary Ion Mass Spectrometry principles. Basic, concepts, instrumental aspects, Applications and trends*, John Wiley & Sons, New York, 1987, 1227 p.
- [11] **Boulakroune M. et Berrabah M.**, *Traitement numérique des mesures par SIMS*, journal Sciences et technologie, 2002, pp. 9-16

ANNEXE 2

A.

Théorème 1

La reconstruction multirésolution d'un signal n'est pas unique, il existe un couple $\tilde{\tilde{x}}_a$ et $\tilde{\tilde{x}}_d$ avec $\tilde{\tilde{x}}_a \neq \tilde{x}_a$ et $\tilde{\tilde{x}}_d \neq \tilde{x}_d$ solution de l'équation de reconstruction (équation (29) du chapitre 4) définie dans le domaine transformée en z par :

$$\begin{aligned}\tilde{\tilde{X}}_a(z) &= \tilde{X}_a(z) + \Delta(z)F(-z) \\ \tilde{\tilde{X}}_d(z) &= \tilde{X}_d(z) + \Delta(z)G(-z)\end{aligned}\tag{1 a, b}$$

$\Delta(z)$ est quelconque.

Démonstration

Posons :

$$\begin{aligned}\tilde{\tilde{X}}_a(z) &= \tilde{X}_a(z) + \Delta_1(z)F(z) \\ \tilde{\tilde{X}}_d(z) &= \tilde{X}_d(z) + \Delta_2(z)G(z)\end{aligned}\tag{2 a, b}$$

En appliquant la formule de reconstruction en z de l'équation (29) du chapitre 4 : $X(z) = \tilde{X}_a(z)\tilde{F}(z) + \tilde{X}_d(z)\tilde{G}(z)$ au couple (1 a, b), il vient :

$$\tilde{\tilde{X}}_a(z)\tilde{F}(z) + \tilde{\tilde{X}}_d(z)\tilde{G}(z) = X(z) + \Delta_1(z)\tilde{F}(z) + \Delta_2(z)\tilde{G}(z)$$

Pour que cette égalité soit égale à $X(z)$ nous devons avoir :

$$\Delta_1(z)\tilde{F}(z) + \Delta_2(z)\tilde{G}(z) = 0\tag{3}$$

Il y a deux façons de résoudre cette équation [2].

Solution 1

Chaque terme est nul :

$$\Delta_1(z)\tilde{F}(z) = 0 \text{ et } \Delta_2(z)\tilde{G}(z) = 0$$

Pour les ondelettes régulières on a $\tilde{F}(-1) = 0$ et $\tilde{G}(1) = 0$, les conditions précédentes peuvent être satisfaisantes si le support de $\Delta_1(z)$ est ponctuel en $z = -1$ et celui de $\Delta_2(z)$ est également ponctuel en $z = 1$. Ces deux valeurs de z correspondent, respectivement, à la demi-fréquence d'échantillonnage et à la fréquence d'échantillonnage (modulo la fréquence d'échantillonnage).

Solution 2

La combinaison des deux termes est nulle. On peut utiliser la condition de suppression du repliement spectral pour trouver cette dernière solution. En effet, cette condition s'écrit :

$$F(-z)\tilde{F}(z) + G(-z)\tilde{G}(z) = 0$$

Ainsi, par identification terme à terme de cette dernière équation et l'équation (3), il vient :

$$\Delta_1(z) = \Delta(z)F(-z)$$

$$\Delta_2(z) = \Delta(z)G(-z)$$

Ainsi nous avons démontré le théorème 1.

Interprétation

La solution 1 de la démonstration est périodique donc à support non borné dans l'espace direct, elle est éliminée par la contrainte de support borné dans la déconvolution.

La solution 2 correspond à des signaux de spectre fréquentiel complémentaire à celui de la solution recherchée du fait des produits par, respectivement, $F(-z)$ et $G(-z)$, pour les solutions $\Delta_1(z)$ et $\Delta_2(z)$ complémentaires aux signaux d'approximation et de détails.

Les échantillons d'indice impair de la solution d'équations de convolution (équation (33) du chapitre 4) appartient donc à $\Delta_1(z)$ et $\Delta_2(z)$? Le théorème suivant répond par la négative à cette question.

Théorème 2

Les échantillons impairs de y_a et y_d correspondent avec un facteur $1/2$ près, respectivement, à la convolution des signaux d'approximation et de détails, par la réponse impulsionnelle h dont les échantillons pairs sont remplacés par des zéros. Les échantillons pairs de y_a et y_d correspondent, respectivement, aux échantillons pairs (donc non nuls) de \tilde{y}_a et \tilde{y}_d avec soustraction d'un signal résultant de la convolution des échantillons impairs du terme de repliement spectral du signal x avec, respectivement, $F(z)$ et $G(z)$, par la réponse impulsionnelle h dont les échantillons impairs sont remplacés par des zéros.

A noter que les transformées en z d'un signal $s(n)$ dont les échantillons, impairs puis pairs, sont remplacés par des zéros s'écrivent respectivement,

$$\begin{aligned} S_{p,0}(z) &= \frac{1}{2}[S(z) + S(-z)] \\ S_{i,0}(z) &= \frac{1}{2}[S(z) - S(-z)] \end{aligned} \quad (4 \text{ a, b})$$

Démonstration

Nous développons la démonstration pour le signal d'approximation, la démonstration pour le signal de détail est identique [2].

Première partie du théorème :

Par transformation en z de l'équation (28) du chapitre 4, pour le signal d'approximation nous avons :

$$Y_a(z) = H(z)X_a(z) \quad (5)$$

Avec

$$\tilde{X}_a(z) = \frac{1}{2}[F(z)X(z) + F(-z)X(-z)] \quad (6)$$

En reportant l'équation (6) dans (5), cette dernière s'écrit :

$$Y_a(z) = \frac{1}{2}[F(z)H(z)X(z) + F(-z)H(z)X(-z)] \quad (7)$$

cependant,

$$\tilde{Y}_a(z) = \frac{1}{2}[F(z)H(z)X(z) + F(-z)H(-z)X(-z)] \quad (8)$$

En comparant (7) et (8) il vient :

$$Y_a(z) = \tilde{Y}_a(z) + \frac{1}{2}F(-z)X(-z)[H(z) - H(-z)] = \tilde{Y}_a(z) + F(-z)X(-z)H_{i,0}(z) \quad (9)$$

Cette relation démontre que l'on ne peut pas identifier $\tilde{Y}_a(z)$ à $Y_a(z)$.

