

Nouvel algorithme de déconvolution des profils d'analyse par spectrométrie de masse des ions secondaires

Nadia DAHRAOUI et M'hamed BOULAKROUNE

Univ. Ouargla, Faculté des Nouvelles Technologies de l'Information et de la Communication, Département d'Electronique et Télécommunications, Ouargla 30000, Algérie.

* Emails : dahraouinadia@gmail.com , boulakroune.mhamed@gmail.com

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 a new Tikhonov-Miller deconvolution method 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, second by the introduction of the obtained denoisy signal in an iterative deconvolution algorithm. It is shown that this new algorithm gives 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 method as well as suggestions for future work are presented and discussed.

Key words: SIMS, multiresolution deconvolution, wavelet shrinkage, Multilayers, depth resolution function, wavelet denoising.

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 un algorithme de déconvolution multirésolution post érosion pour surmonter les limites des algorithmes monorésolution proposé dans ce domaine à ce jour. En effet, cet algorithme se base sur la régularisation de Tikhonov-Miller avec modèle de solution, ce dernier est un signal débruité par décomposition sur une base d'ondelettes. 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.

Mots clés : SIMS, déconvolution multi-résolution, résolution en profondeur, DRF, delta-dopage, débruitage par ondelettes.

1. Introduction

La spectrométrie de masse des ions secondaires (SIMS) est une méthode d'analyse élémentaire qui, de part sa sensibilité et sa bonne résolution en profondeur, est une méthode de choix pour la caractérisation élémentaire des matériaux de la microélectronique. Cependant, la réduction rapide et continue des dimensions des dispositifs avancés de cette filière impose un cahier de charge de plus en plus exigeant, notamment en matière de résolution en profondeur [1-8].

Les différentes méthodes de déconvolution monorésolution 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 ces limites, il est utile d'adapter une méthode de déconvolution qui tient en compte ce paramètre nuisible. Pour cela, nous avons adopté une nouvelle méthode de déconvolution multirésolution basée sur la régularisation de Tikhonov-Miller avec comme modèle de solution un signal décomposé préalablement sur une base d'ondelettes [9-13].

2. Principe de l'algorithme

Dans cet algorithme, l'idée est d'introduire un modèle de solution sous une forme d'un signal décomposé préalablement sur une base d'ondelettes. Il s'agit d'un signal débruité et

reconstruit en ne conservant que les coefficients d'approximation et les coefficients de détails seuillés [9].

Dans cette approche, le modèle de solution est comme suit :

$$X_{mod} = \tilde{x}^{(j-1)} = \tilde{F}^{(j)} y_{\alpha}^{(j)} + \tilde{G} \hat{y}_d^{(j)} \tag{1}$$

