

**République Algérienne Démocratique et Populaire**  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



**Université Batna 2 – Mostefa Ben Boulaïd**  
**Faculté de Technologie**  
**Département d'Electronique**



**Thèse**

Présentée pour l'obtention du diplôme de :  
**Doctorat en Sciences en Electronique**  
**Option : Micro-ondes et Traitement du Signal**

Sous le Thème :

**Multirésolution Déconvolution des profils en profondeur de  
l'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires.  
Cas de Silicium dopé par le Bore**

Présentée par :

**DAHRAOUI Nadia**

**Devant le jury composé de :**

|                          |       |                         |               |
|--------------------------|-------|-------------------------|---------------|
| M. FORTAKI Tarek         | Prof. | Université de Batna 2   | Président     |
| M. BOULAKROUNE M'Hamed   | Prof. | ENP Constantine         | Rapporteur    |
| M. BENATIA Djamel        | Prof. | Université de Batna 2   | Co-Rapporteur |
| M. BENLATRECHE Med Salah | MCA   | Université de Boumerdes | Examineur     |
| M. BEDRA Sami            | MCA   | Université de Khenchela | Examineur     |

**Juillet 2020**

# Remerciements

*Avant tout, je remercie **Dieu** de m'avoir donné la force pour réaliser ce présent travail.*

Je voudrais tout d'abord remercier grandement mon directeur de thèse, Professeur **BOULAKROUNE M'hamed**, pour toute son aide. Je suis ravi d'avoir travaillé en sa compagnie car outre son appui scientifique, il a toujours été là pour me soutenir et me conseiller au cours de l'élaboration de cette thèse.

Je tiens ensuite à remercier professeur **BENATIA Djamel**, pour avoir apporté son expertise et avoir accepté d'examiner mon travail de doctorat en tant que rapporteur et membre de mon jury.

Je remercie Monsieur **FORTAKI Tarek**, Professeur au département d'électronique, université de Batna, qu'il m'a fait l'honneur de présider le jury de soutenance.

Je remercie également Monsieur **BENLATRECHE Mohamed Salah**, Maitre de conférence à l'université de Boumerdes et Monsieur **BEDRA Sami**, Maitre de conférence à l'université de Khenchela, qui ont fait l'honneur de bien vouloir examiner ce travail et participer à ce jury.

J'adresse mes sincères remerciements à monsieur TIDJANI Zakaria et monsieur LAKEHAL Brahim, ils ont pris le temps de m'écouter et de discuter avec moi. Leurs remarques m'ont permis d'envisager mon travail sous un autre angle. Pour tout cela je les remercie.

*J'adresse tout particulièrement un très grand merci à mes parents, pour leur soutien constant et leurs encouragements, à mes frères, à mon petit ange et à toute ma famille et ma belle-famille.*

*Enfin, pour terminer, je tiens à remercier mon mari, **Fateh OUCHENE**, pour sa présence, sa confiance, son soutien, sa patience, pour avoir su trouver les mots justes dans les moments les plus difficiles...*

## Résumé

Le but terminal de ce travail est l'amélioration de la résolution en profondeur, au-delà de ses limites physiques et instrumentales, de l'analyse par SIMS. Pour ce faire, nous avons adopté des algorithmes de déconvolution multirésolution post érosion pour surmonter les limites des algorithmes monorésolution proposé dans ce domaine à ce jour. En effet, ces algorithmes se basent sur la régularisation de Tikhonov-Miller avec modèle de solution, ce dernier est un signal débruité par décomposition sur une base d'ondelettes et à l'aide du filtre de kalman. Les résultats de ce traitement sont très satisfaisants, En particulier l'ordre de grandeurs des gains en résolution en profondeur et en maximum de pics. De plus, les profils déconvolués ne contiennent pas des oscillations et artefacts qui sont dus principalement à la présence du bruit dans les profils mesurés.

## Abstract

In this work, the improvement by deconvolution of the depth resolution in Secondary Ion Mass Spectrometry (SIMS) analysis is considered. In particular, we adopt new Tikhonov-Miller deconvolution methods where a priori model of the solution is included. The latter is a denoisy and pre-deconvoluted signal obtained from: first, by the application of wavelet shrinkage algorithm or kalman filter, second by the introduction of the obtained denoisy signal in an iterative deconvolution algorithm. It is shown that this new algorithms give best results without artifacts and oscillations related to noise. This, leads to a significant improvement of the depth resolution and picks' maximums. In the light of the obtained results, the advantages and limitations of this new methods as well as suggestions for future work are presented and discussed.

## ملخص

الهدف النهائي من هذا العمل هو تحسين الدقة بالنسبة لحساب العمق في تحليل المطياف الكتلي للأيونات الثانوية (SIMS) ، للقيام بذلك، اعتمدنا خوارزميات multirésolution متعددة الدقة للتغلب على قيود الخوارزميات أحادية الدقة monoresolution المقترحة في هذا المجال حتى الآن. في الواقع ، تستند هذه الخوارزميات إلى اعتماد تسوية تيكونوف-ميلار Tikhonov-Miller مع نموذج مسبق للحل ، والأخير هو إشارة منقوصة الضوضاء عن طريق التحلل على أساس المويجات واستخدام فلتر kalman. من الواضح أن هذه الخوارزميات الجديدة تعطي أفضل النتائج دون الإهتزازات والتذبذبات المتعلقة بالضوضاء. هذا ، يؤدي إلى تحسن كبير في دقة العمق ويختار الحد الأقصى. في ضوء النتائج التي تم الحصول عليها ، يتم عرض ومناقشة مزايا وتحديات هذه الأساليب الجديدة وكذلك اقتراحات العمل في المستقبل.

**SIMS:** Secondary Ions Mass Spectrometry;

**CAO:** Conception Assistée par Ordinateur ;

**MRI:** Mixing Roughness Information;

**DRF:** Depth Resolution Function (Fonction de résolution en profondeur) ;

**TOC :** Transformée en Ondelette Continue ;

**TOD :** Transformée en Ondelette Discrète ;

**LIDAR :** LIght Detection And Ranging (La detection par laser);

**EEG:** Electro-Encéphalo-Gramme;

**DWT :** Descrete Wavelet Transform ;

**FKE :** Filtre de Kalman Etendu ;

$n_T$  : Nombre d'atomes éjectés ;

$N_0$  : Nombre d'ions incidents ;

$Y_T$  : Taux de pulvérisation ;

$Y_k$  : Taux de pulvérisation élémentaire (d'une espèce donnée k) ;

$n(k^{\pm n})$  : Nombre d'ions  $k^{\pm}$  émis ;

$n(k)$  : Nombre d'atomes k pulvérisés ;

$\alpha^{\pm n}(k)$  : Taux d'ionisation d'une espèce donnée k (parfois appelée probabilité d'ionisation) ;

$\eta(k^{\pm n})$  : Facteur de transmission (parfois noté f ou T) ;

$n_{det}(k^{\pm n})$  : Nombre d'ions effectivement détectés ;

$n(k^{\pm n})$  : Nombre d'ions créés à la sortie de l'échantillon ;

$Y_k^{\pm n}$  : Taux d'émission ionique (nombre d'ions de l'élément k émis par ion primaire envoyé sur la cible) ;

$I_p$  : l'intensité primaire du signal SIMS ;

$Y_k^c$  : Rendement de pulvérisation élémentaire (*component sputter yield*) ;

$\lambda_d$  : Décroissance exponentielle ;

$W$  : Epaisseur de la zone mixée ;

$E_p$  : Energie des ions primaires ;

$R_p$  : Profondeur de pénétration des ions primaires dans la cible ;

$\theta$  : l'angle d'incidence des espèces ;

$\lambda_{int}$  : La pente intrinsèque de l'échantillon ;

$C(s, u)$  : Coefficients d'ondelettes où  $s$  est l'échelle et  $u$  est le facteur de position à analyser ;

$\tilde{\mathbf{F}}$  et  $\tilde{\mathbf{G}}$  : Matrices construite 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 ;

$\mathbf{y}_a$  : Coefficients d'approximation du signal ;

$\mathbf{y}_d$  : Coefficients de détails du signal ;

$\hat{\mathbf{y}}_d$  : Coefficients de détails du signal modifiés ;

$\alpha$  : Paramètre de régularisation ;

$\mathbf{L}_1(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}_0)$  : Représente la distance entre le signal source  $\mathbf{x}$  et la solutions extrême  $\tilde{\mathbf{x}}_0$  (Solution *ultra-rugueuse*) ;

$\mathbf{L}_2(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}_\infty)$  : Représente la distance entre le signal source  $\mathbf{x}$  et la solutions extrême  $\tilde{\mathbf{x}}_\infty$  (Solution *ultra-douce*) ;

$\varepsilon^2$  : Energie du bruit ;

$\mathbf{D}$  : Opérateur de contrainte ;

$\mathbf{x}_{mod}$  : Modèle de solution ;

**MD4**, **MD5** et **MD6** : Signifie **4**, **5** et **6** Multi-delta dopage successivement ;

## TABLE DES MATIERE

|                                   |          |
|-----------------------------------|----------|
| <b>INTRODUCTION GENERALE.....</b> | <b>1</b> |
|-----------------------------------|----------|

### CHAPITRE 1 : NOTIONS DE BASE SUR L'ANALYSE EN PROFONDEUR PAR SIMS

|  |           |
|--|-----------|
| <b>INTRODUCTION.....</b>   | <b>6</b>  |
| <b>1. EVOLUTION DE LA MICROELECTRONIQUE MODERNE.....</b>                     | <b>6</b>  |
| 1.1. Brève histoire de la microélectronique.....                             | 6         |
| 1.2. Besoin de la microélectronique moderne.....                             | 7         |
| <b>2. SPECTROSCOPIE DE MASSE DES IONS SECONDAIRE.....</b>                    | <b>8</b>  |
| 2.1. Principes et Applications.....  | 8         |
| 2.2. Différents processus de l'analyse SIMS.....                             | 9         |
| 2.2.1. La pulvérisation.....   | 9         |
| 2.2.2. L'ionisation des atomes pulvérisés.....                               | 9         |
| 2.2.3. La transmission des ions secondaires.....                             | 10        |
| 2.2.4. Equation SIMS de base.....  | 10        |
| 2.3. Avantages et inconvénients de la technique SIMS.....                    | 11        |
| 2.4. Caractéristiques générales.....   | 12        |
| 2.4.1. Une analyse élémentaire ou isotopique.....                            | 12        |
| 2.4.2. Une analyse in situ destructive.....                                  | 12        |
| 2.4.3. Une analyse semi-quantitative.....                                    | 12        |
| 2.4.4. Une analyse dynamique.....  | 13        |
| 2.4.5. Sensibilité à la nature du matériau analysé.....                      | 13        |
| 2.5. Spectroscopie, Profils en profondeur et Imagerie.....                   | 13        |
| <b>3. ANALYSE EN PROFONDEUR.....</b>   | <b>14</b> |
| 3.1. Dynamique du signal.....  | 15        |
| 3.2. Sensibilité.....  | 15        |
| 3.3. Résolution en profondeur.....   | 15        |
| <b>4. MECANISMES REGISSANT LA RESOLUTION EN PROFONDEUR.....</b>              | <b>16</b> |
| 4.1. Le mixage collisionnel.....   | 16        |
| 4.1.1. Définition.....   | 16        |
| 4.1.2. Principe.....   | 16        |
| 4.1.3. Influence du mixage collisionnel sur la résolution en profondeur..... | 17        |
| 4.1.4. Modélisation de la décroissance exponentielle.....                    | 17        |
| 4.2. Effets de l'oxygène sur la résolution en profondeur.....                | 18        |
| 4.3. Problèmes d'érosion non homogène.....                                   | 20        |

|           |   |           |
|-----------|---|-----------|
| 4.3.1.    | Inclinaison du fond du cratère.....   | 20        |
| 4.3.2.    | Effets de bords.....  | 20        |
| 4.3.3.    | Rugosité induite .....  | 21        |
| <b>5.</b> | <b>POSITION DU PROBLEME : AMELIORATION DE LA RESOLUTION EN PROFONDEUR .....</b> | <b>21</b> |
| 5.1.      | Optimisation des paramètres physiques de l'analyse.....                         | 22        |
| 5.2.      | Traitement numérique post-érosion .....   | 23        |
|           | <b>CONCLUSION .....</b>   | <b>24</b> |

## CHAPITRE 2 : DE LA RESOLUTION EN PROFONDEUR A LA FONCTION DE RESOLUTION EN PROFONDEUR

|           |  |           |
|-----------|--|-----------|
|           | <b>INTRODUCTION .....</b>  | <b>28</b> |
| <b>1.</b> | <b>RESOLUTION EN PROFONDEUR .....</b>                                    | <b>28</b> |
| 1.1.      | Définition .....   | 28        |
| 1.2.      | Méthodes d'évaluation .....  | 28        |
| 1.2.1.    | Evaluation à partir d'une interface abrupte .....                        | 29        |
| 1.2.2.    | Evaluation à partir d'un delta-dopage .....                              | 30        |
| 1.2.3.    | Séparation de deux deltas-dopage .....                                   | 31        |
| <b>2.</b> | <b>RAPPEL SUR LA CONVOLUTION .....</b>                                   | <b>32</b> |
| 2.1.      | Définition .....   | 32        |
| 2.2.      | Convolution en physique expérimentale .....                              | 33        |
| <b>3.</b> | <b>Identification de la réponse impulsionnelle du système SIMS .....</b> | <b>34</b> |
| 3.1.      | Description expérimentale et spécificité de la DRF .....                 | 36        |
| 3.2.      | Phénomènes liés aux paramètres de la DRF .....                           | 37        |
| 3.3.      | Détermination de la fonction de résolution .....                         | 38        |
| 3.3.1.    | Procédure théorique .....  | 38        |
| 3.3.2.    | Détermination expérimentale de la DRF .....                              | 39        |
| <b>4.</b> | <b>Modélisation de la fonction de résolution en profondeur .....</b>     | <b>40</b> |
| 4.1.      | Définition .....   | 40        |
| 4.2.      | Objectifs de la modélisation .....                                       | 40        |
| 4.3.      | Différentes formes de la DRF .....                                       | 41        |
| <b>5.</b> | <b>SPECTRE DE LA DRF .....</b>   | <b>45</b> |
|           | <b>CONCLUSION .....</b>  | <b>47</b> |

## CHAPITRE 3 : TECHNIQUES DE DEBRUITAGE DES SIGNAUX SIMS

|   |           |
|---|-----------|
| <b>INTRODUCTION .....</b>   | <b>50</b> |
| <b>1. LE BRUIT DANS L'ANALYSE SIMS .....</b>  | <b>50</b> |
| 1.1. Notion de bruit .....  | 50        |
| 1.2. Nature du bruit en SIMS.....   | 51        |
| <b>2. DEBRUITAGE EN UTILISANT LA TRANSFORME DE FOURIER<br/>RAPIDE.....</b>                              | <b>51</b> |
| 2.1.Transformée de fourier.....   | 52        |
| 2.2.Transformée de Fourier Rapide (FFT).....  | 52        |
| 2.3.Débruitage d'un profil SIMS réel.....   | 53        |
| <b>3. DEBRUITAGE EN UTILISANT LES ONDELETTES.....</b>   | <b>54</b> |
| 3.1.De la transformée de fourier à la transformée en ondelettes.....                                    | 54        |
| 3.2. Panorama de quelques applications des ondelettes.....  | 58        |
| 3.3. Algorithme de débruitage par les ondelettes.....   | 60        |
| 3.3.1. Décomposition sur une base d'ondelettes.....   | 61        |
| 3.3.2. Seuillage des coefficients d'ondelettes.....   | 62        |
| 3.2.2.1.Différents types de seuillage .....   | 63        |
| 3.4. Décomposition sur une base d'ondelettes. débruitage d'un profile réel (cinq delta dopage)<br>..... | 64        |
| <b>4. Débruitage en utilisant le filtre de kalman .....</b>   | <b>68</b> |
| 4.1. Etude de filtre de kalman .....  | 68        |
| 4.1.1. Problèmes de filtrage .....  | 68        |
| 4.1.2. Evolution historique du filtre de Kalman .....   | 68        |
| 4.1.3. Définition du filtre de Kalman.....  | 69        |
| 4.1.4. Fonctionnement du filtre de Kalman .....   | 69        |
| 4.1.5. Expression du filtre de Kalman .....   | 70        |
| 4.2.Débruitage d'un profil SIMS réel .....  | 71        |
| <b>CONCLUSION .....</b>   | <b>73</b> |

**CHAPITRE 4 :  
DECONVOLUTION: METHODES ET LIMITES**

|  |           |
|--|-----------|
| <b>INTRODUCTION.....</b>                                       | <b>76</b> |
| <b>1. GENERALITES SUR LA DECONVOLUTION.....</b>                | <b>77</b> |
| 1.1. Définitions.....  | 77        |
| 1.2.Solution de la déconvolution.....                          | 77        |
| 1.2.1. Déconvolution dans le domaine continu.....              | 78        |
| 1.2.2. Déconvolution dans le domaine discret .....             | 79        |
| <b>2. DECONVOLUTION DES PROFILS SIMS : ETAT DE L'ART .....</b> | <b>81</b> |
| <b>3. METHODES DE DECONVOLUTION.....</b>                       | <b>81</b> |



|  |           |
|--|-----------|
| 3.1. Méthodes non itératives.....  | 82        |
| 3.1.1. Filtrage inverse et solution des moindres carrés.....   | 82        |
| 3.1.2. Filtrage au sens des moindres carrés sous contraintes : Régularisation.....   | 83        |
| 3.1.2.1. Introduction à la régularisation .....  | 83        |
| 3.1.2.2. Philosophie de la régularisation .....  | 84        |
| 3.1.2.3. Différentes approches de la régularisation .....  | 85        |
| 3.1.3. Introduction du modèle de solution dans la régularisation .....   | 87        |
| 3.1.3.1. Régularisation de type Tikhonov-Miller avec modèle a priori de la solution.....   | 88        |
| 3.2. Méthodes itératives .....   | 89        |
| 3.2.1. Algorithme de Van Cittert .....   | 89        |
| 3.2.2. Régularisation de l'algorithme de Van Cittert .....   | 90        |
| 3.2.3. Introduction des contraintes dures dans l'algorithme de Van Cittert.....  | 90        |
| 3.2.4. Régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal pré-déconvolué .....  | 91        |
| 3.2.5. Régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal décomposé sur une base d'ondelettes. Déconvolution multirésolution..... | 93        |
| 3.2.6. Régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal débruité en utilisant le filtre de Kalman .....                         | 94        |
| <b>CONCLUSION .....</b>  | <b>96</b> |

**CHAPITRE 5 :  
DEBRUITAGE & DECONVOLUTION DES PROFILS SIMS REELS: RESULTATS ET  
DISCUSSIONS**

|   |            |
|---|------------|
| <b>INTRODUCTION .....</b>   | <b>100</b> |
| <b>1. PROBLÉMATIQUE PROPOSÉE .....</b>  | <b>100</b> |
| <b>2. ECHANTILLONS UTILISES .....</b>   | <b>102</b> |
| <b>3. IMPORTANCE DE LA REDUCTION DU BRUIT ET DE LA SUPPRESSION DES ARTEFACTS DANS LES TECHNIQUES DE RESTAURATION DES SIGNAUX.....</b> | <b>103</b> |
| 3.1. Déconvolution de l'échantillon MD4 .....   | 103        |
| <b>4. DEBRUITAGE ET DECONVOLUTION D'UN PROFIL SIMS REEL .....</b>   | <b>108</b> |
| 4.1 Débruitage de l'échantillon MD6 .....   | 108        |
| 4.2 Déconvolution de l'échantillon MD6 .....  | 109        |
| <b>5. INFLUENCE DE QUELQUES PARAMETRES SUR LA RESOLUTION EN PROFONDEUR .....</b>  | <b>112</b> |

|  |     |
|--|-----|
| 5.1 Influence de la DRF sur la résolution en profondeur. Déconvolution de l'échantillon MD5.....       | 112 |
| 5.2 Discussion sur l'effet du nombre d'itérations. Déconvolution de l'échantillon MD16 (BENNETT) ..... | 115 |
| <b>CONCLUSION</b> .....  | 118 |
| <b>CONCLUSION GENERALE</b> .....   | 122 |

## Introduction générale

Durant les dernières décennies, la réduction incessante des dimensions caractéristiques des circuits intégrés a permis à l'industrie de la microélectronique de connaître un formidable essor technologique et une réelle réussite économique qui, progressivement, ont transformé nos modes de vie et de production vers le "tout numérique" [1-6].

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 [7-10].

Parmi les outils de caractérisation utilisés, on trouve la Spectrométrie de Masse des Ions Secondaires (SIMS) en mode dynamique. Elle constitue une technique d'analyse de choix, grâce à sa sensibilité et ses performances en matière de résolution en profondeur. Elle offre la possibilité de détecter des éléments présents en faible quantité dans une matrice semiconductrice et de réaliser ainsi des profils de concentration en fonction de la profondeur.

La résolution en profondeur, en particulier, a fait de considérables progrès en quelques années, grâce à une instrumentation de plus en plus performante et à des techniques d'analyse de mieux en mieux maîtrisées. Certains auteurs considèrent aujourd'hui que les limites de la méthode sont presque atteintes, même si les meilleures performances sont loin de relever de l'analyse de routine [11-18]. L'évolution vers la résolution ultime passera par la compréhension exhaustive des phénomènes balistiques, chimiques et statistiques qui gouvernent l'analyse par bombardement ionique, ainsi que par l'amélioration encore plus poussée des techniques instrumentales.

Les performances présentées par l'analyse SIMS l'ont imposé comme un outil incontournable pour caractériser les jonctions. Cependant la réduction continue des dimensions des composants induit une amélioration continue des performances des techniques d'analyse en profondeur et non seulement de l'analyse SIMS. Un considérable effort au niveau instrumental est mené pendant ces dernières années pour améliorer les performances de la méthode. Cependant les développements SIMS ne sont pas aussi prononcés et rapides que ceux des techniques de fabrication des matériaux de la microélectronique. Additionnant à cet effet que la mesure SIMS,

de par son principe, implique un élargissement des profils mesurés même en utilisant les appareils les plus précis et dans les meilleures conditions expérimentales, il apparaît nécessaire pour progresser dans ce domaine de dépasser les résultats expérimentaux bruts en leur adjoignant un traitement numérique. Ce traitement doit être capable de remonter à une meilleure approche du profil réel à partir du profil expérimental [19-24].

Dans ce travail, nous nous proposons de présenter des moyens d'améliorer la résolution en profondeur de l'analyse par SIMS, et de développer particulièrement la possibilité d'appliquer des traitements numériques aux résultats expérimentaux. Pour cela cette thèse est répartie comme suit :

Dans ce premier chapitre, après une description de la technique d'analyse par SIMS, nous aborderons l'analyse en profondeur, l'aspect qui nous intéresse le plus dans ce travail. Nous nous attacherons plus longuement aux phénomènes physiques sur lesquels est fondée cette analyse. Enfin, nous concluons sur la problématique de l'application de l'analyse SIMS à la caractérisation des matériaux de la microélectronique moderne.

Nous aborderons dans le deuxième chapitre le problème de la résolution en profondeur, un des paramètres clés de la méthode. Sa connaissance est en effet importante pour juger de la proximité du profil mesuré avec le profil initial. Par la suite, nous passerons à l'étape préliminaire indispensable à la mise en œuvre de la déconvolution, à savoir la détermination de la réponse impulsionnelle du système appelée fonction de résolution en profondeur (DRF : Depth Resolution Function). Ses propriétés et ses caractéristiques seront examinées et une forme analytique sera utilisée pour rendre son utilisation beaucoup plus souple et permettre par la suite la déconvolution de n'importe quel profil expérimental.

Après le passage en revue des notions de base sur le bruit et plus particulièrement sa nature dans l'analyse SIMS. Le chapitre trois présente quelques techniques de débruitage. Nous allons insister sur deux techniques, L'un est basé sur la transformée en ondelettes discrète et l'autre se base sur le filtre de Kalman.

Le quatrième chapitre se penche sur les bases de la restauration d'informations par déconvolution. Les aspects théoriques seront abordés avant la description de quelques méthodes simples, à la base des méthodes plus complexes et orientées vers les systèmes fortement dégradants. Il est nécessaire à la compréhension des paramètres qui règlent la mise en œuvre de la

technique de déconvolution et à la compréhension de la philosophie générale attachée aux problèmes de régularisation d'un problème mal posé. Cette partie se terminera par la présentation d'un nouvel algorithme de déconvolution bien adapté aux signaux SIMS abrupts.

Enfin, le cinquième et le dernier chapitre de cette étude verra la mise en application de la méthode de déconvolution que nous avons choisie, et l'évaluation de ses performances dans un contexte réel. Nous aborderons les performances ultimes de la déconvolution avec le cas particulier des deltas-dopage. Nous concluons par un bilan du travail effectué et les perspectives dans ce domaine.

### Bibliographie de l'Introduction Générale

- [1] **Steven F., Janusz B., Andreas S., Paola F., Alexis F et Valentina S.,** *Toward Carrier Profiling in Nanometer-Wide Si Fins with Micro Four-Point Probe, 22<sup>nd</sup> International Conference on Ion Implantation Technology (IIT), DOI: 10.1109/IIT.2018.8807934, IEEE Xplore, Germany, 2018.*
- [2] **Kline J. R., Sunday D. F., Windover D., et Bunday B.D.,** *X-ray scattering critical dimensional metrology using a compact x-ray source for next generation semiconductor devices, Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS 16, 014001, 2017.*
- [3] **Muramoto S et Bennett J.,** *Inkjet printing of gold nanoparticles onto a biologically relevant matrix to create quantitative test materials for time-of-flight secondary ion mass spectrometry, Surface and Interface Analysis, 2020.*
- [4] **Dialameh M., Lupi F. F., Honicke P., Kayser Y., Beckho B., Weimann T., Fleischmann C., Vandervost W., Dubcek P., Pivac B., Perego M., Seguni G., Leo N.D et Boarino L.,** *Development and synchrotron-based characterization of al and cr nanostructures as potential calibration samples for 3d analytical techniques, Physica Status Solidi A 215, 2017.*
- [5] **Soltwisch V., Honicke P., Kayser Y., Elibracht J., Probst J., Scholze F et Beckhoff B.,** *Element sensitive reconstruction of nanostructured surfaces with finite-elements and grazing incidence soft x-ray fluorescence, Nanoscale 10, 6177–6185, 2018.*
- [6] **Andrle A., Hnicke P., Schneider P.I., Kayser Y., Hammerschmidt M., Burger S., Scholze F., Beckhoff B et Solt.,** *Grazing incidence x-ray fluorescence based characterization of nanostructures for element sensitive profile reconstruction, Proc. SPIE - Modeling Aspects in Optical Metrology VII 11057, 2019.*

- [7] **Kian Kok O., Yun W., Han Wei T., Ramesh Rao N et Zhi Qiang M.,** *Case study on precise boron quantification of mixed matrix, 26<sup>th</sup> International Symposium on Physical and Analysis of Integrated Circuit (IPFA), DOI: 10.1109/IPFA47161.2019.8984874, IEEE Xplore, Hangzhou, China, 2019.*
- [8] **Philippe M.,** *Une histoire de la microélectronique, Engineering school, Ecole nationale supérieure des Télécommunications, pp. 32, 2007.*
- [9] **Voisin P.,** *Lithographie de nouvelle génération par nanoimpression assistée par UV : Etude et Développement de matériaux et procédés pour l'application microélectronique., Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier de Grenoble, 171 p, 2007.*
- [10] **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 de ses séquences sur la vitesse d'érosion et sur la résolution en profondeur, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 145 p, 2004.*
- [11] **Hoffman S.,** *Ultimate depth resolution and profile reconstruction in sputter profiling, Surface and Interface Analysis, pp. 228-236, 2000.*
- [12] **Hoffman S.,** *Profile reconstruction in sputter depth profiling, Thin Solid Films, pp. 336-342, 2001.*
- [13] **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, 222 p, 1997.*
- [14] **Peter S.,** *Recollections of fifty years with sputtering, Thin Solid Film, pp. 6031-6049, Elsevier, 2012.*
- [15] **Baboux N.,** *Analyse ultime par spectrométrie de masses des ions secondaires des matériaux de la microélectronique avancée : Contribution à l'interprétation des profils de bore dans le silicium, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 139 p, 2001.*
- [16] **Gautier B.,** *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, 230 p, 1997.*
- [17] **Boulakroune M.,** *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, Thèse de doctorat, Université El Hadj Lakhdar de Batna, 229 p, 2008.*
- [18] **Alain P., Khalid H et Lee C.,** *Coupling Secondary Ion Mass Spectrometry and Atom Probe Tomography for Atomic Diffusion and Segregation Measurements ,Special Issue 2 (Atom Probe*

- Tomography and Microscopy APT&M* 2018), Vol. 25, Pp. 517-523, DOI: <https://doi.org/10.1017/S1431927618015623>, 2019.
- [19] **Boulakroune M.**, *Reliability of multiresolution deconvolution for improving depth resolution in SIMS analysis*, Volume 386, Pp. 24-32, Elsevier, 2016.
- [20] **Margaux F.**, *Nouvelles approches par spectrométrie de masse pour la caractérisation de systèmes archéologique et biologiques. Application à l'étude de cheveux de momies préhispaniques de la cote andine.*, Thèse de doctorat, Université de Strasbourg, Ecole doctorale des sciences chimiques, 310 p, 2016.
- [21] **Dahraoui N., Boulakroune M et Benatia D.**, *Importance of noise reduction and suppression of artifacts in restoration techniques : A state of the art*, 5<sup>th</sup> International Conference on Control Engineering & Information Technology (CEIT 2017), Tunisia, Vol :32, pp. 32-36. 2017.
- [22] **Valentina S., Silvia A., Alexis F., Thierry C., Paul Van Der H et Wilfried V.**, *Self-Focusing SIMS: A metrology solution to area selective deposition*, *Applied Surface Science*, Vol. 476, Pp 594-599, Elsevier, 2019.
- [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, 183 p, 2001.
- [24] **Dahraoui N., Boulakroune M et Benatia D.**, *New Deconvolution Technique to improve the Depth Resolution in Secondary Ions Mass Spectrometry*, *Journal of Nano-And Electronics Physics*, Vol :11, N° 02, 02021 (5pp). 2019.

# Chapitre 1 : Notions de base sur l'analyse en profondeur par SIMS

## INTRODUCTION

La réduction continue des dimensions des composants de la micro-électronique s'accompagne de la diminution des épaisseurs des couches actives, qui sont maintenant de quelques nanomètres, et impose l'élaboration d'interfaces abruptes bien contrôlées. Ceci exige en effet des résolutions en profondeur accrues, actuellement insuffisante pour caractériser sans ambiguïté les structures courantes de la micro-électronique moderne [1-4].

De nouveaux procédés technologiques sont régulièrement mis en œuvre, et il est impératif d'en assurer le contrôle le plus parfait possible. Il en découle une augmentation continue du cahier des charges des méthodes d'analyses employées à ces fins. Parmi les outils actuellement utilisés, on trouve la spectrométrie de masse des ions secondaires (ou SIMS) en mode dynamique. Cette technique offre la possibilité d'accéder à la constitution en profondeur des dispositifs tout en disposant d'une excellente sensibilité (de l'ordre du ppm), et en offrant une résolution en profondeur acceptable (de l'ordre de quelques nanomètres en moyenne à l'heure actuelle). Ces qualités font même parfois oublier ses inconvénients : son caractère destructif, sa mauvaise résolution latérale et sa propension à générer des artefacts.

Dans ce chapitre, après une description de la technique d'analyse par SIMS, nous aborderons l'analyse en profondeur, l'aspect qui nous intéresse le plus dans ce travail. Nous nous attacherons plus longuement aux phénomènes physiques sur lesquels est fondée cette analyse. Enfin, nous conclurons sur la problématique de l'application de l'analyse SIMS à la caractérisation des matériaux de la microélectronique moderne.

## 1. EVOLUTION DE LA MICROELECTRONIQUE MODERNE

### 1.1. Brève histoire de la microélectronique

Un demi-siècle après l'invention du transistor (qui a eu lieu en 1947), les circuits intégrés comportaient de l'ordre de cent millions de transistors par puce ( $10^8$ ). A partir de l'invention du circuit intégré (interconnexion de plusieurs transistors sur une même puce) en 1958, l'accroissement s'est fait de façon exponentielle, par un doublement tous les 18 mois. Ce rythme



avait été remarqué dès 1965 par G. Moore (d'où le nom de loi de Moore). Il s'est toujours maintenu depuis et les prédictions parient sur son maintien pendant une dizaine d'année encore [5-7].

Aucune autre technique n'a connu un développement aussi rapide dans l'histoire de l'humanité. Cette variation exponentielle s'applique à tous les paramètres caractérisant l'électronique : dimensions des transistors (dont la surface est divisée par 2 tous les 3 ans) [8].

Le nombre total de transistors en service en 1997 était estimé à  $2 \cdot 10^{17}$ , soit 40 millions par habitant de la planète. Cette évolution a rendu possible le développement des ordinateurs, de l'informatique, des logiciels. Sans le transistor, il n'aurait pas été possible de développer des ordinateurs d'une puissance et d'une fiabilité suffisantes pour envisager le développement de l'industrie du logiciel. En retour, les puces actuelles ne peuvent être conçues qu'avec l'aide de programmes de CAO (Conception Assistée par Ordinateur) sophistiqués permettant de gérer leur complexité.

Cette évolution a également rendu possible le développement des télécommunications et des réseaux. Sans électronique complexe, pas de centraux téléphoniques modernes, pas d'informatique distribuée, pas d'internet, pas de téléphone mobile, pas de multimédia...

Tout cet ensemble de techniques aux développements imbriqués, associant ordinateurs, logiciels, électronique, Silicium, et transport de l'information forment un « système technique », qui transforme en profondeur la société en un temps court, d'où le nom de révolution ». On parle de deuxième révolution industrielle », en comparaison avec la première survenue au 19<sup>ème</sup> siècle et liée au système technique fondé sur : moteurs, énergie, métaux, machines, outils, transport, des matières et personnes, extraction minière, ...etc.

## **1.2.Besoin de la microélectronique moderne**

Depuis une cinquantaine d'année, l'industrie de la microélectronique a pris une place importante dans les domaines de la science et de la recherche, mais aussi dans les objets du quotidien. Dans les secteurs de l'aéronautique, du spatial, de la défense ou encore plus récemment dans le secteur médical, la miniaturisation des composants est un moteur d'innovation et d'efficacité [9-12].

L'analyse et les techniques de détection doivent être de plus en plus précises et performantes pour répondre à ces nouvelles caractéristiques industrielles.

