

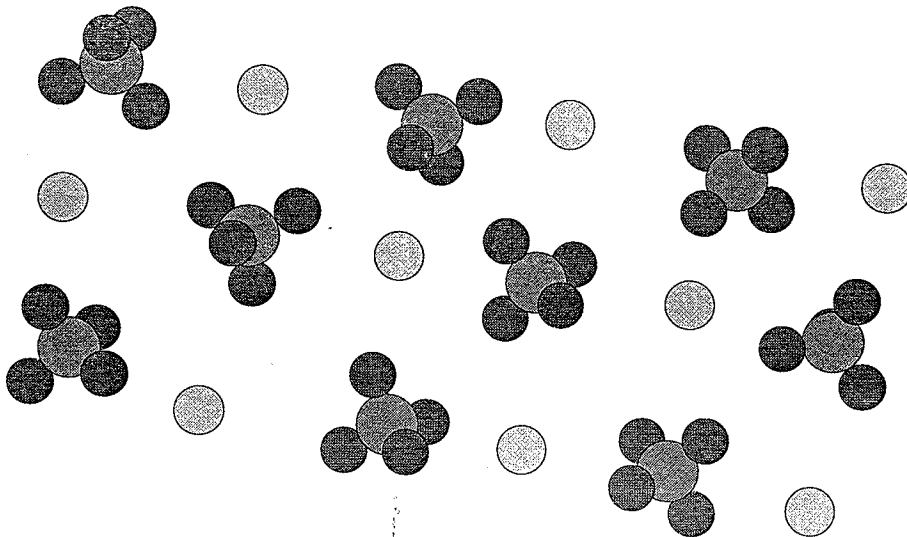
Journées Simulation
Numérique, Matière
Condensée et Désordre
INTERFACE
SIMULATION/EXPÉRIENCE

Jeudi 5 et Vendredi 6 juin 1997

2-4 pl Jussieu, 75005 Paris

Troisième édition

AMPHITHÉÂTRE 24



Fluctuations des quantités de matière rencontrées le long de leurs trajectoires par des particules chargées dans le silicium poreux.

Z. Hajnal*, G. Battistig*, G. Amsel¹ et C. Ortega

Groupe de Physique des Solides, URA 17 du CNRS, Universités Paris 7 et 6,

*Research Institute for Materials Science, H-1525 Budapest, Hongrie

Les couches de silicium poreux obtenues par attaque électrochimique du silicium compact monocristallin de type p présentent une surface interne spécifique très grande, quelques $10^2 \text{ m}^2/\text{cm}^3$ et deux types de morphologie: structure isotrope de type éponge ou anisotrope avec des pores colonnaires perpendiculaires à la surface (100). La porosité de ces couches est, suivant leur mode de formation et les traitements ultérieurs qu'elles subissent, typiquement de 40 à 80%. L'observation par microscopie électronique en transmission (TEM) effectuée sur une coupe transversale de couche colonnaire fournit une image qui, traitée numériquement de façon à visualiser la ligne centrale des parois (squeléttisation en termes d'imagerie), engendre un pavage du plan comme le montre la figure 1 (obtenue à partir d'un cliché TEM de Y. Wang du Laboratoire de Minéralogie de Paris 6 par I. Eördögh à Budapest avec le programme VIRGINIA). Les distances interpores sont typiquement de 15 nm et les épaisseurs de paroi de 5 nm.

Sur le plan expérimental nous disposons d'un moyen de caractérisation de la morphologie des couches colonnaires: des particules chargées traversant un milieu poreux peuvent en effet servir de sonde locale à très haute résolution spatiale, leur sensibilité à la présence de matière étant confinée à un rayon de quelques Å autour de leur trajectoire. La perte moyenne d'énergie de ces particules est proportionnelle à la quantité de matière traversée: les fluctuations de cette dernière peuvent être mesurées expérimentalement en envoyant sur une surface d'environ un mm^2 un grand nombre de particules dans une couche d'épaisseur donnée et en mesurant leur spectre en énergie. Les mesures sont effectuées au moyen de protons sur des couches de surface interne décorée par ^{15}N , en utilisant la réaction nucléaire $^{15}\text{N}(p,\alpha\gamma)^{12}\text{C}$ qui présente une résonance très étroite (largeur $\Gamma = 120 \text{ eV}$) à une énergie de 429 keV. Nous avons montré que la dispersion de la perte d'énergie des protons traversant de telles couches était beaucoup plus grande, jusqu'à 6 fois, dans le cas des structures colonnaires très anisotropes que dans la matière compacte de même composition. Cette dispersion augmente fortement lorsque l'axe du faisceau se rapproche de celui des pores.

Nous avons tenté d'élaborer un modèle statistique de tels pores colonnaires au moyen d'un pavage aléatoire du plan par des polygones, la troisième dimension étant engendrée par des parois parallèles de longueur égale à l'épaisseur de la couche. L'épaisseur des parois du pavage peut être ajustée pour obtenir la porosité désirée. On montrera que la méthode expérimentale que nous venons d'évoquer équivaut à mesurer la statistique de la somme des épaisseurs de parois

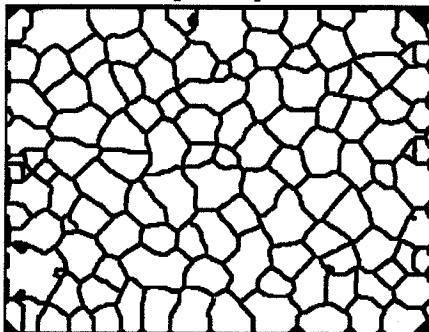


Figure 1

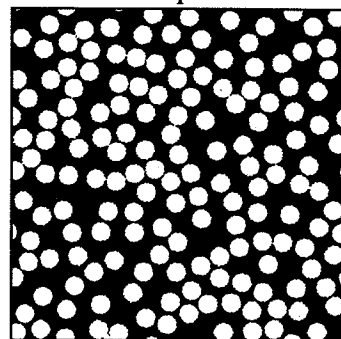


Figure 2

¹ Tel: 01 44 27 46 48, Fax: 01 43 54 28 78, E-mail: amsel@gps.jussieu.fr

traversées par une corde de longueur donnée jetée au hasard sur le plan, ce qui équivaut à la statistique de la porosité unidimensionnelle du milieu.