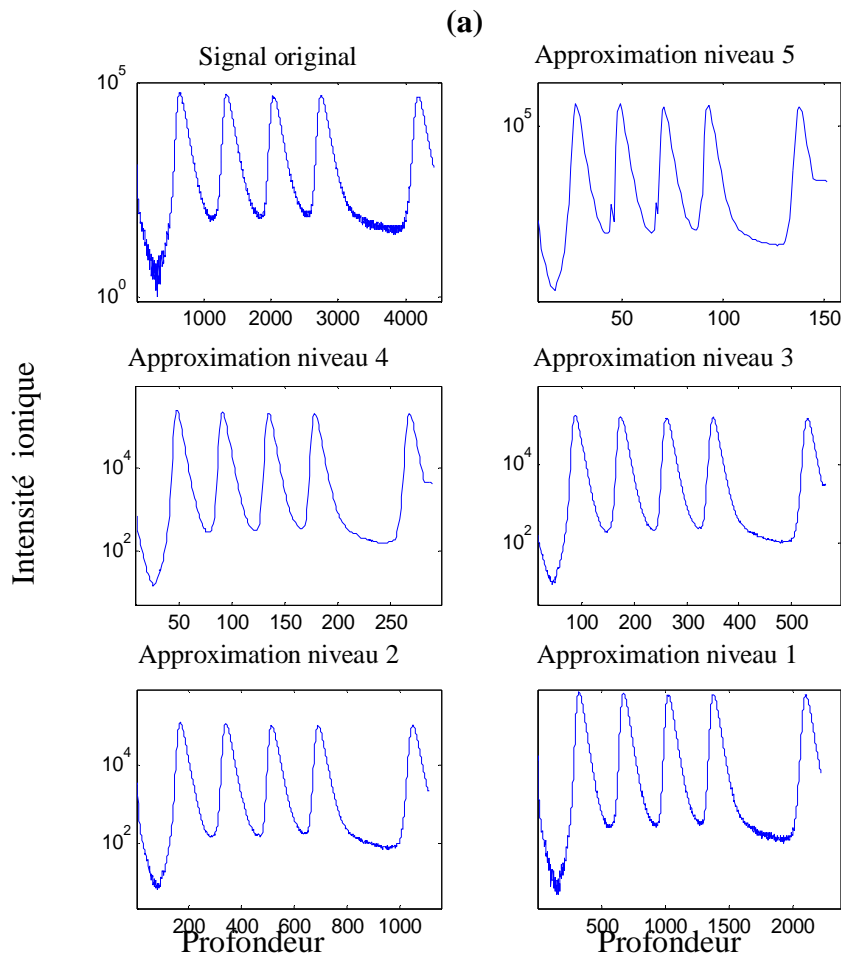
Cet algorithme est itératif ; sa formulation mathématique, dans l'espace de Fourier, est la suivante :

$$\begin{cases} \tilde{X}_{n+1} = \frac{H^* \gamma + \alpha |D|^2 X_{mod,n}}{|H|^2 + \alpha |D|^2} \\ X_{mod,n} = TF[\tilde{x}^{(j-1)}] = TF[\tilde{F}^{(j)} y_{\alpha}^{(j)} + \tilde{G} \hat{y}_d^{(j)}] \\ \hat{x}_n = TF^{-1}[\tilde{X}_n] \end{cases} \tag{2}$$