Nous avons la transformé en z de y_a avec forçage à zéro des échantillons pairs s'écrit :

$$Y_{a,i,0}(z) = \frac{1}{2}[Y_a(z) - Y_a(-z)] \quad (10)$$

En incorporant (9) dans (10), on obtient :

$$Y_{a,i,0}(z) = \frac{1}{2} \left\{ \tilde{Y}_a(z) + \frac{1}{2}F(-z)X(-z)[H(z) - H(-z)] - \tilde{Y}_a(-z) - \frac{1}{2}F(z)X(z)[H(-z) - H(z)] \right\}$$

$$Y_{a,i,0}(z) = \frac{1}{2}[\tilde{Y}_a(z) - \tilde{Y}_a(-z)] + \frac{1}{2}[H(z) - H(-z)] \frac{1}{2}[F(z)X(z) + F(-z)X(-z)]$$

D'après (6) et (10), on aboutit à :

$$Y_{a,i,0}(z) = \tilde{Y}_{a,i,0}(z) + \frac{1}{2}[H_{i,0}(z)X_a(z)]$$

Or dans $\tilde{Y}_{a,i,0}$ les échantillons impairs sont nuls, d'où :

$$Y_{a,i,0}(z) = \frac{1}{2}[H_{i,0}(z)X_a(z)] \quad (11)$$

Soit

$$y_{a,i,0}(z) = \frac{1}{2}[h_{i,0} * \tilde{x}_a]$$

Ce qu'il fallait démontrer.

Deuxième partie du théorème

La transformée en z de y_a avec forçage à zéro des échantillons impairs s'écrit :

$$Y_{a,p,0}(z) = \frac{1}{2}[Y_a(z) + Y_a(-z)] \quad (12)$$

En reportant (9) dans cette dernière relation, il vient :

$$Y_{a,p,0}(z) = \frac{1}{2} \left\{ \tilde{Y}_a(z) + \frac{1}{2}F(-z)X(-z)[H(z) - H(-z)] + \tilde{Y}_a(-z) + \frac{1}{2}F(z)X(z)[H(-z) - H(z)] \right\}$$

$$Y_{a,p,0}(z) = \frac{1}{2}[\tilde{Y}_a(z) + \tilde{Y}_a(-z)] - \frac{1}{2}[H(z) - H(-z)] \frac{1}{2}[F(z)X(z) - F(-z)X(-z)]$$

D'où

$$Y_{a,p,0}(z) = \tilde{Y}_{a,p,0}(z) - \frac{1}{2}[H(z) - H(-z)] \frac{1}{2}[F(z)X(z) - F(-z)X(-z)] \quad (13)$$

Or, il est clair qu'on a

$$\tilde{Y}_{a,p,0}(z) = \tilde{Y}_a(z) \quad (14)$$

Nous avons $X_a(z) = X(z)F(z)$

$$X_{a,0,i}^{(1)} = \frac{1}{2}[X_a^{(1)}(z) - X_a^{(1)}(-z)] \quad (15)$$

En incorporant (10), (14) et (15) dans (13) il vient

$$Y_{a,p,0}(z) = \tilde{Y}_a(z) - X_{a,i,0}^{(1)}(z)H_{i,0}(z) \quad (16)$$

Soit

$$y_{a,p,0}(z) = \tilde{y}_a - h_{i,0} * x_{a,i,0}^{(1)} \quad (17)$$

Ce qu'il fallait démontrer.

B.

Démonstration des inégalités (18) et (19) lorsque les filtres de reconstruction présentent les caractéristiques : $\|\tilde{\mathbf{F}}\|^2 \leq 1$ et $\|\tilde{\mathbf{G}}\|^2 \leq 1$

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{H}^{(0)}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq \|\mathbf{b}_a^{(1)}\|^2 + \|\mathbf{b}_d^{(1)}\|^2 \quad (18)$$

$$\|\mathbf{D}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq (r_a^{(0)})^2 + (r_d^{(0)})^2 \quad (19)$$

Preuve :

Les reconstructions de la solution \mathbf{x} et de \mathbf{y} sont définies par :

$$\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{F}}_x \mathbf{x}_a^{(0)} + \tilde{\mathbf{G}}_x \mathbf{x}_d^{(0)}$$

$$\tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{F}}_y \mathbf{y}_a^{(0)} + \tilde{\mathbf{G}}_y \mathbf{y}_d^{(0)}$$

En utilisant l'inégalité triangulaire, nous obtenons :

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{H}^{(0)}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq \|\tilde{\mathbf{F}}_y \mathbf{y}_a^{(0)} - \mathbf{H}^{(0)}\tilde{\mathbf{F}}_x \mathbf{x}_a^{(0)}\|^2 + \|\tilde{\mathbf{G}}_y \mathbf{y}_d^{(0)} - \mathbf{H}^{(0)}\tilde{\mathbf{G}}_x \mathbf{x}_d^{(0)}\|^2$$

Nous pouvons aussi écrire :

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{H}^{(0)}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq \|\tilde{\mathbf{F}}_y (\mathbf{y}_a^{(0)} - \mathbf{H}^{(1)}\mathbf{x}_a^{(0)})\|^2 + \|\tilde{\mathbf{G}}_y (\mathbf{y}_d^{(0)} - \mathbf{H}^{(1)}\mathbf{x}_d^{(0)})\|^2$$

En utilisant un produit scalaire compatible avec la norme matricielle :

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{H}^{(0)}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq \|\tilde{\mathbf{F}}_y\|^2 \|\mathbf{y}_a^{(0)} - \mathbf{H}^{(1)}\mathbf{x}_a^{(0)}\|^2 + \|\tilde{\mathbf{G}}_y\|^2 \|\mathbf{y}_d^{(0)} - \mathbf{H}^{(1)}\mathbf{x}_d^{(0)}\|^2$$

Une condition suffisante pour que l'inégalité (18) soit vérifiée est :

$$\|\tilde{\mathbf{F}}^{(1)}\|^2 \leq 1 \text{ et } \|\tilde{\mathbf{G}}^{(1)}\|^2 \leq 1$$

Pour prouver (2) nous avons :

$$\|\mathbf{D}^{(0)}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq \|\mathbf{D}^{(1)}\tilde{\mathbf{F}}^{(1)}\tilde{\mathbf{x}}_a^{(0)}\|^2 + \|\mathbf{D}^{(1)}\tilde{\mathbf{G}}^{(1)}\tilde{\mathbf{x}}_d^{(0)}\|^2$$

En utilisant une démarche similaire à la première proposition nous obtenons :

$$\|\mathbf{D}^{(0)}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq \|\tilde{\mathbf{F}}^{(1)}\|^2 \|\mathbf{D}^{(1)}\tilde{\mathbf{x}}_a^{(0)}\|^2 + \|\tilde{\mathbf{G}}^{(1)}\|^2 \|\mathbf{D}^{(1)}\tilde{\mathbf{x}}_d^{(0)}\|^2$$

Avec les mêmes contraintes sur $\|\tilde{\mathbf{F}}^{(1)}\|^2$ et $\|\tilde{\mathbf{G}}^{(1)}\|^2$ nous pouvons écrire :

$$\|\mathbf{D}^{(0)}\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq \|\mathbf{D}^{(1)}\tilde{\mathbf{x}}_a^{(0)}\|^2 + \|\mathbf{D}^{(1)}\tilde{\mathbf{x}}_d^{(0)}\|^2$$

Donc l'inégalité (19) est vérifiée.

