



Hurricane

Hurricane Manuel de l'utilisateur

Version 1.5

SAMx

SAMx - Hurricane Hurricane Manuel de l'utilisateur, Version 1.5

Imprimé en France, juillet 2014.

© 1999-2014 SAMx. Tous droits réservés.

Les informations contenues dans ce manuel sont susceptibles d'être modifiées sans préavis. Les logiciels SAMx sont fournis sous licence d'utilisation : ils ne peuvent être utilisés que dans les limites des termes et conditions de cette licence. En aucun cas ils ne peuvent être copiés ou cédés sans l'autorisation écrite de SAMx.

STRATA, XMAS, IDFix, STRATAGem, MaxView, MaxView XL, MADMax sont des marques déposées de SAMx.

WINDOWS est une marque déposée de Microsoft Corporation.

SAMx

Le Cusson

32360 LAVARDENS

France

E-mail : support@samx.com

Tél. : +33 (0) 5 62 63 00 00

Fax : +33 (0) 5 62 07 85 44

Introduction

Hurricane est un programme de calcul de simulation des interactions des électrons avec la matière, communément appelé programme de Monte Carlo.

Ce programme est basé sur les développements de Jean Henoc, Françoise Maurice, Jean-Louis Pouchou et Françoise Pichoir.

A la différence des autres programmes de Monte Carlo, Hurricane possède les particularités suivantes :

- Traitement complet des interactions individuelles

(diffusion, perte d'énergie, production de photons et électrons)

- Prise en compte des électrons secondaires et des phénomènes induits par les plus rapides d'entre eux.
- Calculs effectués à partir de lois théoriques. Pas d'utilisation des lois de comportement moyen, pas d'ajustement.

L'objectif d'Hurricane est de pouvoir traiter des situations face auxquelles les méthodes classiques d'analyse quantitative sont impuissantes ou approximatives :

- Échantillons chimiquement hétérogènes
- Échantillons rugueux, poreux
- Géométries particulières

Pour ce faire Hurricane s'appuie sur un maillage de l'espace et des primitives géométriques (sphère, cylindre, rhomboèdre) offrant la possibilité de définir des objets précipités de formes et de natures chimiques diverses, disposés de différentes façons dans une matrice.

Table des matières

Démarrage de Hurricane	1
Lancer l'application	1
Définition d'un composé	2
Ajouter un composé	2
Conditions expérimentales	5
L'onglet Beam/X-Rays	5
Définition de la géométrie	7
Principes pour la simulation	7
Ajout d'un cylindre	8
Autres primitives géométriques	10
Vue 3D de la géométrie	11
Vue par défaut	11
Paramètres du détecteur et angle de tilt	13
L'onglet Sample	13
Autres paramètres du faisceau	14
Modes Spot et Scan	14
Paramètres de calcul	15
Paramètres de simulation	15
Sauvegarde des paramètres	18
Sauvegarde de la configuration	18
Lancement de la simulation	19
Commencer la simulation	19
Réglage des dimensions de la boîte de calcul	20
Régler les dimensions	20
Résultats	22
Fenêtre de résultat	22
Réduction de la variance des ionisations	24
Techniques de réduction de variance	24
Utilisation du Batch	26
Introduction	26
Chargement d'une configuration de calcul	27
Lancement de la simulation en batch	29
Résultats des simulations en batch	29
Personnalisation de la gamme d'énergie	31
Quand est-ce nécessaire ?	31

Utilisation du programme « calelas »	31
Sélection de la gamme d'énergie	32
Classification des électrons sortants	33
Etude des électrons sortants	33
Fichiers de résultats de classification	34
Répertoire des résultats	34
Importation d'un fichier de classification dans un tableur	35
Fichiers de résultats	35
Paramétrage de la classification	37
Définir la classification	37
Sauvegarde de tous les électrons ré-émis	38
Dans l'onglet Computation	38