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

3. Résultats et discussions

3.1. Décomposition sur une base d'ondelettes : Débruitage



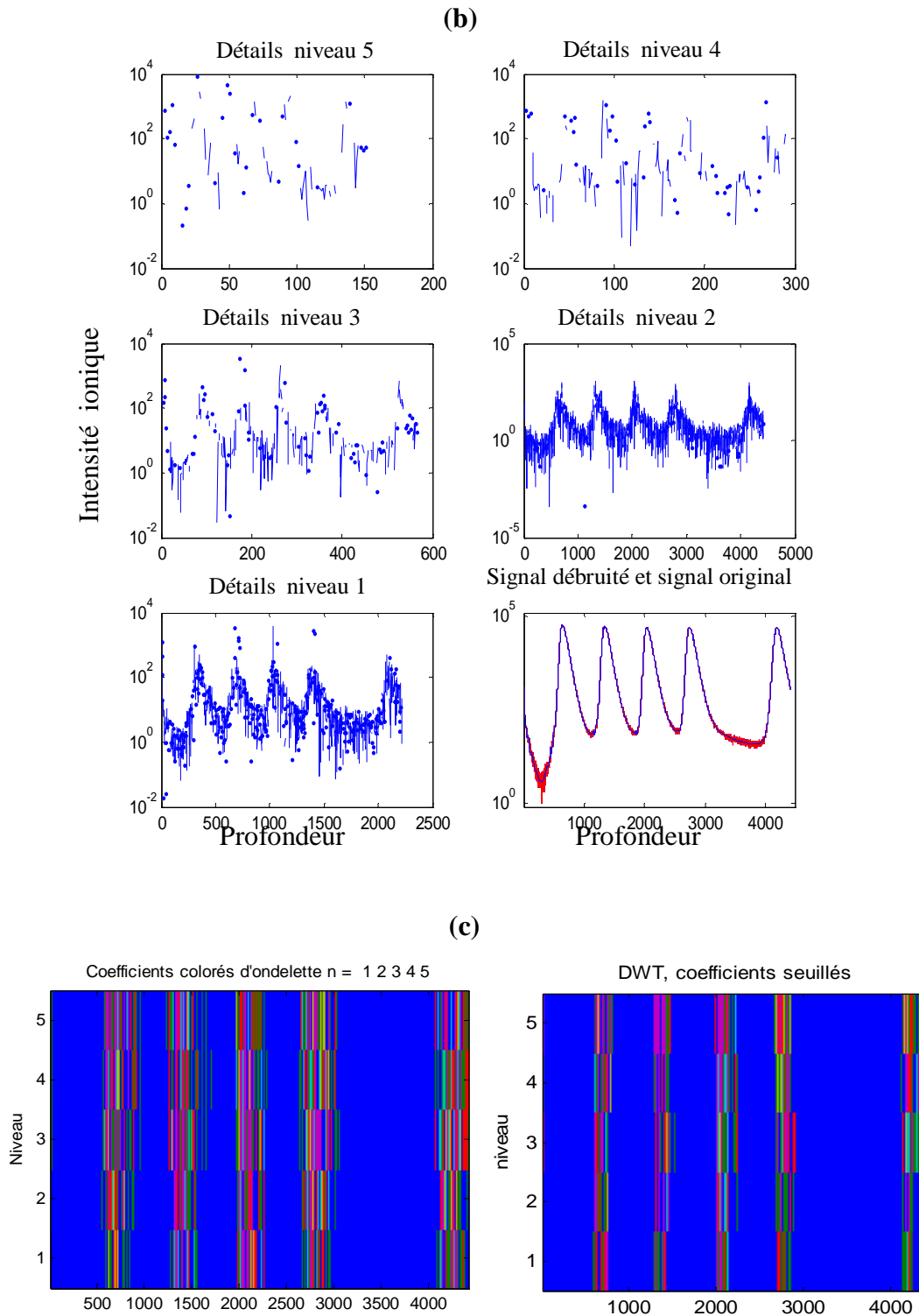


Figure 1 : Décomposition de l'échantillon MD5 sur une base d'ondelettes « sym8 », niveau de décomposition 5 :

- 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.**

La décomposition ainsi que le débruitage, par exemple, de l'échantillon MD5 (5 deltas-dopage) sur une base d'ondelette sont illustrés sur la Figure 1. L'ondelette utilisée est à support compact de la famille Symlet qui est Sym8.

Dans les graphiques des approximations (voir Figure 1-a) partant de \mathbf{a}_1 et recherchons, en remontant, un niveau tel que l'approximation constitue un bon candidat à être un estimateur du signal utile. Les niveaux 4 et 5 sont raisonnables, dont les estimateurs associés sont de très bonnes qualités, d'être des bons candidats pour le signal utile.

Regardons maintenant les détails (voir Figure 1-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 – doping. On en déduit que les détails \mathbf{d}_4 et \mathbf{d}_5 contiennent des composantes du signal utile par opposition au bruit non informatif. Ce phénomène est aussi visible sur le graphique des coefficients d'ondelettes du niveau 5 au niveau 1.

Le point qui attire toute l'attention ici est la continuité du signal débruité entre les deltas - doping là où il est sensé d'être discontinu, les méthodes classiques de débruitage sont incapables d'une telle adaptation en échelle (voir Figure 1-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 1-c). Ces coefficients (« bégayés » 2^n fois au niveau n) sont concentrés dans la zone où le signal est trop bruité (hautes fréquences), après le seuillage il reste uniquement les détails qui sont supérieurs au seuil déterminé et susceptibles d'appartenir au signal utile. Le seuil obtenu par le seuillage universel dur en utilisant la formule de Donoho et Johnstone est $\lambda = 55,7831$ cps/s. Le niveau de bruit estimé est d'un SNR = 40,9212 dB [9].