Nombreux laboratoires d'analyse et de caractérisation de matériaux disposent d'une expérience significative dans la mise en œuvre de techniques de pointe, et un savoir-faire reconnu pour l'exploitation des données et l'interprétation des résultats. Il existe différents types d'analyses tels que l'analyse chimique (métaux lourds, aditifs, solvants résiduels), l'analyse thermique, l'analyse métallurgique et l'analyse de surface.

## **2. SPECTROSCOPIE DE MASSE DES IONS SECONDAIRE**

### **2.1. Principes et Applications**

La Spectroscopie de Masse d'Ions Secondaires (SIMS) est une technique d'analyse physico-chimique de l'extrême surface. Elle est basée sur la détection des particules chargées (ions secondaires) produits sous l'effet d'un bombardement d'ions incidents (ions primaires). La nature des ions secondaires émis est intimement liée à celle de la surface de l'échantillon. De plus, les ions secondaires ne peuvent provenir que de l'extrême surface, ce qui fait du SIMS une des techniques les plus sensibles à la surface. Le phénomène SIMS est suffisamment général pour pouvoir analyser tout type de surface. Les applications du SIMS sont donc nombreuses: analyse élémentaire et moléculaire, profil en profondeur, imagerie ionique, identification chimique, etc.

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 quadrupôle 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 [13,14].

## 2.2. Différents processus de l'analyse SIMS

### 2.2.1. La pulvérisation

Une des manières d'éroder un matériau de façon contrôlée est la *pulvérisation*. Ce phénomène se produit lorsque l'on expose la surface d'un matériau à un bombardement de particules massives et (cinétiquement) énergétiques [14-17].

Lors du bombardement ionique, la partie des cascades de collisions localisée vers la surface engendre l'éjection d'atomes hors de l'échantillon. 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* qui correspond au nombre d'atomes de la cible pulvérisés par l'arrivée d'un ion primaire. Si la cible contient plusieurs espèces atomiques, auxquelles on associe l'indice  $k$ .

$$Y_t = \sum_k Y_k = \frac{n_T}{N_0} \quad (1.1)$$

Les atomes ne sont pas pulvérisés proportionnellement à leur concentration dans la matrice mais selon un processus de *pulvérisation préférentielle*. Ce phénomène entraîne localement un appauvrissement de l'espèce pulvérisée préférentiellement, et donc une concentration dynamique de chaque élément.

En effet, l'appauvrissement d'une espèce, et donc l'enrichissement d'une autre à la surface de l'échantillon va initier un régime transitoire des concentrations locales jusqu'à ce qu'un certain rapport d'équilibre de concentration entre les deux espèces soit atteint. Le régime permanent (pour la pulvérisation) est alors installé. Ce phénomène transitoire rend encore plus difficile la quantification des profils sur de très faibles épaisseurs.

### 2.2.2. 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 dépend directement des taux d'ionisation des différentes espèces pulvérisées. 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  $\alpha^{\pm n}$  selon qu'il s'agit de la production d'ions négatifs ou positifs.

$$\alpha^{\pm n}(k) = \frac{n(k^{\pm n})}{n(k)} \quad (1.2)$$

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.

### 2.2.3. La transmission des ions secondaires

Les atomes pulvérisés puis ionisés seront acheminés vers le détecteur. Comme dans tout appareillage, la transmission n'est pas idéale. L'instrument ne détecte qu'une fraction des ions, puisqu'une partie seulement de ces ions est transmise à travers l'appareillage. On définit donc un facteur de transmission  $\eta$  (parfois noté  $f$  ou  $T$ ) qui caractérise le nombre d'ions effectivement détectés  $n_{\text{det}}(k^{\pm n})$  par rapport au nombre d'ions créés à la sortie de l'échantillon.

$$\eta(k^{\pm n}) = \frac{n_{\text{det}}(k^{\pm n})}{n(k^{\pm n})} \quad (1.3)$$

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

### 2.2.4. 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 :

$$I_k^{\pm n} = I_p \eta Y_k^{\pm n} \quad (1.4)$$

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 :

$$I_k^{\pm n} = I_p \eta_k \alpha_k^{\pm} Y_k^c C_k^s \quad (1.5)$$

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 de choix des conditions expérimentales puisque les coefficients  $Y$ ,  $\alpha$  et  $\eta$  dépendent de 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.

### 2.3. Avantages et Inconvénients de la technique SIMS

La technique SIMS présente de nombreux avantages qui sont en majeure partie dus à la flexibilité de cette technique. Parmi ces avantages, on peut citer :

- Excellente sensibilité de détection pour les dopants et les impuretés, avec une sensibilité d'une partie par million, et moins ;
- Profil de profondeur avec d'excellents seuils de détection et une excellente résolution en profondeur ;
- Analyse de petites zones (10 $\mu$ m au moins) ;
- Détection de tous les éléments et des isotopes y compris l'hydrogène ;
- Excellente gamme dynamique (jusqu'à 6 ordres d'amplitude) ;
- Stoechiométrie/composition possible, dans certaines applications.

Même en étant bien adaptée à certaines problématiques, la technique SIMS présente des désavantages qui la rendent complexe. Ces inconvénients ont des origines diverses : la nature de l'ion primaire et les conditions du bombardement ionique, la nature et l'orientation

cristallographique de la cible et l'interférence possible des masses d'ions secondaires [13, 18]. L'application de la technique SIMS n'est pas nécessairement rendue impossible par ces problèmes, mais au moins compliquée. Parmi les inconvénients de la SIMS, on peut citer :

- Analyse destructive.
- Pas d'informations sur les liaisons chimiques.
- Spécifique à chaque élément.
- L'échantillon doit être solide et compatible avec le vide.

## **2.4. Caractéristiques générales**

### **2.4.1. 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, ...) difficilement ou non accessibles par d'autres méthodes. On peut également réaliser des analyses isotopiques.

### **2.4.2. Une analyse in situ destructive**

L'échantillon est érodé en cours d'analyse et les ions -extraits puis guidés par des champs électrostatiques ( $L ; V$ ) ou magnétiques ( $B$ )- peuvent être collectés dans un système de comptage, ce qui permet d'enregistrer l'intensité ionique en fonction du temps et de la profondeur. Il faudra donc à chaque analyse sacrifier une partie de la surface de l'échantillon (de l'ordre de  $500 \mu\text{m} \times 500 \mu\text{m}$ ) et effectuer les analyses avec circonspection si l'échantillon s'avère rare ou précieux [13, 14].

### **2.4.3. Une analyse semi-quantitative**

Pour la plupart des analyses, l'instrument enregistre une intensité ionique en coups par seconde en fonction du temps. Pour pouvoir remonter aux concentrations des éléments, il est impératif de disposer de standards (la quantification). 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.

#### 2.4.4. Une analyse dynamique

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.

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 de 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 [15].

#### 2.4.5. Sensibilité à la nature du matériau analysé

La production des ions secondaires repose principalement sur les réactions chimiques entre le faisceau ionique primaire et les couches atomiques superficielles de l'échantillon. L'état de la surface est également un facteur à prendre en considération.

### 2.5. Spectroscopie, Profils en profondeur et Imagerie

Les analyses SIMS ne concernent que l'extrême surface des échantillons c'est à dire les premières monocouches atomiques ou moléculaires de la surface. L'analyse des ions secondaires par spectrométrie de masse informe sur la nature chimique élémentaire et moléculaire de l'extrême surface. Trois modes d'analyse peuvent être utilisés:

- **Spectrométrie de masse :**

Le but est de repérer la présence de certains éléments dans un échantillon donné. Le spectromètre de masse 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. Le travail d'interprétation consistera à l'identification des pics obtenus, dont certains nécessitent l'emploi d'une très haute résolution en masse car certains rapports masse/charge peuvent être très proches.

- **Imagerie ionique et SIMS statique :**

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 la 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.

- **Profil en profondeur et SIMS dynamique :**

L'alternance de phases d'abrasion et de phases d'analyse permet de déterminer l'évolution en profondeur des éléments constituant la surface. Les domaines d'application se limitent à des dépôts très minces n'excédant pas le  $\mu\text{m}$ , par contre la résolution en profondeur peut atteindre la monocouche [14].

### 3. ANALYSE EN PROFONDEUR

#### **Profil 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, il est très utile de le détailler afin de mieux comprendre les différents mécanismes qui le gouvernent. En effet, 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 [13-15].

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 :

- Dynamique du signal ;
- Sensibilité ;
- Résolution en profondeur.

### **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.

### **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.

### **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 ! 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 [13, 14].

## 4. MECANISMES REGISSANT LA RESOLUTION EN PROFONDEUR

D'une manière générale, les phénomènes dégradant la résolution en profondeur contribuent à la modification toute entière des profils initiaux.

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.

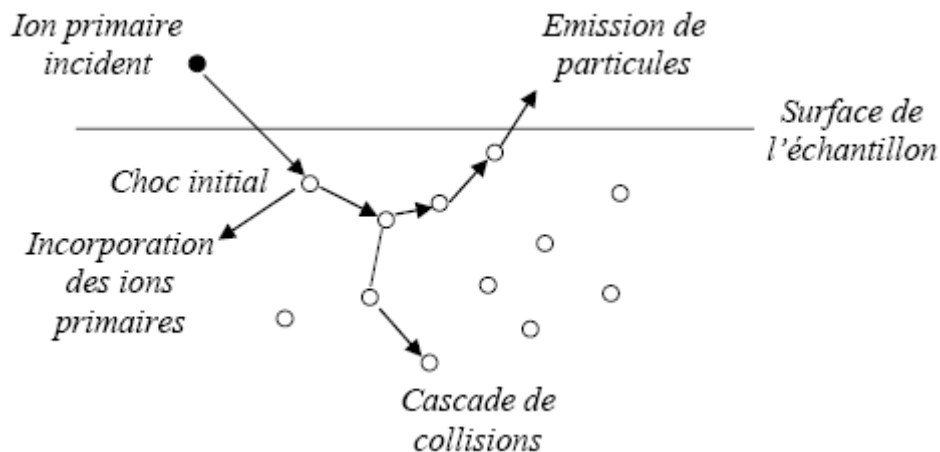
### 4.1. Le mixage collisionnel

#### 4.1.1. Définition

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 jamais totalement éliminé.

#### 4.1.2. Principe

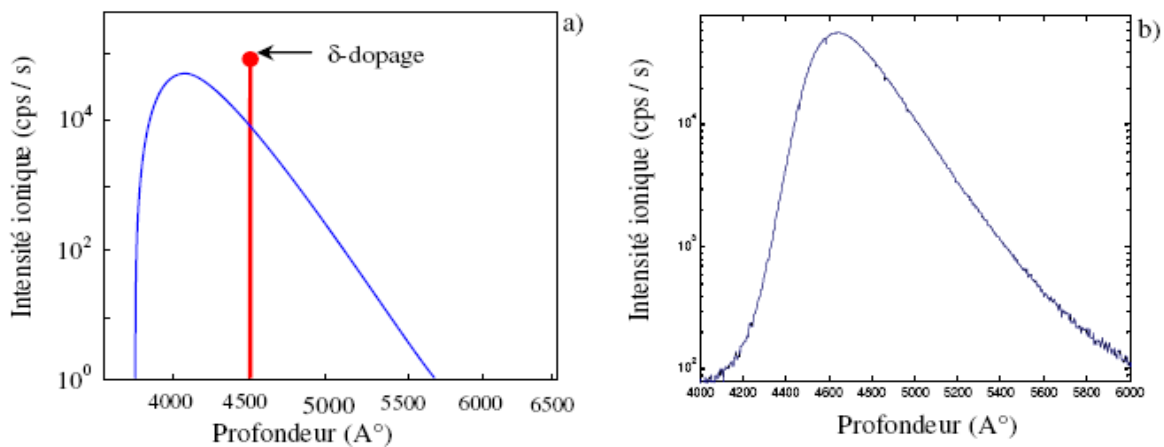
Il résulte du transfert d'énergie des ions primaires aux atomes cibles, avec une nette prédominance des chocs atomiques (élastiques) dans la gamme d'énergie utilisée en SIMS. On peut distinguer les chocs directs, entre un ion primaire très énergétique et un atome cible, et les chocs indirects entre atomes cibles mis en mouvement et atomes au repos. Ce dernier mécanisme est à la base des cascades de collisions [20].



*Figure 1.1 : Principe du mixage collisionnel.*

### 4.1.3. Influence du mixage collisionnel sur la résolution en profondeur

Les prévisions théoriques du mixage collisionnel n'ont qu'un caractère qualitatif. Les méthodes utilisées donnent une idée assez bonne des dommages créés dans les couches mixées, mais la complexité des phénomènes, tels que l'effet de matrice et la pulvérisation préférentielle, ne permet ni de quantifier ni de prévoir un profil de concentration de manière précise. 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 [14].



**Figure 1.2 :** 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.

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 trainée 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, a une allure gaussienne (Figure 1.2).

### 4.1.4. 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. Hoffman [21] a proposé un modèle MRI (*Mixing-Roughness-Information*), plus quantitatif, reliant la décroissance exponentielle  $\lambda_d$  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-2010, permet de calculer cette valeur en fonction de l'énergie des ions primaires  $E_p$ , l'angle d'incidence  $\theta$ , 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:

$$R_p = AE_p^n \cos(\theta) \quad [\text{Å}] \quad (1.7)$$

Dupuy *et al.* [22] ont constaté la linéarité de  $\lambda_d$  en fonction de la profondeur de pénétration des ions primaires  $R_p$ , dans le cas du bore dans le silicium. Petravic et al [23] l'ont étudié en particulier dans le cas de Ge dans Si et Si dans GaAs, et cela quelque soit le type du faisceau primaire employé. Smirnov *et al* [24] et Meuris *et al.* [25] ont également constaté le même comportement dans le cas de l'arsenic dans le silicium.

La dépendance linéaire de  $\lambda_d$  avec  $\cos(\theta)$  a été vérifiée par Petravic *et al.* Dans le cas de Ge dans Si [23] et dans le cas de Si dans GaAs [26]. Les diverses études ont abouti à sa modélisation par une loi quadratique de  $\lambda_d^2$  selon une loi de la forme suivante :

$$\lambda_d^2(E_p, \theta) = \lambda_{int}^2 + (AE_p^{0.5} \cos(\theta))^2 \quad (1.8)$$

Où  $\lambda_{int}$  est la pente intrinsèque de l'échantillon.

#### 4.2.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.

- ***La ségrégation***

Lors du bombardement du silicium par des ions  $O_2^+$ , il y a une importante incorporation des ions primaires dans la cible, ce qui se traduit par une oxydation des couches atomiques proches 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. Certaines espèces réagissent à ce phénomène et migrent vers l'interface  $SiO_2/Si$ , là où il n'y a plus d'oxygène. Ce phénomène est appelé ***ségrégation***.

Les impuretés ségrégées fuient régulièrement vers l'intérieur, ce qui donne des queues trainantes donc une mauvaise résolution en profondeur.

- ***Le gonflement de la matrice : swelling***

En l'absence de ségrégation, l'oxydation des premières couches atomiques de la matrice s'accompagne, d'un point de vue géométrique, d'un gonflement de la matrice, appelé *swelling*, lié à l'incorporation des ions primaires. Ce phénomène apparemment transparent pour l'opérateur, va en fait provoquer d'une part une augmentation très importante du taux d'ionisations des espèces à analyser et d'autre part une dilution locale de toutes les espèces par la présence des atomes d'oxygène incorporés [20].

Brice Gautier a montré que le gain de résolution en profondeur lié à ce phénomène peut atteindre 2.35 dans le cas du silicium [15].

- ***L'analyse sous soufflage d'oxygène***

Alternativement ou conjointement à l'emploi d'ions primaires d'oxygène, l'échantillon est bombardé sous une certaine pression d'oxygène gazeux ( $> 2.10^{-6}$  Torr) dans la chambre de l'échantillon, au lieu d'un vide poussé, cette technique est dite **sous soufflage d'oxygène**.

L'avantage du soufflage est sa capacité à diminuer le régime transitoire de la mesure et à augmenter le taux d'ionisation des impuretés électropositives (le Bore). Ces avantages assurent une meilleure reproductibilité des profils.

Par contre, il a comme inconvénient une diminution de la vitesse d'érosion par un facteur 2 à 4 (pour le Silicium) et la difficulté de régler le faisceau primaire [20].

### **4.3. Problèmes d'érosion non homogène**

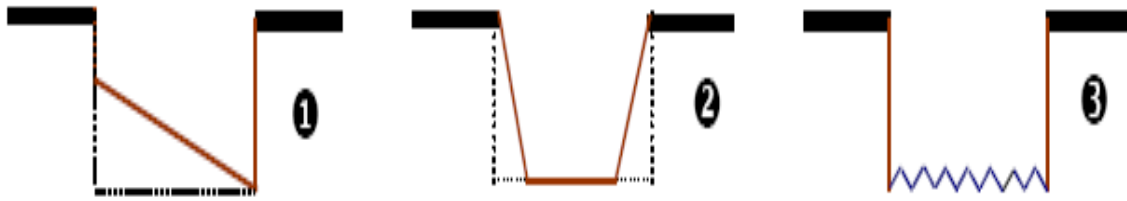
La surface exposée au bombardement ne s'érode pas toujours de façon homogène. Par conséquent, le cratère produit par l'érosion n'est pas plat, ce qui entraîne que tous les points du cratère ne sont plus situés à la même profondeur. On conçoit aisément que dans ce cas, les ions secondaires qui arrivent 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 [14].

#### **4.3.1. 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. 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 [14].

#### **4.3.2. 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 [14].



**Figure 1.7 :** Problèmes d'érosion non homogène : ① inclinaison du fond de cratère ② effets de bords ③ rugosité induite.

### 4.3.3. Rugosité induite

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 [20] 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  $0.5 \text{ keV} / \text{O}_2^+$  ( $44^\circ$ , incidence oblique) [14, 15, 27].

## 5. POSITION DU PROBLEME : AMELIORATION DE LA RESOLUTION EN PROFONDEUR

La demande en résolution en profondeur est de plus en plus pressante dans le domaine de la microélectronique. Les développements récents des circuits intégrés à base de silicium conduisent à contrôler des jonctions très peu profondes par implantation de dopants à très faible énergie (quelques dizaines d'électrons-volts). Dans le contexte de ce développement, l'analyse SIMS est devenue en quelques années un outil incontournable grâce à sa sensibilité et ses performances en matière de résolution en profondeur. Cependant les développements de l'instrumentation SIMS ne sont pas aussi prononcés et rapides que ceux des techniques de fabrication des matériaux de la microélectronique moderne [14-16,27]. La résolution en profondeur de la technique SIMS s'améliore donc :

→ *En optimisant les paramètres physiques de l'analyse;*

→ *En utilisant des techniques de traitement du signal.*

### 5.1. 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  $\lambda_d$  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). En plus avec le soufflage d'oxygène améliore d'avantage la résolution en profondeur. 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) [14].

- *Angle d'incidence*

L'équation (1.8) 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, il a été montré que lorsque l'angle d'incidence était supérieur à  $25^\circ$ , il n'y avait pas de formation de  $\text{SiO}_2$  stoechiométrique. 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  $\text{SiO}_2$ . 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 (Dans la section 4.1.4), 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 [14].

- *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.

## 5.2. Traitement numérique post-érosion

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 [14-16]. 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* dont le but est de remonter à une meilleure approche du profil réel à partir du profil expérimental. 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).

## CONCLUSION

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.

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.

Dans ce chapitre, 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 majorité 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.

### Bibliographie du Chapitre 1

- [1] **Kian Kok O., Yun W., Han Wei T., Ramesh Rao N et Zhi Qiang M.,** *Case study on precise boron quantification of mixed matrix, 26<sup>th</sup> International Symposium on Physical and Analysis of Integrated Circuit (IPFA), DOI: 10.1109/IPFA47161.2019.8984874, IEEE Xplore, Hangzhou, China, 2019.*
- [2] **Steven F., Janusz B., Andreas S., Paola F., Alexis F et Valentina S.,** *Toward Carrier Profiling in Nanometer-Wide Si Fins with Micro Four-Point Probe, 22<sup>nd</sup> International Conference on Ion Implantation Technology (IIT), DOI: 10.1109/IIT.2018.8807934, IEEE Xplore, Germany, 2018.*
- [3] **Valentina S., Silvia A., Alexis F., Thierry C., Paul Van Der H et Wilfried V.,** *Self-Focusing SIMS: A metrology solution to area selective deposition, Applied Surface Science, Vol. 476, Pp 594-599, Elsevier, 2019.*
- [4] **Alain P., Khalid H et Lee C.,** *Coupling Secondary Ion Mass Spectrometry and Atom Probe Tomography for Atomic Diffusion and Segregation Measurements ,Special Issue 2 (Atom Probe Tomography and Microscopy APT&M 2018), Vol. 25, Pp. 517-523,DOI: <https://doi.org/10.1017/S1431927618015623>, 2019.*
- [5] **Gille B.,** *Histoire des techniques, Technique et civilisation, technique et science, PARIS : Gallimard, Encyclopédie de la Pléiade, 1978.*
- [6] **Daumas M.,** *Histoire générale des techniques, PARIS : PUF, Vol.5, 1962-1978, Réédition, 1996.*
- [7] **Singer C et al.,** *A history of technology, New york, London, Vol.5 et Vol.6, 1978.*
- [8] **Philippe M.,** *Une histoire de la microélectronique, Engineering school, Ecole national supérieure des Télécommunications, pp. 32, 2007.*
- [9] **Voisin P.,** *Lithographie de nouvelle génération par nano-impression assistée par UV : Etude et Développement de matériaux et procédés pour l'application microélectronique., Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier de Grenoble, 171 p, 2007.*
- [10] **Naas A.,** *Etude de l'oxyde de silicium implantée krypton ou xénon : Evolution de la constante diélectrique., Thèse de doctorat, Université d'Orléans, Ecole doctorale sciences et technologies,143 p, 2010.*

- [11] **Becker J.**, *Etude et développements d'un spectrométrie de masse et énergie : Modélisation et Optimisation de l'optique, Réalisation du prototype.*, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, France, 233 p, 2013.
- [12] **Margaux F.**, *Nouvelles approches par spectrométrie de masse pour la caractérisation de systèmes archéologique et biologiques. Application à l'étude de cheveux de momies préhispaniques de la cote andine.*, Thèse de doctorat, Université de Strasbourg, Ecole doctorale des sciences chimiques, 310 p, 2016.
- [13] **Behrish R et Wittmaack K.**, *Sputtering by particle bombardement III, characteristics of sputtered particles, Technical applications, Springer-verlag Berlin-Heidelberg, Germany, 416 p, 1991.*
- [14] **Boulakroune M.**, *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*, Thèse de doctorat, Université El Hadj Lakhdar de Batna, 229 p, 2008.
- [15] **Gautier B.**, *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, 230 p, 1997.
- [16] **Baboux N.**, *Analyse ultime par spectrométrie de masses des ions secondaires des matériaux de la microélectronique avancée : Contribution à l'interprétation des profils de bore dans le silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 139 p, 2001.
- [17] **Peter S.**, *Recollections of fifty years with sputtering, Thin Solid Film*, pp. 6031-6049, Elsevier, 2012.
- [18] **Patrick P.**, *Analyses quantitatives par SIMS dans le mode secondaire négatif*, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 266 p, 2005.
- [19] **Magee C. W et Honig R. E.**, *Depth profiling by SIMS: depth resolution, dynamic range and sensitivity, Surface and Interface Analysis, Vol. 4 N° 2, pp. 35-41, 1982.*
- [20] **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 de ses séquences sur la vitesse d'érosion et sur la résolution en profondeur*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 145 p, 2004.
- [21] **Hoffman S.**, *From depth resolution to depth resolution function: refinement of the concept layers, single layers and multilayers, Surface and Interface Analysis, vol.27, pp 825-834, 1999.*
- [22] **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.*
- [23] **Petravic M.**, *Depth resolution during sputter profiling of Si in GaAs, Nuclear Instrumrnts and method, for physic Research, B85, pp. 388-390, 1994.*

- [24] **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*, vol.24, pp 469-475, 1996.
- [25] **Meuris M et Vandervost W.,** *On the effect of an oxygen beam in sputter depth profiling, Journal of Vacuum Sciences and Technology*, vol. A9, pp. 1482-1488, 1991.
- [26] **Petravic M.,** *Depth resolution during sputter profiling of Si in GaAs, Nuclear Instruments and method, for physic Research*, 1994, B85, pp. 388-390.
- [27] **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*, 183 p, 2001.

# Chapitre 2 : De la résolution en profondeur à la fonction de résolution en profondeur

## INTRODUCTION

L'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires, comme toute technique de caractérisation en profondeur, est un système qui s'identifie par la réponse impulsionnelle qui représente sa fonction du transfert. Ce chapitre traite en premier temps l'importance de compréhension de la philosophie de la convolution, ce qui nous amènera à définir la réponse impulsionnelle du système d'analyse, appelé fonction de résolution en profondeur (DRF). La modélisation de cette fonction par une forme analytique sera également examinée dans ce chapitre.

## 1. RESOLUTION EN PROFONDEUR

### 1.1. Définition

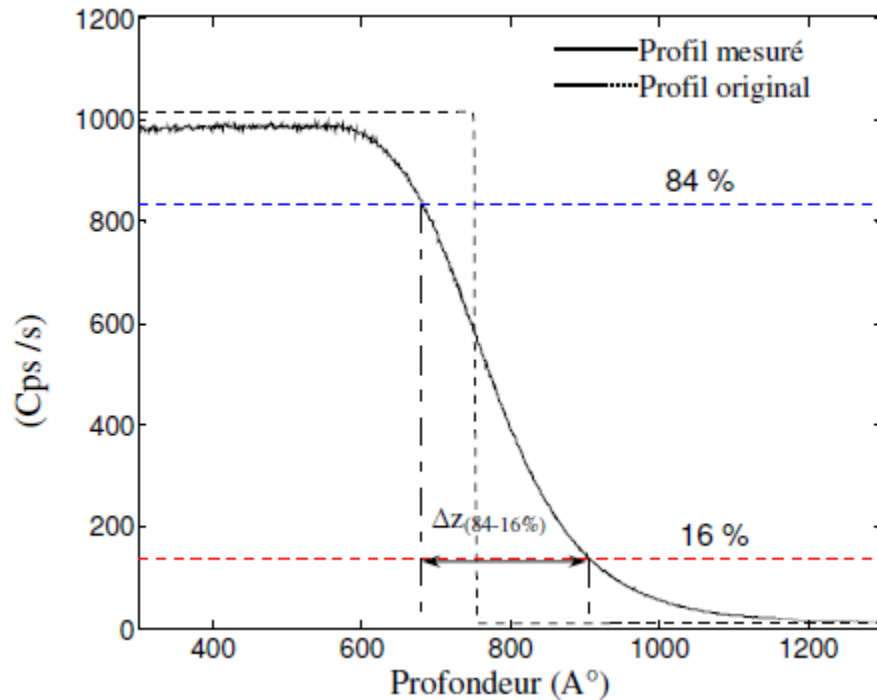
La résolution en profondeur peut être définie comme la différence de profondeur minimale à partir de laquelle on peut mesurer une différence de concentration de manière significative.

### 1.2. Méthodes d'évaluation

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 [1, 2]. 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.

### 1.2.1. Evaluation 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 [3]. 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  $\sigma$ . Dans ce cas, la distance  $\Delta z$  séparant  $Z_{84\%}$  et  $Z_{16\%}$  est égale à  $2\sigma$  (Figure 2.1) [1, 2, 4].



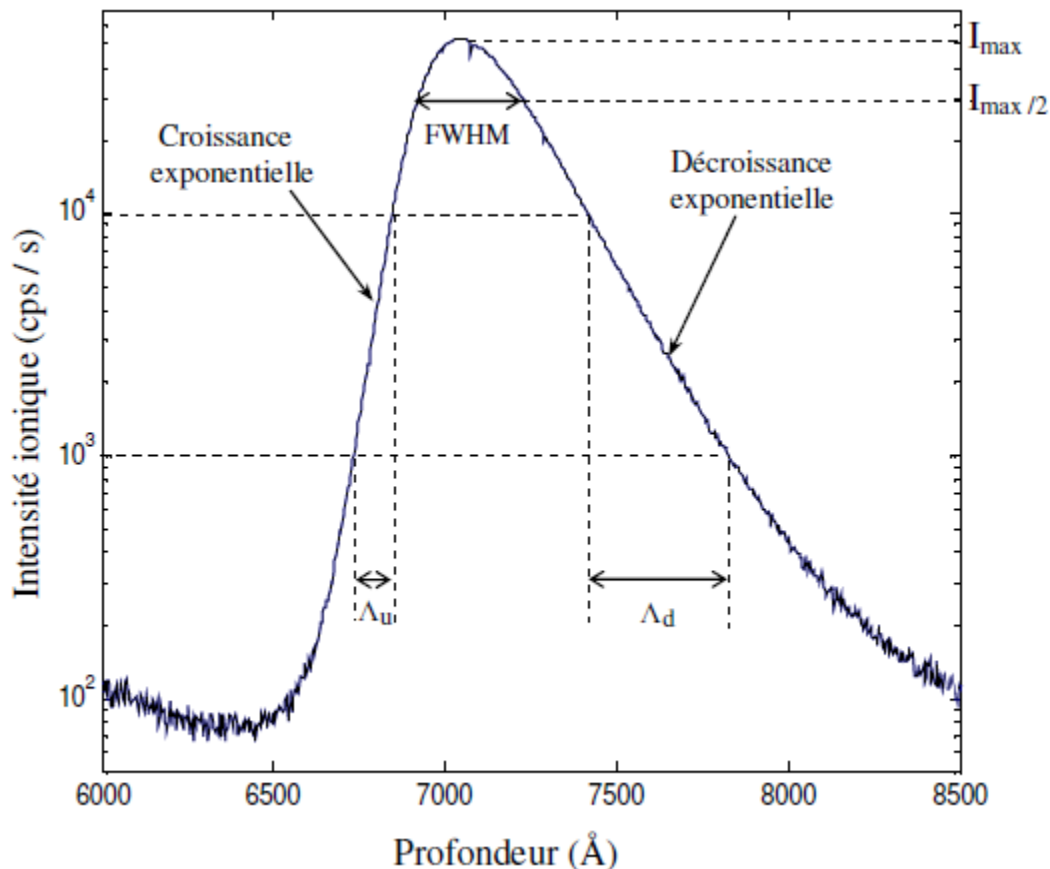
**Figure 2.1 :** Evaluation de la résolution en profondeur à partir d'une interface abrupte [1, 2, 4].

D'autres auteurs mesurent la longueur nécessaire pour que le signal décroisse entre 90% et 10% du maximum du signal ce qui correspond à  $2.564\sigma$ , où encore entre 95% et 5% pour  $3.29\sigma$ . Quelque soit le choix de l'intervalle comme critère définissant la résolution en profondeur, ce choix reste arbitraire et n'a pas d'importance fondamentale [1]. 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  $\Delta_d$ . De plus, si on prend un front montant au lieu d'un front descendant, on s'aperçoit que la distance  $\Delta_z$  n'est pas la même que pour le front descendant. En effet, une interface montante montrera la même attitude exponentielle, la même constante peut être définie dans le cas d'une interface montante par le paramètre  $\Delta_u$  qui est souvent inférieur à celui du front descendant. Ce qui élimine la possibilité d'une fonction de résolution en profondeur uniquement gaussienne.

### 1.2.2. Evaluation à partir d'un delta-dopage

L'avantage de l'analyse d'un  $\delta$ -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 (2.2) [1, 2, 4].



**Figure 2.2 :** Evaluation de la résolution en profondeur à partir d'un delta-dopage. Profil expérimental de Bore dans le Silicium ; 5,2 keV/  $O_2^+$ ,  $46,1^\circ$  d'incidence [1, 2, 4].

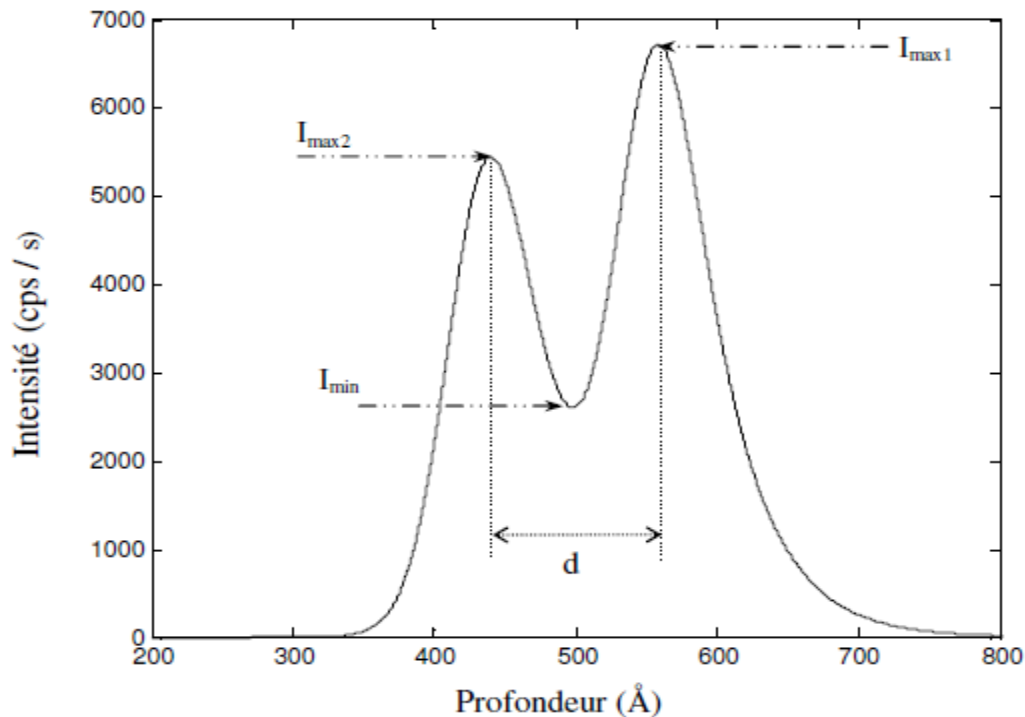


Dans le cas où son élaboration est possible, la particularité d'un delta-dopage est de donner directement, par sa mesure, la réponse impulsionnelle du système de mesure. La courbe obtenue peut alors être considérée comme le résultat de la plus petite structure mesurable, et permet des comparaisons directes par l'un de ses paramètres caractéristiques [1-6].

Dans ce type de mesure, la résolution en profondeur peut être caractérisée par la mesure de la largeur à mi-hauteur (FWHM pour **F**ull **W**idth at **H**alf **M**aximum). 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.