[1] **Burdeau J. -L, Goutte R. et Prost R.,** *Joint nonlinéair-quadratic regularization in wavelet based deconvolution schem*, IEEE Int. Conference on signal processing WCCC-ICSP 2000, 2000, Vol. 1, pp. 77-80

[2] **Burdeau J. L.,** *Deconvolution multiresolution par décomposition sur une base d'ondelettes. Applications*, Thèse de doctorat, INSA de Lyon France, 2000, 194 p.

ANNEXE 3

SIMULATION DES PROFILS SIMS

Le principe de la simulation repose sur la convolution des différentes formes analytiques des structures avec la forme analytique de la fonction de résolution dont les paramètres sont fittés d'une DRF déterminée expérimentalement (voir chapitre 2). Le maximum des intensités ioniques est localisé entre 10^3 et 10^5 cps/s.

Pour que les profils simulés soient proches des profils expérimentaux on doit ajouter le bruit. Pour cela, nous avons choisi de construire un bruit gaussien de moyenne nulle par rapport au signal, c'est-à-dire la variation du signal due au bruit par rapport au signal parfait peut être positive ou négative avec une distribution de probabilité gaussienne autour de la valeur parfaite. En effet, Brice [1] a montré que l'adjonction d'un bruit poissonien à la place d'un bruit gaussien ne provoque aucune modification dans le résultat de la déconvolution seul le niveau de bruit intervient, un bruit gaussien doit être préféré. Pour simuler le comportement des profils quand le signal devient très faible, on a fait en sorte que lorsque le signal est inférieur à 1 coup par seconde, alors la valeur moyenne de bruit ne suit pas celle du signal mais conservée à 1 coup par seconde. On a ainsi un signal noyé dans le bruit comme c'est le cas dans la réalité lorsque la concentration devient inférieure à la sensibilité de l'appareil.

Il été vérifié expérimentalement que le rapport signal / bruit (SNR) d'un profil en profondeur est typiquement de l'ordre de 30 à 50 dB. Dans nos simulations nous allons utiliser un SNR de valeurs 35 et 40 dB car ces valeurs correspondent au niveau réel du bruit en SIMS. Pour construire le bruit nous allons utiliser la procédure du paragraphe qui suit.

1. Procédure de génération d'un bruit blanc-gaussien

Pour simuler le bruit qui vient s'ajouter au signal, nous allons construire un bruit gaussien de valeur moyenne nulle par rapport au signal et un écart type obtenu par une relation empirique.

Un bruit blanc gaussien n'est qu'un signal pseudo-aléatoire à une distribution gaussienne.

Il faut tout d'abord penser à la génération d'un signal pseudo-aléatoire ⁽¹⁾ afin de donner une distribution gaussienne à ce signal.

Exemple de génération d'un signal pseudo-aléatoire

Cet exemple, consiste à générer un signal pseudo-aléatoire de comportement imprévisible par une relation de récurrence parfaitement déterministe de la forme suivante :

$$x(k+1) = [Ax(k)] \text{ mod } (P) \quad (1)$$

Où A et P sont des entiers particuliers.

En effet, P doit être un nombre premier et A une racine primitive positive de P. la notation mod (P) signifie *modulo* P. D'une manière générale, on dit que $a = b \text{ modulo } N$ si a est le reste de la division de b par N.

Le signal généré par la relation de récurrence est périodique de période P-1. De plus, sur une période, chaque nombre entier $x(k_i)$ entre 1 et P-1 n'apparaît qu'une seule fois et d'une manière pratiquement imprévisible, c'est à dire presque aléatoire. Une portion du signal généré par la relation de récurrence (1) est représentée dans la Figure 1.

⁽¹⁾ Les signaux pseudo-aléatoires sont des signaux périodiques mais sur une seule période, ils se comportent comme des signaux aléatoires.

En divisant chaque nombre ainsi généré par P, on obtient un signal pseudo-aléatoire de densité de probabilité uniforme.

A partir d'un signal pseudo-aléatoire, on peut générer de nouveau avec une relation de récurrence, des signaux pseudo-aléatoires possédant d'autres distributions. Par exemple la relation de récurrence non linéaire :

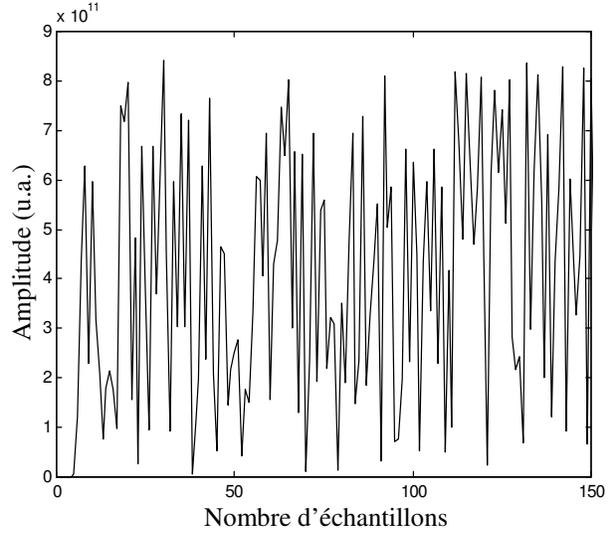


Figure 4 : Signal pseudo-aléatoire à distribution uniforme.