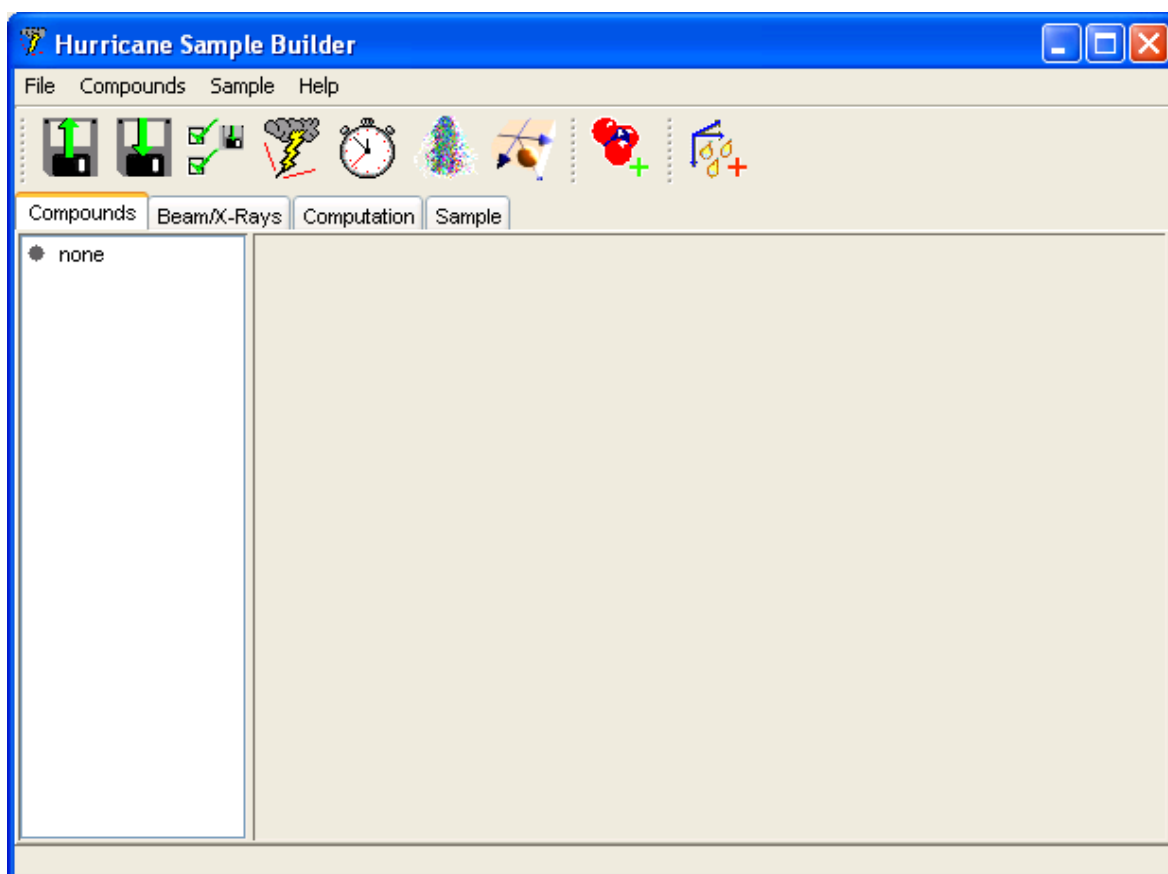
Démarrage de Hurricane

Lancer l'application



Lancer l'application en double-cliquant sur le raccourci disponible sur le bureau

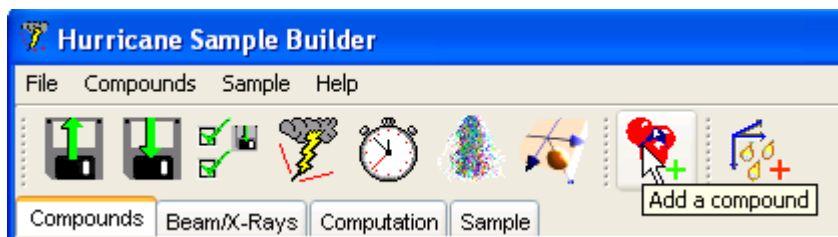
Voici l'aspect de la fenêtre de démarrage :