3.2. Déconvolution de l'échantillon MD5

Les résultats de la déconvolution de l'échantillon MD5 en échelles linéaire et logarithmique sont illustrés dans la Figure 2. Cette figure montre en plus la reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué et DRF (la fonction de résolution en profondeur).

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, 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.

3.3. Déconvolution de l'échantillon MD6

La déconvolution de cet échantillon a également conduit à une excellente amélioration de la résolution en profondeur et de la récupération de la forme originale du signal. Les pentes exponentielles ont été complètement supprimées donnant ainsi des pics symétriques et bien séparés. Par comparaison avec les résultats de la déconvolution par l'algorithme de Gautier, les profils obtenus par notre approche sont lisses et dépourvus des artefacts. Ces derniers sont très nombreux aux pieds des pics déconvolués proposé par Gautier [10].

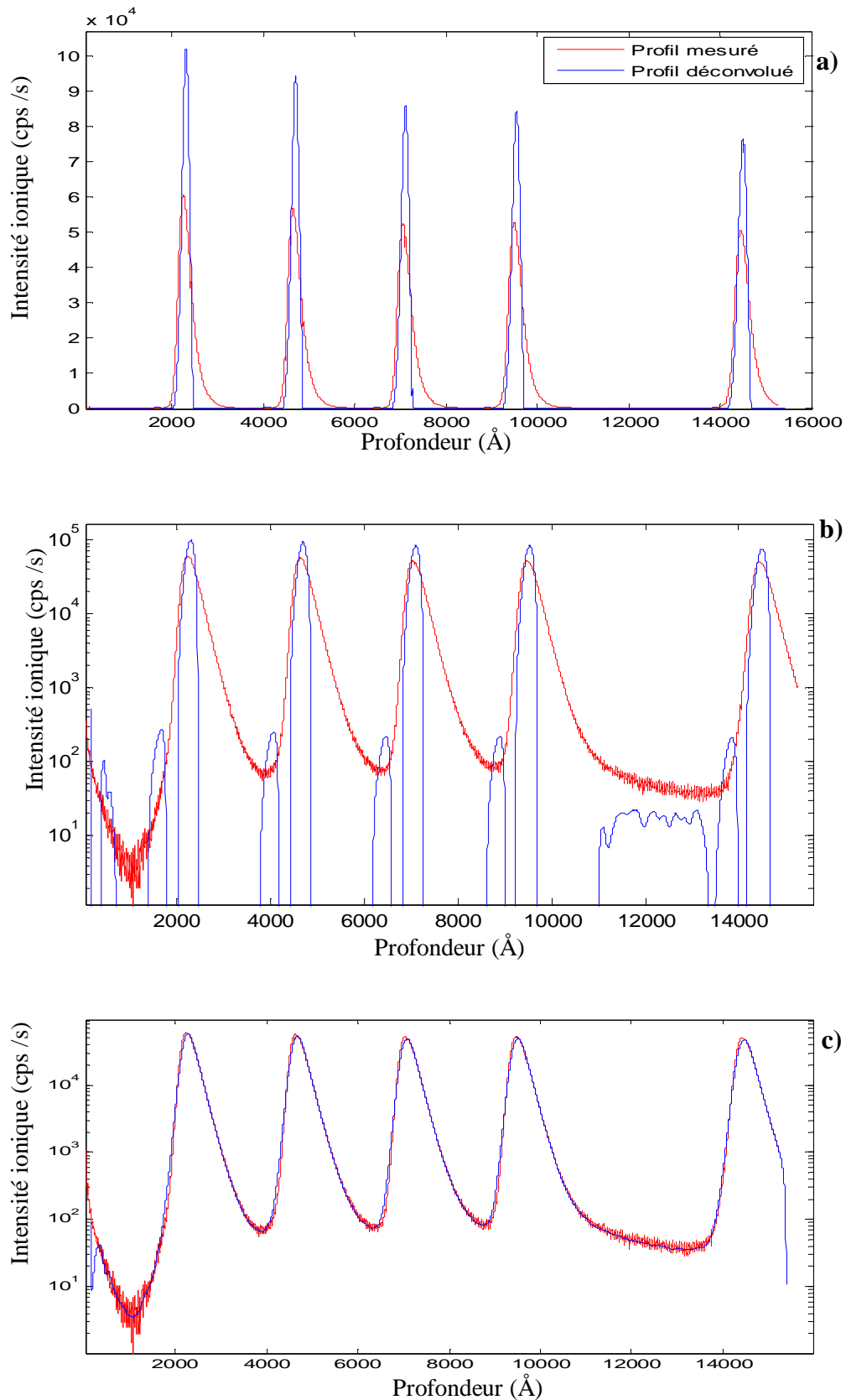


Figure 2 : Résultats de la déconvolution multirésolution de l'échantillon MD5 de bore dans le silicium (DRF1 : $\lambda_d=37,5$; $\lambda_u=10,9$; $\sigma_g=22,5$) :

- a) représentation en échelle linéaire, b) représentation en échelle logarithmique,
- c) reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué et la DRF1.