$$y(k) = \sqrt{2\sigma^2 \ln \frac{1}{x(k)}} \quad (2)$$

permet de générer un signal pseudo-aléatoire $y(k)$ possédant une distribution de Rayleigh à partir d'un signal $x(k)$ à distribution uniforme. En effet, la condition d'équivalence en probabilité donne :

$$p(y) dy = p(x) dx \quad (3)$$

d'où

$$p(y) = p(x) \left| \frac{dx}{dy} \right|_{x=f(y)} \quad (4)$$

En calculant le terme $\left| \frac{dx}{dy} \right|$ à partir de la relation inverse de (2) on obtient :

$$p(y) = \frac{y}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) \quad \text{avec } y \geq 0 \quad (5)$$

On peut montrer, en utilisant le principe de la relation (3), qu'à partir du signal $y(k)$ ainsi généré et du signal $x(k)$ à distribution uniforme, on peut générer un signal pseudo-aléatoire à distribution gaussienne en utilisant les relations suivantes :

$$\begin{aligned} z(k) &= y(k) \cos [2\pi x(k+1)] \\ z(k+1) &= y(k) \sin [2\pi x(k+1)] \end{aligned} \quad (6)$$

Le signal ainsi généré possède la distribution de Gauss :

$$p(z) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right) \quad (7)$$

Un tel signal est présenté sur la Figure 2.

Pour une échelle grande telle qu'il est le cas avec l'échelle des profondeurs des profils SIMS le bruit gaussien paraît très condensé comme le montre la Figure 3.

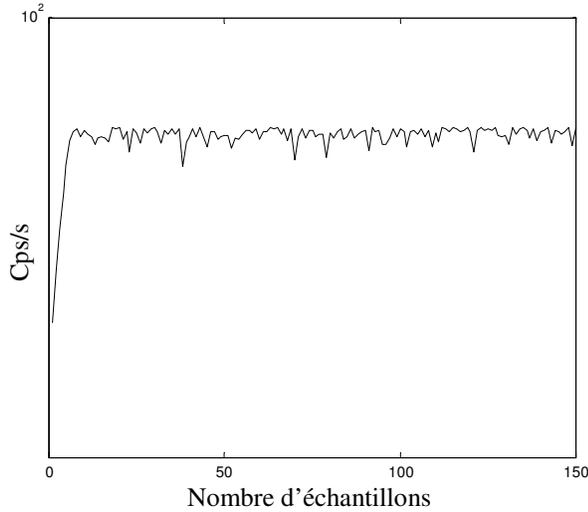


Figure 2 : Signal pseudo-aléatoire à distribution gaussienne.

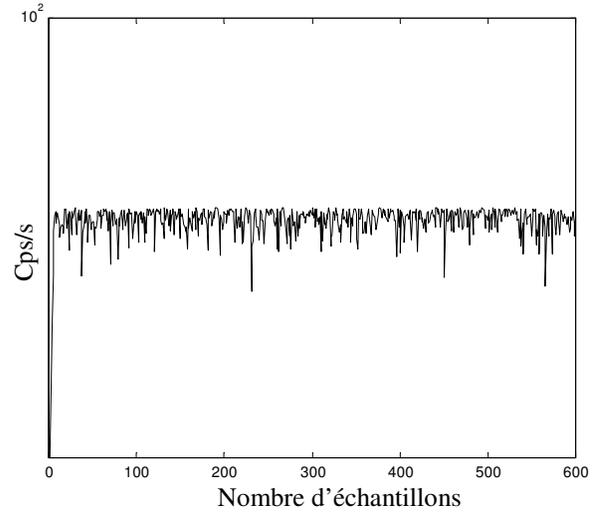


Figure 3 : Signal pseudo-aléatoire à distribution gaussienne condensée.

Allen [2] a proposé de modéliser le bruit, pour un profil de bore dans du silicium, par une distribution de probabilité gaussienne tirée d'observations expérimentales, il a établi une loi empirique reliant la valeur moyenne du signal $\bar{S} \neq 0$ à l'écart type du bruit σ_b :

$$\sigma_b = 1.7\sqrt{\bar{S}} \quad (8)$$

Cette relation n'a rien d'absolu, mais présente l'avantage d'avoir été obtenue dans le cas du bore dans le silicium, à partir de l'observation de la variation du signal sur des plateaux différents de concentration constante du bore dans la matrice de silicium.

Par cette procédure, nous pouvons construire des signaux qui peuvent correspondre à la réalité, et de déconvoluer par la suite des profils qu'il n'est pas absurde de rencontrer lors d'une expérience véritable.

2. Structures simulées

2.1. Marches de concentration avec des interfaces abruptes

La première structure que nous avons choisie pour simuler les profils SIMS est les marches de concentration montante et descendante avec des interfaces abruptes. Ce cas de figure est présent en technologie MOS (par exemple LP-CVD ou MBE), pour les dépôts de couches minces avec un contrôle minutieux du processus de dépôt pour obtenir des interfaces abruptes.

Les formulations mathématiques de ces structures sont :

- Pour la marche de concentration montante :

$$C(z) = AU(z-a) = \begin{cases} A & z \geq a \\ 0 & z < a \end{cases} \quad (9)$$

- Pour une marche de concentration descendante :

$$C(z) = A[U(z)-U(z-a)] \quad (10)$$

$C(z)$ représente la répartition de la concentration dans le matériau, A est la concentration maximale et a est la position de l'interface abrupte.

Pour simuler les profils SIMS de cette structure nous avons utilisé une DRF qui correspond à une mesure de routine menée à 5,5 keV/O₂⁺, 42,4° dont les paramètres sont : $\lambda_d = 37,54 \text{ \AA}$, $\lambda_u = 3,44 \text{ \AA}$, $\sigma_g = 22,46 \text{ \AA}$, $\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$, où σ_{DRF} est l'écart-type de la DRF.

Les Figures 4 et 5 représentent respectivement les résultats de la simulation des profils SIMS pour les deux types de marches (descendante et montante) en échelles linéaire et logarithmique.