### 1.2.3. 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 ?



*Figure 2.3 : Estimation de la résolution en profondeur à partir de la limite de séparation de deux deltas-dopage adjacents [1, 2, 4].*

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 2.3). 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.

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 [1, 2, 4]:

$$C\% = \frac{I_{max} - I_{min}}{I_{max}} \cdot 100 \quad (2.1)$$

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  $d_0$ .

## 2. RAPPEL SUR LA CONVOLUTION

### 2.1. Définition

La convolution joue un rôle fondamental en traitement du signal. Elle est étroitement liée à la réponse impulsionnelle d'un système linéaire et invariant dans le temps [7]. Elle est caractérisée par l'équation l'intégrale suivante :

$$y(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(t - \tau)x(\tau)d\tau \quad (2.2)$$

Où

$$y(t) = h(t) * x(t) \quad (2.3)$$

$y(t)$  est le résultat de convolution de la fonction  $h$  par la fonction  $x$ . Supposons les fonctions  $h$  et  $x$  connues, alors l'équation (2.2) est dite équation de convolution.

La déconvolution est défini comme étant la résolution de l'équation de convolution. Sachant qu'il n'existe pas une définition officielle du mot. Chacun utilise le mot déconvolution dans un sens différent, ce qui, dans certains cas, amène à de grosses confusions [8].

## 2.2. Convolution en physique expérimentale

Les mesures physiques sont dans la grande majorité des cas réalisées à l'aide de systèmes linéaires (ou parfois on utilise la partie linéaire de la caractéristique). C'est pourquoi on trouve si souvent et dans des domaines très variés la notion de convolution. En effet, on sait que la condition nécessaire et suffisante pour qu'un système physique  $\mathbf{H}$  soit défini par un opérateur de convolution est que ce système soit :

- Linéaire (au sens mathématique du terme) ;
- Continu ;
- Invariant par translation.

Cette condition, très bien perçue intuitivement, fait appel à des développements mathématiques dans lesquels nous n'entrons pas.

Si  $e(x)$  est l'entrée (la quantité à mesurer) du système  $\mathbf{H}$  et  $s(x)$  sa sortie (la mesure de  $e(x)$ ), alors  $s$  est liée à  $e$  par la relation :

$$s(t) = e(t) * h(t) \quad (2.4)$$

Où  $s$ ,  $e$  et  $h$  sont des fonctions ou des distributions.

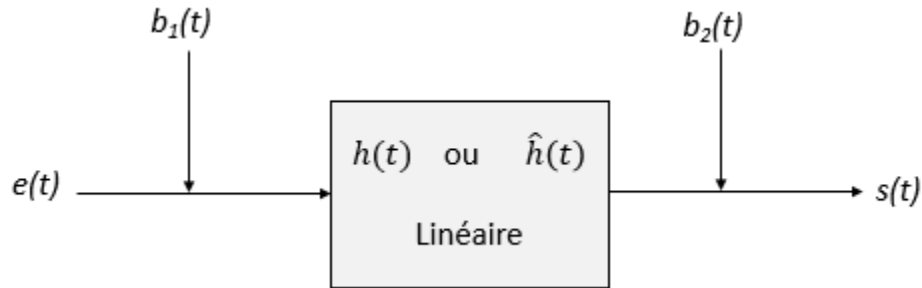
La signification de  $h(t)$  est simple. Si  $e(t) = \delta(t)$ , l'équation (2.4) devient :

$$h(t) = \delta(t) * h(t) \quad (2.5)$$

Car la distribution de *dirac* est l'unité de convolution. Donc  $h(t)$  caractérise parfaitement le système linéaire : c'est la **réponse impulsionnelle** du système.

Notons dès maintenant que, dans les cas où  $h(t)$  n'est pas connue théoriquement mais est elle-même le résultat d'une mesure, on n'a pas accès à  $h(t)$  exactement mais à une approximation.

La situation, en physique expérimentale, peut être encore compliquée et peut se résumer sur le schéma suivant :



**Figure 2.4 :** Schéma de principe d'un système physique.

La grandeur d'entrée  $e(t)$  que l'on veut estimer est très souvent affectée d'un bruit  $b_1(t)$ . C'est le cas si un canal fluctuant s'interpose entre  $e(t)$  et le système physique  $\mathbf{H}$

On ne connaît pas exactement  $h(t)$  mais une estimation  $\hat{h}(t)$  qui peut être une mesure bruitée et distordue de  $h(t)$ .

Enfin, la sortie  $s(t)$  est toujours bruitée par un bruit propre du système de détection. Ces bruits peuvent être additifs ou multiplicatifs et de statistiques connues ou inconnues. On doit tenir compte de leurs propriétés avant d'élaborer une méthode de déconvolution [9].

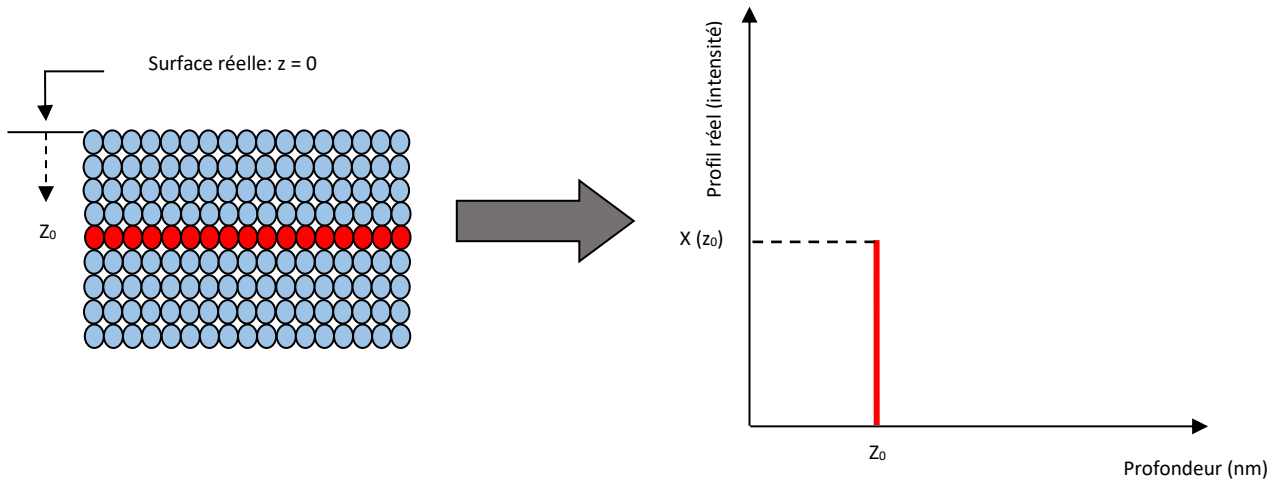
Notons dès maintenant l'importance de ces bruits. Ils constituent le plus souvent, la limitation drastique de bien des méthodes proposées dans la littérature [1-6, 8, 9].

### 3. Identification du système SIMS par sa réponse impulsionnelle

La réponse impulsionnelle d'un système est la réponse de ce dernier à un signal Dirac. Dans le système SIMS, on appelle cette réponse "fonction de résolution en profondeur", ou DRF (*Depth Resolution Function*).

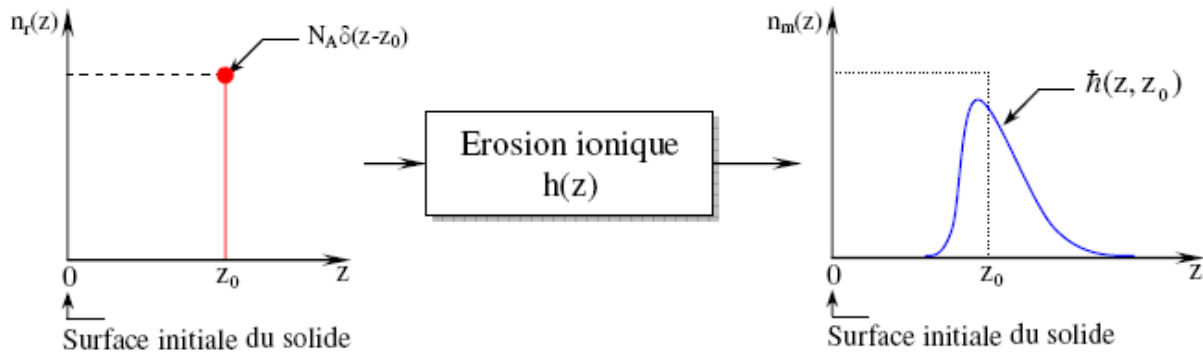
Les mesures obtenues par l'analyse SIMS peuvent être considérées comme la réponse du système d'analyse, cette réponse sera impulsionnelle dans le cas où l'impureté ou le dopant

représente une couche infiniment fine (Pseudo-dirac) enterrée sous la surface du solide à une profondeur  $z_0$ , le profil réel est illustré dans la figure (2.5).



**Figure 2.5 :** Représentation graphique d'un exemple de dopant enterrée à la profondeur  $z_0$  sous la surface de l'échantillon (Pseudo Dirac de concentration).

Cette figure représente le profil réel de la distribution de l'espèce étudiée (Ex : delta-dopage du Bore dans le Silicium), ce profil est loin d'être obtenu par analyse avec la même allure, dans les différents résultats expérimentaux obtenus, le profil mesuré est gouverné par la fonction de résolution en profondeur comme le montre la figure (2.6) :



**Figure 2.6 :** Schéma de principe d'une réponse à un Dirac de concentration en SIMS pour une espèce donnée enterrée sous la surface.

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. Un profil mesuré  $n_m(z)$  obtenu par érosion ionique peut être relié au profil réel quelconque original  $n_r(z)$  par l'équation (2.2) :

$$n_m(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(z, z_0) \cdot n_r(z_0) dz_0 \quad (2.6)$$

Avec :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} h(z, z_0) dz = 1 \quad (2.7)$$

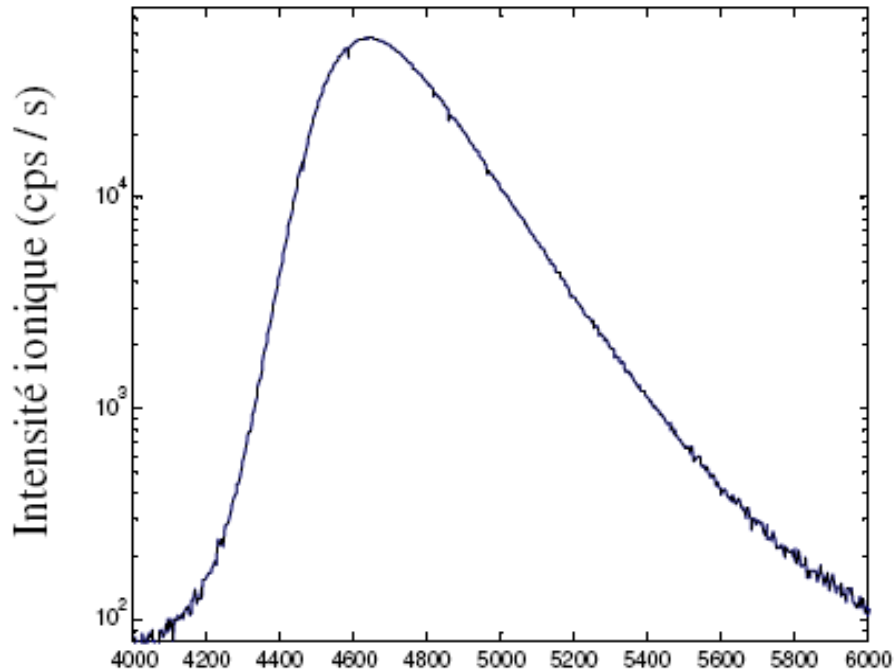
L'intégrale de l'équation (2.6) est appelée intégrale de convolution notée symboliquement

$$n_m(z) = h(z) * n_r(z) \quad (2.8)$$

Dans notre cas,  $h(z) = DRF$ .

### 3.1. Description expérimentale et spécificité de la DRF

Avec l'avancement rapide des techniques de fabrication des matériaux semi-conducteurs, et spécialement avec l'épitaxie par jets moléculaires (MBE : *Molecular Beam Epitaxy*), ou la déposition de vapeur chimique (CVD : *Chemical Vapor Deposition*), ces techniques permettent l'obtention d'une structuration des couches atomiques très fines qu'on peut considérer, par exemple dans le cas d'un delta-dopage du Bore dans le Silicium, comme un pseudo Dirac, ce qui permet de considérer dans ce cas que le résultat de l'analyse SIMS soit effectivement la réponse impulsionnelle du système. Cette dernière (la DRF) a une allure spécifique se résume en un sommet arrondi et deux pentes exponentielles: une montante et l'autre descendante. En effet, 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 exciteur 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) [1]. La figure (2.7) représente la courbe obtenue lors de l'analyse d'un delta-dopage :



*Figure 2.7 : Réponse impulsionnelle du système SIMS à un Dirac de concentration.*

La DRF n'est pas simplement fonction de l'appareil, et on ne peut pas la fixer une fois pour toutes pour différentes mesures. Ceci est pour plusieurs raisons:

- Elle est spécifique à un élément donné, dans une matrice donnée: chaque couple matrice-élément produit sa propre DRF.
- Elle est dépendante de tous les paramètres expérimentaux influençant la mesure: énergie des ions primaires, angle d'incidence...etc.
- Il n'est pas impossible que les conditions expérimentales soient reproductibles d'un instrument à l'autre. Cependant, la transposition de la DRF d'un appareil à secteur magnétique vers un appareil à quadripôle est encore assez hypothétique [2].

### **3.2. Phénomènes liés aux paramètres de la DRF**

Malgré qu'il soit fondamentalement impossible de relier de manière non ambiguë les trois paramètres de fittage de la forme analytique choisie à la physique des phénomènes, la dépendance énergétique des paramètres de fittage permet de postuler quelques hypothèses sur leur nature physique :

- Descente exponentielle  $\lambda_d$ : Comme nous avons vu. L'origine de  $\lambda_d$  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.
- L'écart-type  $\sigma_g$ :  $\sigma_g$  est relié aux cascades de collisions isotropes qui se tiennent à l'intérieur du matériau, et augmente avec l'étendue de celle-ci. Littmarck [10] 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  $R_p$ .
- Montée exponentielle  $\lambda_u$ : le comportement du paramètre  $\lambda_u$  est plus ambigu. Le fait qu'il est insensible à l'énergie des ions primaires. Badheka et al [11] ont montré que ce paramètre est principalement relié à la rugosité microscopique de la surface pulvérisée. Turner et al [12] 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.

### 3.3.Détermination de la fonction de résolution

#### 3.3.1. 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) :

$$n_r(z) = \begin{cases} 1 & \text{si } z > 0 \\ 0 & \text{si } z < 0 \end{cases} \quad (2.9)$$

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 :

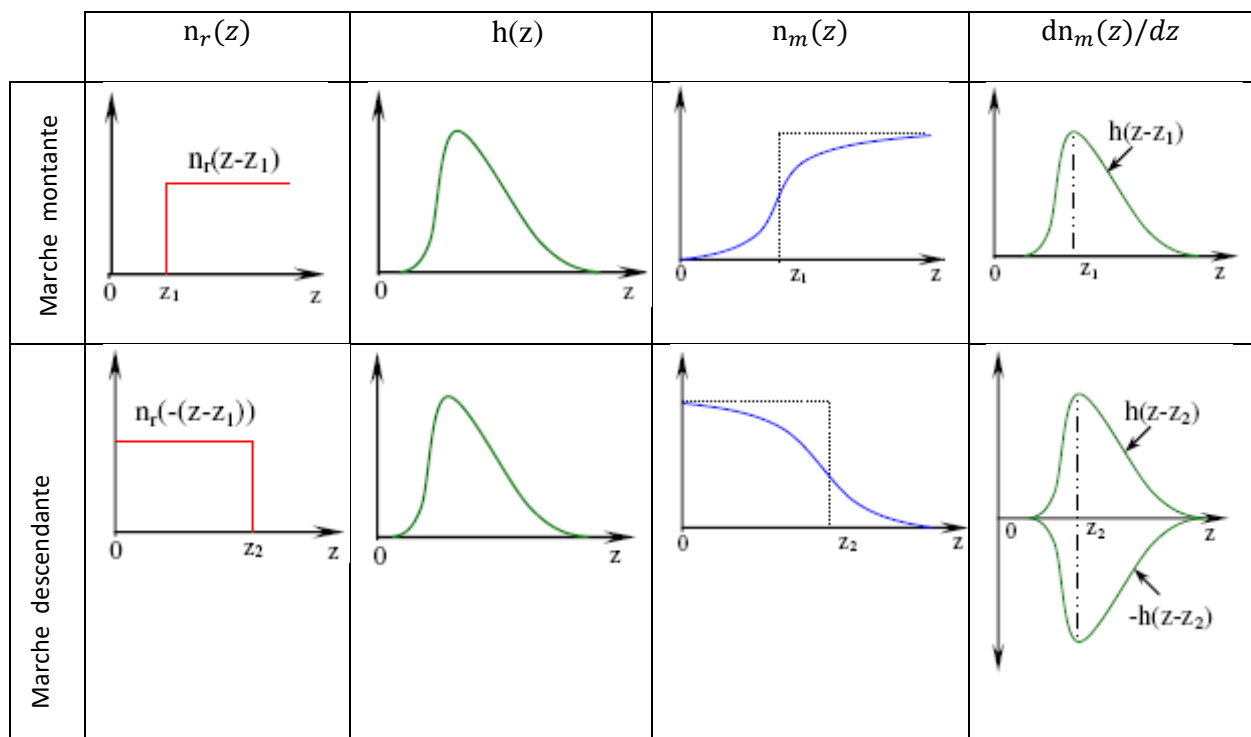
$n_m(z) = n_r(z) * h(z)$ , en prenant la dérivée de cette réponse, on a :

$$\frac{dn_m(z)}{dz} = \frac{dn_r(z)}{dz} * h(z) = \delta(z) * h(z) = h(z) \quad (2.10)$$



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  $z = z_1$ . Le tableau illustre comment une fonction marche montante (ou descendante) est élargie et distordue par profilage en profondeur avec une fonction de résolution arbitraire.

**Tableau (2.1) :** Détermination de la fonction de résolution par dérivation de la réponse à une marche montante ou descendante.

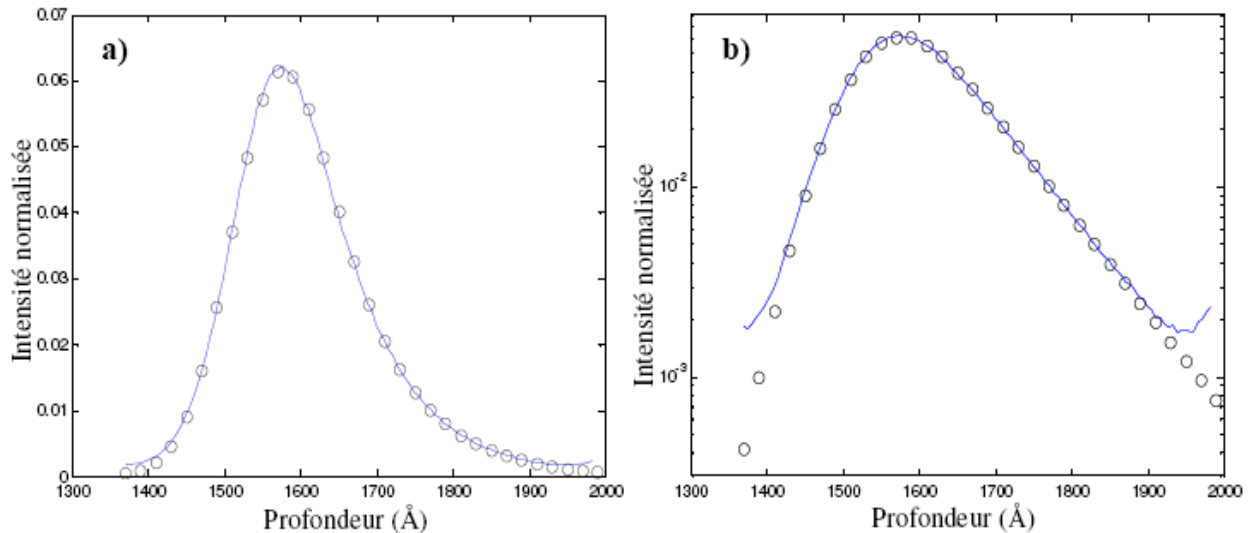


### 3.3.2. Détermination expérimentale de la DRF

- **Fittage des données expérimentales**

La figure (2.8) représente un exemple du fittage des données expérimentales par la forme analytique choisie de la fonction de résolution, dans le cas du bore dans le Silicium. On remarque la qualité de fittage sur la quasi-totalité de la dynamique, qui est justifié par une excellence

superposition de la forme analytique de la DRF et du delta-dopage mesuré comme l'atteste les tracés linéaires et logarithmiques, excepté sur la partie où le rapport signal / bruit est mauvais.



**Figure (2.8) :** *Fittage par la forme analytique de la DRF des deltas-dopage de bore dans le silicium à  $9.5 \text{ keV/O}_2^+$ ,  $40.9^\circ$ . Tracé linéaire (a) et logarithmique (b). Les petits cercles correspondent au fittage, les traits continus aux données expérimentales [2].*

#### 4. Modélisation de la fonction de résolution en profondeur

##### 4.1. Définition

Le terme “Modélisation” est employé dans plusieurs domaines ; En mathématiques appliquées, et en pratique en chimie, en physique, en informatique, en météorologie ou en sciences de la vie et de la terre, le *modèle mathématique* permet d'analyser des phénomènes réels et de prévoir des résultats à partir de l'application d'une ou plusieurs théories à un niveau d'approximation donné.

##### 4.2. Objectifs de la modélisation

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 [1, 2, 4]:

- ◆ Le fittage effectue un lissage local de la courbe représentant la DRF : le fittage permet de supprimer le bruit de la fonction de résolution mesurée.
- ◆ 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 forme DRF avec la période voulue afin de l'adapter au profil à déconvoluer. Cet avantage est probablement l'un des plus déterminants.
- ◆ 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 fait une mesure de delta-dopage.
- ◆ La fonction de résolution peut être utilisée de façon à fitter 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.
- ◆ 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.

### 4.3. Différentes formes de la DRF

Le fittage de la DRF par une forme analytique est un sujet de discussion assez débattu par différents auteurs. Herzel *et al* [13] ont proposés en premier temps une forme polynomiale, ils utilisent un polynôme d'ordre 12 pour fitter la DRF. 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. 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, ce qui permet de douter de la pertinence du choix polynomial!

Par la suite, Prudon [14] est proposé de fitter la DRF par une forme gaussienne. Le modèle mathématique d'une telle fonction est donnée par l'équation :

$$G(z) = \frac{B}{\sqrt{2\pi}\sigma_g} \exp\left(\frac{-z^2}{2\sigma_g^2}\right) \quad (2.11)$$

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

On a déjà vu que la courbe de la DRF est caractérisée par trois parties remarquables: une pente exponentielle montante, un sommet arrondi, et enfin une pente exponentielle descendante. Mis à part la position globale (en profondeur) de la courbe, on peut espérer caractériser la DRF par trois paramètres indépendants.

D'autres approches développées pour la description analytique de la DRF, deux expressions ont connus une large utilisation dans le SIMS dans ces dernières années, l'une proposée par Hoffman [15] appelée modèle MRI, et l'autre par Dowsett *et al* [16].

### → **Modèle MRI**

Le modèle MRI (Mixing-Roughness-Information) de Hoffman donne une description mathématique de la DRF en se basant sur les trois phénomènes physiques fondamentaux: le mixage collisionnel, la rugosité de la surface analysée, et la profondeur d'échappement. Il est destiné non seulement à l'analyse SIMS, mais aussi à l'AES (*Auger Electron Spectroscopy*) et le XPS (*Photo Electron Spectroscopy*).

La DRF du modèle MRI est constitué par trois différentes fonctions  $g_w$ ,  $g_\lambda$ ,  $g_\sigma$  représentées par trois différents paramètres  $w$ ,  $\lambda$ ,  $\sigma$  :

- ◆ le mixage collisionnel caractérisé par une zone de mixage de longueur  $w$ , décrit par une fonction exponentielle  $g_w$ . Cette description du mixage collisionnel est basée sur le modèle simple de Liao et al [17] qui supposent que le mixage est instantané, entier et restreint à une zone d'épaisseur  $w$  sous la surface bombardée.

- ◆ La profondeur d'échappement de la méthode de l'analyse décrite par une autre fonction exponentielle  $g_\lambda$  de paramètre  $\lambda$  (la profondeur d'échappement des ions dans le SIMS, et la profondeur d'échappement des électrons dans le cas du AES et XPS).
- ◆ La rugosité décrite par une fonction gaussienne  $g_\sigma$  d'écart type  $\sigma$ . Selon Hoffman le paramètre  $\sigma$  ne se limite pas uniquement à la rugosité causée par le bombardement ionique ( $\sigma_s$ ), mais il tient en compte aussi [18-21] : les rugosités de la surface ( $\sigma_0$ ) et de l'interface (où du delta-dopage) ( $\sigma_i$ ) dans la structure originale de l'échantillon (ce type de rugosité est négligeable dans le cas des matériaux de référence de haute qualité). La rugosité apparaît à la fin de la zone mixée ( $\sigma_w$ ) (Mixing length straggling).

Le paramètre de la rugosité  $\sigma$  est approximativement donnée par :

$$\sigma = \sqrt{\sigma_0^2 + \sigma_i^2 + \sigma_s^2 + \sigma_w^2} \quad (2.12)$$

Le modèle MRI est donné par les formules suivantes:

$$\text{Mixage collisionnel :} \quad g_w = \frac{1}{w} \exp[-(z - z_0 + w)/w] \quad (2.13)$$

$$\text{Profondeur d'échappement :} \quad g_\lambda = \frac{1}{\lambda} \exp[-(z - z_0)/\lambda] \quad (2.14)$$

$$\text{Rugosité :} \quad g_\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp[-(z - z_0)^2/(2\sigma^2)] \quad (2.15)$$

$Z_0$  est la position du delta dopage qui engendre la DRF.

L'avantage du modèle MRI est que ces paramètres ont des significations physiques bien définies. Ceci permet de les prédire théoriquement et/ ou les mesurer expérimentalement par des méthodes indépendantes [18-20].

### → **Modèle de Dowsett**

Dowsett et al [16] de leur côté proposent une autre forme analytique pour la DRF, que Hoffman [18] l'appelle 'empirique'. Elle est le résultat de la convolution d'une double exponentielle (éq. 2.16) avec une fonction gaussienne (éq. 2.11). L'utilisation de la double exponentielle est imposée par les comportements de la partie montante et descendante.

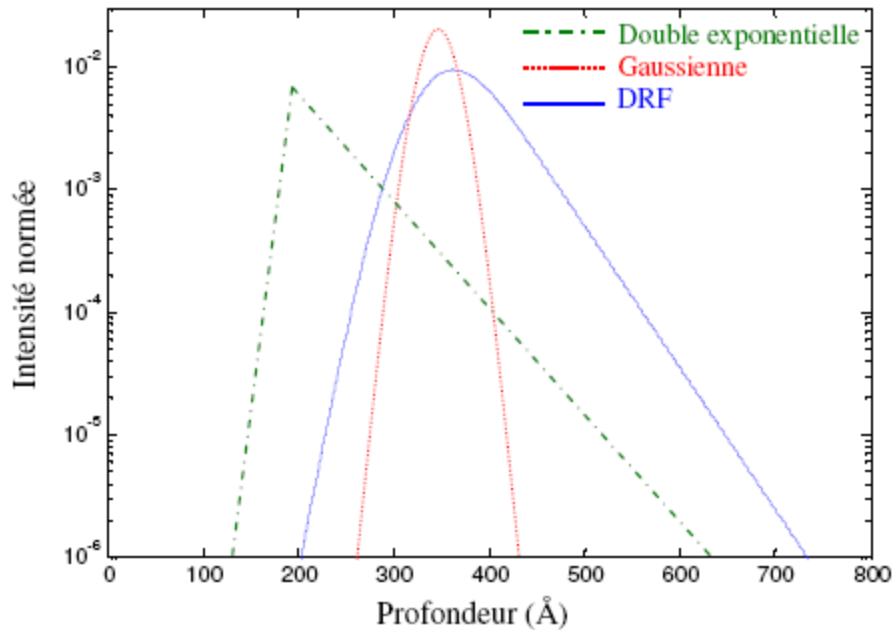
Une double exponentielle est définie comme suit :

$$D(z) = A \cdot \begin{cases} \exp\left(\frac{z - z_0}{\lambda_u}\right), & z < z_0 \\ \exp\left(-\frac{z - z_0}{\lambda_d}\right), & z > z_0 \end{cases} \quad (2.16)$$

Le résultat normalisé de la convolution est donné par la figure (1), son équation est donnée par :

$$h(z) = \frac{1}{2(\lambda_u + \lambda_d)} \left\{ \begin{aligned} & \exp\left(\frac{z - z_0}{\lambda_u} + \frac{\sigma_g^2}{2\lambda_u^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{z - z_0}{\sqrt{2}\sigma_g} + \frac{\sigma_g}{\sqrt{2}\lambda_u}\right) + \\ & \exp\left(-\frac{z - z_0}{\lambda_d} + \frac{\sigma_g^2}{2\lambda_d^2}\right) \operatorname{erfc}\left(-\frac{z - z_0}{\sqrt{2}\lambda_d} + \frac{\sigma_g}{\sqrt{2}\lambda_d}\right) \end{aligned} \right\} \quad (2.17)$$

La description de la DRF par cette forme analytique nécessite trois paramètres fondamentaux:  $\lambda_u$ ,  $\lambda_d$  et  $\sigma_g$ . 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 (2.9) :** Les fonctions qui composent la forme analytique de la DRF.

L'expression analytique de la DRF obtenue ici (nommé: *Analytical Resolution Function* (ARF), par Wittmaack [21]), conduit à un très bon fittage des données expérimentales.

Selon Zalm [22], 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  $\Delta$ , définie sur une plage de profondeur déterminée et non de  $-\infty$  à  $+\infty$  comme une fonction gaussienne. 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.

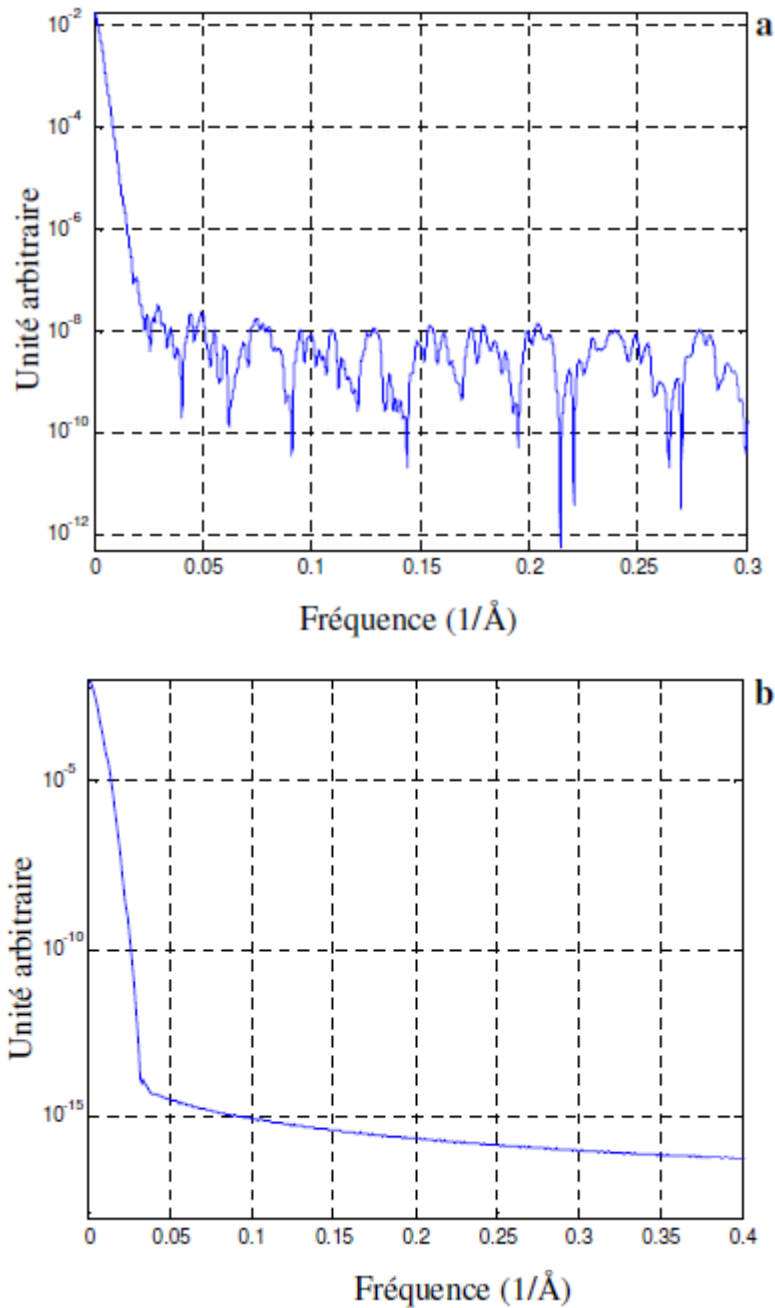
Une autre formule pour la DRF est proposée par Gallardo et al [23]. Ils ont l'appelée modèle RMR (Recoil Implantation-Cascade Mixing-Surface Roughness). Ce modèle prend donc en considération les deux types du mixage collisionnel, et la rugosité. Dans ce modèle, le premier terme (Recoil Implantation) est décrit par une fonction exponentielle décroissante, les deux autres termes sont décrits par des fonctions gaussiennes, et la DRF est obtenue finalement par la convolution de ces trois fonctions.

Dans notre travail, on a utilisé la DRF proposée par Dowsett et al, qui a déjà démontrée son efficacité.

## 5. SPECTRE DE LA DRF

Dans les sections précédentes de ce chapitre, 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 (2.10) 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'une 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.