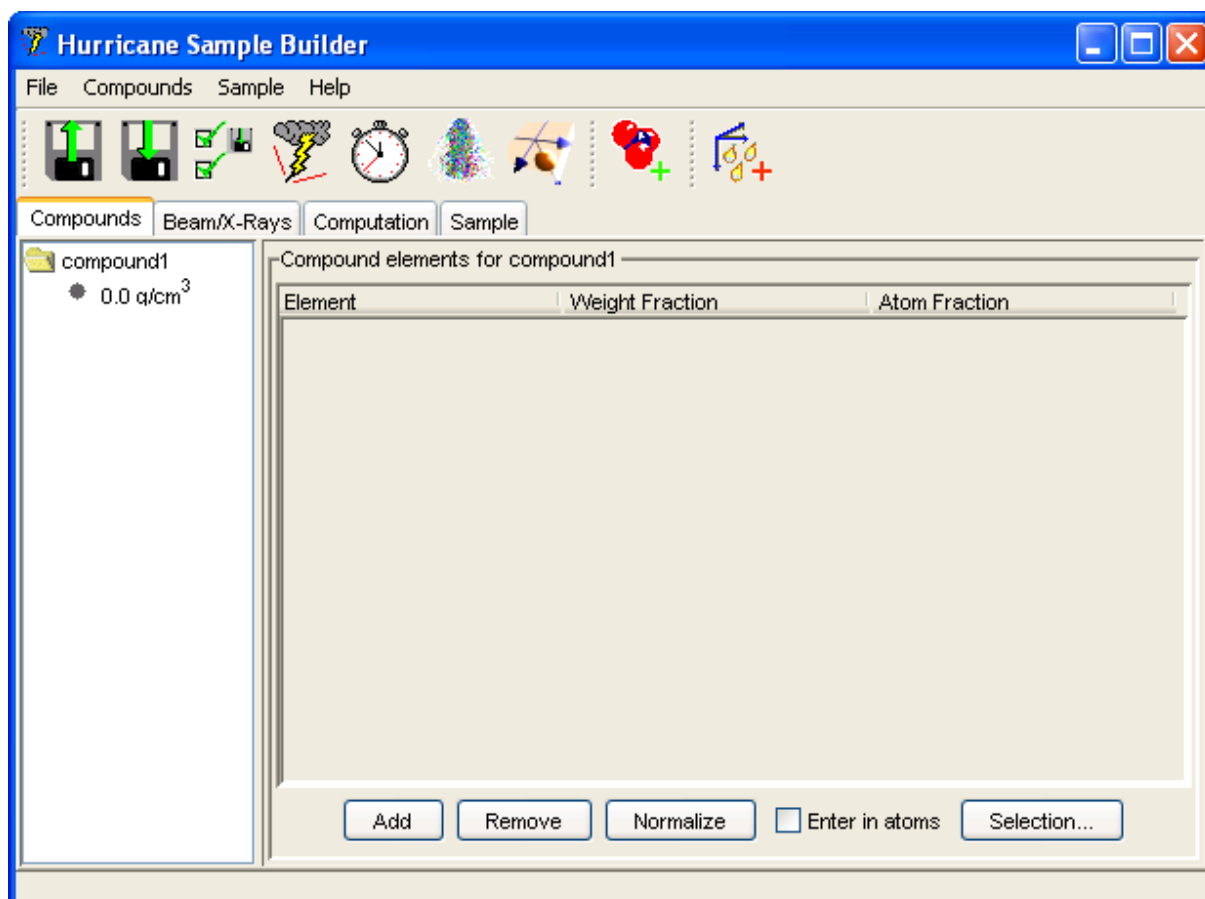
Définition d'un composé

Ajouter un composé

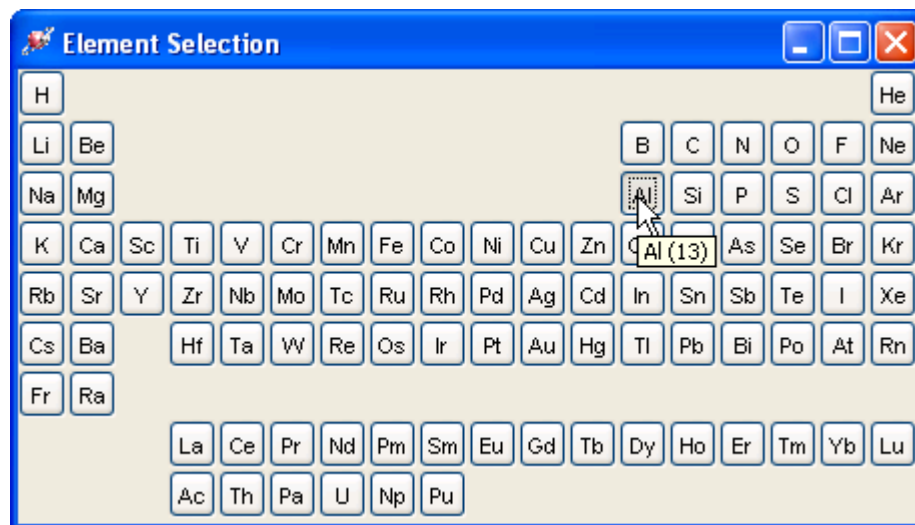
Pour ajouter un composé, cliquer sur le bouton correspondant (ou passer par le menu Compounds) :



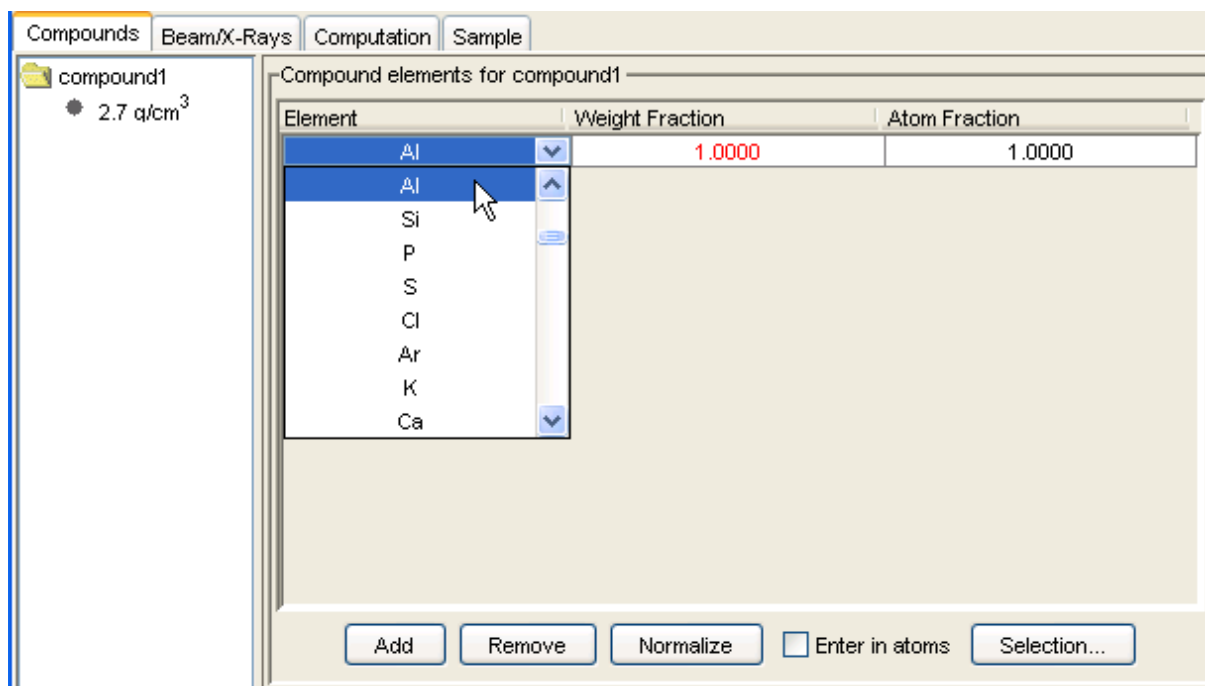
La fenêtre principale est alors mise-à-jour dans l'onglet Compounds :



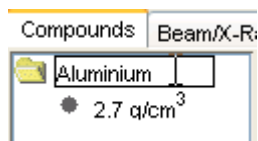
Pour ajouter ou enlever un élément, cliquer sur le bouton Selection..., ce qui fait apparaître la fenêtre de sélection suivante, dans laquelle il suffit de cliquer une fois avec le bouton gauche de la souris sur la case correspondante pour le sélectionner ou le désélectionner.