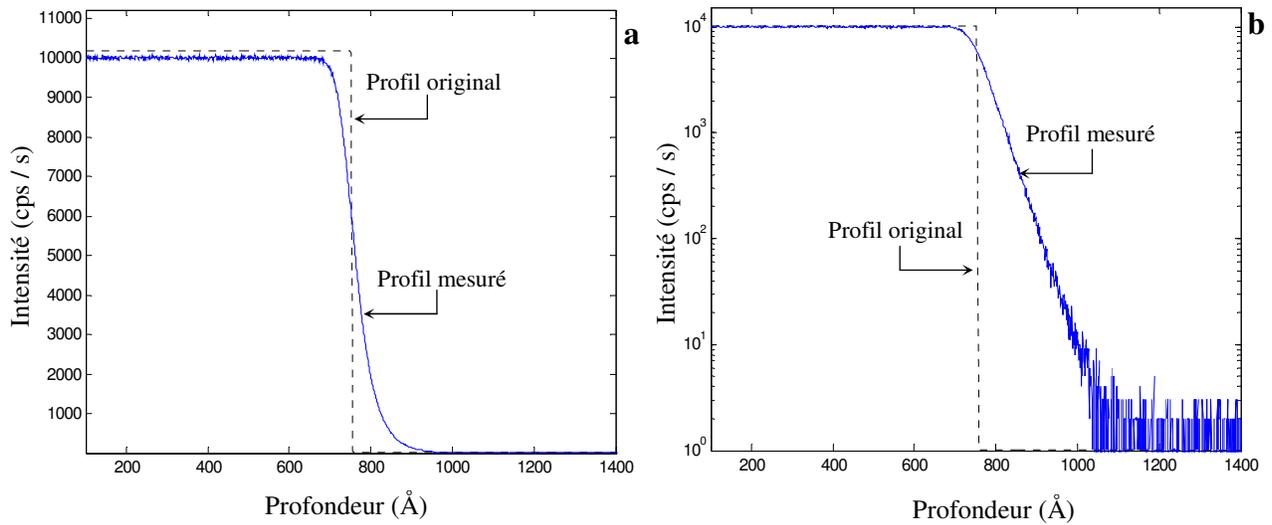


Figure 4 : Profil SIMS simulé d'une marche de concentration descendante, a) tracé linéaire b) tracé logarithmique. DRF ($\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$), SNR = 40 dB.

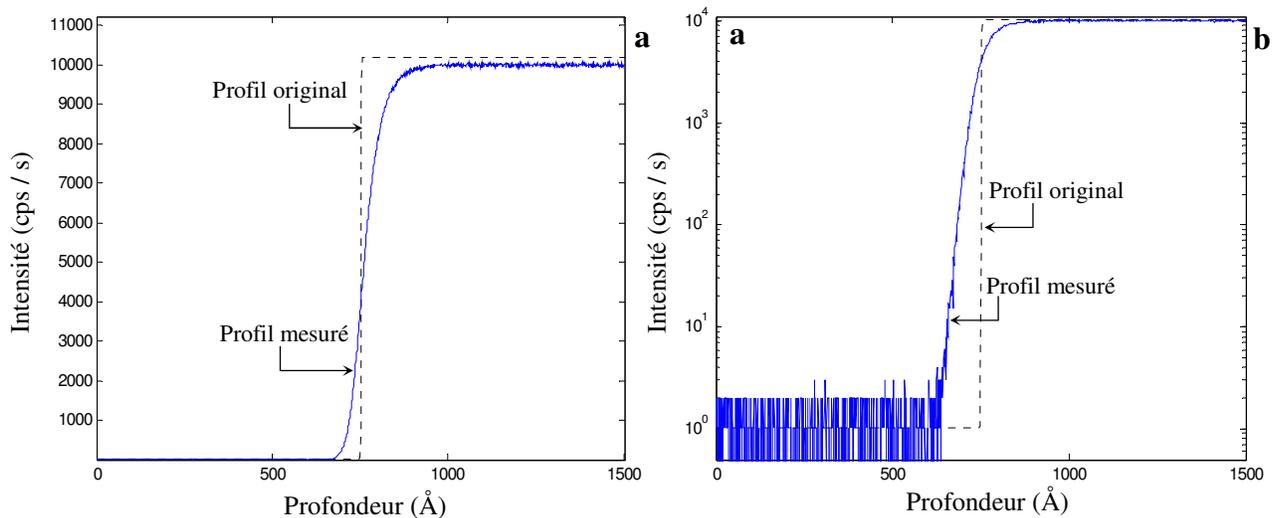


Figure 5 : Profil SIMS simulé d'une marche de concentration montante, a) tracé linéaire b) tracé logarithmique. DRF ($\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$), SNR = 40 dB.

Après l'analyse, les interfaces abruptes sont considérablement altérées par les flans exponentiels de la DRF, deviennent ainsi graduelles, étalées en profondeur suivant une fonction erreur. C'est bien l'effet du mixage collisionnel caractérisé par le paramètre de la descente exponentielle λ_d . Pour identifier l'effet de l'analyse sur les structures nous devons mesurer l'étalement des profils en profondeur, le moyen le plus adéquat est de mesurer

la résolution en profondeur à travers les interfaces (voir chapitre 1 § 7.1.). Dans ce cas, la résolution en profondeur est mesurée par la distance nécessaire pour que le signal décroisse de 84 % à 16 % de l'intensité maximale [3]. La largeur de la zone mixée w est estimée par une relation proposée par Hofman [4] qui est : $\Delta z(16-84\%) = 1,6w$. L'ordre de cette zone pour les deux structures est $\approx 47 \text{ \AA}$.

Cet exemple nous montre que les profils SIMS obtenus correspondent bien aux cas réels rencontrés lors de l'expérience.

2.2. Créneau de concentration avec des interfaces graduelles (fonctions erreurs)

Les fonctions de ce type se rencontrent dans le cas de diffusion Fickienne des interfaces abruptes. L'expression mathématique d'un profil $C(z)$ en forme de fonction erreur est [1] :

$$C(z) = \frac{C_0}{2} \left[1 \pm \operatorname{erf} \left(\frac{z}{\sqrt{2}\sigma_0} \right) \right] \quad (11)$$

C_0 est le coefficient d'amplitude utilisé pour ajuster le niveau du signal, et σ_0 caractérise la raideur de la pente de la fonction. Ce paramètre est à relier à l'écart-type de la gaussienne dont la fonction erreur est l'intégrale.

La Figure 6 montre le résultat de la simulation de l'analyse SIMS à travers une structure sous forme d'une fonction erreur de pente $28,5 \text{ \AA}$. La DRF utilisée est la même du paragraphe précédent d'un écart-type $\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$.

L'analyse SIMS élargit de manière significative les fronts de montée et de descente du profil. En particulier le profil adopte le comportement exponentiel de la DRF de part et d'autre du profil. Le front de descente du profil original est complètement gouverné par la traînée exponentielle de la DRF et il est impossible de deviner quel était le profil avant convolution. En particulier la symétrie initiale des interfaces est effacée.