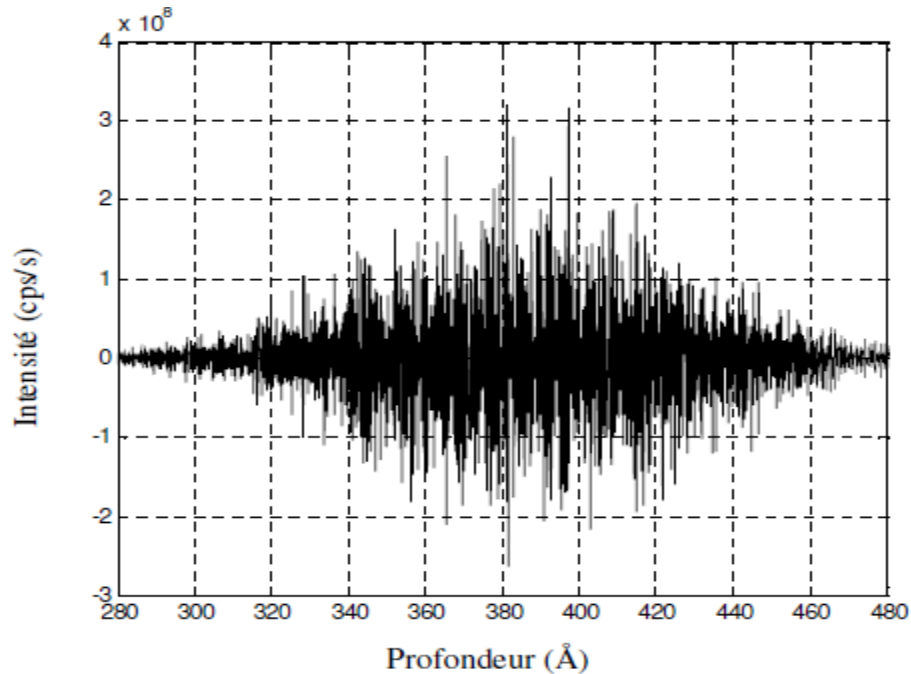


**Figure (2.10) :** Spectre de : a) DRF déterminée expérimentalement à 9,5 keV/  $O_2^+$ , b) DRF fittée par une forme analytique.

La Figure (2.11) 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 (2.11) :** Déconvolution brute d'un profil mesuré du Bore dans le silicium ( $3 \text{ keV}/\text{O}_2^+$ ,  $56,1^\circ$ ).

## CONCLUSION

L'une des utilisations les plus importantes de l'analyse SIMS en microélectronique est la réalisation de profils de concentration 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.

Dans ce chapitre, on a exposé les différentes méthodes d'évaluation de la résolution en profondeur. Ainsi que la fonction de résolution en profondeur. Celui-ci peut être modélisé par une fonction analytique pour mieux maîtriser le système.

Il existe plusieurs formes de la DRF dans la littérature parmi lesquelles on a choisi le modèle de Dowsett, qui est le résultat de la convolution d'une double exponentielle par une gaussienne. Elle est décrite par trois paramètres indépendants  $\lambda_u$ ,  $\lambda_d$  et  $\sigma_g$ . Le spectre de cette DRF est un filtre passe bas, son inversion est un filtre passe haut qui, par une convolution brute, amplifie

le bruit qui gêne l'interprétation des résultats. Pour cela, on doit appliquer une méthode de débruitage avant la déconvolution. Ceci est l'objectif du chapitre suivant.

## Bibliographie du chapitre 2

- [1] **Gautier B.**, *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, 230 p, 1997.
- [2] **Boulakroune M.**, *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*, Thèse de doctorat, Université El Hadj Lakhdar de Batna, 229 p, 2008.
- [3] **Magee C. W** et **Honig R. E.**, *Depth profiling by SIMS: depth resolution, dynamic range and sensitivity*, *Surface and Interface Analysis*, Vol. 4 N° 2, pp. 35-41, 1982.
- [4] **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, 183 p, 2001.
- [5] **Baboux N.**, *Analyse ultime par spectrométrie de masses des ions secondaires des matériaux de la microélectronique avancée : Contribution à l'interprétation des profils de bore dans le silicium*, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 139 p, 2001.
- [6] **Peter S.**, *Recollections of fifty years with sputtering*, *Thin Solid Film*, pp. 6031-6049, Elsevier, 2012.
- [7] **Raïs El hadi B.**, *Fondements du traitement du signal*, presse de l'Office des Publications Universitaires(OPU), Algérie, 4<sup>ème</sup> édition, 213 p, 2008.
- [8] **Biraud Y. G.**, *Les méthodes de déconvolution et leurs limitations fondamentales*. *Revue de Physique Appliquée*, 11 (2), pp. 203-214, 1976.
- [9] **Kasmi H.**, *Développement d'une méthode de déconvolution temporelle et récursive*, *Mémoire de Magister*, Université Ferhat Abbas, SETIF ; 87 p, 2014.
- [10] **Littmark U.**, *The theory of recoil mixing in solids*, In : *Topics in current physics*, Ed ; Springer-Verlag, Berlin, pp. 159-200, 1984.
- [11] **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. New York: Wiley, pp. 219-222, 1994.
- [12] **Turner J. E., Keller H., et Maes 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, pp. 95-98, 1990.
- [13] **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*, Vol. 23, pp. 764-710, 1995.
- [14] **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, 222 p, 1997.
- [15] **Hoffman S.,** *Atomic mixing, surface roughness and information depth in high-resolution AES Depth profiling of a GaAs/ AlAs superlattice structure*, *Surface and Interface Analysis*, 21 673, 1994.
- [16] **Dowsett M. G., Rowlands G., Allen P. N., Barlow R. D.,** *An analytic form for the SIMS response function measured from ultra thin impurity layers*, *Surface and Interface Analysis*, 21, 1994 .
- [17] **Liau Z. L., Tsaor B. Y., Mayer J. W.,** *Influence of atomic mixing and preferential sputtering on depth profiles and interfaces*, *Journal of Vacuum Sciences and Technology*, 16 n°2 121, 1979.
- [18] **Hoffman S.,** *Profile reconstruction in sputter depth profiling*, *Thin Solid Films*, pp. 336-342, 2001.
- [19] **Hoffman S.,** *From depth resolution to depth resolution function ; refinement of the concept for delta layers, single layers and multilayers*, *Thin Solid Films*, *Surface and Interface Analysis*, 27, 825, 1999.
- [20] **Hoffman S.,** *Ultimate depth resolution and profile reconstruction in sputter profiling*, *Surface and Interface Analysis* pp. 228-236, 2000.
- [21] **Wittmaack K.,** *Detailed evaluation of the analytical resolution function*, *Applied Surface Science*, pp. 203-204, 2003.
- [22] **Zalm P. C.,** *Ultra shallow doping profiling with SIMS*, *Rep. Prog. Phys.*, Vol 21, pp. 310-315, 1995.
- [23] **Gallardo S., Kudriatsev Y., Villegas A., Ramirez G., Asomoza R., Cruz-Hernandez E., Rojas-Ramirez J. S., López-López M.,** *SIMS characterization of segregation in InAs/ GaAs heterostructures*, *Applied Surface Science*, 255, 1341, 2008.

# Chapitre 3 : Débruitage des signaux SIMS

## INTRODUCTION

Dans de nombreux domaines technologiques (télécommunication, télédétection, géo-localisation, contrôle industriel, sismologie), l'information utile n'est pas accessible directement, elle est masquée par le bruit dans le signal observé.

En effet, l'étude d'un signal nécessite de supprimer au maximum les signaux parasites dus aux conditions d'acquisition. Le but de filtrage est de 'nettoyer' le signal en éliminant le plus possible de bruit tout en préservant le maximum d'informations. D'une manière générale, le débruitage consiste à restaurer un signal utile à partir d'observations corrompues par un bruit additif.

Dans ce chapitre, après un passage en revue des notions de base sur le bruit et sa nature dans l'analyse SIMS, nous allons présenter quelques techniques de débruitage. Parmi ces techniques nous allons focaliser la lumière sur deux entre elles ; la transformée en ondelettes discrètes et le filtre de Kalman. Une étude comparative entre ces deux techniques sera ainsi présentée.

## 1. BRUIT DANS L'ANALYSE SIMS

### 1.1. Notion 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. 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 [1].

## 1.2. Nature du bruit en 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 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 [2].

## 2. DEBRUITAGE EN UTILISANT LA TRANSFORME DE FOURIER RAPIDE

D'abord, pourquoi a-t-on besoin des transformées, ou encore qu'est-ce une transformée? Les transformations mathématiques sont appliquées aux signaux bruts pour obtenir davantage d'informations qui sont disponibles dans ces signaux. Dans la suite, le signal dans le domaine temporel s'appellera le **signal brut**, et un signal transformé par une certaine transformation mathématique sera un **signal traité**.

Il existe un grand nombre de transformations qui peuvent s'appliquer à un signal. Parmi celles-ci la transformée de Fourier. En effet, dans la pratique, la plupart des signaux sont des

signaux dépendant du temps (du domaine temporel) sous leur format brut. La représentation du signal est une **représentation temps -amplitude**. Cette représentation n'est pas toujours la meilleure pour la plupart des applications de traitement du signal. Dans beaucoup de cas, l'information la plus pertinente est cachée dans la composante de fréquence du signal. Le *SPECTRE de fréquence* d'un signal est constitué par les composantes de fréquence de ce signal.

### 2.1. Transformée de Fourier

L'analyse de Fourier est une base majeure de la physique et des mathématiques. Elle est indissociable du traitement du signal, et ce pour deux raisons principales. La première est l'universalité du concept de fréquence sur lequel elle repose. La seconde tient à la structure même de l'analyse de Fourier qui se prête aisément à des transformations communes comme le filtrage linéaire en les traduisant de manière particulièrement simple.

La transformation de Fourier consiste à décomposer un signal périodique quelconque en une somme de signaux sinusoïdaux de différents amplitudes et déphasages.

$$X(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} x(t)e^{-j2\pi f t} dt \quad (3.1)$$

La transformée de Fourier Discrète, notée TFD, est une suite finie de  $N$  termes  $x(0)$ ,  $x(1)$ ,  $x(2)$ , .....,  $x(N-1)$  et elle est calculée par la relation :

$$X(k) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} x(n)e^{-\frac{j2\pi nk}{N}} \quad \text{pour } K = 0, \dots, N-1 \quad (3.2)$$

Où le terme  $N$  représente le nombre de points de calcul de la TFD. Ce terme joue sur la précision du tracé alors que le terme  $X$  est lié à la résolution en fréquence [3].

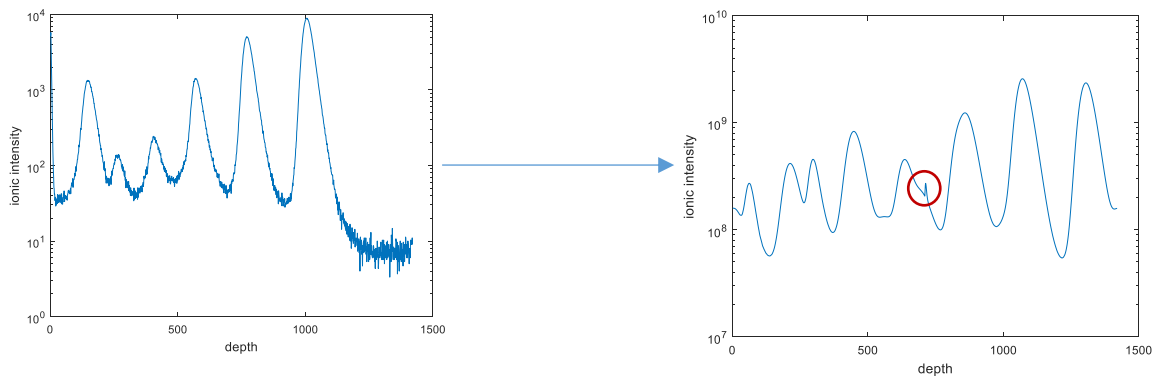
### 2.2. Transformée de Fourier Rapide (FFT)

La transformée de Fourier rapide, est une technique mathématique de calcul rapide élaborée en 1965 par J. W. Cooley et J. W. Tuckey. La FFT permet de ramener le calcul de la transformée de Fourier discrète de  $N$  à  $N \cdot \log(N)$  opérations. Cette réduction de la complexité de calcul a suffi à faire passer facilement résolubles de nombreux problèmes liés à l'analyse spectrale. Pour une meilleure visualisation d'une analyse fréquentielle, la FFT est utilisée au travers d'une fenêtre glissante d'observation. Malgré sa célébrité et son succès, la FFT reste

inadaptable pour les signaux non stationnaires et elle montre assez vite ses limitations, perte de localisation temporelle.

### 2.3. Débruitage par la FFT d'un profil SIMS réel

La figure présente le résultat du débruitage d'un profil expérimental de l'analyse SIMS, en utilisant la Transformée de Fourier Rapide (FFT), cet échantillon contient 6 delta-dopage du Bore dans le Silicium.



**Figure 2.1 :** a) signal mesuré original (Signal mesuré par SIMS), b) signal débruité en utilisant la Transformée de Fourier Rapide.

En comparant les deux courbes, on remarque que le profil débruité contient plusieurs pics, plus de six delta dopage. En effet, L'analyse de Fourier présente un sérieux inconvénient. Lors de la transformation dans le domaine fréquentiel, les informations temporelles sont perdues. Lorsqu'on regarde une transformée de Fourier d'un signal, il est impossible de dire quand un événement particulier s'est produit. Si les propriétés du signal ne changent pas beaucoup dans le temps (par exemple, des signaux stationnaires), cet inconvénient n'est pas très important. Cependant, les signaux les plus intéressants contiennent de nombreuses caractéristiques non stationnaires ou transitoires telles que la dérive, les tendances, les changements abrupts, le début et la fin des événements.

Une ondelette est une forme d'onde de durée effectivement limitée qui a une valeur moyenne de zéro. En comparant les ondelettes aux ondes sinusoïdales, qui sont à la base de l'analyse de Fourier, les sinusoïdes n'ont pas de durée limitée. Ils s'étendent du moins l'infini au plus l'infini. Les sinusoïdes sont lisses et prévisibles, tandis que les ondelettes ont tendance à être irrégulières et asymétriques.

L'analyse de Fourier est extrêmement utile pour de nombreux signaux car le contenu fréquentiel du signal est d'une grande importance. Alors, pourquoi les autres techniques telles que l'analyse par ondelettes sont-elles nécessaires?

### 3. DEBRUITAGE EN UTILISANT LES ONDELETTES

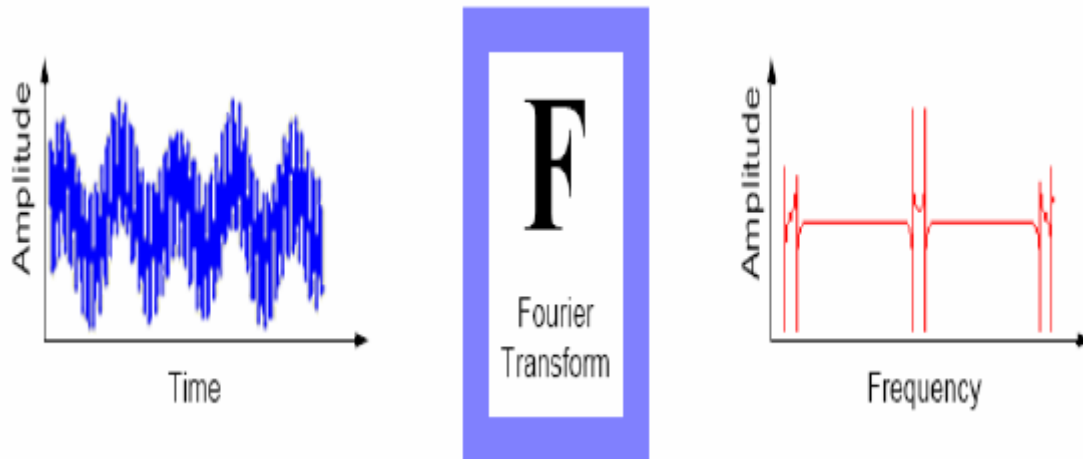
Parmi l'un des plus grands succès de la transformée en ondelettes est le débruitage. En effet cette technique est basée sur la construction d'estimateurs statistiques à base d'ondelettes qui nécessite le calcul d'un seuil qui correspond à l'amplitude maximale du bruit et dépend de l'énergie du signal et du bruit. Ces méthodes exploitent la caractéristique essentielle de la transformée en ondelettes qui est la concentration de l'énergie du signal autour de peu de coefficients et l'on n'a donc besoin d'estimer que quelques grands coefficients pour obtenir une bonne estimation de la fonction.

#### 3.1. De la transformée de Fourier à la transformée en ondelettes

Pour expliquer ce qu'est le traitement et l'analyse du signal par ondelettes, nous allons faire une petite digression vers l'analyse de Fourier afin de mieux faire comprendre d'où émerge ce concept.

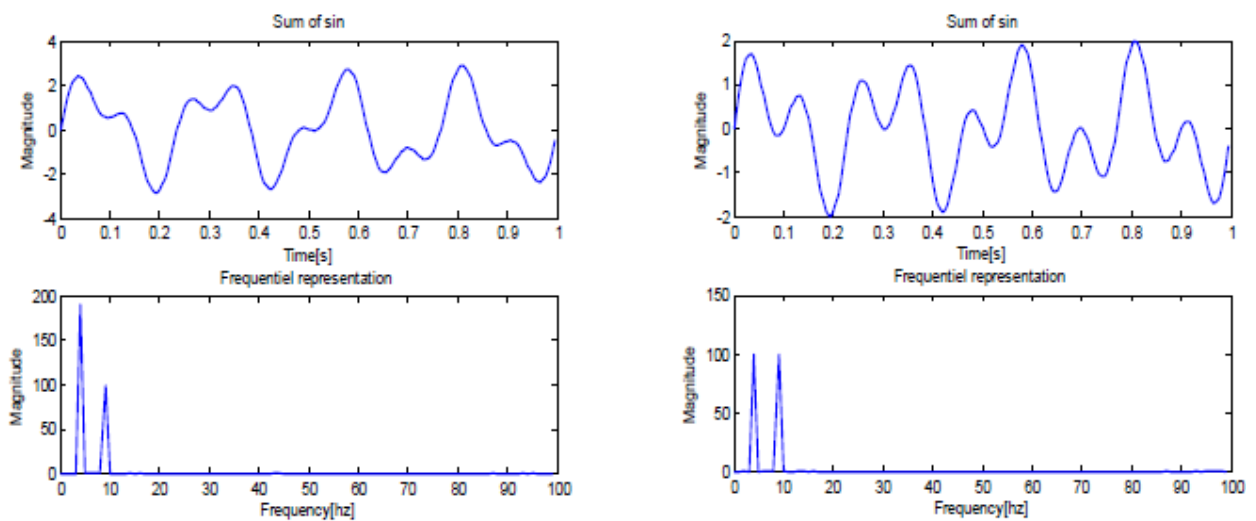
Lorsqu'on observe un signal  $f(t)$  au cours du temps, on est en mesure de connaître son début et sa fin et de constater ses éventuelles variations qualitativement. Cependant, il est moins évident de se faire une idée de ses périodicités (ses fréquences). D'où l'utilisation de la transformée de Fourier afin de décomposer le signal en une fréquence fondamentale accompagné de ses harmoniques (les spectres). Chaque fréquence correspond à une fonction sinusoïdale [4]. Donc l'analyse de Fourier est une analyse en fréquence d'un signal temporelle  $f(t)$ . La figure suivant explique le concept de la transformée de Fourier ;





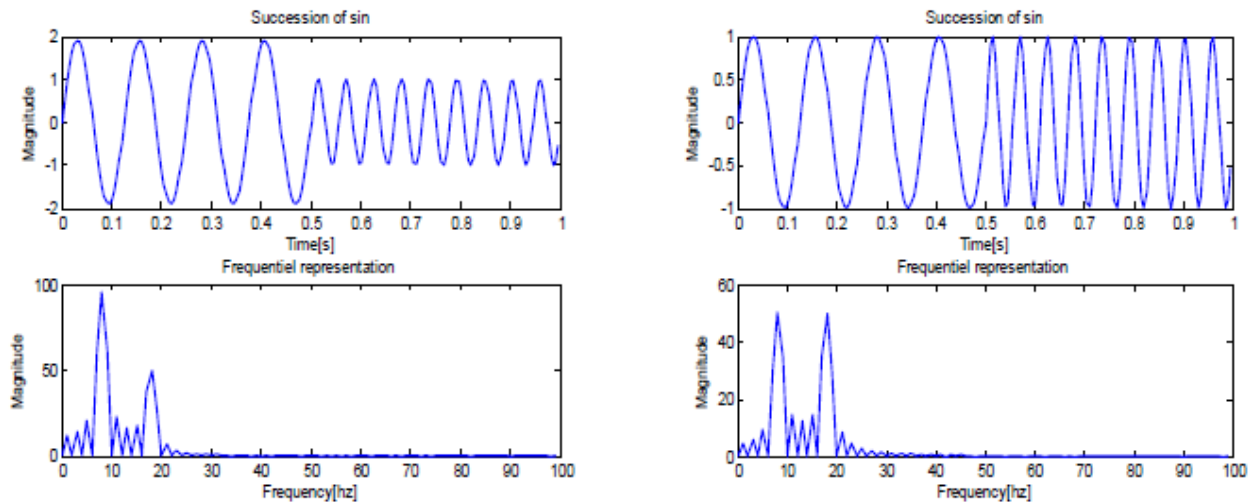
**Figure 2.2 :** De la représentation temporelle vers la représentation fréquentielle

Dans l'exemple suivant, on a appliqué la transformée de Fourier d'un signal stationnaire composé d'une somme de deux sinusoïdes de différentes fréquences et de différents amplitudes (Partie gauche) et le même signal de même amplitude (Partie droite).



**Figure 2.3 :** Représentation temporelle et fréquentielle 'somme de deux sinusoïde'  $F_1 = x_1 + x_2$ .

Dans le deuxième exemple on passe à un signal non stationnaire (succession de deux sinusoïdes) de différentes amplitudes (à gauche) et de même amplitude (à droite).

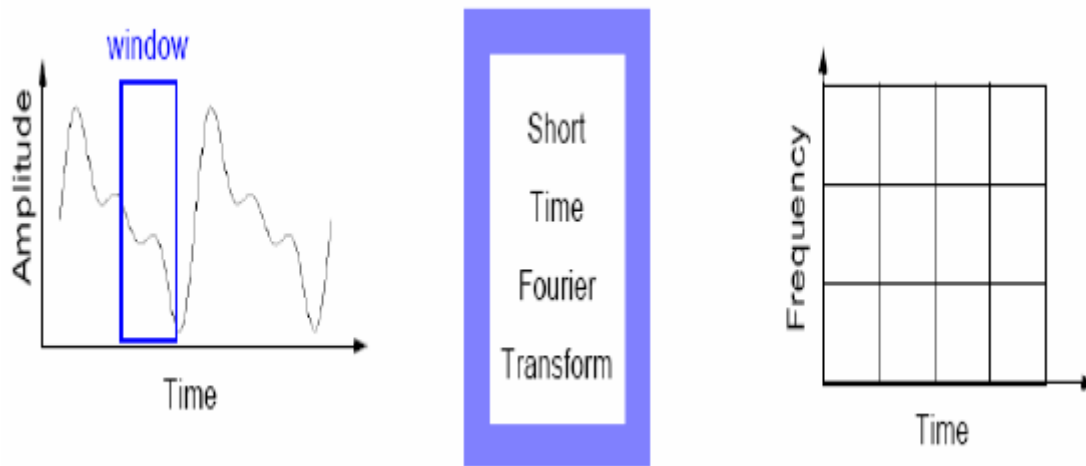


**Figure 2.4 :** Représentation temporelle et fréquentielle ‘succession de deux sinusoïde’

$$F_1 = x_1 \oplus x_2.$$

D’après les deux exemples précédents, on remarque que la transformée de Fourier nous donne une bonne connaissance combien de fréquences existe mais sans aucune information où ses fréquences sont localisées dans le temps. Donc l’analyse est globale, d’où la difficulté d’obtenir une information localisée dans le temps. Donc on ne peut pas étudier des signaux dont la fréquence varie au cours du temps. (Les signaux non stationnaires). L’idée suivante consiste à représenter notre signal en fonction du temps et de fréquence. On a donc une description directe et une description fréquentielle. On passe alors à la transformée de Fourier à fenêtre glissante STFT [5].

L’idée de base consiste à découper le signal en plages temporelles finies. On réalise sur chaque plage, une analyse de Fourier. Cette analyse est donc dépendante de la localisation de la plage, la figure suivante donne un aperçu sur ce concept [4, 5].



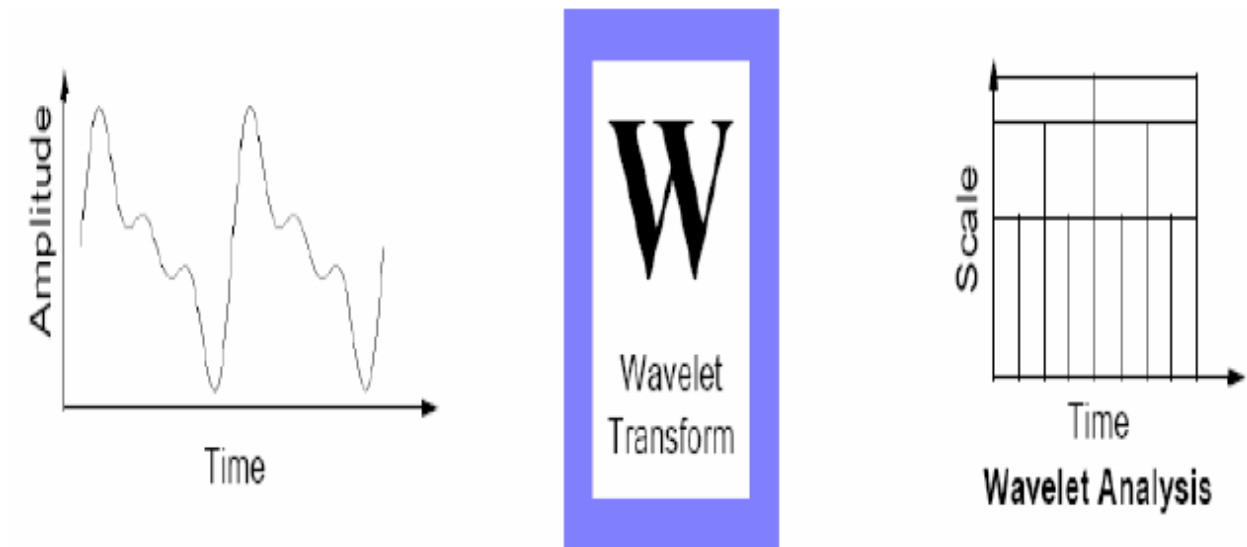
**Figure 2.5 :** Représentation temporelle vers STFT.

Le principal inconvénient de cette technique est que la longueur de la plage (l'échelle) est fixe. Cela peut s'avérer très embarrassant si on fait l'analyse de signaux qui correspondent à des phénomènes avec des échelles de temps très différents.

On ne peut pas connaître précisément à quel instant dans le temps le spectre fréquentiel est localisé. On peut seulement connaître dans quel intervalle de temps l'intervalle des fréquences sont présentées [6].

L'analyse en ondelettes a pour objectif de rendre compte de ces deux phénomènes simultanément, en introduisant une fenêtre dont la taille varie avec la fréquence.

L'ondelette est une forme d'onde qui a une durée limitée et avec une valeur moyenne égale à zéro. La transformation en ondelettes permet d'appliquer une analyse multi-résolution sur le signal étudié. L'analyse multi-résolution de la transformation en ondelettes équivaut à une décomposition atomique temps-échelle. Chacun des atomes peut s'interpréter comme étant une projection locale du signal analysé et est obtenu à partir d'une ondelette  $\psi(t)$  unique par une translation en temps et une dilatation. Partant d'une fonction bien localisée, dans le plan temps-échelle [7].



**Figure 2.6 :** De la représentation temporelle vers la représentation en ondelettes.

La transformée en ondelettes d'un signal  $f$  est la famille  $C(s, u)$  coefficients d'ondelettes qui dépendent des deux paramètres  $s$  et  $u$  où  $s$  est l'échelle et  $u$  est le facteur de position à analyser. Suivant les besoins de l'analyse du signal  $f$  les paramètres  $(s, u)$  peuvent être utilisés de façon continue (TOC) ou discrète (TOD). La transformée continue d'ondelettes exigeant une continuité des valeurs des paramètres  $(s, u)$  est plutôt utilisée dans l'analyse de l'allure du signal (approximation) tandis que la transformée discrète d'ondelettes basée beaucoup plus sur l'utilisation de la complémentarité des deux filtres, passe-haut et passe bas, va servir à l'extraction d'informations caractérisant les transitions rapides du signal(détails).

### 3.2. Panorama de quelques applications des ondelettes

Les applications des ondelettes sont innombrables. Grâce à des caractéristiques spécifiques, les ondelettes sont considérées comme l'un des outils les plus dominants et couvrant une variété immense d'applications d'engineering.

La capacité des ondelettes à faire ressortir les variations d'un signal peut être exploitée de diverses manières :

#### ❖ En géophysique

Dans la référence [8] Fabrice a proposé différentes techniques pour caractériser un signal géophysique à partir de la transformée en ondelettes continue et de l'analyse

multirésolution. Ces techniques ont été développées sur des signaux émis par un LIDAR utilisé en physique de l'atmosphère.

Ces méthodes peuvent très facilement être étendues à d'autres domaines géophysiques ayant des signaux du même type : sonar, radar, réflectométrie ... Les applications concernées sont celles qui ont des mesures quasi-instantanées et pour lesquelles on s'intéresse à l'évolution du signal en fonction de la distance.

#### ❖ **En mécanique**

Les méthodes de diagnostic sans connaissance a priori sont basées sur l'extraction d'informations par le biais du traitement des signaux mesurés qui sont (courants, tensions, vitesse, couples, vibrations, température). Ces signaux peuvent fournir des informations significatives sur les défauts. L'analyse par les ondelettes est une technique performante qui a montré son efficacité dans la détection des défauts électriques rotoriques même la détection de la non-stationnarité [5].

#### ❖ **En astronomie**

Selon l'astrophysicien français Albert Bijaoui [9], une meilleure connaissance de cette structure est nécessaire aux théoriciens qui veulent tester les divers scénarios de l'évolution de l'univers ; une première tâche consiste à faire l'inventaire des galaxies de l'univers. Puisque les ondelettes identifient les structures aux différentes échelles, elles sont capables de distinguer une étoile d'une galaxie, ce qui n'est pas toujours évident.

#### ❖ **Dans le domaine des sciences biomédicales**

Le secteur biomédical se caractérise par la présence d'une grande variabilité dans les signaux disponibles. Les enregistrements sont souvent complexes : mélanges de signaux localisés comme des spikes (pics) en EEG (électro-encéphalogramme) et de signaux diffus comme le bruit de fond cardiaque ou l'écoulement sanguin. Le signal cardiaque se décompose en séquences dont la plus importante est appelée le complexe QRS. Le repérage de forme par ondelettes permet la discrimination de patterns normaux et anormaux. Les ondelettes testées sur une base de données usuelle s'avèrent avoir un taux de détection excellent. Alors que les autres méthodes ne pouvaient les repérer, les ondelettes détectent bien de petits signaux de fréquence assez grande apparaissant dans les maladies coronariennes, des infarctus ou des arythmies ventriculaires.

### ❖ En nanotechnologies

Concernant les nanotechnologies et plus particulièrement dans le domaine de l'analyse d'hétéro-structures en couches minces par réflectométrie et diffraction des rayons X pour l'optoélectronique, Durand [10] a été montré que les ondelettes lui donné beaucoup d'aide dans l'analyses non destructive de ces matériaux, donnant non seulement l'épaisseur des couches nanométrique mais aussi, dans certains cas, l'ordre d'empilement des couches. L'utilisation de la transformée de Fourier ne permettait pas d'extraire les informations d'un profil à grande dynamique avec de très nombreuses zones d'instantanarités et encore moins de donner l'ordre des couches.

### ❖ Débruitage

Les ondelettes fournissent des moyens simples et efficaces d'estimer de façon non linéaire des signaux, en présence de bruit. La procédure est simple : on transforme le signal en ondelettes ; on élimine, à toutes les résolutions, les coefficients supérieurs une valeur seuil et on reconstruit le signal avec les coefficients qui restent à une transformée inverse en ondelettes. Le débruitage par les ondelettes est très performant pour les signaux constitués à la fois de parties lisses et de zones présentant des irrégularités et des variations brusques. Les méthodes classiques sont incapables d'une telle adaptation en temps.

### ❖ Compression

L'algorithme de base est très semblable à celui du débruitage. Partant du signal à compresser, on le décompose d'abord sur une base orthogonale d'ondelettes au moyen de la transformée discrète. Ensuite, on sélectionne une partie des coefficients par *seuillage dur*, en conservant intact les coefficients d'approximation de niveau convenablement choisi. Enfin, à partir des coefficients seuillés, on reconstruit le signal original en leur appliquant la transformée discrète inverse. Le signal ainsi obtenu est le signal comprimé.

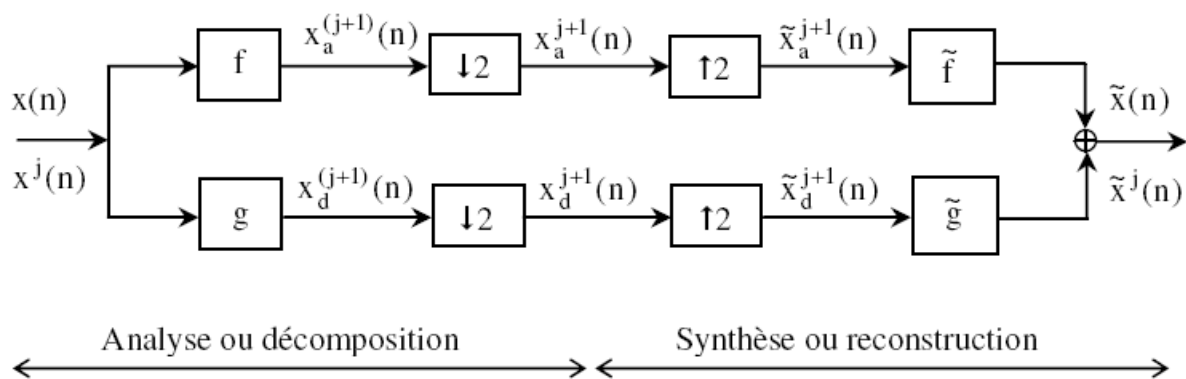
## 3.3. Algorithme de débruitage par les ondelettes

Le bruit est un phénomène qui affecte toutes les fréquences. Comme le signal utile tend à dominer les composantes basse fréquence, on s'attend à ce que la majorité des composantes à haute fréquence au-dessus d'un certain niveau soient dues au bruit.