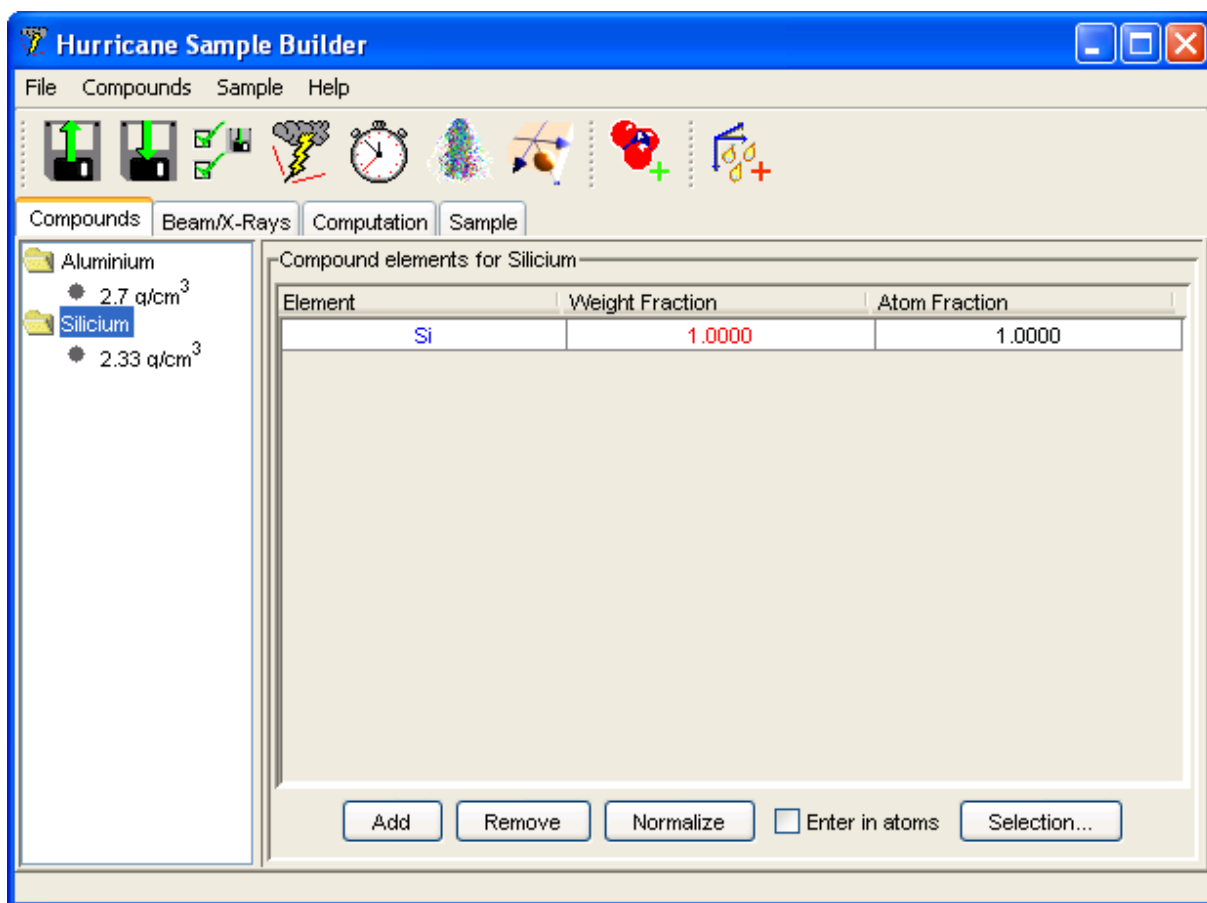
Autre méthode pour ajouter un élément, cliquer sur le bouton Add. On sélectionne ensuite l'élément désiré dans la colonne Element à l'aide du bouton gauche de la souris, et éventuellement en appuyant simultanément plusieurs fois sur la touche du clavier correspondant à la première lettre de l'élément.