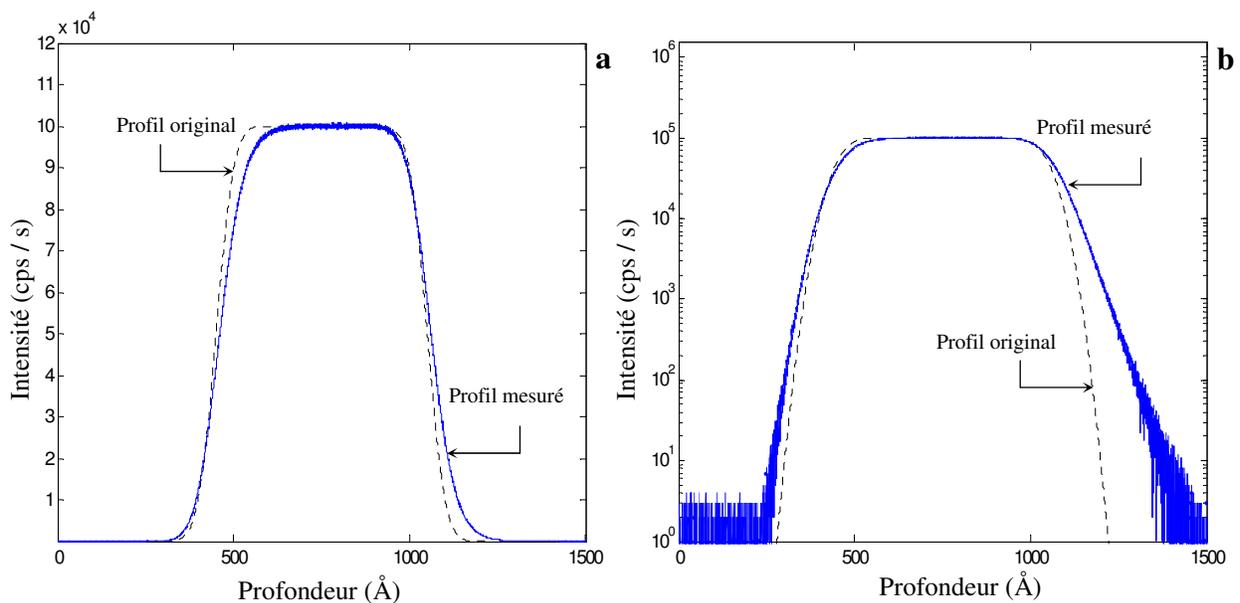


Figure 6 : Résultat de la simulation d'un profil SIMS d'un créneau de concentration dont les interfaces sont des fonctions erreurs de pente $28,5 \text{ \AA}$. a) tracé linéaire, b) tracé logarithmique. $\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$, $SNR = 35 \text{ dB}$.

2.3. Profil implanté de forme gaussienne

La forme gaussienne est l'une des formes les plus intéressantes, elle est fréquemment employée pour modéliser les implantations des dopants dans une matrice, comme on peut la rencontrer dans des cas de diffusion Fickienne. La fonction gaussienne présente l'avantage d'être entièrement caractérisée par son écart-type σ qui définit une largeur à mi-hauteur égale à $2,335 \sigma$. La mesure de cette largeur à mi-hauteur conduit immédiatement au moment centré d'ordre deux sans qu'il soit utile de la calculer de manière numérique.

La Figure 7 présente la simulation de l'analyse SIMS des profils gaussiens d'écart-type 10 et 120 Å, respectivement.

C'est clair de constater que l'analyse SIMS modifie de manière remarquable les structures de faibles largeurs. Notamment, dans le cas des profils qui présentent des largeurs inférieures à celle de la DRF. Si l'écart-type du profil original σ_R est inférieur à celui de la DRF σ_{DRF} , il sera difficile d'estimer σ_R du profil mesuré (d'écart-type σ_M) (voir Figure 7 a, b), le profil mesuré est gouverné par les flans exponentiels de la DRF. Pour les grandes valeurs de σ_R ($>\sigma_{DRF}$) le profil mesuré est légèrement modifié par la DRF mais le bruit prend toute sa place.