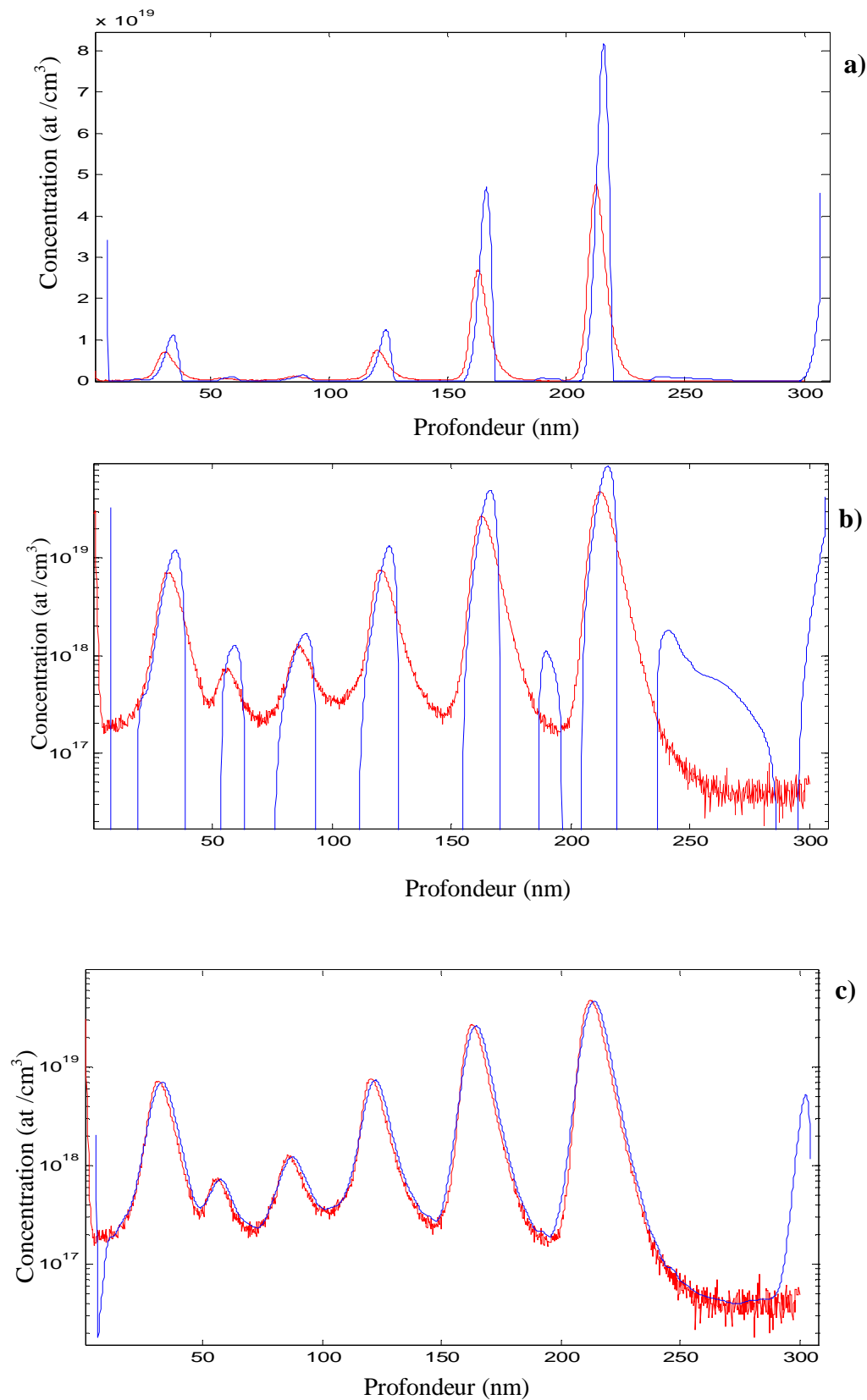


Figure 3 : Résultats de la déconvolution multirésolution de l'échantillon MD6 de bore dans le silicium (DRF2: $\lambda_d=19,8$; $\lambda_u=8,16$; $\sigma_g=17,13$) :

- a) représentation en échelle linéaire, b) représentation en échelle logarithmique,**
- c) reconstruction du profil mesuré à partir du profil déconvolué et la DRF2.**

Pour éliminer complètement ces oscillations, Gautier propose d'appliquer un niveau de confiance local, empirique et déduit de l'erreur de reconstruction sur les profils déconvolués. Le but

est de séparer les parties du signal faisant partie du profil original de celles générées artificiellement par le processus d'inversion (artefacts de déconvolution). D'après cet auteur, lorsque le signal tombe dans le bruit que l'on ne peut plus réellement faire confiance dans le résultat de la déconvolution, c'est de fixer une valeur limite du signal déconvolué au dessous de laquelle il ne faut plus prendre en compte le résultat de la déconvolution comme faisant partie du signal original. A notre avis, un niveau de confiance qui autorise à prendre en compte certaines parties du signal et au dessous duquel le signal ne doit plus être pris en compte n'apporte aucune information sur la qualité de l'information et qui a du mal à trouver une signification parlante dans le cas d'un signal SIMS. L'un des avantages de l'analyse SIMS est la grande dynamique du signal, restreindre le signal déconvolué à une dynamique qui ne dépasse pas deux décades ne reflète pas le signal original et les parties filtrées par le niveau de confiance peuvent fournir des informations