La procédure de débruitage à base d'ondelettes est décrite dans ce qui suit:

- **Décomposition:** Sélectionner le niveau  $N$  et le type d'ondelettes puis déterminer les coefficients du signal SIMS par DWT (Discrete Wavelet Transform). Pour le débruitage des ondelettes, nous devons décider à partir de nombreuses sélections possibles, telles que le type d'ondelettes mère, les niveaux de décomposition et les valeurs des seuils à l'étape suivante.
- **Seuillage:** L'estimation des valeurs seuils repose sur les méthodes analytiques et empiriques. Pour chaque niveau de 1 à 5, nous utilisons les valeurs de seuil estimées et fixons les coefficients de détail en dessous des valeurs de seuil à zéro. Sur la base de la connaissance de l'analyse des ondelettes dans l'ensemble de données, nous utilisons des critères objectifs pour déterminer les valeurs de seuil. Fondamentalement, le choix de l'ondelette mère semble peu importe, alors que les valeurs des seuils le font. Par conséquent, la définition des valeurs du seuil est un sujet crucial. Selon l'analyse décrite, nous fixons des valeurs de seuil en fonction des propriétés des ensembles de données SIMS.
- **Reconstruction:** Nous reconstituons le signal débruité en utilisant les coefficients d'approximation initiaux du niveau  $N$  et les coefficients de détail modifiés des niveaux de 1 à  $N$  par la DWT inverse [11].

Le principe de décomposition/ reconstruction en deux sous-bandes est présenté sur la figure (2.7) :



*Figure 2.7 : Décomposition /reconstruction à 2 bandes.*

### 3.3.1. Décomposition sur une base d'ondelettes

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  $x(n)$ .

### 3.3.2. Seuillage des coefficients d'ondelettes

Considérons le modèle suivant :

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{b} \quad (3.3)$$

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.

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 :

$$\mathbf{y}_a = \mathbf{F}\mathbf{y} \quad (3.4)$$

$\mathbf{F}$  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 :

$$\mathbf{y}_d = \mathbf{G}\mathbf{y} \quad (3.5)$$



$\mathbf{G}$  est une matrice construite à l'aide de la réponse impulsionnelle du filtre  $\mathbf{g}$  associée à l'ondelette correspondante. Le vecteur  $y_d$  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  $y_d$ . Ces coefficients modifiés sont notés  $\hat{y}_d$ . Le signal reconstruit sera alors une bonne approximation du signal recherché :

$$\tilde{x} = \tilde{\mathbf{F}}y_d + \tilde{\mathbf{G}}\hat{y}_d \quad (3.6)$$

$\tilde{\mathbf{F}}$  et  $\tilde{\mathbf{G}}$  sont des matrices construite 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 :

$$\|x - \tilde{x}\|_{min}^2 \quad (3.7)$$

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 [12-14]. 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 ».

### 3.3.2.1. Différents types de seuillage

Les méthodes de seuillage les plus connues sont introduite par D Donoho [15]. On distingue deux méthodes : Le seuillage dur (Hard Thresholding) et le seuillage doux (Soft Thresholding). Des versions de ces méthodes ont été développées. Dans notre cas nous nous intéressons par ces deux méthodes de seuillage (Dur et Doux).

- **Seuillage dur**

Le seuillage dur [16] considère un coefficient donné soit comme représentant totalement un bruit pur donc à éliminer, ou comme un coefficient représentant le signal donc à conserver.

La fonction de seuillage dur  $S_{dur}$  appliquée dans ce cas est définie par :

$$S_{dur}(x) = \begin{cases} x & \text{si } |x| > \lambda \\ 0 & \text{si } |x| \leq \lambda \end{cases} \quad (3.8)$$

Où  $\lambda$  est la valeur du seuil.

- **Seuillage doux**

Le seuillage doux rend [15, 17] consiste à éliminer chaque coefficient au-dessous du seuil, et à soustraire ce seuil des autres coefficients.

La fonction de seuillage doux  $S_{doux}$  appliquée dans ce cas est définie par :

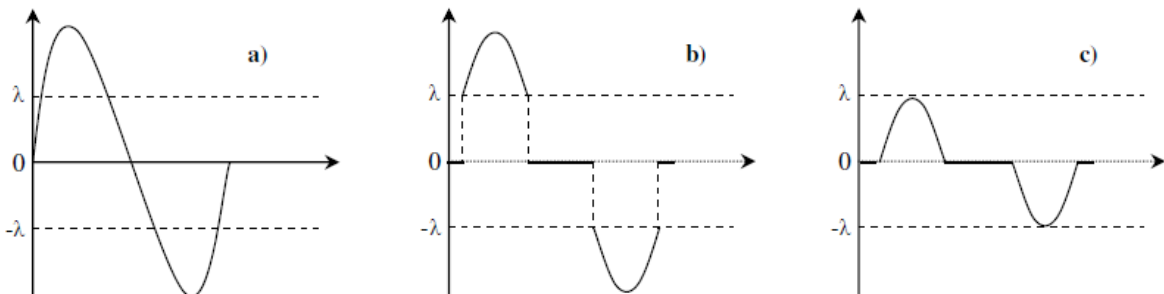
$$S_{doux}(x) = \begin{cases} \text{sign}(x)(|x| - \lambda) & \text{si } |x| \geq \lambda \\ 0 & \text{si } |x| < 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

$\lambda$  est le seuil convenablement déterminé en fonction du modèle de bruit. Dans le cas d'un bruit blanc gaussien, Donoho et Johnstone [14] ont modélisé ce seuil par :

$$\lambda = \sigma\sqrt{2\log(N)} \quad (3.10)$$

Avec  $N$  est le nombre des données observées,  $\sigma$  l'écart-type de bruit.

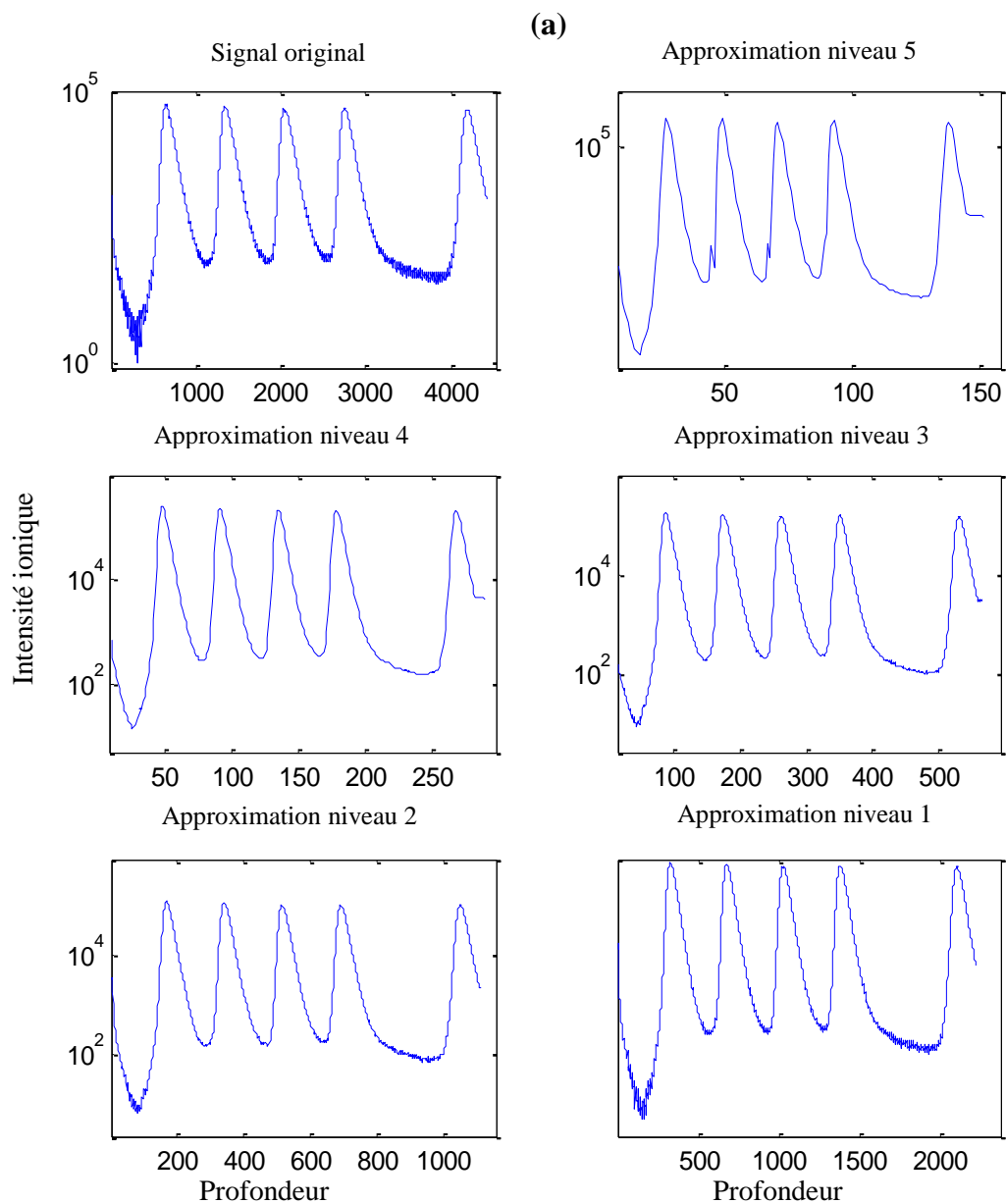
Le seuil  $\lambda$  dépend de  $\sigma$  qui donne le niveau du bruit (l'échelle caractéristique du bruit).



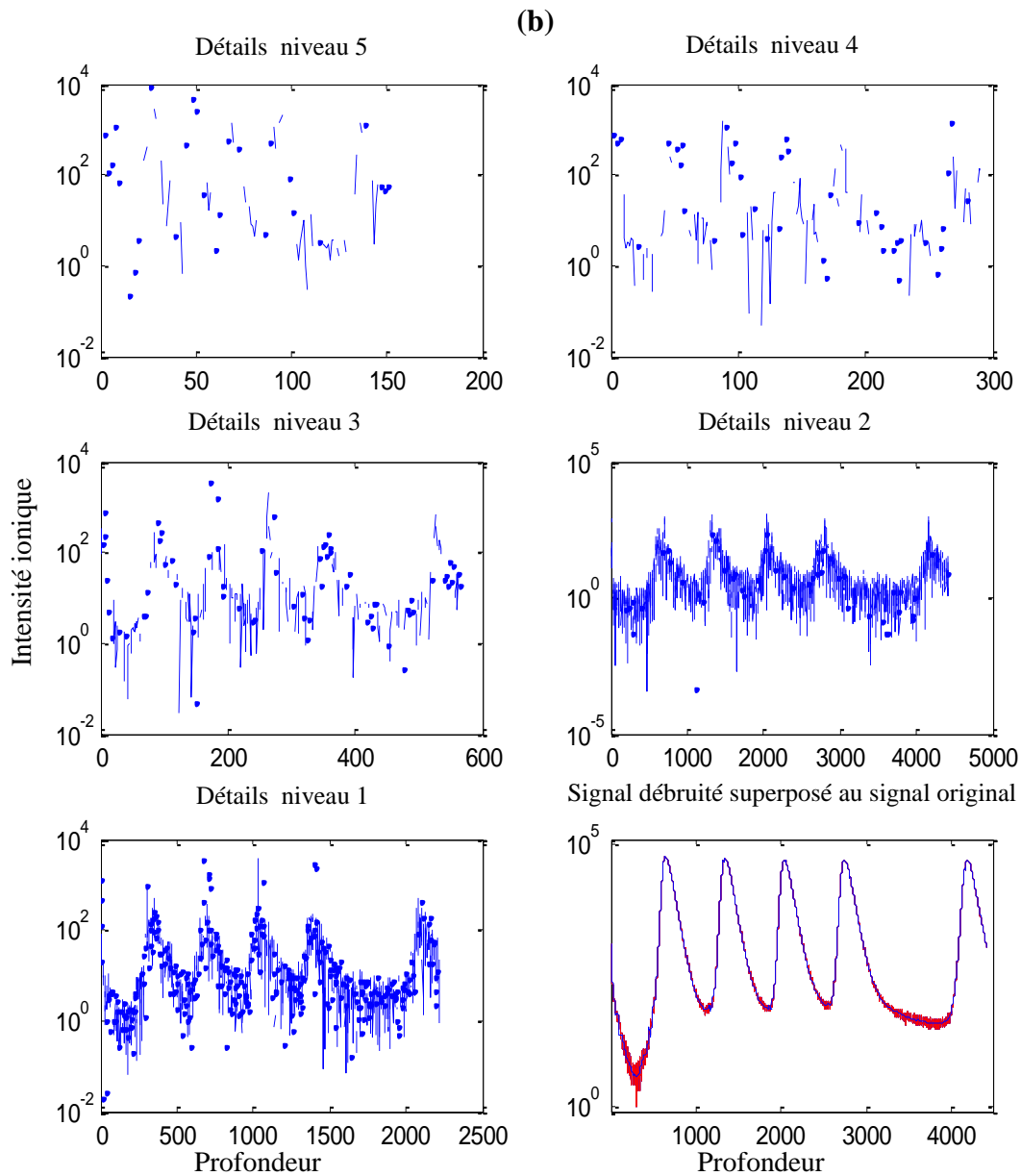
**Figure 2.8 :** a) Signal original, b) Seuillage dur, c) Seuillage doux.

### 3.4. Décomposition sur une base d'ondelettes. débruitage d'un profil réel (cinq delta dopage)

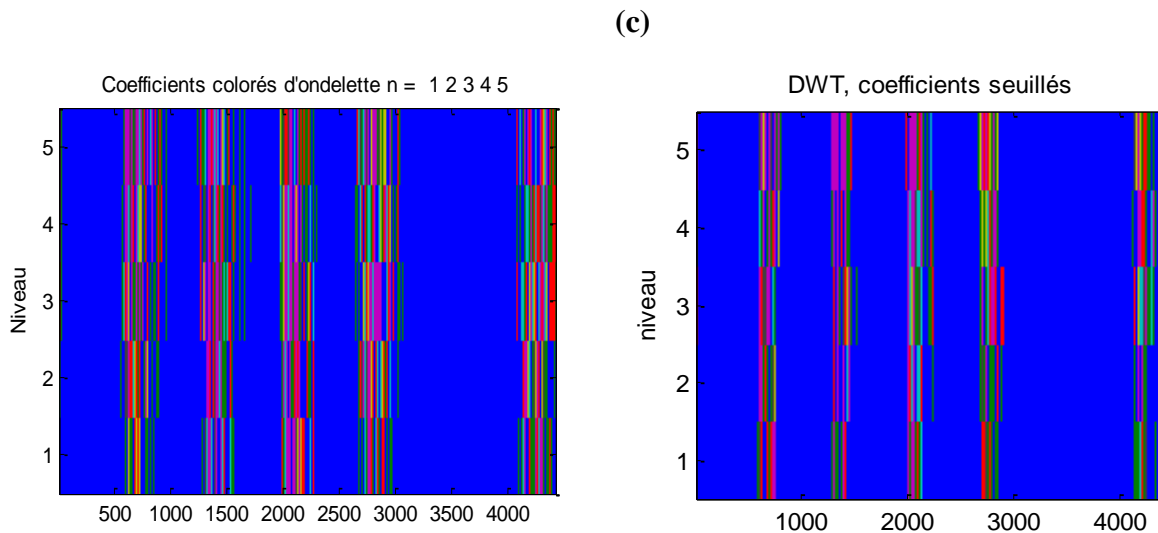
Nous allons maintenant voir un exemple de décomposition d'un profil réel sur une base d'ondelette. La décomposition ainsi que le débruitage de cet échantillon (MD5) sur une base d'ondelette sont illustrés sur la Figure (2.9). L'ondelette utilisée est à support compact de la famille Symlet qui est Sym8.



Dans les graphiques des approximations (voir Figure 2.9-a) partant de  $a_1$  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 2.9-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.



**Figure 2.9 :** Décomposition de l'échantillon MD5 sur une base d'ondelettes « sym8 », niveau de décomposition 5 : a) signal mesuré original avec les signaux d'approximation, b) signaux de détails et le signal débruité superposé au signal original, c) les coefficients colorés d'ondelettes avec les coefficients seuillés.

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 2.9-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 2.9-c). En utilisant ce processus, les composants haute fréquence au-dessus d'un certain seuil peuvent être supprimés. Le seuil obtenu par le seuillage universel dur en utilisant la formule de Donoho et Johnstone est  $\lambda = 55,7831$  cps/s. Le niveau de bruit estimé est d'un SNR = 40,9212 dB [2].

Un profil SIMS brut et son profil débruité sont représentés sur la Figure 2.9-b. En particulier, la figure montre que les composantes basse fréquence, qui représentent habituellement la structure principale du signal, sont séparées des composantes hautes fréquences. Ces résultats préliminaires démontrent les capacités supérieures de l'approche par ondelettes à l'analyse des profils SIMS par rapport aux techniques traditionnelles.

## 4. Débruitage en utilisant le filtre de Kalman

### 4.1. Etude de filtre de Kalman

#### 4.1.1. Problèmes de filtrage

Le filtrage est une opération fondamentale en traitement du signal et en automatique. Par filtrage, on entend généralement plusieurs types de traitements [18], qu'il convient de préciser :

- Le filtrage (filtering) proprement dit, qui consiste à extraire de l'information à l'instant  $t$  à partir de données disponibles jusqu'à l'instant  $t$  inclus ;
- Le lissage (smoothing) qui consiste à extraire de l'information à l'instant  $t$ , à partir de données observées au-delà de l'instant  $t$ ; le lissage exploitant plus d'information que le filtrage conduit à des résultats plus performants ;
- La prédiction (prediction) qui consiste à prédire la valeur d'une quantité d'intérêt à l'instant  $t + \tau$ , connaissant cette quantité jusqu'à l'instant  $t$  inclus.

#### 4.1.2. Evolution historique du filtre de Kalman

Dans de nombreuses applications telles qu'en télécommunication, télédétection, géolocalisation, contrôle industriel, sismologie ou encore en ingénierie biomédicale, le signal qui porte l'information cachée n'est pas accessible directement et noyé dans le signal observé. Le développement de méthodes de l'information cachée est en conséquence un enjeu important pour les différentes applications et est à l'origine d'une littérature scientifique très riche en traitement du signal. Par exemple, la poursuite d'un véhicule par un système radar est obtenue par l'estimation de la vitesse et de la position du véhicule à partir d'un signal radar.

La problématique qui se pose alors est de savoir au regard de l'observation et d'hypothèses sur le système, comment estimer au mieux le signal utile. Wiener fut le premier à proposer en 1949 une solution dans le cas où les signaux mis en jeu sont stationnaires. Il développa un estimateur linéaire minimisant l'erreur quadratique moyenne obtenue en résolvant l'équation de Wiener-Hopf.

Kalman proposa, en 1960, une alternative au filtre de Wiener qui s'affranchit de la stationnarité du processus observé et de celui caché. Le filtre de Kalman est basé sur un modèle d'état linéaire qui met en équation l'évolution du signal utile, et sa relation au signal mesuré

ainsi que sur un critère d'optimisation qui exploite toutes les observations, de l'instant initial à l'instant courant. Le filtre obtenu par Kalman est récursif, sa réponse en chaque instant n'est en effet fonction que du signal observé en son entrée et de sa réponse à l'itération précédente. Ainsi, le filtre de Kalman ne nécessite pas toutes les données passées pour produire une estimation à l'instant courant. Il ne nécessite donc pas de mise en mémoire et de retraitement des données. Cet avantage rend possible l'implémentation du filtre de Kalman pour des applications en temps réel.

En 1960, alors que Kalman visitait la NASA, un des responsables, F. Schmidt comprit la possibilité d'appliquer les résultats de Kalman pour le projet « Apollo » pour l'estimation et la commande de la trajectoire. Schmidt travailla sur le sujet et on peut dire que ce fut la première réelle implantation du filtre.

Le filtre de Kalman peut être utilisé dans les situations où nous voulons lisser, estimer ou prédire les états d'un certain système dynamique et linéaire. L'une des plus importantes applications du filtre de Kalman est son utilisation avec les systèmes non linéaires, et avec cette extension le filtre de Kalman devient ce qu'on appelle Filtre de Kalman Étendu (FKE). [19-21].

#### **4.1.3. Définition du filtre de Kalman**

C'est un filtre à réponse impulsionnelle infinie qui estime les états d'un système dynamique à partir d'une série de mesures incomplètes ou bruitées. Le filtre a été nommé d'après le mathématicien et informaticien américain d'origine hongroise Rudolf Kalman [22].

#### **4.1.4. Fonctionnement du filtre de Kalman**

Le filtre de Kalman est une méthode visant à estimer des paramètres d'un système évoluant dans le temps à partir de mesures bruitées. On retrouve ce filtre dans bon nombre de domaines relatifs au traitement du signal, radar, traitement d'images etc. [23].

La force de ce filtre est sa capacité de prédiction des paramètres et de rectification des erreurs, non seulement des capteurs, mais aussi du modèle lui-même !

Le fonctionnement du filtre de Kalman peut se diviser en deux étapes :

- Une première étape de prédiction de l'estimation selon le modèle du système. Pour ce faire, le filtre de Kalman reprend l'estimation précédente des paramètres et de l'erreur et prédit les nouveaux paramètres et la nouvelle erreur en fonction de la modélisation du système.
- La seconde étape va faire la mise à jour de cette prédiction grâce aux nouvelles mesures. Ces mesures (par définition bruitées) vont permettre d'obtenir une estimation des paramètres et de l'erreur à partir de la prédiction faite. Si jamais le modèle comporte des erreurs, cette étape de mise à jour permettra de les rectifier.

#### 4.1.5. Expression du filtre de Kalman

Cette étude est basée sur la formule du filtre de kalman utilisé par Obidin et al [24]. Ce Filtre peut être appliqué aux signaux de l'ensemble suivant, [25]:

$$\sum(\beta, L) = \left\{ \begin{array}{l} k \text{ derivates exists, } (f^{(0)}, f^{(1)}, \dots, f^{(k)}) \\ f: |f^{(k)}(t_2) - f^{(k)}(t_1)| \leq L|t_2 - t_1|^\alpha, \\ \forall t_1, t_2, \alpha \in (0,1]; \\ \beta = k + \alpha \end{array} \right\} \quad (3.11)$$

Ce filtre est de la forme suivante :

$$\hat{F}^n(t_i) = \hat{F}^n(t_{i-1}) + \frac{1}{n} \alpha \hat{F}^n(t_{i-1}) + q_n (X_i - A \hat{F}^n(t_{i-1})) \quad (3.12)$$

Où :

$$\hat{F}^n(t_i) = \begin{pmatrix} \hat{F}_n^{(0)}(t_i) \\ \hat{F}_n^{(1)}(t_i) \\ \vdots \\ \hat{F}_n^{(k)}(t_i) \end{pmatrix}, \quad q_n = \begin{pmatrix} q_0 n^{-\frac{2\beta}{2\beta+1}} \\ q_1 n^{-\frac{2\beta}{2\beta+1}} \\ \vdots \\ q_k n^{-\frac{2\beta}{2\beta+1}} \end{pmatrix}, \quad A = (1 \ 0 \ \dots \ 0)_{1 \times (k+1)'}.$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix},$$

$$q_0(\gamma) = U_{00} \left(\frac{\gamma}{\sigma}\right)^{\frac{1}{k+1}},$$

$$q_1(\gamma) = U_{01} \left(\frac{\gamma}{\sigma}\right)^{\frac{2}{k+1}},$$

...

$$q_k(\gamma) = U_{0k} \left(\frac{\gamma}{\sigma}\right).$$



Le paramètre  $\gamma$  est choisi [25] pour que la fonction suivante est minimisée:

$$C(q) = \sigma^2 \left( \int_0^{\infty} q * e^{(a-qA)*t} e^{(a-qA)t} q dt + \left( \frac{L}{\sigma} \right)^2 \left[ \left( \frac{1}{q_k} \right)^2 + \sum_{j=0}^{k-1} \left( \frac{q_j}{q_k} \right)^2 \right] \right) \quad (3.13)$$

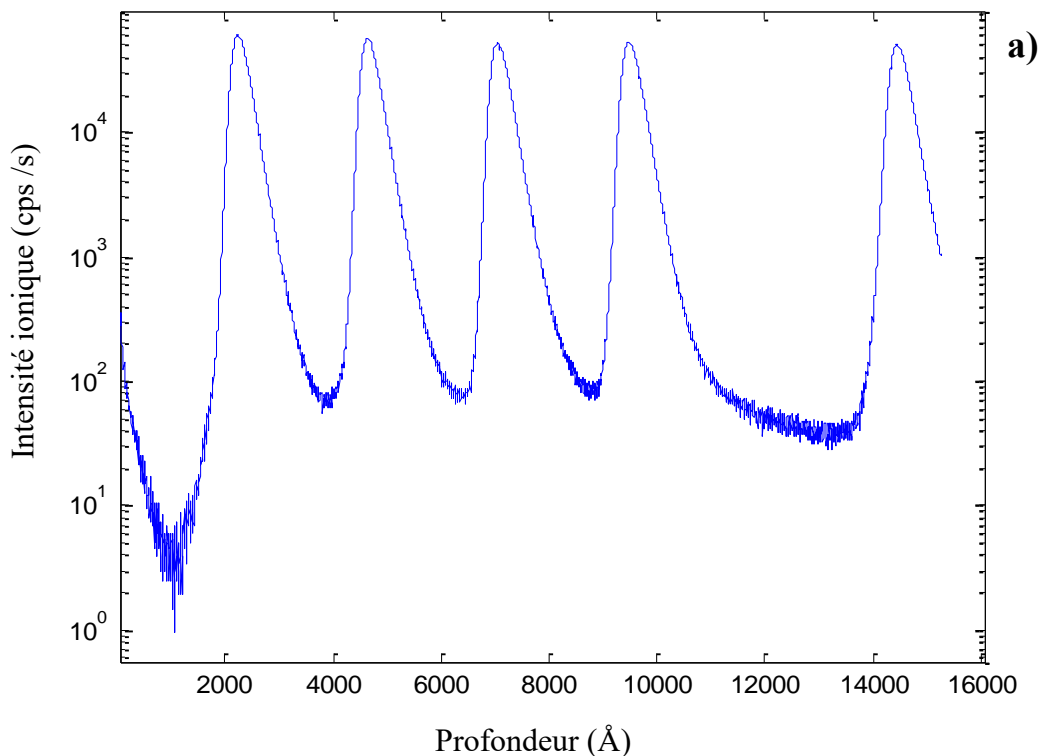
En sortie, ce filtre produit non seulement le signal lui-même, mais aussi ses dérivées. Cependant, puisque les dérivés ne sont pas utilisés dans l'étude, nous pouvons choisir n'importe quel  $k \geq 0$ .

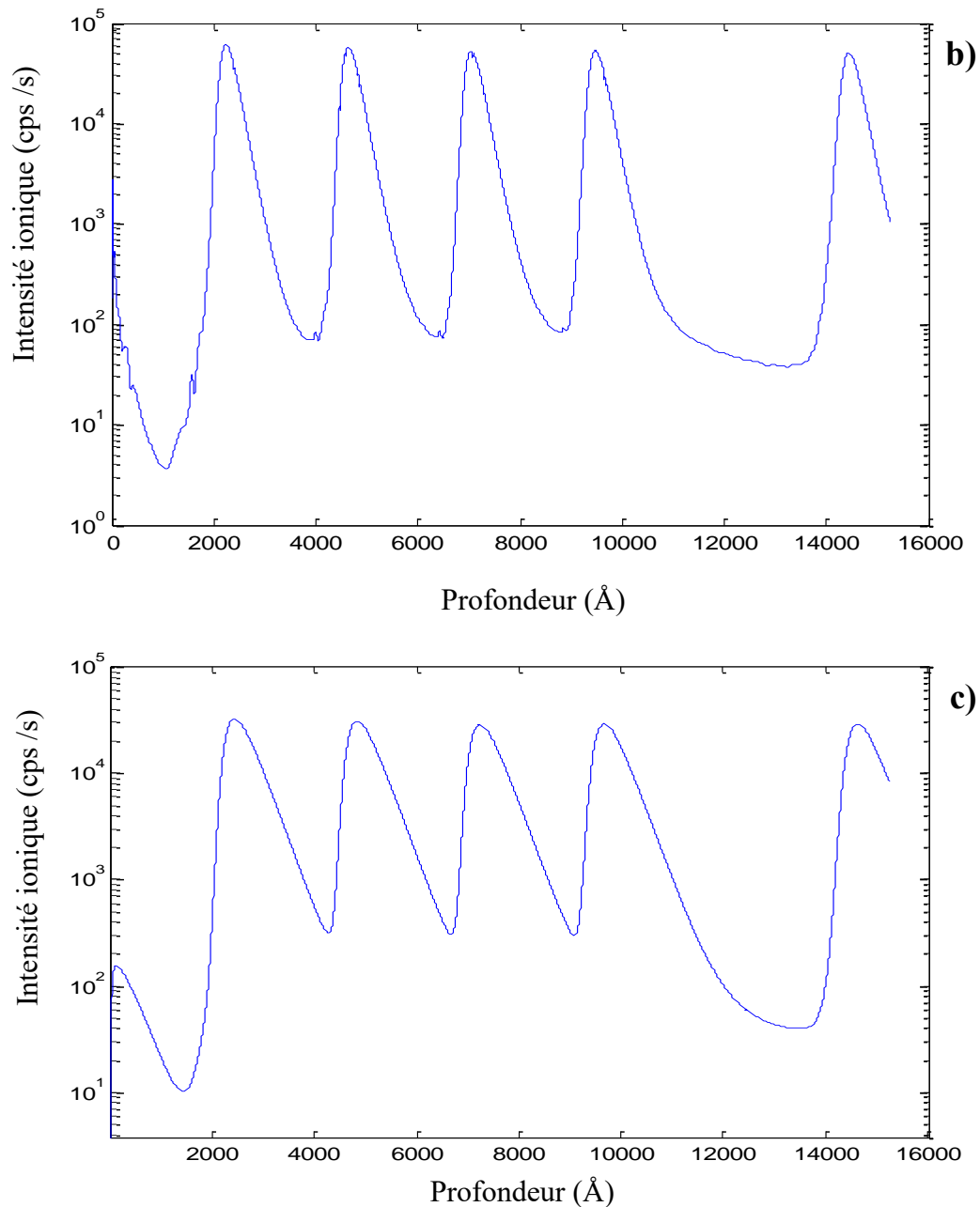
Dans cette étude, nous utilisons ce filtre pour  $k=0$ , [25]. son expression est la suivante ( $\hat{F}(t_i) = \hat{F}_n^{(0)}(t_i)$ ):

$$\hat{F}(t_i) = \hat{F}(t_{i-1}) + \left( \frac{2L}{n\sigma} \right)^{2/3} (X_i - \hat{F}(t_{i-1})) \quad (3.14)$$

#### 4.2. Débruitage d'un profil SIMS réel

Dans cette section, on présente le débruitage d'un profil MD5, qui contient cinq multi delta-dopage de bore dans le silicium, en utilisant les deux techniques précédentes (les ondelettes et le filtre de Kalman).





*Figure 2.10 : a) signal mesuré original, b) signal débruité en utilisant les ondelettes, c) signal débruité en utilisant le filtre de Kalman.*

Il en résulte que le signal obtenu à l'aide des ondelettes suit le profil d'origine. En particulier, ce signal montre que les composants basse fréquence, qui représente généralement la structure principale du signal, sont séparés des composants haute fréquence. En effet, les composantes hautes fréquence, au-dessus d'un certain seuil, sont supprimées. Ces résultats préliminaires

démontrent les capacités supérieures de l'approche en ondelettes dans l'analyse des profils SIMS plutôt que les techniques traditionnelles.

Dans cette section, l'étude est qualitative. Alors que, dans le cas de débruitage par le filtre de kalman. Une limitation importante d'une telle méthode est que le filtre de kalman prend en considération que le modèle de bruit gaussien. Tandis que, un autre type de bruit est requis (bruit de Poisson). Cette restriction limite l'utilisation du filtre de kalman

Il est visible que le résultat obtenu de cette figure (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.

## CONCLUSION

En traitement de signal et de l'information, les données observées sont très souvent composées de l'information utile (signal) corrompue par une perturbation généralement indépendante. La perturbation (bruit) peut être interne au système physique de traitement de l'information ou externe, due aux interactions entre le signal et les éléments de son milieu de propagation. La distribution du signal n'est pas toujours connue et elle s'avère assez souvent difficile à estimer en pratique. Il en est de même concernant la nature de la perturbation : sa distribution n'est pas connue et est assez souvent difficile à modéliser.

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 subjective et dépend des critères propres à chaque utilisateur : ce qui n'est que du bruit pour certains pourra pour d'autres considéré comme un signal de la plus haute importance !

### Bibliographie du Chapitre 3

- [1] **De Coulon F.**, *Traité d'électricité : Théorie et traitement des signaux*, Presse polytechniques et universitaires romandes, Lausanne, vol. 6, 547 pages, 1996.
- [2] **Boulakroune M.**, *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*, Thèse de doctorat, Université El Hadj Lakhdar de Batna, 229 p, 2008.
- [3] **Belhamdi S.**, *Diagnostic des défauts de la machine asynchrone contrôlée par différentes techniques de commande*, Thèse de doctorat, Université Mohamed Khider de Biskra, 177 p, 2014.
- [4] **Perrier V M.**, *Idée de la base, Application de la théorie des ondelettes*, Laboratoire de modélisation et calcul de l'IMAG, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2005.
- [5] **Bourdim S.**, *Méthodes ondelettes et bayésiennes pour le diagnostic : Application aux machines asynchrones*, Mémoire de Magister, Université Ferhat Abbas de Sétif, 138 p, 2011.
- [6] **Polikar R.**, *The story of wavelet*, In: *IMACS/ IEEE CSCC'99 Proceedings*, pp 5481-5486, 1999.
- [7] **Bouzida A.**, *Diagnostic de défauts de la machine asynchrone à cage par la technique des ondelettes*, Mémoire de Magister, Ecole National Polytechnique d'Alger, 2008.
- [8] **Fabrice C., Franck M et Jean L.**, *Applications de l'analyse en ondelettes sur un signal géophysique*, 16<sup>ème</sup> Colloque GRETSI, Grenoble, pp. 15-19, 1997.
- [9] **Bijaoui A., Slezak E et Mars G.**, *Détection des objets faibles dans des images célestres à l'aide de la transformation ondelette*, 12<sup>ème</sup> Colloque du GRETSI, Grenoble, pp. 209-211, 1989.
- [10] **Durand O et Morizet N.**, *Fourier-inversion and wavelet-transform methods applied to X-ray Reflectometry and HRXRD profiles from complex Thin-layered Hetero-structures*, *Applied Surface Science*, 2006.
- [11] **Boulakroune M.**, "Advanced in Wavelet Theory and Their Applications in Engineering", *Physics and Technology*, Edited by Dr. Dumitru Baleanu, ISBN 978-953-51-0494-0, 634 pages, In Tech, 2012.
- [12] **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, 336 pages, 2003.
- [13] **Antoniadis A., Bigot J. et Sapatinas T.**, *Wavelet estimators in nano parametric regression : a comparative simulation study*, *J.Statistical Software*, Vol. 6, 81-83, 2001.