Le nom du composé est généré en suivant une numérotation automatique. Il est possible de le changer en cliquant deux fois dessus avec le bouton gauche à la droite du dossier dans la colonne de gauche. Après modification du nom, appuyer sur la touche Entrée pour valider.



De la même façon, on peut ajouter et définir un deuxième composé aussi simple que le précédent ne contenant qu'un seul élément, le silicium. La fenêtre principale devrait alors ressembler à ce qui suit.

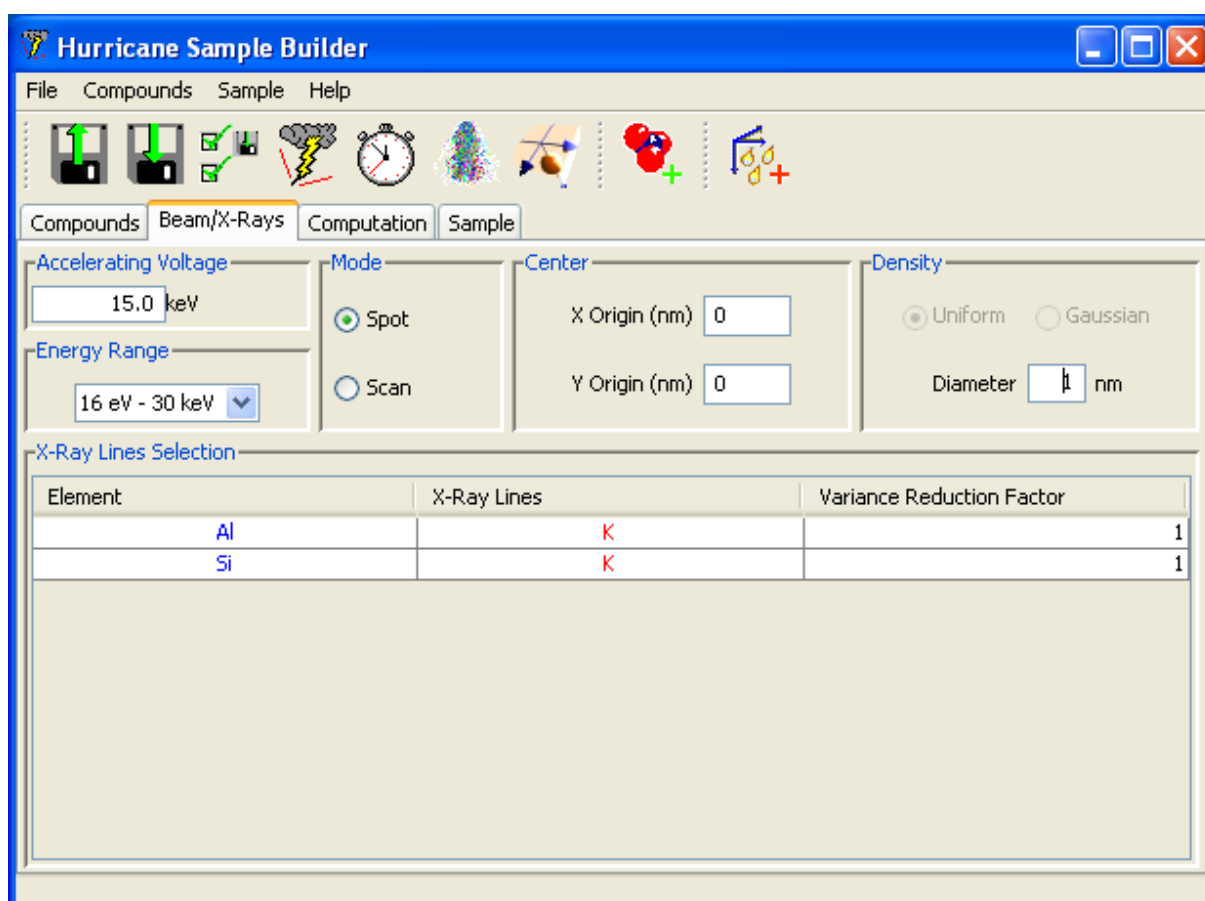


La définition des composés est maintenant terminée.