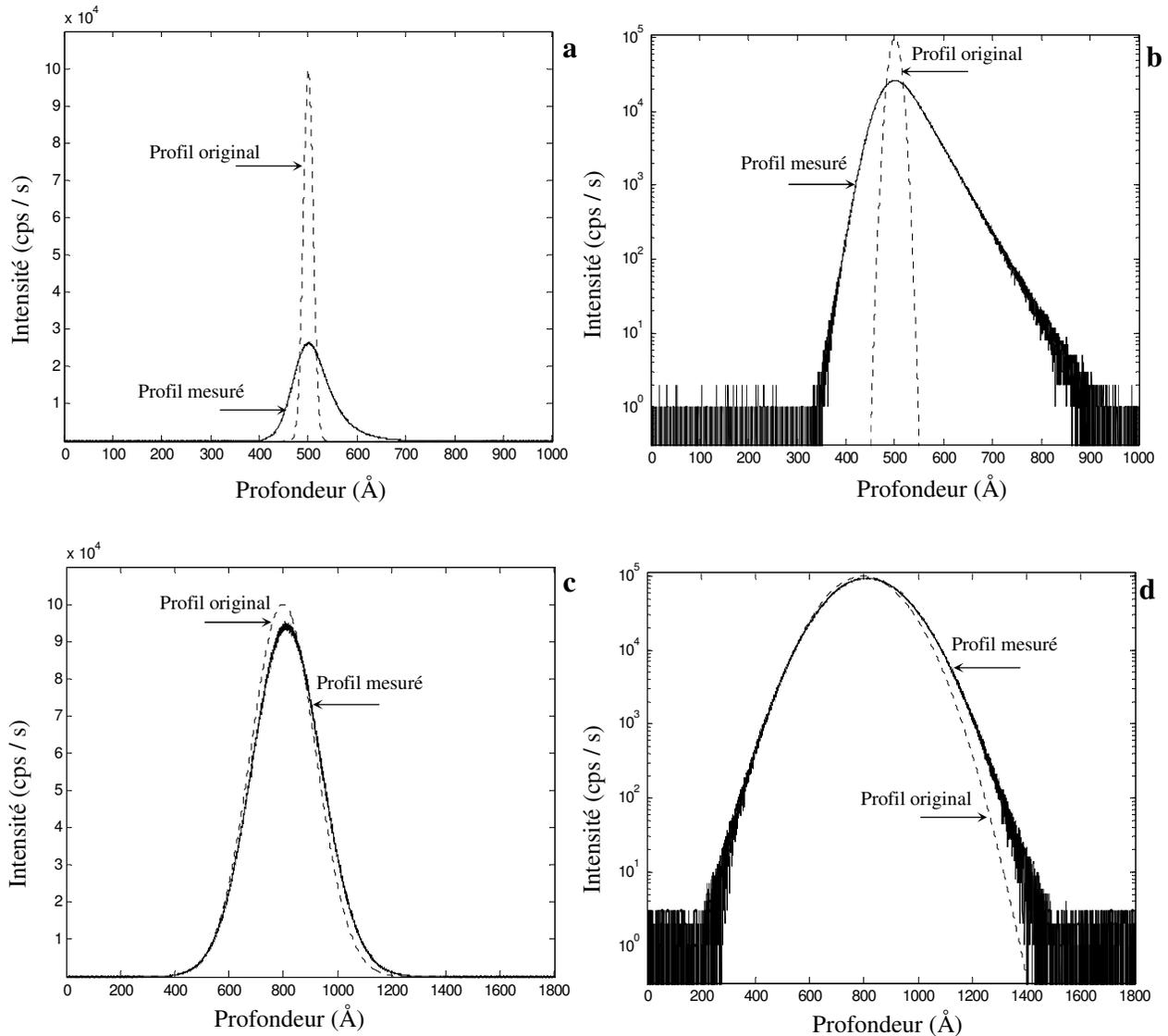


Figure 7 : Simulation de l'analyse SIMS des profils gaussiens :
 - d'écart-type 10 Å a) tracé linéaire, b) tracé logarithmique ;
 - d'écart-type 120 Å c) tracé linéaire, d) tracé logarithmique.

$$\sigma_{DRF} = 43,88 \text{ \AA}$$

$$SNR = 25 \text{ dB}$$

Nous savons qu'un profil mesuré $y(z)$ est le résultat de la convolution de la DRF avec la distribution réelle de la concentration $x(z)$ dans l'échantillon. La DRF de sa part est la convolution d'une gaussienne $G(z)$ avec un double exponentiel $D(z)$:

$$y(z) = h(z)*x(z) = [G(z)*D(z)]*x(z) = D(z) * [G(z) *x(z)] \quad (12)$$

Dans notre cas $x(z)$ est une gaussienne alors $[G(z) *x(z)]$ est également une gaussienne d'écart-type :

$$\sigma_T^2 = \sigma_R^2 + \sigma_{DRF}^2 \quad (13)$$

Le résultat de la convolution de la gaussienne avec la DRF a la même forme analytique que la DRF mais d'écart-type plus grand (σ_T).

Une propriété importante de la fonction de résolution est la conservation du moment centré d'ordre deux en sa forme quadratique. Même si le profil original n'est pas gaussien, on peut toujours écrire :

$$\sigma_M^2 = \sigma_R^2 + \sigma_{DRF}^2 \quad (14)$$

Où σ_M est l'écart-type du profil mesuré. Dans le cas général, théoriquement c'est possible de déterminer σ_R si σ_M et σ_{DRF} sont connus.

La Figure 8-a présente les variations de l'écart-type du profil mesuré σ_M en fonction de celui du profil original σ_R . Une grande concordance est trouvée entre σ_M mesuré directement et σ_M déduit de l'équation (14).

L'opération inverse qui consiste à déterminer l'écart-type du profil original σ_R de celui du profil mesuré σ_M est limitée par les petites valeurs de σ_R par rapport à celui de la DRF. Par exemple, un écart-type mesuré de 109 Å nous donne un écart-type σ_R de 107 Å alors que le profil original de départ a un écart-type de 100 Å, conduisant ainsi à une erreur de 7 Å seulement. Cependant un écart-type mesuré de 46 Å conduit à $\sigma_R = 40$ Å alors que l'écart-type initial est de 10 Å, ce qui donne une erreur de 30 Å !

Nous avons également mesuré les variations de la largeur à mi-hauteur (FWHM) du profil mesuré en fonction de celle du profil original. Cette procédure n'est, théoriquement, pas valable en analyse SIMS car la majorité du profil est gouvernée par la décroissance exponentielle de la DRF. Cependant, dans les hauts niveaux du signal, la DRF est gouvernée uniquement par son caractère gaussien, le caractère exponentiel est dominant dans les bas niveaux du signal.

Par le même processus précédent, nous avons mesuré la FWHM de la convolution numérique des fonctions et à noter que la relation :

$$(\text{FWHM})_M^2 = (\text{FWHM})_R^2 + (\text{FWHM})_{DRF}^2 \quad (15)$$

n'est autant pas vérifiée que l'équation (14) comme s'est montré par la Figure 8-b.

Cette étude va nous servir à déterminer la résolution en profondeur ultime de l'algorithme de déconvolution sur ce type de structure.

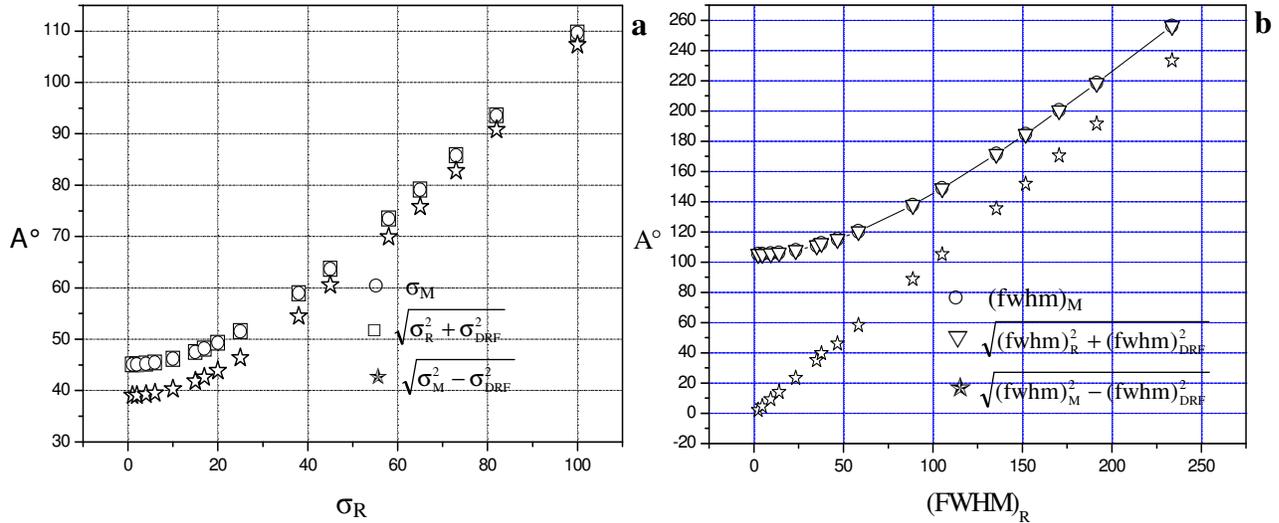


Figure 8 : a) Evolution de l'écart-type du profil mesuré en fonction de l'écart-type du profil original.

b) Evolution de FWHM du profil mesuré en fonction de FWHM du profil original.