- [14] **Donoho D. L., Johnstone I. M., Kerkyacharian G. et Picard D.,** *Wavelet shrinkage : Asymptotia, JRSS, ser. B., Vol. 57, n° 2, pp. 301-369, 1995.*
- [15] **Donoho D. L et Johnstone I. M.,** *Ideal spatial adaptation by wavelet shrinkage, Biometrika, Vol. 81, N° 3, pp. 425-455, 1994.*
- [16] **Sayood K.,** *Introduction to data compression, Morgan Kaufman publishers, 1996.*
- [17] **Donoho D. L.,** *Denoising by soft thresholding, IEEE Trans Information theory, Vol. 41, N° 3, pp. 613-627, 1995.*
- [18] **Jutten C .,** *filtrage linéaire optimal cours de cinquième année du département 3i Options Image et signaux et Automatique. Université Joseph Fourier-Polytech, grenoble. France 2010.*
- [19] **Delignon Y.,** *Filtrage de kalman, Traitement des signaux, Ti385-Technologie radar et applications, système radar, Technique de l'ingénieur, <http://www.techniques-ingenieur.fr/>, Réf. Internet R1107, pages 99-104. 2009. Site consulté le 24/12/2016.*
- [20] **Belmahdi F.,** *Application du filtre de kalman pour le dbruitage des signaux, Mémoire de Magister, Université Mouloud Maameri de Tizi Ouzou, 110 pages, 2015.*
- [21] **Ghanai D.,** *Développement d'outils de modélisation et de filtrage pour les signaux biomédicaux, Thèse de doctorat, Université El Hadj Lakhdar de Batna, 105 pages, 2013.*
- [22] *[https://fr.wikipedia.org/wiki/Filtre\\_de\\_Kalman](https://fr.wikipedia.org/wiki/Filtre_de_Kalman), consulté le 24/12/2016.*
- [23] **Ferdinand P.,** *Le filtre de Kalman : intérêts et limites, 'cours en ligne' ; <http://www.ferdinandpiette.com/blog/>, consulté le 28/12/2016.*
- [24] **Obidin M. V et Serebvoski A. P.,** *Signal Denoising with the Use of the Wavelet Transform and the Kalman Filter, Journal of Communications Technology and Electronics, Vol.59, N°. 12, pp. 1440-1445, 2014.*
- [25] **Goldentayer L et Lipster R.,** *Online Tracking of a Smooth Regression Function, Mathematics Subject Classification. 62G05; Secondary 62M99, 1991.*

## Chapitre 4 : La déconvolution : méthodes et limites

### INTRODUCTION

La déconvolution suscite, depuis plusieurs années, un intérêt renouvelé dans des techniques extrêmement variées, tel que l'automatique (représentation des processus), l'optique pour éliminer l'effet instrumental et l'effet atmosphérique (microscopie, télécopie, spectroscopie etc.), le radar, la radioastronomie et tout autre phénomène nécessitant une remonté à une grandeur  $e(t)$  à par son observation  $s(t)$  à travers un instrument  $h$ .

En traitement du signal ces trois grandeurs sont reliées entre elles par une équation dite de convolution qui permet d'exprimer l'observation  $s(t)$  de n'importe quelle grandeur  $e(t)$  en fonction d'un instrument  $h$  qui est un système linéaire utilisé pour transformer le signal  $e(t)$  en un signal  $s(t)$  La déconvolution est un procédé algorithmique destiné à inverser les effets de convolution et on dit que la déconvolution est un problème inverse.

En effet, la déconvolution est la résolution des problèmes inverses issus de la physique dont sa principale difficulté consiste en la présence de plusieurs solutions et pour en choisir une il est nécessaire de disposer d'informations supplémentaires. En effet, la déconvolution ne satisfait pas les conditions de Hadamard qui sont l'existence, l'unicité et la continuité de la solution donc elle fait partie des problèmes mal posés.

Plusieurs méthodes ont été développées, les résultats étaient décevant, la complicité des calculs et l'apparition des oscillations d'amplitudes trop élevées sur la solution ont diminué d'une manière considérable l'intérêt des différentes techniques.

## 1. GENERALITES SUR LA DECONVOLUTION

### 1.1. Définitions

On propose en général les définitions suivantes :

- La déconvolution est la résolution de l'équation de convolution.
- La déconvolution se présente comme étant le problème inverse de la convolution.

Dans les sciences appliquées l'équation de convolution donne lieu à deux problèmes inverses de grande importance [1].

- a. *L'identification* : c'est la détermination des paramètres d'un système dont on connaît le signal d'entrée et sa mesure.
- b. *Le filtrage inverse* : c'est la reconstruction d'un signal à partir de sa mesure via un système caractérisé par une réponse impulsionnelle parfaitement connue.

La déconvolution peut être un filtrage inverse ou une identification.

L'opération qui consiste à reproduire un signal à partir de sa mesure et déterminer les paramètres du système de mesure à la fois (identification + filtrage inverse) est appelée : Déconvolution aveugle.

### 1.2. Solution de la déconvolution

On considère la déconvolution qui consiste à reconstituer un signal  $e(t)$  à partir de sa mesure  $s(t)$  via un système linéaire de réponse impulsionnelle  $h(t)$  connue. La déconvolution est donc la résolution de l'équation de convolution.

Or la forme de l'expression de l'équation de convolution dépend de l'espace de travail, le principe de la résolution peut ne pas être identique.

### 1.2.1. Déconvolution dans le domaine continu

- **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 l'équation de la propriété du produit de convolution, la transformée de Fourier donne :

$$Y(f) = H(f).X(f) \leftrightarrow X(f) = \frac{Y(f)}{H(f)} \quad (4.1)$$

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

$$x(t) = \text{TF}^{-1} \left[ \frac{Y(f)}{H(f)} \right] \quad (4.2)$$

Cette solution est formelle, car l'équation nécessite l'existence de l'inverse de convolution  $H^{-1}(f)$ . 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 [2].

- **La déconvolution continue en présence du bruit**

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. La fonction de transfert du système est un filtre passe-bas, son inverse agit donc comme un amplificateur hautes fréquences. Le bruit sera donc amplifié par la déconvolution [2, 3].

On peut écrire l'équation du système en présence du bruit sous son formalisme simplifié :

$$y_b(t) = h(t) * x(t) + b(t) = y(t) + b(t) \quad (4.3)$$

Dans l'espace de Fourier, cette équation devient :



$$Y_b(f) = H(f).X(f) + B(f) = Y(f) + B(f) \quad (4.4)$$

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

$$\tilde{X}(f) = X(f) + \frac{B(f)}{H(f)} \quad (4.5)$$

$\tilde{X}(f)$  est une estimation de  $X(f)$  que l'on obtient en divisant simplement  $Y_b(f)$  par  $H(f)$ . l'équation ci-dessus nous montre que le bruit prend toute son importance ici :  $\tilde{X}(f)$  est composé du profil réel  $X(f)$  auquel s'ajoute le bruit  $B(f)$  fortement amplifié par le terme  $H^{-1}(f)$ .

$\tilde{X}(f)$  a donc un spectre « saturé » de bruit dans les hautes fréquences, et son image  $\tilde{x}(t)$  dans le domaine temporel est un signal fortement oscillatoire et inutilisable.

### 1.2.2. Déconvolution dans le domaine discret

- **Cas non bruité**

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

$$x = \mathbf{H}^{-1}y \quad (4.6)$$

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.

#### Conditionnement d'une matrice :

Le conditionnement de la matrice  $\mathbf{H}$  est défini par son nombre de conditionnement qui s'exprime par :

$$C(\mathbf{H}) = \|\mathbf{H}\|\|\mathbf{H}^{-1}\| = \sqrt{\frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}} \quad (4.7)$$

Où  $\lambda_{max}$  et  $\lambda_{min}$  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.

Problème mal posé :

Un problème est dit mal posé s'il correspond à l'un des trois cas suivants [2] :

- 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.
- **Cas bruité**

Dans ce cas, l'estimation de la solution aura l'expression suivante :

$$\tilde{x} = \mathbf{H}^{-1} y = x + \mathbf{H}^{-1} b \quad (4.8)$$

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 a 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; la déconvolution monorésolution et la déconvolution multirésolution [2].

## 2. DECONVOLUTION DES PROFILS SIMS : ETAT DE L'ART

La déconvolution des profils SIMS a été abordée depuis plus de vingt ans et plusieurs approches ont été proposées [4-13]. Cependant, dans les approches classiques de régularisation [14-18], afin de limiter le contenu en bruit, il faut attribuer une limite supérieure à la quantité de hautes fréquences susceptibles d'être présentes dans le résultat de la déconvolution, qui pourrait être invalide. Cependant, par ce processus, *on limite la quantité de hautes fréquences, pas la quantité de bruit.*

La meilleure solution consiste à récupérer correctement les fréquences dans les différentes bandes du signal et à trouver un critère objectif pour séparer les hautes fréquences contenant du bruit de celles contenant les informations utiles. De plus, dans ces méthodes classiques régularisées, le paramètre de régularisation est appliqué de manière exhaustive à toutes les bandes du signal, ce qui a pour résultat de traiter les basses fréquences contenant le signal utile comme des hautes fréquences composées principalement de bruit. Le résultat est alors un signal oscillant, car le paramètre de régularisation est insuffisant pour compenser les hautes fréquences. L'idée est donc d'adapter localement le paramètre de régularisation dans différentes bandes de fréquence. C'est ce qu'on appelle la déconvolution multirésolution (MD) basée sur la régularisation de Tikhonov-Miller et l'analyse en ondelettes [19]. La description multi-échelle des signaux a facilité le développement de la théorie des ondelettes et son application à de nombreux domaines [20-27]. Dans le domaine SIMS, cet outil a été utilisé dans les références [28, 29], l'objectif principal est de montrer que la déconvolution multirésolution donne des résultats bien meilleurs que ceux obtenus avec la déconvolution monorésolution.

## 3. METHODES DE DECONVOLUTION

On distingue deux méthodes, les méthodes itératives et les méthodes non itératives ;

### 3.1. Méthodes non itératives

#### 3.1.1. Filtrage inverse et solution des moindres carrés

La méthode des moindres carrés (MC) est une alternative au filtrage de Wiener. Les filtres de Wiener sont déduits à partir de moyennes d'ensemble alors que la technique des MC est déterministe dans son approche.

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

Dans cette approche, on cherche à minimiser la fonction suivante :

$$E = \|y - \mathbf{H}\tilde{x}\|^2 \quad (4.9)$$

$\mathbf{H}\tilde{x}$  est donc le signal reconstruit, c'est-à-dire le signal qui va nous permettre de vérifier si la convolution de  $x$  par  $h$  donne bien le signal mesuré  $y$ .

La fonction  $E$  représente l'énergie de l'erreur observable.

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

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

$$\frac{dE}{d\tilde{x}} = 0 \leftrightarrow \mathbf{H}^T \mathbf{H} \tilde{x} = \mathbf{H}^T y \quad (4.10)$$

La solution de cette équation est:

$$\tilde{x} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T y \quad (4.11)$$

Cette dernière équation est appelée “équation normal”, est appelée la solution des moindres carrés ou solution pseudo-inverse ou encore solution généralisée [30]. Le terme  $(\mathbf{H}^T \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T$  est souvent appelé l'inverse généralisé de  $\mathbf{H}$ , il est noté  $\mathbf{H}^G$ .

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.

Il nous faut donc définir des critères sur la solution recherchée afin de limiter le nombre de solutions à celles physiquement acceptables, ce qui s'appelle « 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. Cette modification du cahier des charges du problème de la déconvolution est très utilisée en traitement du signal, et est désignée sous le nom de *régularisation*.

### **3.1.2. Filtrage au sens des moindres carrés sous contraintes : Régularisation**

#### **3.1.2.1. Introduction à la régularisation**

Comme nous venons de le voir, la déconvolution de signaux SIMS fait partie des problèmes inverses mal posés. Pour faire face à l'instabilité du système, il faut établir de nouveaux critères qui nous permettront de choisir parmi les solutions possibles celle que nous aurons jugé la plus acceptable. La régularisation propose donc d'apporter de l'information dans le processus de résolution du problème. Cet apport d'information concerne en général la solution elle-même, et plus précisément ses caractéristiques fréquentielles. Elle sera couplée au premier critère que nous avons déjà formulé, à savoir la proximité du profil reconstruit avec le signal mesuré.

La régularisation est largement employée dans les cas suivants :

- Lorsque le nombre d'inconnues est trop grand par rapport au nombre de données disponibles. La solution n'est pas unique pour ce problème sous-déterminé.
- Le rapport signal sur bruit est mauvais.

Régulariser un problème revient donc à faire l'hypothèse qu'on ne peut pas obtenir la vraie solution uniquement à partir des données, et que la connaissance de la réponse impulsionnelle, qui a dégradé le signal d'origine, ne permet de définir qu'une classe de solutions mathématiquement possibles, contenant les solutions physiquement acceptables et celle qui ne le sont pas.

L'apport d'informations par la régularisation constitue un choix assez libre selon les caractéristiques que l'opérateur souhaite privilégier pour la solution recherchée. Cette notion de « choix de la solution » indique donc que la solution trouvée n'est pas la seule possible, mais une de celles qui sont acceptables.

### 3.1.2.2. Philosophie de la régularisation

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

$$L\{\tilde{x}(\alpha, y)\} = \{L_1(x, \tilde{x}_0) + \alpha L_2(x, \tilde{x}_\infty)\}_{x \in X} \quad (4.12)$$

$X$  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  $\alpha$ , 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  $\tilde{x}_0$  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 correspond aux données mesurées.

L'objectif de la régularisation consiste donc à faire un compromis entre les deux solutions extrêmes  $\tilde{x}_0$  et  $\tilde{x}_\infty$  en ajustant le paramètre de régularisation  $\alpha$  pour que le critère  $L$  soit minimal.

### 3.1.2.3. Différentes approches de la régularisation

- **Régularisation de norme minimal ou d'ordre 0**

Nous avons vu précédemment que lorsque le problème est mal posé, certaines solutions sont inacceptables, et notamment elles ne sont pas bornées en amplitude. Puisqu'on sait que la solution recherchée est d'amplitude bornée, on peut apporter cette information sous forme d'une norme à minimiser :

$$L_2(x, \tilde{x}_\infty) = \|\tilde{x}\|^2 = \sum_k \tilde{x}_k^2 \text{ est minimal} \quad (4.13)$$

Quant à  $L_1$ , nous utilisons tout simplement le critère des moindres carrés sur la solution trouvée:

$$L_1 = \|y - \mathbf{H}\tilde{x}\|^2 \quad (4.14)$$

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

$$L = \|y - \mathbf{H}\tilde{x}\|^2 + \alpha \|\tilde{x}\|^2 \quad (4.15)$$

C'est une méthode de régularisation simple, et qui écarte toutes les solutions de norme excessive.

- **Régularisation de Tikhonov-Miller**

C'est la régularisation la plus utilisée qui est basée sur un critère quadratique [31]. Le critère est  $L_1$  le même que dans le cas précédent (moindres carrés entre les données mesurées et le profil reconstruit). On impose ici à cette grandeur quadratique d'être inférieure à l'énergie du bruit  $\varepsilon^2$ :

$$\|y - \mathbf{H}\tilde{x}\|^2 \leq \|b\|^2 = \varepsilon^2 \quad (4.16)$$

On notera que, d'après l'équation qui modélise notre problème, on a  $b = y - \mathbf{H}x$ .

Le critère  $L_2$  est du même type que précédemment, quadratique, et s'exprime à l'aide d'un *opérateur de contrainte*  $\mathbf{D}$ . Les solutions définies comme acceptables seront dépendantes des propriétés choisies pour cet opérateur :

$$L_2 = \|\mathbf{D}\tilde{x}\|^2 \quad (4.17)$$

$L_2$  limite l'espace des solutions mathématiquement possible un espace particulier dont les propriétés sont imposées par  $\mathbf{D}$ . la solution est l'estimée  $\tilde{x}$  telle que  $L$  soit minimum :

$$L = \|y - \mathbf{H}\tilde{x}\|^2 + \alpha\|\mathbf{D}\tilde{x}\|^2 \quad (4.18)$$

En utilisant les propriétés des produits scalaires et des dérivées, on démontre que la solution  $\tilde{x}$  s'exprime par:

$$(\mathbf{H}^T\mathbf{H} + \alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D})\tilde{x} = \mathbf{H}^T y \quad (4.19)$$

Soit :

$$\tilde{x} = (\mathbf{H}^T\mathbf{H} + \alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D})^{-1}\mathbf{H}^T y, \quad \text{avec} \quad \mathbf{H}^+ = \mathbf{H}^T\mathbf{H} + \alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D} \quad (4.20)$$

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 des moindres carrés, 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 est donné par :

$$C(\mathbf{H}^+) = \sqrt{\frac{\max(\lambda_H^2 + \alpha\lambda_D^2)}{\min(\lambda_H^2 + \alpha\lambda_D^2)}} \quad (4.21)$$



Où  $\lambda_H^2$  et  $\lambda_D^2$  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 sources 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 (par exemple de type gradient  $d(n) = [1, -1]$ , ou de type Laplacien avec  $d(n) = [-1, 2, 1]$ ).

Le rôle du paramètre de régularisation est fondamental puisque la qualité de la restauration dépendra fortement de son influence par rapport à celle du bruit, de l'opérateur  $\mathbf{D}$  choisi, et de la réponse impulsionnelle [2]. Cependant, les différentes méthodes d'estimation de  $\alpha$  ne donnent pas forcément une valeur unique, et le résultat de la déconvolution pourra être sensiblement différent sur la plage de ces valeurs.

Dans nos applications, on utilise la Méthode de la validation croisée généralisée, cette méthode consiste à choisir la valeur de  $\alpha$  qui minimise l'expression suivante :

$$V(\alpha) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} |y(i)|^2 (P(i))^2}{[\sum_{i=0}^{N-1} P(i)]^2} \quad (4.22)$$

Avec  $P(i)$  est défini par :

$$P(i) = \frac{\alpha D(i)}{1 + \alpha D(i)} \quad (4.23)$$

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.

### 3.1.3. Introduction du modèle de solution dans la régularisation

Selon Barakat [18, 32], Les méthodes proposées pour la résolution du problème de restauration sont au nombre de quatre:

- La régularisation de type Tikhonov-Miller;
- La régularisation de type Tikhonov-Miller avec modèle a priori de la solution;
- Restauration par Champs de Markov;

- Restauration par le Maximum d'Entropie.

Ces méthodes ont un point commun, elles s'appuient toutes sur la définition d'un critère à optimiser, qui peut s'écrire de façon générale, sous la forme de l'équation (4.15).

Où  $L_1$  est une distance mesurant la fidélité de la solution aux données mesurées, et  $L_2$  est une mesure de la fidélité de la solution à la priori.

La distinction entre les quatre méthodes présentées, vient du choix de la fonctionnelle  $L_2$  pour introduire l'information à priori. Cette information à priori sera de **type déterministe** (Régularisation de Tikhonov-Miller, restauration de Tikhonov-Miller avec modèle à priori de la solution) ou de **type stochastique** (Restauration par les champs de Markov, restauration par le maximum d'entropie).

### 3.1.3.1. Régularisation de type Tikhonov-Miller avec modèle a priori de la solution

Nous avons vu précédemment 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  $\tilde{x}$  s'applique sur tout son intervalle de définition, sans distinguer les différentes zones du signal. Barakat et al. [32] ont proposé une extension de cette régularisation en introduisant un terme  $x_{mod}$  représentant un modèle d'information a priori :

$$L_2(x, \tilde{x}_\infty) = \|\mathbf{D}(\tilde{x} - x_{mod})\|^2 \quad (4.24)$$

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  $\alpha$ . Cet apport

d'informations va encore plus restreindre l'ensemble des solutions. La précision de la solution dépendra directement de la précision du modèle apporté.

La solution cherchée devient :

$$\tilde{x} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D})^{-1} (\mathbf{H}^T y + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D} x_{mod}) \quad (4.25)$$

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

Cependant, les performances de cette déconvolution sont uniquement améliorées d'environ 10% par rapport à la déconvolution classique de Tikhonov-Miller. [18].

### 3.2. Méthodes itératives

Elles ont généralement l'avantage de ne pas imposer le calcul direct d'opérateurs inverses, et de permettre le choix de l'information *a priori* que l'on apporte. Les paramètres et les contraintes sont facilement ajustables au cours du traitement [33]. Ces algorithmes itératifs sont adaptés à une grande variété de signaux [34]:

- Dégradation linéaire ou non;
- Systèmes variants et invariants;
- Bruit corrélé ou non.

#### 3.2.1. Algorithme de Van Cittert

Van Cittert 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  $k$  :

$$\begin{cases} x^{(k+1)} = x^{(k)} + (y - \mathbf{H}x^{(k)}) \\ x^{(0)} = y \end{cases} \quad (4.26)$$

Le vecteur  $x^{(k)}$  est en quelque sorte une solution intermédiaire entre les solutions initiale  $x^{(0)}$  et finale  $x^{(\infty)}$ . On peut montrer que l'algorithme de Van Cittert converge vers une solution  $x^{(\infty)}$  équivalente à celle obtenue par filtrage inverse [2, 3, 35] :

$$x^{(\infty)} = \mathbf{H}^{-1}y \quad (4.27)$$

### 3.2.2. Régularisation de l'algorithme de Van Cittert

Comme dans les méthodes non-itératives, l'algorithme de Van Cittert original conduit à une solution instable si le problème est mal conditionné. Il faudra d'une manière ou d'une autre introduire une régularisation si l'on souhaite obtenir une solution bornée.

La première étape consiste à remplacer la résolution itérative de  $y = \mathbf{H}x$  par celle de  $\mathbf{H}^T y = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D})x$ . L'algorithme de Van Cittert avec régularisation de Tikhonov-Miller s'écrit alors :

$$\begin{cases} x^{(k+1)} = x^{(k)} + (\mathbf{H}^T y - (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \alpha \mathbf{D}^T \mathbf{D})x^{(k)}) \\ x^{(0)} = y \end{cases} \quad (4.28)$$

Le fait de régulariser l'algorithme de base ne suffit pas encore à obtenir une solution acceptable physiquement. En particulier la solution n'est pas toujours positive, ce qui est gênant pour un profil de concentration ou une image numérique.

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

Les contraintes dures peuvent être appliquées aussi bien aux signaux résultant de la déconvolution par inversion directe que sur les solutions « intermédiaires » des algorithmes itératifs.

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

$$\begin{cases} x^{(k+1)} = Cx^{(k)} + (y - \mathbf{H}Cx^{(k)}) \\ x^{(0)} = y \end{cases} \quad (4.29)$$

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  $\mathbf{H}^+ = (\mathbf{H}^T\mathbf{H} + \alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D})$ .

En combinant les contraintes dures avec la régularisation, on obtient l'algorithme suivant, mis au point par B. Gautier et R. Prost [35].

$$\begin{cases} x^{(k+1)} = Cx^{(k)} + \mu_k (\mathbf{H}^T y - (\mathbf{H}^T\mathbf{H} + \alpha\mathbf{D}^T\mathbf{D})Cx^{(k)}) \\ x^{(0)} = \mathbf{H}^T y \end{cases} \quad (4.30)$$

$\mu_k$  est un scalaire ajusté à chaque itération de façon à optimiser la rapidité de la convergence. Cet algorithme a prouvé sa fiabilité et sa robustesse pour un large éventail de signaux [10, 35], la contrainte de positivité étant elle-même fortement régularisante.

### 3.2.4. Régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal pré-déconvolué

Mancina [3] a proposé une méthode de restauration basée sur l'apport d'informations concernant directement la forme du signal recherché. Cette nouvelle méthode est inspirée à la fois de l'inversion directe de l'équation de convolution dans l'espace de Fourier, de la régularisation de Tikhonov-Miller, et de l'application de contraintes dures. Mais elle se distingue notamment par l'introduction d'informations sous la forme d'un *modèle de la solution*, qui évoluera au fil de l'algorithme.

L'approche de Mancina consiste à itérer la méthode proposée par Barakat et *al*, 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 :

$$\begin{cases} \hat{X}_{n+1} = \frac{\mathbf{H}^*Y + \alpha|\mathbf{D}|^2 X_{\text{mod } n}}{|\mathbf{H}|^2 + \alpha|\mathbf{D}|^2} \\ X_{\text{mod } n} = TF[C\hat{x}_n] \\ \hat{x}_n = TF^{-1}[\hat{X}_n] \\ X_{\text{mod } 0} = 0 \end{cases} \quad (4.31)$$

L'avantage certain d'effectuer le travail dans l'espace de Fourier est la rapidité des calculs, par comparaison avec les calculs matriciels, exigeant le maniement de matrices de grandes dimensions. Par contre certaines méthodes ne peuvent être transposées dans l'espace de Fourier. Les algorithmes itératifs tels que ceux basés sur l'algorithme de Van Cittert et comportant des contraintes dures non linéaires en sont un exemple. Les opérateurs comme la contrainte de positivité ou d'amplitude n'ont pas d'équivalent dans le domaine de Fourier.

L'algorithme nécessite quelques précautions : à chaque itération, il faut s'assurer que le modèle calculé est plus proche de la solution que le modèle précédent. La régularisation seule n'étant pas suffisante dans le cas des méthodes itératives, il est essentiel voire obligatoire de rendre la solution positive par la contrainte de positivité. Cette opération n'étant pas possible dans le domaine de Fourier, il faut l'effectuer dans le domaine temporel, moyennant une transformation inverse de Fourier avant la contrainte de positivité (ou de maintien à zéro) et une transformation directe après.

La philosophie de cet algorithme consiste en fait à chercher le meilleur modèle de solution et de l'appliquer par une simple inversion de l'équation de convolution (régularisée) avec modèle. Il est important de signaler que les itérations ne portent pas sur le signal mesuré lui-même, mais plutôt sur le modèle recherché.

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 [2].

Les différentes méthodes de déconvolution proposées dans ce domaine jusqu'ici ont montré une certaine invalidité envers le bruit. Pour franchir ces limites, il est utile d'adapter une méthode de déconvolution qui tient en compte ce paramètre nuisible. Le modèle de solution dans ce cas doit impérativement être dépourvu du bruit. Une méthode de débruitage est donc nécessaire pour limiter son effet sur la qualité de la solution. Une décomposition du signal (qui sera utilisé comme modèle de solution dans ce cas) sur une base d'ondelettes est un excellent outil pour atteindre cet objectif. Dans le paragraphe suivant nous allons voir en détail le principe de décomposition d'un signal sur une base d'ondelettes, le seuillage des coefficients d'ondelettes sera également décrit.

### **3.2.5. Régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal décomposé sur une base d'ondelettes. Déconvolution multirésolution**

Dans cet algorithme, l'idée est d'introduire un modèle de solution sous une 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 [2].

Le signal dégradé (données du problème)  $y$  est, dans le cas usuel d'un filtre de dégradation passe-bas, proche du signal d'approximation de  $x$  en terme du contenu spectral.

La décomposition, sur une base d'ondelette, de  $y$  va conduire à un signal d'approximation qui est très voisin de  $x$ . 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  $x$ . Au contraire, le signal de détails de  $x$  est fortement dégradé par la convolution et le signal de détails de  $y$  contient peu d'informations sur celui de  $x$ . De plus, le signal de détails de  $y$  est fortement affecté par le bruit additif. De ce fait, la reconstruction de  $x$  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.

Dans cette approche, le modèle de solution est le signal débruité (à la résolution  $2^{-j}$ ) de l'équation :

$$X_{\text{mod}} = \tilde{x}^{(j-1)} = \tilde{F}^{(j)} y_a^{(j)} + \tilde{G} \hat{y}_d^{(j)} \quad (4.32)$$

Cet algorithme est itératif permettant de se rapprocher de la solution toute en remédiant les limites de l'approche précédente. Sa formulation mathématique, dans l'espace de Fourier, est la suivante :

$$\begin{cases} \hat{X}_{n+1} = \frac{\mathbf{H}^* \mathbf{Y} + \alpha |\mathbf{D}|^2 X_{\text{mod } n}}{|\mathbf{H}|^2 + \alpha |\mathbf{D}|^2} \\ X_{\text{mod } 0} = TF[\tilde{x}^{(j-1)}] = TF[\tilde{F}^{(j)} y_a^{(j)} + \tilde{G} \hat{y}_d^{(j)}] \\ \hat{x}_n = TF^{-1}[\hat{X}_n] \end{cases} \quad (4.33)$$

Avec  $y_a^{(j)}$  et  $\hat{y}_d^{(j)}$  sont, respectivement, le signal d'approximation et le signal de détails seuillé 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.

### 3.2.6. Régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal débruité en utilisant le filtre de Kalman

Nous avons vu que le mauvais conditionnement du système à résoudre conduit à 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 assez lisse, selon l'opérateur de régularisation choisi. Les contraintes dures, quant à elles, imposent à la solution de faire partie des signaux positifs, et éventuellement définis sur un intervalle donné. Nous avons



également conclu que les méthodes itératives étaient bien plus performantes que l'inversion simple de l'équation de convolution régularisée, grâce à la manière d'introduire les contraintes.

Nous proposons maintenant de compléter les informations apportées par l'introduction d'un signal sensé décrire au mieux les variations locales du signal recherché. Cet apport d'informations va encore plus restreindre l'ensemble des solutions. La question est maintenant de savoir si le modèle va dans le sens de nous rapprocher de la solution réelle, qui est inaccessible. Il est évident qu'apporter des informations manquant de précision ou erronées 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.

Dans cet algorithme, l'idée est la même que celle de l'approche de précédente. La seule différence est que le modèle de solution est un signal estimé préalablement, il s'agit d'un signal débruité, en utilisant le filtre de Kalman.

Cet algorithme est itératif, sa formulation mathématique, dans l'espace de Fourier, est la suivante :

$$\begin{cases} \hat{X}_{n+1} = \frac{\mathbf{H}^*Y + \alpha|\mathbf{D}|^2 X_{\text{mod } n}}{|\mathbf{H}|^2 + \alpha|\mathbf{D}|^2} \\ X_{\text{mod } 0} = TF[\hat{F}(t_i)] \\ \hat{x}_n = TF^{-1}[\hat{X}_n] \end{cases} \quad (4.34)$$

Dans une méthode d'estimation classique (par exemple, la méthode des moindres carrés), une simple erreur dans la modélisation du système entraîne inévitablement une erreur au niveau de l'estimation. La force du filtre de Kalman est d'intégrer un terme d'imprécision sur le modèle lui-même, ce qui lui permet de donner des estimations correctes malgré les erreurs de modélisation (pour peu que les erreurs restent raisonnables).

## CONCLUSION

Les limites physiques atteintes par l'analyse SIMS rendent difficilement envisageables d'autres améliorations techniques de l'appareillage sans que le coût devienne exorbitant.

Les techniques de traitement numérique tel que *la déconvolution* reste un moyen efficace pour obtenir la meilleure résolution en profondeur. C'est une opération délicate, qu'il ne faut pas mettre en œuvre sans précaution. Il est nécessaire de bien contrôler le processus de restitution et d'en comprendre les mécanismes, sous peine d'obtenir des résultats aberrants.

Le problème de la déconvolution en SIMS, comme dans la majorité des domaines fait partie des problèmes inverses mal posés. La présence de bruit dans la mesure complique les calculs, et il faut prendre certaines précautions si on cherche à obtenir un résultat physiquement acceptable. Il faut donc transformer le problème mal posé en un problème bien posé, ceci est rendu possible en faisant appel à une régularisation.

Dans ce chapitre, nous avons essayé de donner une vision claire sur le principe de la restauration des données perdues lors de la mesure par SIMS, et donc l'amélioration de la résolution en profondeur de cette technique, par l'application d'une technique de déconvolution.

En effet, les différentes méthodes de la 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. Pour franchir ses limites nous avons proposé, une nouvelle méthode basée sur la régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal débruité préalablement en utilisant le filtre de Kalman qui a montré son efficacité, et aptitude pour débruiter un tel signal, dans plusieurs domaines d'applications. Ce modèle de solution incorporé dans cet algorithme permet d'éliminer les artefacts dus principalement à la présence de bruit dans les données mesurées ainsi que d'améliorer le gain de la déconvolution.

La revue des techniques de déconvolution vues dans ce chapitre nous permettra dans le chapitre suivant de les comparer en connaissance de cause pour justifier notre choix.