Les pavages considérés ici sont construits à partir d'un système de points aléatoires P_i dans le plan, les côtés des polygones étant formés par des médiatrices de couples de points; le critère qui permet de retenir les segments formant effectivement le côté d'un polygone est basé sur une transformation par inversion des points voisins de chaque point. Il s'agit en fait d'une construction similaire à celle de Voronoï.

Le système de points P_i est engendré en jetant sur le plan au hasard des disques de diamètre D_0 , les nouveaux disques étant rejetés s'ils recouvrent un disque déjà posé. On commence par le remplissage complet d'un rectangle, en effectuant autant d'essais qu'il le faut. Si ces disques sont considérés comme des sections de pores on obtient ainsi une porosité de l'ordre de 50%. Ce mode de construction fournit le système P_i le plus ordonné possible obtenu par ce procédé. Un carré presque rempli par de tels disques est représenté sur la figure 2. On obtient des systèmes P_i moins corrélés spatialement en gardant le même nombre de points P_i mais en diminuant le diamètre d'exclusion D , c'est à dire en diminuant le taux de remplissage de la surface par les disques. Les P_i tendent vers une distribution de Poisson lorsque $D \ll D_0$.

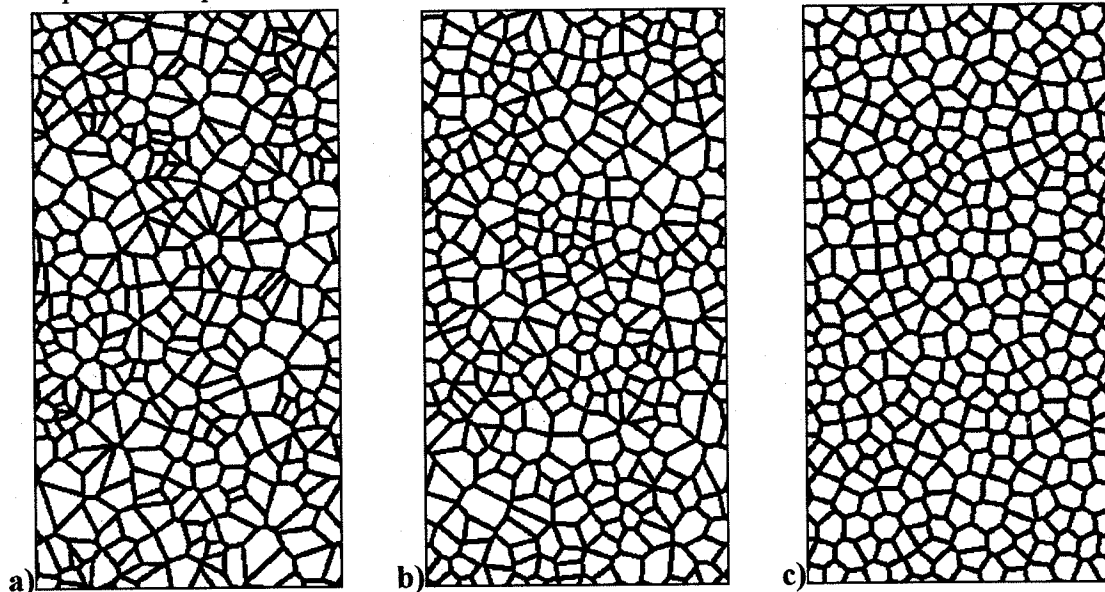


Figure 3

La figure 3 montre des polygones correspondant à un même nombre de points P_i mais obtenus avec des diamètres d'exclusion D égaux à: a) $D_0/3$, b) $2D_0/3$ et c) D_0 . On constate visuellement une forte régularisation des polygones lorsque le taux de remplissage augmente. Une simulation visuellement satisfaisante de la figure 1 correspond probablement à un pavage intermédiaire entre b) et c).

La figure 4 représente un histogramme du type décrit plus haut, pour une longueur de corde de 6 distances moyennes interpores.

On présentera des résultats plus détaillés, on montrera dans quelle mesure les simulations reproduisent les faits expérimentaux et on évoquera les tests statistiques plus objectifs permettant de comparer des morphologies comme celles de la figure 1 et 3. Les raffinements du modèle actuellement à l'étude et sa signification physique seront discutés.

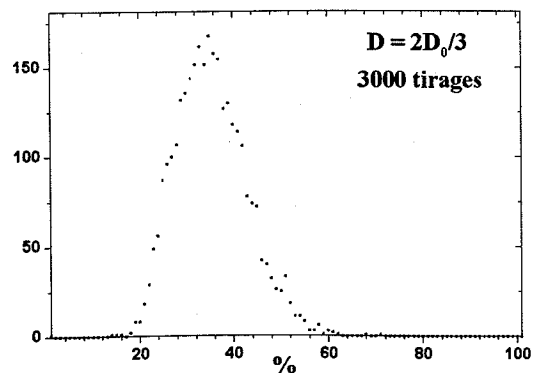


Figure 4