Vérification des relations théoriques données par (14) et (15).

2.4. Deux deltas-dopage adjacents

Nous allons maintenant voir l'influence de la mesure (la simulation) SIMS sur deux structures consécutives, notamment sur deux deltas - dopage adjacents. Dans une mauvaise mesure, ces deux courbes se superposent donnant ainsi une seule courbe en forme de cloche plus large que les précédentes. La question qui se pose : à partir de quelle distance d la mesure peut distinguer entre les deux structures ? On parle alors de la limite de séparation (vue dans le chapitre 1 § 7.3) qui est un bon critère pour caractériser la résolution en profondeur de l'analyse.

Dans ce sens, nous avons simulé l'analyse SIMS de deux deltas-dopage adjacents séparés par une distance d variable entre 50 et 300 Å. Les profils ont été bruités avec un bruit gaussien de 35 dB. La DRF utilisée pour l'analyse est la même utilisée précédemment ($\sigma_{DRF} = 43,88$ Å). La limite de séparation est déterminée par le contraste que nous avons défini dans le chapitre 1 (§ 7.3, équation (19)) par :

$$C_{\%} = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max}} \cdot 100 \quad (16)$$

La variation du contraste en fonction de la distance est illustrée dans la Figure 9.

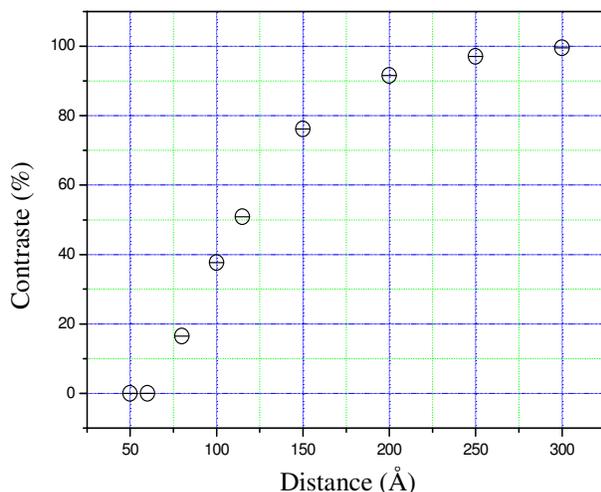


Figure 9 : Variation du contraste en fonction de la distance. $\sigma_{DRF} = 43.88$ Å, $SNR = 35dB$.

Nous constatons que deux deltas - dopage sont complètement séparés par la mesure si sont séparés par une distance de 115 Å. Ils sont distingués par la mesure si sont séparés par une distance de 75 Å.

Un exemple de l'analyse de ce type d'échantillon est donné par la Figure 10 pour $d_{(%, 35dB)} = 300$ Å est 115 Å qui correspondent respectivement à $C = 100\%$ et 50% .

A noter que ces résultats sont relatifs et n'ont aucun caractère absolu car beaucoup de paramètres entre en jeu lors de l'analyse SIMS. Néanmoins, nous avons uniquement

donné des exemples pour certaines conditions d'analyse caractérisées par une certaine DRF.

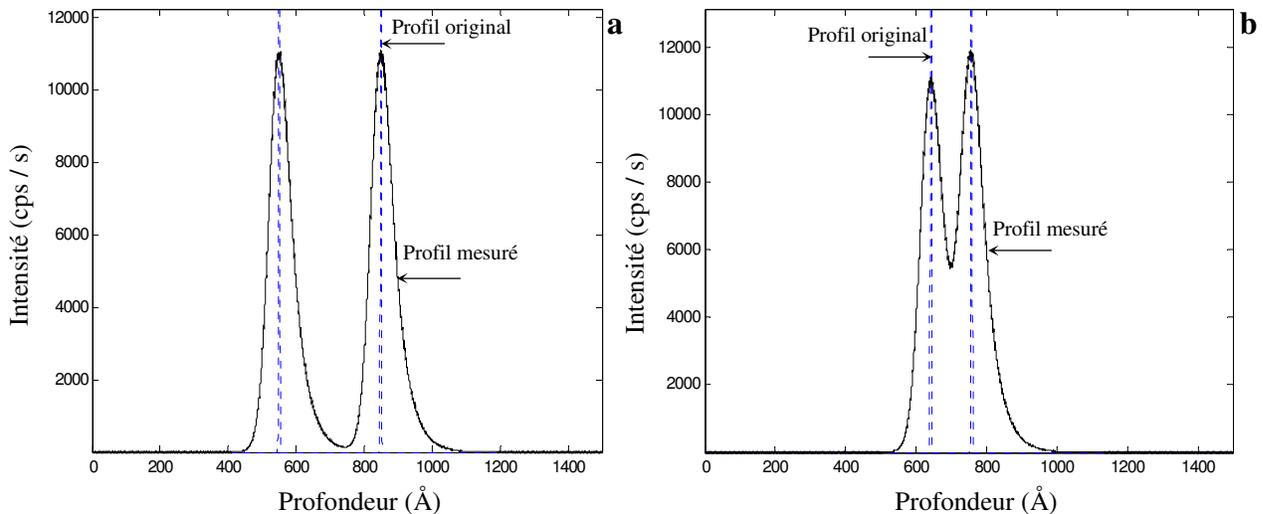


Figure 10 : Simulation de l'analyse SIMS de deux deltas - dopage séparés initialement par : a) 300 Å, b) 115 Å. SNR = 35 dB, $\sigma_{DRF} = 43,88$ Å.

- [1] **Brice G.**, *Etude de la résolution en profondeur lors de l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires. Mise au point d'une procédure de déconvolution et applications*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1997, 222 p.
- [2] **Allen P. N., Dowsett M. G. et Collins R.**, *SIMS profile quantification by maximum entropy déconvolution*, Surface and interface analysis, 1993, Vol. 20, pp. 696-702
- [3] **Magee C. W. et Honig R. E.**, *Depth profiling by SIMS: depth resolution, dynamic range and sensitivity*, Surface and interface analysis, 1982, Vol. 4, n° 2, pp. 35-41
- [4] **Hoffman S.**, *From depth resolution to depth resolution function: Refinement of the concept for delta-layers, single layers and multilayers*, Surface and Interface analysis, 1999, Vol. 27, pp.825-834