## Bibliographie du Chapitre 4

- [1] **Kasmi H.**, *Développement d'une méthode de déconvolution temporelle et récursive. Mémoire de Magister, Université Ferhat Abbas, SETIF1, 87 p, 2014.*
- [2] **Boulakroune M.**, *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, Thèse de doctorat, Université El Hadj Lakhdar de Batna, 2008, 229 p.*
- [3] **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, 183 p.*
- [4] **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, Vol. 21, pp. 310-315, 1994.*
- [5] **Gallardo S., Kudriatsev Y., Villegas A., Ramirez G., Asomoza R., Cruz-Hernandez E., Rojas-Ramirez J. S et López-López M.**, *SIMS characterization of segregation in InAs/ GaAs heterostructures, Applied Surface Science, 255, 1341, 2008.*
- [6] **Drozdov Yu. N., Drozdov M. N., Novikov A. V., Yunin P. A., et Yurasov D. V.**, *Layer-by-layer analysis of structures containing  $\delta$ -layers by secondary ion mass spectrometry taking into account the TOF.SIMS-5 depth resolution function, Journal of Surface Investigation, 2012, Vol 6, N° 4, pp. 574-577.*
- [7] **Samuel K., et Saralees N.**, *Recent results on the use of model resolution functions for the deconvolution of depth profiling data, Surface & Interface Analysis. New York : Wiley, pp. 554-555, 2007.*
- [8] **Kang H L., Lao J B., Li Z P., Yao W Q., Lia C et Wang J Y.**, *Reconstruction of GaAs/ AlAs super lattice multilayer structure by quantification of AES and SIMS sputter depth profiles, Applied Surface Sciences, In press 2015.*
- [9] **Liu Y., Hoffman S., Wang J Y et Chakraborty B R.**, *Quantitative reconstruction of Ta/ Si multilayer depth profiles obtained by Time-of-Flight-Secondary-Ions-Mass-Spectrometry (ToF-SIMS) using Cs<sup>+</sup> ion sputtering, Thin Solid Films, Vol. 591, Part A, pp. 60-65, 2015.*
- [10] **Gautier B., Prudon G et Dupuy J C.**, *Toward a better reliability in the deconvolution of SIMS depth profiles, Surface and Interface Analysis Vol. 26, Pp. 974-983, 1998.*
- [11] **Fares B., Gautier B., Dupuy J C., Prudon G et Holliger P.**, *Deconvolution of very low energy SIMS depth profiles, Applied Surface Sciences, Vol. 252, Pp. 6478-6481, 2006.*

- [12] **Mancina G., Prost R., Prudon G., Gautier G et Dupuy J C.,** *Deconvolution SIMS depth profiles: Toward the limits of the resolution by self-deconvolution test, Twelfth International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry (SIMS XII), Pp. 5-10, Belgium, 1999.*
- [13] **Yang M H et Goodman G G.,** *Application of deconvolution of boron depth profiling in SiGe heterostructures, Tin Solid Films, Vol. 508, Pp. 276-278, 2006.*
- [14] **Thomas G et Prost R.,** *Iterative constrained deconvolution, Signal Processing, Vol. 23-1, Pp.89-98, 1991.*
- [15] **Tikhonov A N.,** *Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method, Soviet Mathematics Doklady-IAC-CNR, Vol. 4, Pp. 1035-1038, 1963.*
- [16] **Berger T., Stromberg J O et Eltoft T.,** *Adaptive regularized constrained least squares image restoration, IEEE Trans Image Process, Vol. 8/9, Pp. 1191-1203, 1999.*
- [17] **Cao Y., Cen S et Rebholz L G.,** *Well-posedness and a numerical study of a regularization model with adaptive nonlinear filtering for incompressible fluid, Computers & Mathematics with Applications, Vol. 71, Pp. 2192-2205, In press 2016.*
- [18] **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, 1997.*
- [19] **Boulakroune M., Benatia D et El oualkadi A.,** *Multiscale deconvolution using wavelet transform for improving the depth resolution in secondary ion mass spectrometry, International Conference on Signal, Circuits and Systems, 2008.*
- [20] **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, 336 p.*
- [21] **Antoniadis A., Bigot J. et Sapatinas T.,** *Wavelet estimators in nano parametric regression : a comparative simulation study, J. Statistical Software, 2001, Vol. 6, 81-83.*
- [22] **Donoho D. L., Johnstone I. M., Kerkycharian G. et Picard D.,** *Wavelet shrinkage : Asymptotia, JRSS, ser. B., 1995, Vol. 57, n° 2, pp. 301-369.*
- [23] **Charles C., Leclerc G., Louette P et Rasson J P.,** *Noise filtering and deconvolution of XPS data by wavelets and fourier transform, Surface and Interface Analysis, Vol. 36, Pp. 71-80, 2004.*
- [24] **Rashed E A., Ismail I A et Zaki S I.,** *Multiresolution mammogram analysis in multilevel decomposition, Pattern Recognition Letters, Vol. 28, Pp. 286-292, 2007.*
- [25] **Neelamani R., Choi H et Baraniuk R.,** *ForWard: Fourier-wavelet regularized deconvolution for ill-conditioned systems, IEEE Transaction on Signal Processing, Vol. 52/2, Pp. 418-433, 2004.*

- [26] **Ptacek., Henzlova et Koranda P.,** *Bone SPECT image reconstruction using deconvolution and wavelet transformation: development, performance assessment and comparison in phantom and patient study with standard OSEM and resolution recovery algorithm*, *Physica Medica*, Vol. 30/7, Pp. 858-894, 2014.
- [27] **Economou N et Kritikakis G.,** *Attenuation analysis of real GPR wavelets: The equivalent amplitude spectrum (EAS)*, *Journal of Applied Geophysics*, Vol. 126, Pp. 13-26, 2016.
- [28] **Boulakroune M.,** *Reliability of multiresolution deconvolution for improving depth resolution in SIMS analysis*, *Applied Surface Science*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.05.164>, 2016.
- [29] **Dahraoui N, Boulakroune M et Benatia D.,** *New iterative algorithm for improving depth resolution in ionic analysis: Effect of iterations number*, *International Journal of Electrical, Computer, Electronics and Communication Engineering*, *World Academy of Science, Engineering and Technology*, Vol. 9/3, 2015.
- [30] **Demoment G.,** *Image reconstruction and restoration: Overview of common estimation structures and problems*, *IEEE Transaction on Acoustics, Speech and Signal Processing*, Vol. 37/12, Pp. 2024-2036, 1989.
- [31] **Tikhonov A N et Arsenin V Y.,** *Solutions of ill-posed problems*, Washington: Halsted Press, 258 p, 1977.
- [32] **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, 149 p, 1998.
- [33] **Katsaggelos A K., Biemond J., Mersereau R M et Schafer R W.,** *General formulation of constrained iterative restoration algorithms*, *IEEE International Conference on Acoustic, and Electronics Engineers*, Pp 700-703, 1985.
- [34] **Prost R et Goutte R.,** *Discrete constrained iterative deconvolution algorithms with optimized rate of convergence*, *Signal processing*, Vol. 7/3, Pp. 209-230, 1984.
- [35] **Gautier B.,** *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, 230 p.

# Chapitre 5 : Déconvolution des profils SIMS

## INTRODUCTION

Dans ce chapitre nous allons cerner les performances de notre approche de déconvolution sur des échantillons SIMS contenant des deltas-dopages. En particulier, nous allons comparer ces performances avec celles d'autres techniques proposées dans le domaine de caractérisation par SIMS. La plupart des profils ont été mesurés avec l'appareil Cameca Ims-4f, d'autres mesures nous ont été fournies par d'autres laboratoires. Les mesures, faites avec l'analyseur Cameca Ims-4f, ont été effectuées en ions primaires  $O_2^+$  (en incidence oblique), avec et sans soufflage d'oxygène.

## 1. PROBLÉMATIQUE

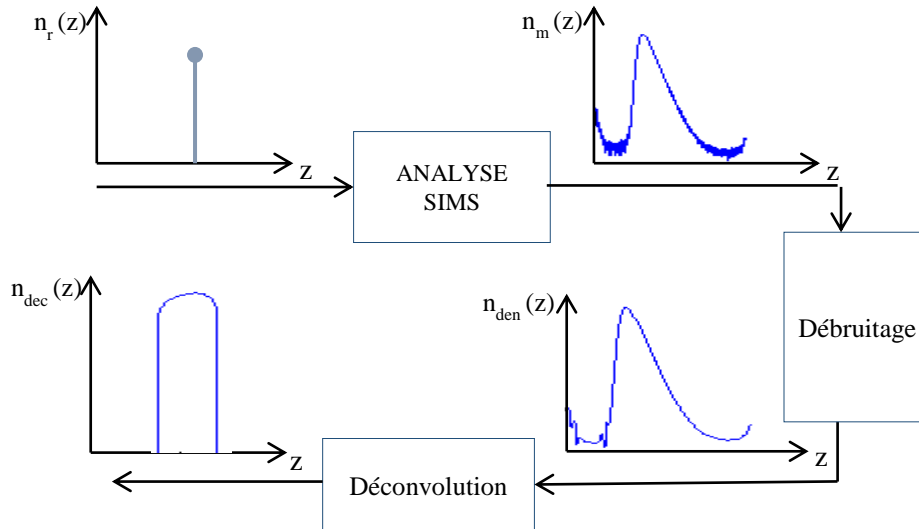
Le schéma de la figure (5.1) résume la problématique de ce travail qui contient trois phases principales :

1. Identification de la réponse du système SIMS (DRF) ;
2. Débruitage du signal SIMS ;
3. Déconvolution du profil SIMS provenant de la phase 2.

### **Phase 1 :**

La fonction de résolution en profondeur (DRF) est la réponse impulsionnelle du système SIMS qui caractérise ce système d'analyse et on doit l'identifier précisément. En quelque sorte, c'est la fonction qui dégrade le profil réel pour obtenir un profil mesuré.

Le fittage de la DRF par une forme analytique est indispensable dans le domaine de traitement du signal grâce à ces avantages multiples. Dans ce travail, on utilise la forme de Dowsett pour fitter la DRF [1-7].



**Figure 5.1 :** *Problématique du système SIMS.*

### **Phase 2 :**

Les différentes méthodes de déconvolution proposées dans ce domaine jusqu'à nos jours ont montré une certaine invalidité envers le bruit. Pour franchir ces limites, il est utile d'adapter une méthode de déconvolution qui tient en compte ce paramètre nuisible. Le modèle de solution dans ce cas doit impérativement être dépourvu du bruit. Une méthode de *débruitage* est donc nécessaire pour limiter son effet sur la qualité de la solution.

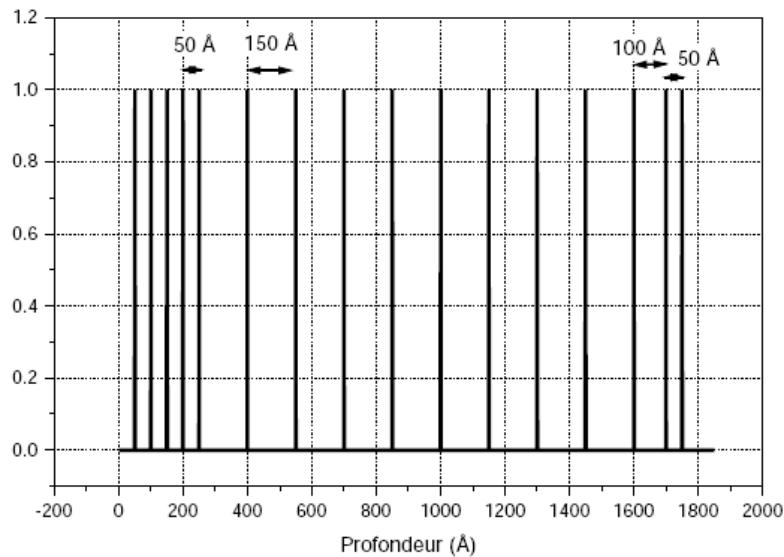
### **Phase 3 :**

Les techniques de traitement numérique tel que la déconvolution reste un moyen efficace pour obtenir la meilleure résolution en profondeur. C'est une opération délicate, qu'il ne faut pas mettre en œuvre sans précaution. Il est nécessaire de bien contrôler le processus de restitution et d'en comprendre les mécanismes, sous peine d'obtenir des résultats aberrants tels que la naissance des artefacts ou des oscillations qui gênent l'interprétation des résultats et handicape les

algorithmes proposés. 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 avec comme modèle de solution un signal débruité. En effet, dans cette phase, on a adopté des méthodes qui se basent sur la régularisation de Tikhonov-Miller où un modèle de solution est inclus, c'est un signal débruité à base d'ondelette ainsi que le filtre de Kalman.

## 2. ECHANTILLONS UTILISES

Les profils en forme de  $\delta$ -dopage constituent des structures idéales pour appliquer une méthode de déconvolution puisque ce sont les profils les plus affectés par la convolution lors de l'analyse SIMS. Leur déconvolution 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. Dans ce travail, on dispose de trois échantillons, qui sont des profils expérimentaux (Profils réels) provenant de l'appareil Cameca IMS-4f. Ce sont MD4, MD5 et MD6, ce qui signifie 4, 5 et 6 Multi-delta dopage successivement.



**Figure 5.2 :** Structure schématique de l'échantillon Bennett (MD16) [8].

De plus, un échantillon contenant seize deltas-dopage qui a été fabriqué par l'université de Warwick (Angleterre), pour J. Bennett [8], nous l'appellerons « échantillon Bennett ». Cet



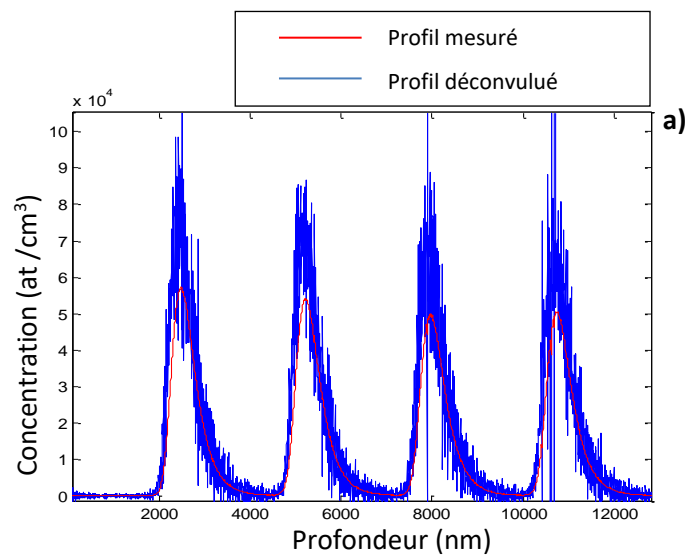
échantillon a été analysé sous soufflages d'oxygène et à faible énergie d'impact, des ions primaires  $E_p = 1.5$  keV. Dans ce cas le mixage collisionnel est faible mais les pics distants nominalement de  $150\text{\AA}$  ne sont pas complètement dissociés lors de la mesure à cette faible énergie. Les deltas dopage distant de  $50\text{\AA}$ , sont complètement superposés. Cet échantillon représente un échantillon important pour tester notre technique de déconvolution. La structure de cet échantillon est conçue comme l'indique la figure (5.2).

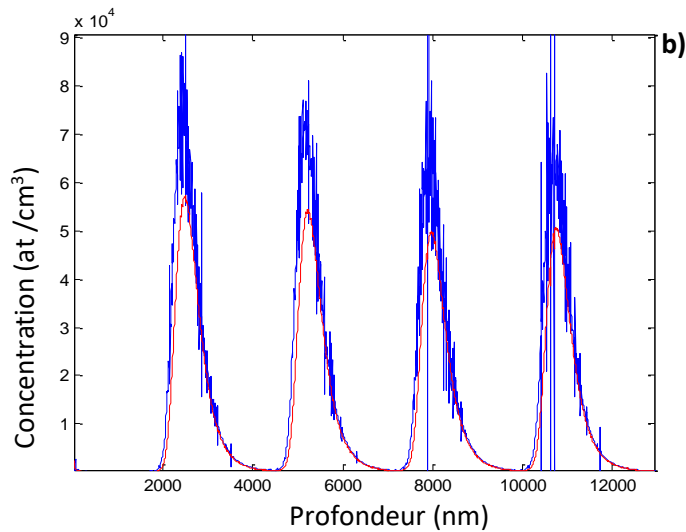
### 3. IMPORTANCE DE LA REDUCTION DU BRUIT ET DE LA SUPPRESSION DES ARTEFACTS DANS LES TECHNIQUES DE RESTAURATION DES SIGNAUX

Cette section traite l'idée de base de ce travail qui est la suppression du bruit. En effet, travailler avec des signaux débruités, au lieu des signaux provenant directement de la mesure, est une étape indispensable pour obtenir des meilleurs résultats lors de la restauration des signaux originaux (signaux réels). Les résultats obtenus par la suite montrent bien l'importance de l'idée de débruitage des signaux SIMS [9].

#### 3.1. Déconvolution de l'échantillon MD4

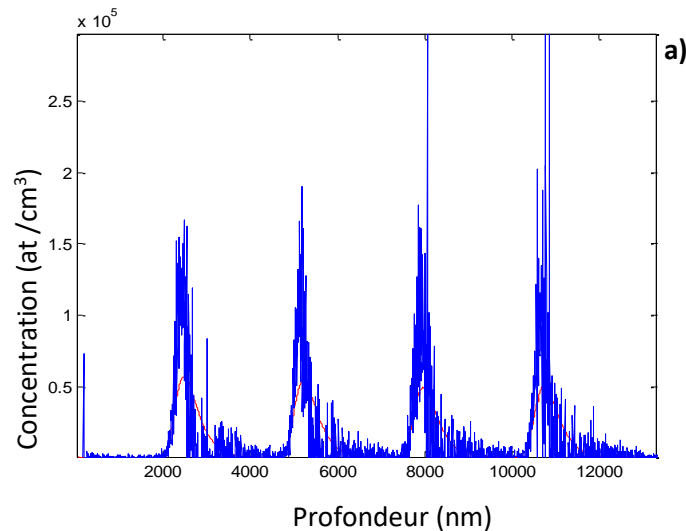
Les résultats de la déconvolution de l'échantillon MD4 en échelles linéaire et logarithmique sont illustrés dans les figures suivantes. Ces résultats montrent clairement le débruitage du signal mesuré avant de l'utiliser dans une procédure de déconvolution.

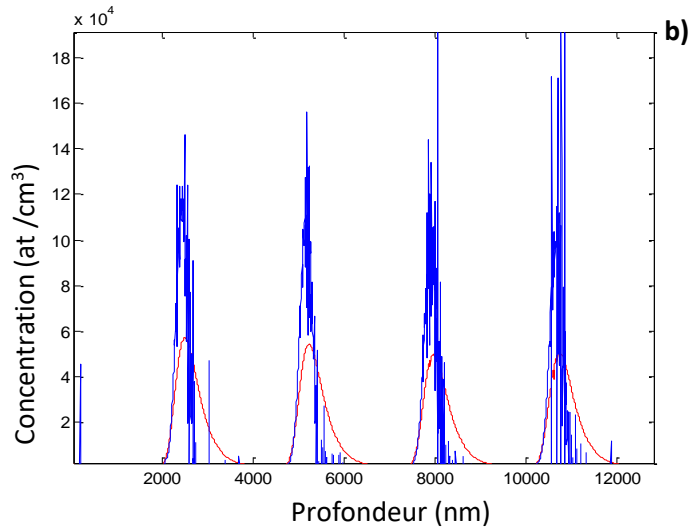




**Figure 5.3 :** Résultats de la déconvolution de l'échantillon MD4 par inversion directe de l'équation de déconvolution, représentation en échelle linéaire, (DRF:  $\lambda d = 47.8$  ;  $\lambda u = 10.55$  ;  $\sigma g = 26.3$ ): a) En utilisant un signal brut, b) En utilisant un signal débruité.

En réalité, ce cas de profil (profils de delta-dopage) est le plus difficile en termes de restauration car le spectre est riche en hautes fréquences qui limitent la qualité de la solution finale. La figure (5.3) montre un exemple de déconvolution par inversion directe de l'équation de convolution d'un profil mesuré du bore dans le silicium. Il montre que la forme du signal déconvolué en utilisant un signal débruité est meilleure que celle du signal brut, ainsi qu'une minimisation des oscillations, en particulier dans les jonctions entre les deltas-dopage.





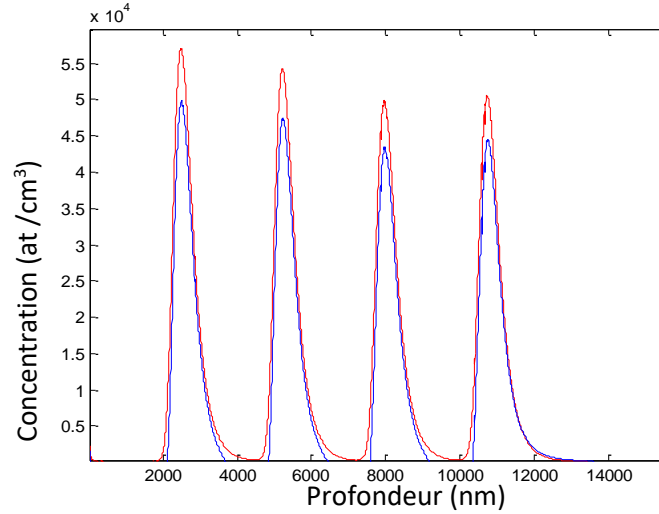
**Figure 5.4 :** Résultats de la solution du filtrage inverse et solution des moindres carrés, représentation en échelle linéaire: a) En utilisant un signal mesuré, b) En utilisant un signal débruité.

La figure (5.4) présente les résultats de la solution de filtrage inverse et de la solution des moindres carrés. Cette figure montre une bonne amélioration de la forme du signal déconvolué et une minimisation des oscillations et des artefacts dans le second cas (Fig. 5.4-b), améliorant ainsi le gain en résolution et les maximums des pics, mais cela ne suffit pas pour mieux définir le profil réel.

Il faut donc définir des critères sur la solution recherchée afin de limiter le nombre de solutions à celles physiquement acceptables. Cette modification de la spécification du problème de la déconvolution est largement utilisée dans le traitement du signal et est désignée sous le nom de régularisation ou filtrage par les moindres carrés sous contraintes [9-12].

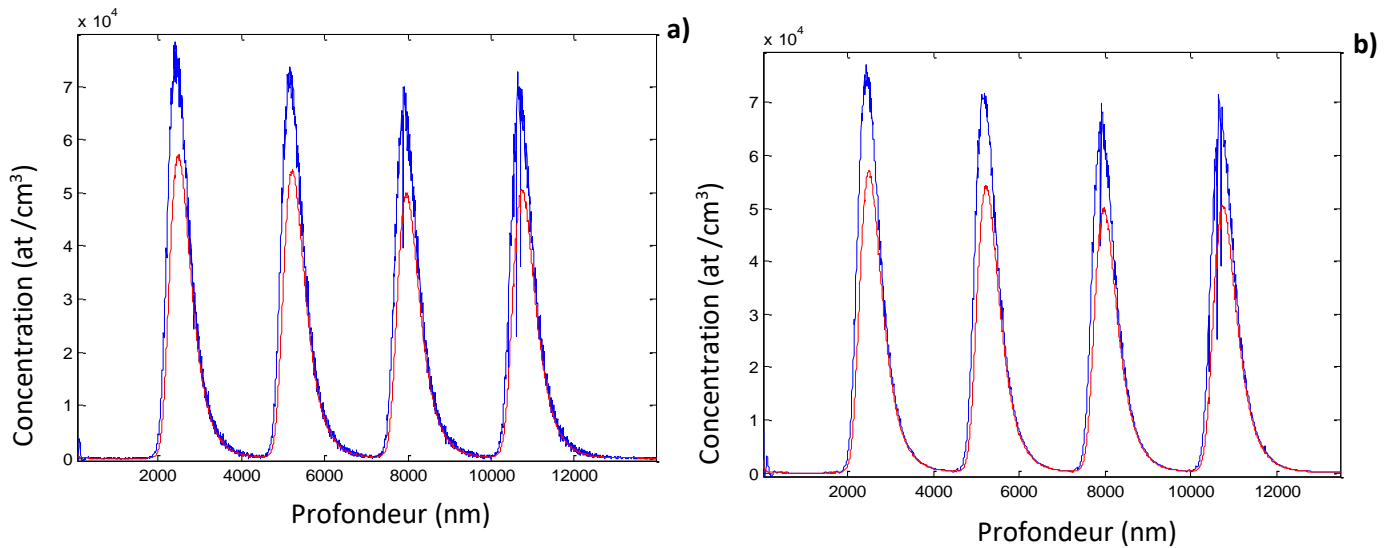
Dans la régularisation de Tikhonov-Miller, le terme de régularisation fait uniquement référence à la solution recherchée, et ce de manière globale, c'est-à-dire que la propriété que l'on souhaite imposer à  $x$  s'applique tout au long de son intervalle de définition, sans distinction des différentes zones du signal.

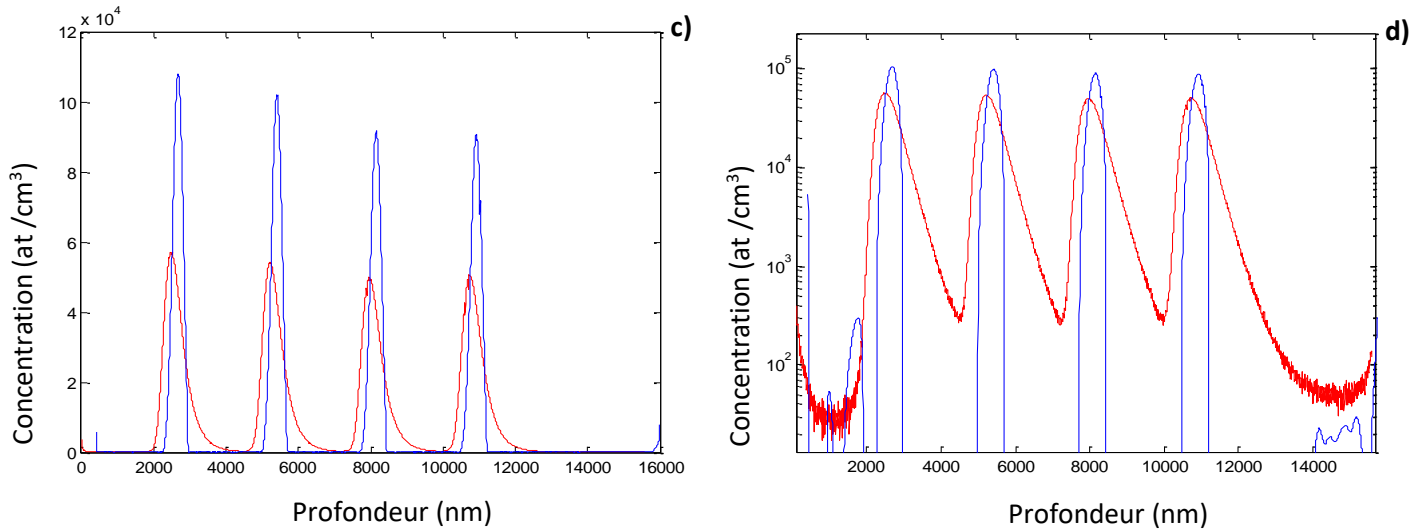
La figure (5.5) montre le résultat de la déconvolution en utilisant l'approche de Barakat [13, 14]. Dans ce cas, nous avons choisi comme modèle de solution un signal préalablement décomposé sur une base d'ondelettes. On remarque que le bruit est totalement éliminé, ainsi qu'une légère amélioration du gain en résolution. La précision de la solution dépendra directement de la précision du modèle apporté.



**Figure 5.5 :** Résultats de la déconvolution en utilisant l'approche de Barakat, représentation en échelle linéaire, (DRF:  $\lambda d = 47.8$  ;  $\lambda u = 10.55$  ;  $\sigma g = 26.3$ )

La déconvolution par l'algorithme itératif de Van Cittert [9-15], conduit à une amélioration remarquable de la forme du signal, principalement au bas niveau du profil déconvolué (Fig. 5.6).





**Figure 5.6 :** Résultats de déconvolution par des méthodes itératives, ( $DRF: \lambda d = 47.8$  ;  $\lambda u = 10.55$  ;  $\sigma g = 26.3$ ): a) Par l'algorithme de Van-Cittert en utilisant un signal mesuré, représentation en échelle linéaire, b) Par l'algorithme de Van-cittert En utilisant un signal débruité, représentation en échelle linéaire, c) Déconvolution multirésolution, représentation en échelle linéaire, d) Déconvolution multirésolution, représentation en échelle logarithmique.

Lorsqu'on étudie un phénomène en utilisant une large gamme de valeurs, l'échelle linéaire est mal adaptée, il est préférable d'utiliser l'échelle logarithmique qui est mieux adaptée pour présenter un domaine étendu de valeurs. Elle montre sur un petit intervalle une large gamme de valeurs, à condition qu'elles soient non nulles et de même signe, elle sépare les petites valeurs et rapproche les valeurs les plus élevées. Par conséquent, cette échelle est préférable dans notre cas, car elle présente des oscillations et artefacts d'une manière remarquable. La déconvolution de cet échantillon (Fig. 5.6-d) a donné une grande amélioration de la résolution en profondeur et la récupération de la forme originale du signal. Les pentes exponentielles ont été complètement supprimées pour donner des sommets symétriques et bien séparés.

Dans cette section, nous avons testé divers algorithmes de déconvolution proposés dans la littérature, en utilisant un signal débruité (par les techniques d'ondelettes dans notre cas) au lieu

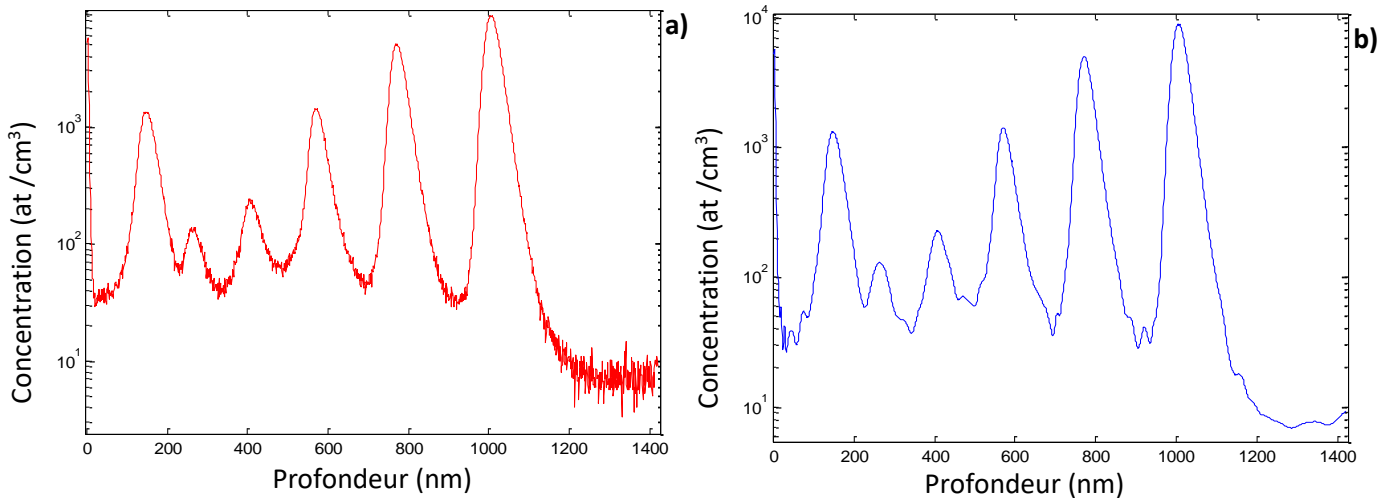
du signal mesuré, qui est le signal réel dégradé par la procédure de mesure. Il est très difficile de comparer les algorithmes car les résultats obtenus dépendent fortement de la qualité du signal (rapport signal sur bruit, échantillonnage), ainsi que des paramètres et des optimisations de l'algorithme. Quels critères faut-il utiliser pour comparer les signaux?

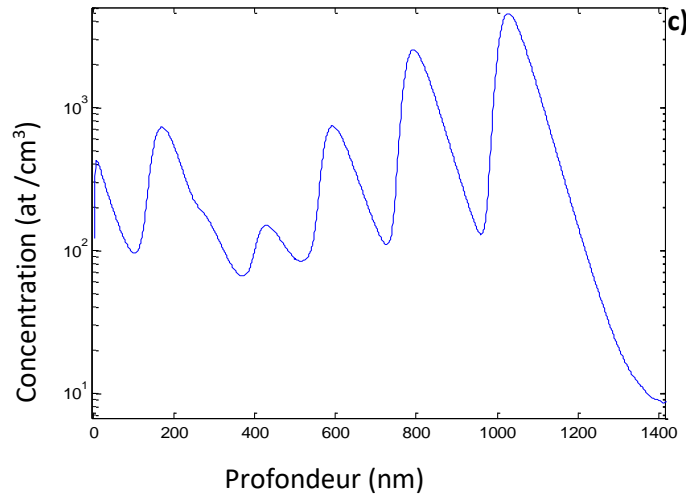
#### 4. DEBRUITAGE ET DECONVOLUTION D'UN PROFIL SIMS REEL

##### 4.1. Débruitage de l'échantillon MD6

Dans cette section, on présente le débruitage, par les deux techniques les ondelettes et le filtre de Kalman, d'un profil MD6 qui contient six multi delta-dopage de bore dans le silicium.

Le profil SIMS brut et le profil débruité sont représentés sur la figure (5.7). En particulier, cette figure montre que les composantes basses fréquences, qui représentent généralement la structure principale du signal, sont séparées de celles des hautes fréquences. Ces résultats préliminaires démontrent les capacités supérieures des ondelettes dans l'analyse de profils SIMS que d'autres techniques traditionnelles.





**Figure 5.7 :** *a) Signal brut, b) signal débruité en utilisant les ondelettes, c) signal débruité en utilisant le filtre de Kalman.*

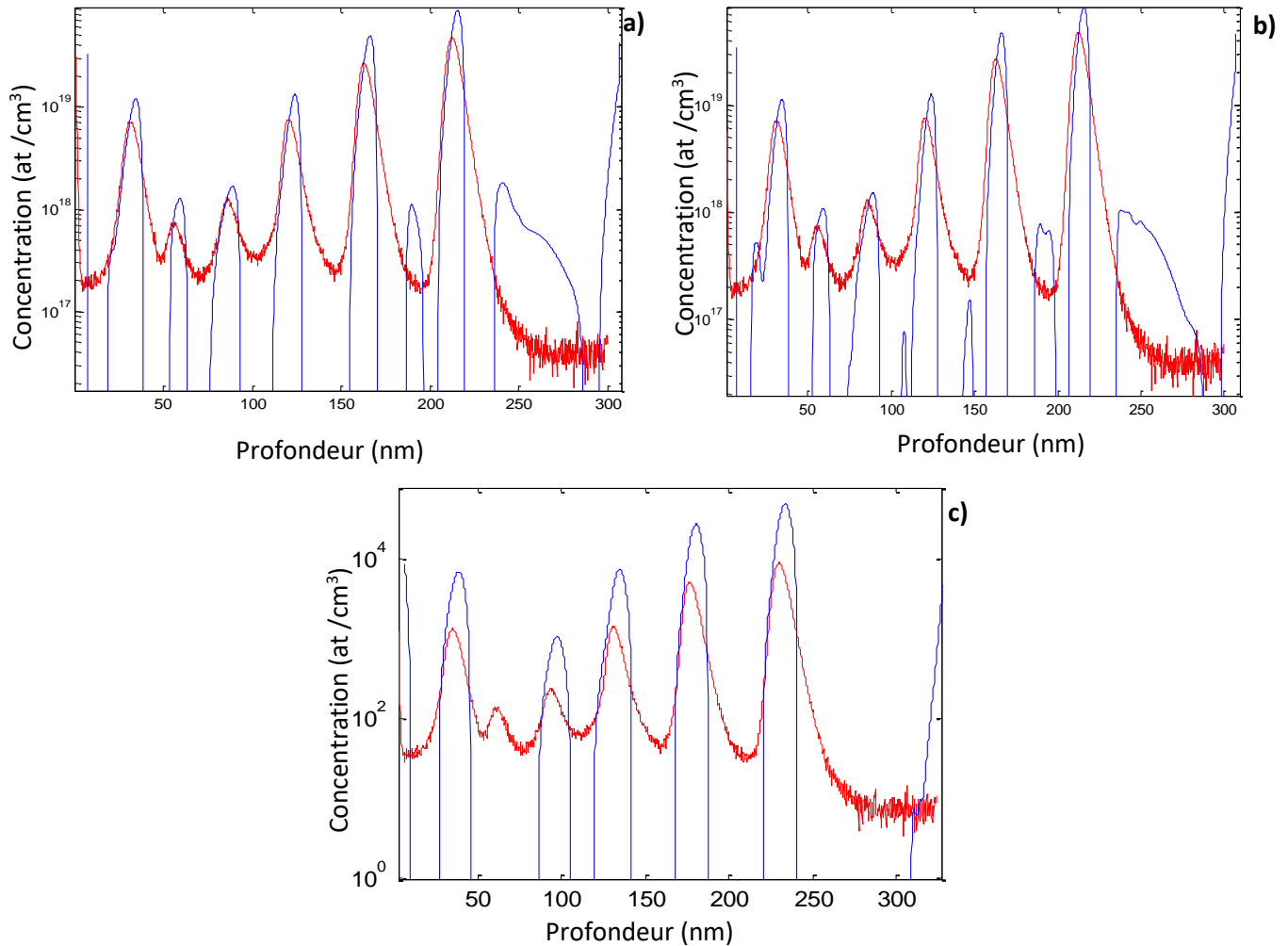
Dans cette section, l'étude est qualitative. En effet, dans le cas de débruitage par le filtre de Kalman, il est noté que le deuxième pic a disparu. Une limite importante de cette méthode est que le filtre de Kalman ne traite que le bruit gaussien. Le bruit peut généralement être modélisé par un modèle gaussien mais dans certains cas, un autre type de bruit est requis (bruit de Poisson). Cette restriction limite l'utilisation du filtre de Kalman.