précieuses sur l'échantillon analysé. Mancina [11] a montré que les artefacts ne sont pas toujours des aberrations de la déconvolution, ils peuvent être des structures mais de faibles concentrations. L'interprétation des artefacts doit être mesurée, surtout si leur dose n'est pas négligeable, et on ne peut pas les éliminer des profils. L'analyse de Mancina est bien claire dans notre cas car on voit la présence d'un pic plus prononcé situé entre les pics 5 et 6 à une profondeur de 190 nm. On peut considérer que ce pic n'est pas engendré par l'analyse mais c'est une caractéristique intrinsèque de l'échantillon, donc c'est une structure à part entière dont la concentration n'est pas négligeable, 9.10^{18} at/cm³.

Avec les profils expérimentaux, les performances de la déconvolution sont surtout limitées par les imperfections de la mesure. Mis à part la génération d'artefacts dans les régions à faibles concentrations, les mauvaises conditions expérimentales conduisent soit au développement d'oscillations soit à la stagnation du profil déconvolués.

Tableau 1 : Récapitulation des gains en résolution et en maximum des pics obtenus par la déconvolution.

		MD5					
		Pic # 1	Pic # 2	Pic # 3	Pic # 4	Pic # 5	
DRF1	Gain en FWHM	1,53	1,51	1,53	1,35	1,51	
	Gain en maximum	1,8	1,77	1,75	1,72	1,64	
		MD6					
		Pic # 1	Pic # 2	Pic # 3	Pic # 4	Pic # 5	Pic # 6
DRF2	Gain en FWHM	1,4	1,68	1,29	1,44	1,32	1,37
	Gain en maximum	1,56	1,46	1,16	1,65	1,74	1,71

En observant les différentes valeurs des gains obtenus, ces résultats montrent clairement la bonne qualité des profils déconvolués ainsi que les bons gains obtenus par la déconvolution.