#### 4.2. Déconvolution de l'échantillon MD6

Les résultats de la déconvolution de l'échantillon MD6 en échelle logarithmique sont illustrés dans la figure (5.8). La déconvolution de cet échantillon donne une bonne amélioration de la résolution en profondeur et une récupération de la forme du signal d'origine. Les pentes exponentielles ont été complètement supprimées, donnant des pics bien séparés et symétriques. Par rapport aux résultats de la déconvolution selon l'algorithme de Gautier [11], les profils obtenus par notre approche sont lisses et sans artefacts, ce qui perturbe l'interprétation des résultats obtenus.

Gautier [11] propose d'appliquer un niveau de confiance local empirique déduit de l'erreur de reconstruction sur les profils déconvolués. L'objectif est de séparer les parties du profil du signal d'origine de celles artificiellement générées par le processus d'inversion (artefacts de

déconvolution). À notre avis, un niveau de confiance qui permet de prendre en compte certaines parties du signal et d'empêcher d'autres, ne fournit aucune information sur la qualité des informations et ne trouve pas de sens dans le cas d'un signal SIMS. L'un des avantages de l'analyse SIMS réside dans le signal haute dynamique, qui limite le signal déconvolué à une dynamique ne dépassant 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.



**Figure 5.8 :** Résultats de déconvolution de l'échantillon MD6, (a) En utilisant les ondelettes, (DRF1:  $\lambda d = 19.8$  ;  $\lambda u = 8.16$  ;  $\sigma g = 17.3$ ), (b) En utilisant les ondelettes, (DRF2:  $\lambda d = 29.98$  ;  $\lambda u = 10.74$  ;  $\sigma g = 19.18$ ), (c) En utilisant le filtre de Kalman, (DRF2:  $\lambda d = 29.98$  ;  $\lambda u = 10.74$  ;  $\sigma g = 19.18$ ).



Mancina [10] a montré que les artefacts ne sont pas toujours des aberrations de la déconvolution, ils peuvent être des structures mais de faibles concentrations. Un "artefact" apparaissant au cours de la déconvolution peut éventuellement être une structure existante dans le profil réel, mais il peut être complètement masqué pendant la mesure ou une mauvaise distribution de la dose par la méthode de déconvolution.

L'interprétation des artefacts doit être mesurée, en particulier si leur dose n'est pas négligeable, et nous ne pouvons pas éliminer des profils. L'analyse de Mancina est très claire dans notre cas car nous constatons la présence d'un pic plus prononcé entre les pics 5 et 6 jusqu'à une profondeur de 190 nm dans les deux cas de déconvolution (voir Fig. 5.8-a). La question qui se pose ici est de savoir ce qui peut être considéré que ce pic est un artefact. La réponse est claire: le fait que ce petit pic n'a pas disparu - comme d'autres artefacts situés à des profondeurs de 110 et 145 nm (voir Fig. 5.8-b) lors du changement de DRF, on peut considérer que ce pic n'est pas généré par l'analyse mais c'est une caractéristique intrinsèque de l'échantillon, c'est donc une structure complète dans laquelle la concentration n'est pas négligeable, à  $9.10^{18}$  at/ cm<sup>3</sup>. L'interprétation des artefacts doit être prudente, surtout si leur dose n'est pas négligeable. Il est important de signaler que nous ne pouvons pas le supprimer automatiquement des profils.

Dans le cas du filtre de Kalman, on remarque que le profil déconvolué est totalement dépourvu d'artefacts, de plus, le deuxième pic n'apparaît pas. Dans une méthode d'estimation conventionnelle comme la méthode des moindres carrés, une simple erreur dans la modélisation du système entraîne une erreur dans l'estimation. La force du filtre de Kalman est d'intégrer un terme d'imprécision sur le modèle lui-même, ce qui lui permet de donner des estimations correctes malgré les erreurs de modélisation. En outre, sa force réside aussi dans sa capacité à prévoir des paramètres et à rectifier des erreurs, non seulement de la mesure, mais également du modèle lui-même!

En comparaison, les résultats obtenus par le filtre de Kalman sont dépourvus d'artefacts et d'oscillations. Tandis que le gain en FWHM est moins amélioré que ceux obtenus par la technique des ondelettes. Mais le gain du maximum du pic est meilleur, par exemple au pic 6, le gain du

maximum est de 1,82 dans le cas d'ondelettes (Fig. 5.8-a) mais dans le cas du filtre de Kalman (Fig. 5.8-c), le gain est de 1,94.

Le filtre de Kalman est donc une méthode d'estimation intéressante, mais elle ne peut être utilisée que lorsque nous pouvons décrire notre système avec précision. S'il est impossible de trouver la modélisation du système, il est préférable de recourir à d'autres méthodes comme la méthode de Monté-Carlo, par exemple, qui est une méthode statistique, mais qui nécessite une puissance de calcul considérable. Une autre limitation importante d'une telle méthode est que le filtre de Kalman permet de ne prendre en compte qu'un modèle de bruit gaussien. En général, le bruit peut être modélisé de manière gaussienne, mais dans certains cas, un autre type de bruit est requis notamment dans le traitement d'images, traitement de la parole, le bruit Poissonien est fréquemment utilisé. Cette restriction limite alors l'utilisation du filtre de Kalman.

## **5. INFLUENCE DE QUELQUES PARAMETRES SU LA RESOLUTION EN PROFONDEUR**

La déconvolution est une opération délicate. Pour ceci On doit prendre en considération plusieurs paramètres, on cite entre autre :

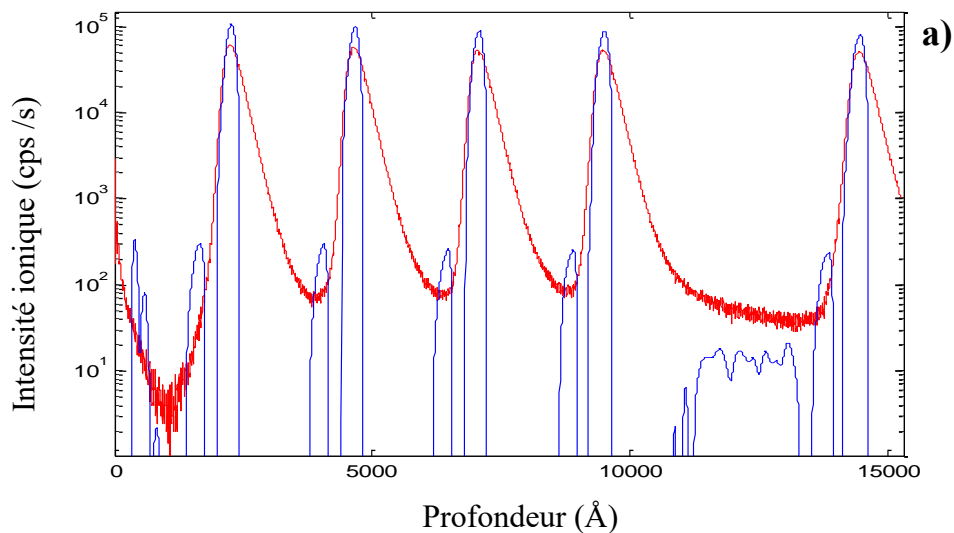
- Le choix de la fonction de résolution en profondeur ;
- Le choix du modèle de solution ;
- Le choix de méthode de débruitage ;
- Le choix de la méthode de déconvolution (Mono ou Multirésolution).

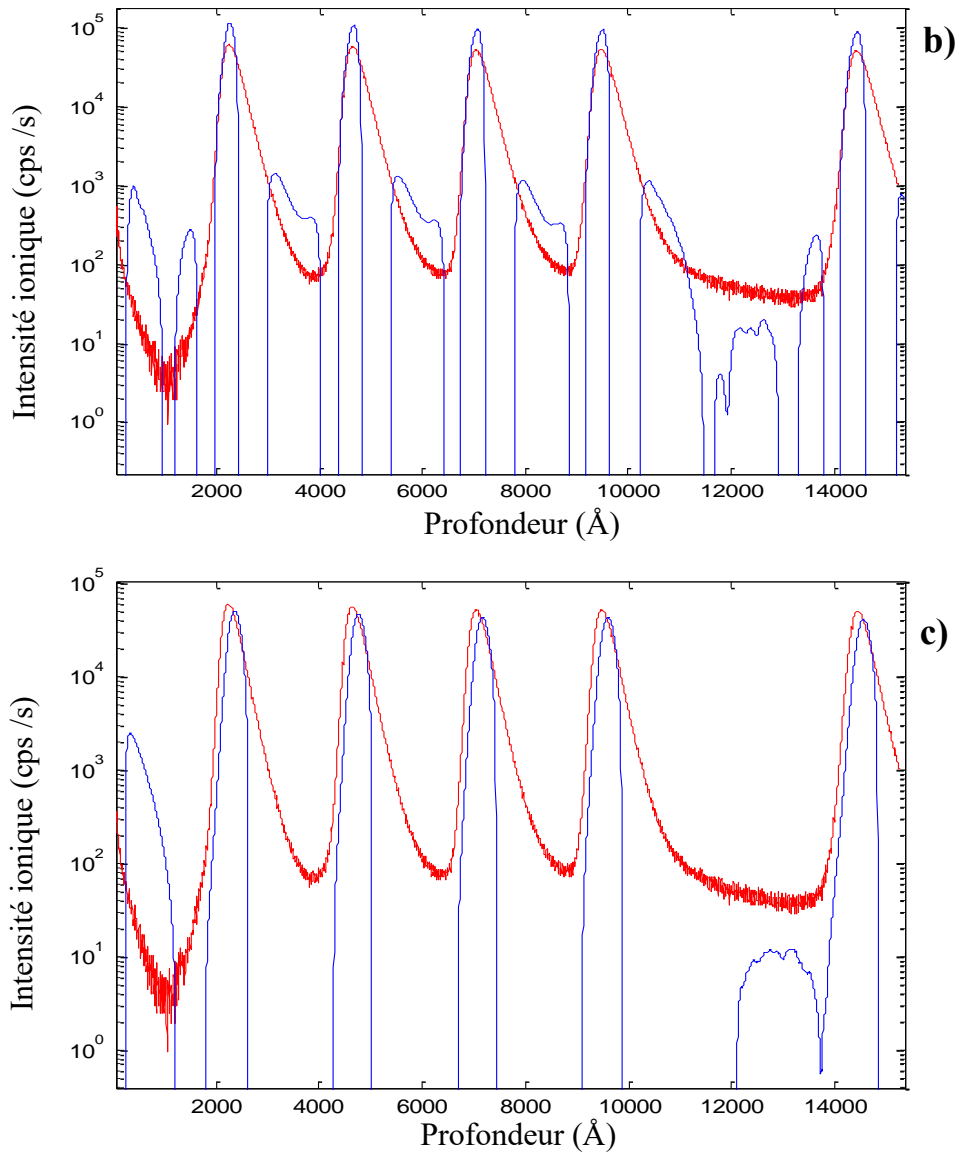
### **5.1. Influence de la DRF sur la résolution en profondeur. Déconvolution de l'échantillon MD5**

Cette section présente la déconvolution de l'échantillon MD5, en utilisant différentes DRF. La figure (5.9) montre les résultats de déconvolution, en échelle logarithmique.

La déconvolution de cet échantillon a conduit à une bonne 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.

A noter que dans ce profil, figures (5.9-a) et (5.9-b), on voit des artefacts présents aux bas du signal déconvolué, qui sont créés entièrement par le processus d'inversion et n'ont aucun rapport avec le signal original. 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. Donc, 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.





**Figure 5.9 :** Résultats de la déconvolution de l'échantillon MD5 de bore dans le silicium, représentation en échelle logarithmique : **a)** signal déconvolué en utilisant les ondelettes (DRF 1:  $\lambda_d=37,5$ ;  $\lambda_u=10,9$ ;  $\sigma_g=22,5$ ), **b)** signal déconvolué en utilisant les ondelettes (DRF 2 «la vraie » :  $\lambda_d=51,31$ ;  $\lambda_u=13,5$ ;  $\sigma_g=41,3$ ), **c)** signal déconvolué en utilisant le filtre de Kalman (DRF 2 «la vraie » :  $\lambda_d=51,31$ ;  $\lambda_u=13,5$ ;  $\sigma_g=41,3$ ).

D'après la figure (5.9-c), on constate que la déconvolution a également conduit à une bonne récupération de la forme du profil sur toute la dynamique du signal, le profil déconvolué montre

une nette amélioration de la résolution en profondeur. La largeur des pics mesurés et des pics déconvolués nous indique que les pics ne sont pas des vrais delta-dopages, sont proches des gaussiennes plus que des  $\delta$ -dopages. Les profils déconvolués ne montre aucune asymétrie. En particulier le comportement exponentiel asymptotique a entièrement disparu sur le front de montée comme sur le front de descente.

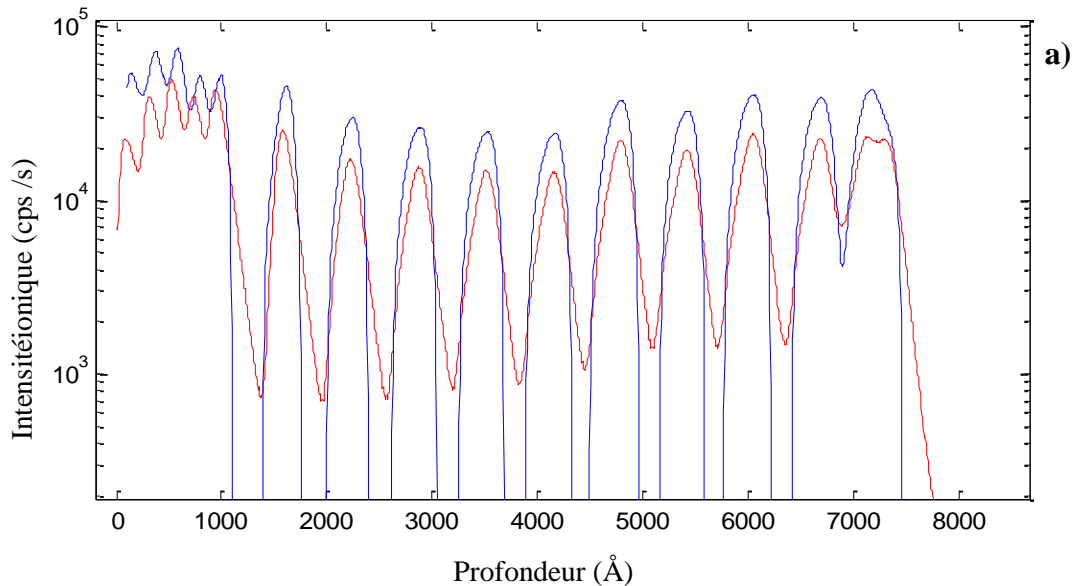
### **5.2.Discussion sur l'effet du nombre d'itérations. Déconvolution de l'échantillon MD16 (BENNETT)**

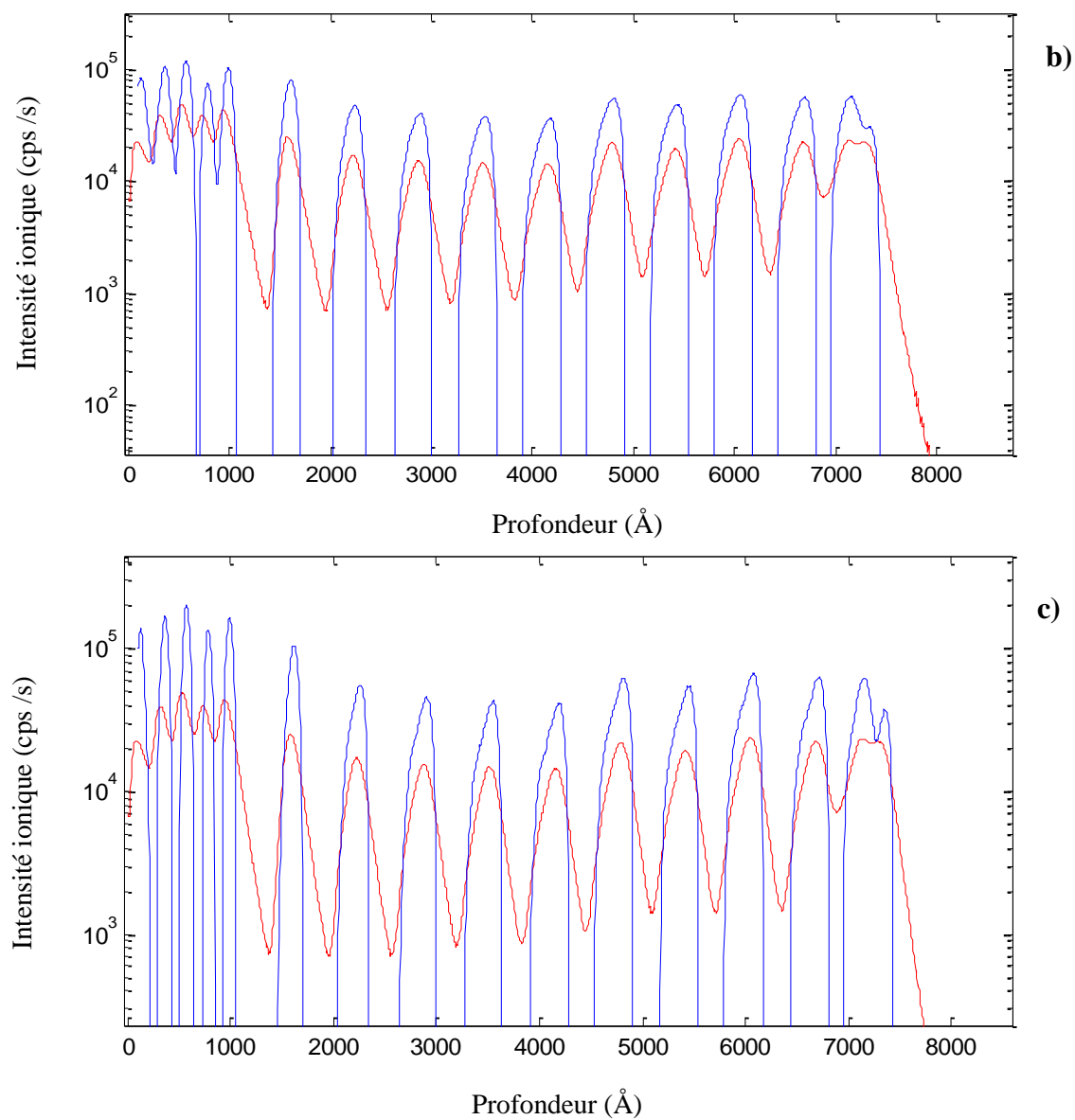
La figure (5.10) représente l'évolution du profil déconvolué en fonction du nombre d'itérations ( $n=200$  ;  $n=1000$  et  $n=10000$ ). Nous avons choisi, plus particulièrement, de suivre l'évolution du profil déconvolué sur cet échantillon pour deux raisons. La première raison est que la structure de cet échantillon est plus compliquée (cinq pics espacé de 50 Å suivis de neuf pics espacés de 150 Å après 100Å on trouve deux pics espacés de 50 Å) par rapport aux autres échantillons. La deuxième raison est que l'épaisseur et le nombre de deltas-dopage relativement élevés de cet échantillon reflète l'aptitude de l'algorithme de déconvolution à récupérer la forme et la dynamique du signal des structures grandes et condensées. Evidemment, faire la déconvolution sur un échantillon mince contenant un seul delta-dopage est plus aisée et simple de la faire sur une structure épaisse et plus compliquée. C'est pour ces deux raisons qu'on a choisi de suivre l'évolution des profils déconvolués en fonction du nombre d'itérations. À noter en outre que les deux derniers pics permettent de voir la limite de séparation (à travers le contraste) que peut atteindre cet algorithme, car parmi les critères d'évaluation de la résolution en profondeur est la séparation entre deux pics que la mesure les a jointés.

Dans la plupart des pics, les pentes exponentielles ayant pour origine le mixage collisionnel sont pratiquement supprimées, alors que l'élargissement des structures, à caractère gaussien, est plus ou moins corrigé en fonction du nombre d'itérations.

En observant l'évolution du profil déconvolué en fonction du nombre d'itérations, on constate que la qualité des profils déconvolués est nettement améliorée, ceci est caractérisé plus

particulièrement sur la déconvolution des deux derniers pics, qui sont bien séparés dont le contraste dépasse 70% (voir la Figure 5.10-c). En effet, dans les algorithmes itératifs le nombre d'itérations joue un rôle déterminant sur la qualité de la solution, bien qu'un compromis ait été fait entre le nombre d'itération et la qualité des pics obtenus. Le gain en résolution obtenu est de l'ordre de 1.8, alors celui de l'amplitude est de l'ordre de 1,7. L'ordre de grandeur relativement petit de ces gains est dû, d'une part, principalement de la bonne qualité de mesure menée à basse énergie et d'autre part de la largeur des deltas-dopage qui sont proches des gaussiennes que des deltas dopage. A noter que le premier delta-dopage, qui n'est enterré qu'à 50 Å de profondeur ne devrait pas être pris en compte, puisque à cette énergie, il se situe encore à la limite du régime transitoire de l'analyse. L'avantage de la déconvolution de cet échantillon est l'absence totale des artefacts et d'oscillations aux pieds des pics déconvolués malgré la structure compliquée cet échantillon qui contient des forts gradients de concentration et en particulier du bruit.





**Figure 5.10 :** L'évolution du profil déconvolué en fonction du nombre d'itérations *n*. **a)**  $n=200$ , **b)**  $n=1000$ , **c)**  $n=10000$ .

## CONCLUSION

Ce travail est porté en particulier sur l'amélioration de la résolution en profondeur dans l'analyse par spectrométrie de masse à ions secondaires. Dans ce contexte, un algorithme basé sur la régularisation de Tikhonov-Miller avec modèle de solution a été développé et comparé avec d'autres techniques proposées dans la littérature.

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à l'idée du débruitage du signal mesuré, en tant qu'une étape préliminaire avant d'appliquer n'importe quelle technique de traitement du signal. Nous avons utilisé les ondelettes et le filtre de Kalman pour débruiter le signal SIMS. Le signal obtenu est utilisé comme un modèle de solution dans une procédure de déconvolution.

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 avec comme modèle de solution un signal débruité.

A titre comparatif, les résultats obtenus par le filtre de Kalman sont dépourvus des artefacts et d'oscillations. Tandis que, les gains en FWHM et en maximum de pic sont moins améliorés que celles obtenus par la technique des ondelettes.

Le filtre de Kalman est donc une méthode d'estimation intéressante, mais qui n'est utilisable que lorsque l'on peut décrire assez précisément notre système. S'il est impossible de trouver une modélisation correcte du système, il est alors préférable de se tourner vers d'autres méthodes comme la méthode de Monté-Carlo par exemple qui est une méthode statistique, mais qui requiert une importante puissance de calcul. Une autre limite importante est que le filtre de Kalman permet de prendre en compte uniquement un modèle de bruit Gaussien. Le bruit peut en général être modélisé de façon Gaussienne, mais dans certains cas, un autre type de bruit est requiert (notamment en traitement d'images où l'on utilise fréquemment des bruits de Poisson). Cette restriction limite donc l'utilisation du filtre de Kalman.



La déconvolution en utilisant les ondelettes a donné une grande amélioration de la résolution en profondeur et la récupération de la forme originale du signal. Les pentes exponentielles ont été complètement supprimées pour donner des sommets symétriques et bien séparés. Le signal obtenu suit le profil d'origine et les composants haute fréquence dépassant un certain seuil peuvent être supprimés. En comparaison avec les résultats obtenus en utilisant le filtre de kalman. Dans cet algorithme basé sur l'analyse en ondelettes, le gain en maximum du pic est moins amélioré tandis que le gain en FWHM est meilleur.

On conclut ainsi que la déconvolution est une opération délicate et ne doit pas être mise en œuvre sans précaution. Si non, nous pouvons obtenir des résultats Aberrant, tels que des structures inexistantes dans la réalité ou des résultats mathématiquement corrects, mais physiquement irréalistes. Cela nécessite un bon contrôle du processus de restitution et de ses mécanismes. Parmi les éléments à prendre en compte, on trouve les suivants:

- Appliquer une technique de débruitage telle que les ondelettes ou filtre de Kalman, qui sont des outils puissants de traitement du signal.
- Choix de la forme qui fitte mieux la DRF ainsi que le choix des paramètres de la DRF lui-même.
- Application de contraintes dures (contrainte de positivité, support, amplitude ...) et douces (régularisation), et le choix des paramètres de régularisation. Ainsi que le bon choix du modèle de solution, s'il existe pour l'algorithme de déconvolution.
- Type de l'algorithme appliqué (Mono ou Multi résolution, itératif ou non itératif).
- Le nombre d'itérations dans le cas d'une méthode itérative est très important (critère d'arrêt de l'algorithme), etc.

Un inconvénient de ces méthodes de déconvolution 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 du Chapitre 5

- [1] **Hoffman S., Liu Y., Wang J.Y et Kovac J.,** *Analytical and numerical depth resolution functions in sputter profiling, Applied Surface Science, 314, pp 942-955, 2014.*
- [2] **Dowsett M. G., Rowlands G., Allen P. N., Barlow R. D.,** *An analytic form for the SIMS response function measured from ultra thin impurity layers, Surface and Interface Analysis, 21 (1994) 310 .*
- [3] **Hoffman S., Liu Y., Jian W., Kang H.L., et Wang J.Y.,** *Depth resolution in sputter profiling revisited, Surface and Interface Analysis, DOI 10.1002.sia.6039, 2016.*
- [4] **Hoffman S.,** *From depth resolution to depth resolution function ; refinement of the concept for delta layers, single layers and multilayers, Thin Solid Films, Surface and Interface Analysis, 27 (1999) 825.*
- [5] **Wittmaack K.,** *Detailed evaluation of the analytical resolution function, Applied Surface Science, (2003), 203-204.*
- [6] **Zalm P. C.,** *Ultra shallow doping profiling with SIMS, Rep. Prog. Phys., 1995, Vol 21, pp 310-315.*
- [7] **Gallardo S., Kudriatsev Y., Villegas A., Ramirez G., Asomoza R., Cruz-Hernandez E., Rojas-Ramirez J. S., López-López M.,** *SIMS characterization of segregation in InAs/ GaAs heterostructures, Applied Surface Science, 255 (2008) 1341.*
- [8] **Bennett J., Diebold A.,** *Round robin study of ultra shallow B depth profiling experimental conditions, In : International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry 1999:Brussels, Belgium (SIMS XII), A. Benninghoven ed. Amsterdam: Elsevier, p 541-544, 2000.*
- [9] **Dahraoui N., Boulakroune M et Benatia D.,** *Importance of noise reduction and suppression of artifacts in restoration techniques : A state of the art, 5<sup>th</sup> International Conference on Control Engineering & Information Technology (CEIT 2017), Tunisia, Vol :32, pp. 32-36. 2017.*
- [10] **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, 183 p, 2001.*
- [11] **Gautier B.,** *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, 230 p, 1997.*

- [12] **Boulakroune M.**, *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*, Thèse de doctorat, Université El Hadj Lakhdar de Batna, 229 p, 2008.
- [13] **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, 149 p, 1998.
- [14] **Barakat V., Guilpart B., Goutte R. et Prost R.**, *Model-based Tikhonov-Miller Image Restoration, Proceeding of International Conference on Image Processing, Santa Barbara CA, Vol. 1, pp. 310-313, 1997.*
- [15] **Boulakroune M.**, *Reliability of multiresolution deconvolution for improving depth resolution in SIMS analysis*, Volume 386, Pp. 24-32, Elsevier, 2016.

## CONCLUSION GENERALE

Le travail présenté dans cette thèse avait comme objectif l'amélioration de la résolution en profondeur de l'analyse SIMS, et de manière plus générale, sur la restauration d'informations à partir des profils de concentration en profondeur. Et ceci, en adjoignant aux résultats expérimentaux bruts un traitement numérique post-érosion qui est la déconvolution numérique. Nous nous sommes limités au cas du bore dans le Silicium.

Nous avons dans un premier temps effectué une revue aussi complète que possible sur les mécanismes essentiels gouvernant la résolution en profondeur. 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.

Les limites physiques atteintes par l'analyse SIMS rendent difficilement envisageables d'autres améliorations techniques de l'appareillage sans que le coût devienne exorbitant.

Les techniques de traitement numérique telles que *la déconvolution* reste un moyen efficace pour obtenir une résolution en profondeur meilleure. C'est une opération délicate, qu'il ne faut pas mettre en œuvre sans précaution. Il est nécessaire de bien contrôler le processus de restitution et d'en comprendre les mécanismes, sous peine d'obtenir des résultats aberrants.

Tout d'abord, 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. En effet, le fittage de la fonction de résolution (Réponse impulsionnelle du système de mesure) par une forme analytique est une étape indispensable avant d'appliquer une telle méthode de déconvolution. On a choisi la forme de Dowsett et al, celle-ci a plusieurs avantages qui sont déjà cités dans ce présent travail.

Par la suite, nous avons procédé au choix d'une méthode de déconvolution, en nous appuyant sur la description détaillée des principes et des méthodes liées à cette spécialité, plusieurs méthodes ont été proposées dans la littérature. Le problème de la restauration des profils dégradés par l'analyse SIMS fait partie des familles nombreuses des problèmes mal posés pour lesquels la solution de l'équation de convolution bruitée n'est ni stable, ni unique. Il faut donc disposer d'un moyen de stabiliser la solution et de la rendre conforme à ce qu'on doit attendre d'un signal issu d'une analyse SIMS.

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. Pour cela, nous avons choisi d'utiliser un nouvel algorithme de déconvolution dont le modèle de solution est un signal débruité. En effet, nous avons tout d'abord étudié quelques techniques de débruitage du signal. Nous avons choisi les ondelettes et le filtre de Kalman dont on a utilisé ce signal comme modèle de solution avant d'appliquer la procédure de déconvolution.

Ensuite, nous avons mis en œuvre la déconvolution des profils SIMS réels en particulier les structures multi deltas-dopage. La structure la plus difficile à déconvoluer est celle qui est constituée des couches ultrafines ou des deltas-dopage. En effet, nous avons testé, dans plusieurs méthodes proposées dans la littérature depuis quelques années, notre idée de débruiter le signal mesuré (provenant directement de l'analyse SIMS) avant de l'utiliser comme modèle de solution dans la procédure de déconvolution. Nous avons trouvé des meilleurs résultats comparant avec ceux des algorithmes de base (en utilisant directement le signal mesuré bruité).

Notre étude s'est poursuivie par une évaluation détaillée des techniques de déconvolution choisi dans ce travail, qui sont basés sur l'algorithme de Van Cittert par la régularisation de Tikhonov-Miller et contraint et un modèle de solution qui est un signal débruité préalablement, sur une base d'ondelettes en premier lieu et à l'aide d'un filtre de Kalman en deuxième lieu.

D'après les courbes obtenues de la déconvolution des profils par les techniques proposées, nous avons remarqué que les résultats obtenus par le filtre de Kalman sont dépourvus d'artefacts et d'oscillations. Tandis que, les gains en FWHM et en maximum des pics sont moins améliorés que celles obtenus par la technique des ondelettes.

Le filtre de Kalman est donc une méthode d'estimation intéressante, mais qui n'est utilisable que lorsque l'on peut décrire assez précisément notre système. S'il est impossible de trouver une modélisation correcte du système, il est alors préférable de se tourner vers d'autres méthodes

Plusieurs paramètres entre en jeu pour améliorer la résolution en profondeur. Parmi eux on peut citer :

- Optimisation des paramètres physique de l'appareillage SIMS (c'est le cheval de bataille des constructeurs d'analyseurs ioniques) ; 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. Dans ces conditions, la résolution en profondeur peut s'améliorer d'un facteur 2 en moyenne et la majorité des phénomènes physiques peuvent être éliminés, sauf le mixage collisionnel, sera toujours présent car il est propre à la mesure.
- Utilisation des différentes techniques de traitement numérique du signal telle que la déconvolution et le débruitage. Et ceci, permet d'aider la résolution en profondeur pour franchir les limites physiques et expérimentales.
- La DRF joue un rôle très important dans l'opération de la déconvolution. Donc, il serait très intéressant de développer de nouvelles techniques et de nouveaux modèles qui permettent une détermination plus précise de la DRF. Ainsi qu'on devrait ajuster les paramètres de la DRF ( $\lambda_u$ ,  $\lambda_d$  et  $\sigma_g$ ).
- Application de contraintes dures (contrainte de positivité, support, amplitude ...) et douces (régularisation), et le choix des paramètres de régularisation.
- Choix du modèle de solution, s'il existe pour l'algorithme de déconvolution. Dans ce travail, on a choisi un signal débruité préalablement.

- Choix d'un outil puissant de débruitage du signal (les ondelettes, filtre de Kalman, algorithmes génétiques, techniques d'intelligence artificielle...etc).
- Choix de la technique de déconvolution elle-même (itérative ou non, mono ou multirésolution, etc.).
- Si la méthode de déconvolution est itérative, on doit donc déterminer un critère d'arrêt de l'algorithme et le nombre d'itération...etc.