Le meilleur gain en résolution est remarqué pour l'échantillon MD6 de valeur 1,68 pour le pic2, le plus faible est observé pour l'échantillon MD6 (pic3) de valeur égale à 1,29. Le meilleur gain en maximum obtenu pour l'échantion MD5 (pic1) de valeur 1,8, alors que le plus faible gain obtenu de l'échantillon MD6 d'une valeur 1,16 (pic3).

4. Conclusion

Ce travail avait comme objectif l'amélioration de la résolution en profondeur en analyse SIMS en adjoignant aux résultats expérimentaux bruts un traitement numérique. Nous avons mis en œuvre la déconvolution des profils SIMS réels (des structures multi deltas-dopage).

Les gains en résolution en profondeur obtenus pour les différentes structures varient entre 1,29 et 1,68 Å. Ceux des maximums des pics oscillent autour de 1,5.

La reconstruction des profils est excellente, surtout pour les hauts niveaux du signal. Les écarts entre le profil mesuré et le profil reconstruit se situent principalement aux jonctions des pics de concentration, où le bruit est dominant.

En conclusion, pour une déconvolution objective, ce qui est important est d'avoir un bon gain et une bonne récupération de la forme et de la totalité du signal sans artefacts et oscillations au lieu d'avoir des gains et formes meilleurs sans s'assurer qu'ils soient exacts ! Le plus grand danger de la déconvolution est d'aboutir à un résultat éblouissant et éclatant alors qu'il n'est pas réel et ne correspond pas au profil initial !

Références

- [1] Drozdov Yu. N., Drozdov M. N., Novikov A. V., Yunin P. A., et Yurasov D. V., *Layer-by-layer analysis of structures containing δ -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.
- [2] Boulakroune M. et Benatia D., *Improvement of SIMS multilayer profile analysis*, *Sciences of Electronics, Technologies of Information and Telecommunications (SETIT), Tunisia*, 2012.
- [3] Vandervorst W., *Semiconductor Profiling with sub-nm resolution: Challenges and solutions*, *Journal of Applied Surface Science*, 2008, Vol 255, pp. 805-812.
- [4] Portavoce A., Rodriguez N., Daineche R., Grosjean C. et Girardeaux C., *Correction of secondary ion mass spectrometry profiles for atom diffusion measurements*, *Journal of Materials Letters, ELSEVIER*, 2012, Vol 63, pp. 676-678.
- [5] Hochstenbach M. E., McNinch N. et Reichel L., *Discrete ill-posed least-squares problems with a solution norm constraint*, *Journal of Linear Algebra and its Applications*, 2012, Vol 436, pp. 3801-3818.
- [6] Stevie F. A. et Griffis D. P., *Quantification in dynamic SIMS: Current statute and future needs*, *Journal of Applied Surface Science*, 2008, Vol 255, pp. 1364-1367.
- [7] Kudriavtsev Y., Gallardo S., Villegas A., Ramirez G. et Asomoza R., *Depth-Profile Analysis of Nanostructures by SIMS: Depth Resolution Function*, *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2008, Vol 72, No. 7, pp. 895-898.
- [8] Fares B., Gautier B., Dupuy J. C., Prudon G. Et Holliger Ph., *Deconvolution of very low primary energy SIMS depth profiles*, *Journal of Applied Surface Science*, 2006, Vol 252, pp. 6478-6481.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [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*, 2003, 336 p.
- [13] Benali R., *Analyse du signal ECG par réseau adaptatif d'ondelettes en vue de la reconnaissance de pathologies cardiaques*, *Thèse de doctorat, Université Abou Bekr Belkaid Tlemcen*, 2013, 140 p.