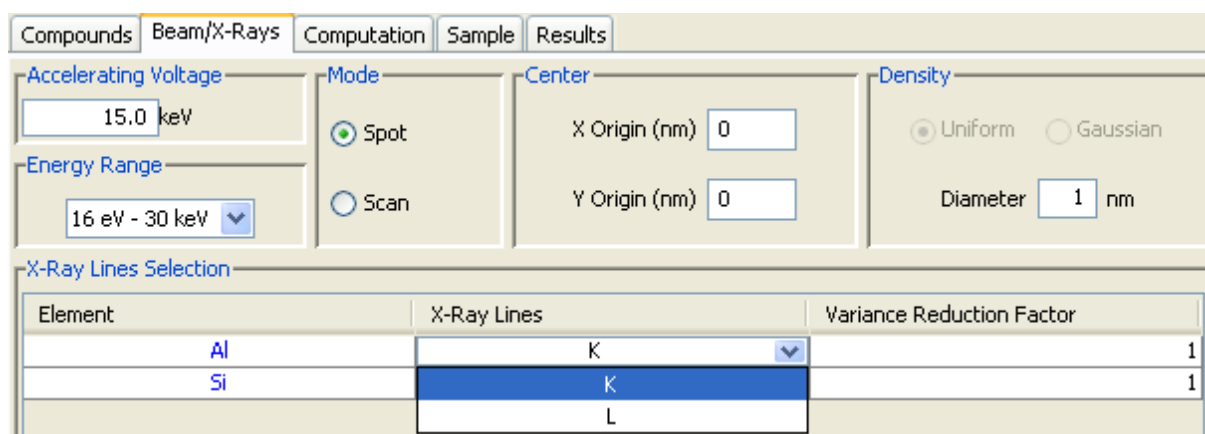
Conditions expérimentales

L'onglet Beam/X-Rays

Cliquer sur l'onglet Beam/X-Rays, l'interface prend alors l'aspect suivant :



Pour sélectionner la raie étudiée pour chaque élément, cliquer avec le bouton gauche de la souris sur l'intersection de la ligne correspondante avec la colonne X-Ray Lines.



Il est à noter que la liste des raies possibles peut varier suivant la tension d'accélération. Dans l'exemple en cours, si l'on modifiait la tension d'accélération à 1 kV, seules les raies L pourraient être théoriquement choisies, et donc la liste déroulante disparaîtrait (note : la souris doit être utilisée pour cliquer avec le bouton gauche dans une autre case que celle de la tension d'accélération pour que le changement soit pris en compte), mais l'étude des raies L de l'aluminium et du silicium n'ayant pas de sens au regard des capteurs actuels, cela signifierait simplement qu'il faudrait augmenter la tension d'accélération. Si nécessaire, remettre la tension d'accélération à 15 kV et re-sélectionner les raies K.

Depuis Hurricane 1.5, il est possible de personnaliser la gamme d'énergie, bien que la gamme par défaut devrait suffire dans la plupart des cas (à condition que la tension d'accélération ne dépasse pas l'énergie maximum de la gamme). Voir la section sur la personnalisation de la gamme d'énergie pour plus d'informations.

Définition de la géométrie

Principes pour la simulation

Le principe opératoire de la simulation impose le prédécoupage de l'échantillon en une grille tridimensionnelle de cellules. Le choix des dimensions de cette grille est borné par deux principes contradictoires :

D'une part, la boîte de calcul doit être prise comme assez grande, sinon les trajectoires électroniques seront interrompues par une intersection précoce avec les bords, ce qui faussera de façon évidente le nombre des électrons rétrodiffusés, mais aussi la production des autres interactions considérées. Plus la tension sera élevée, plus la boîte devra être grande. Enfin, les ordres de grandeur de taille peuvent varier considérablement suivant les éléments considérés (notamment suivant leur densité).

D'autre part, si l'on souhaite exploiter des profils de résultats plus ou moins finement, la cellule unité doit être la plus petite possible. Cependant, la finesse des détails géométriques ne dépend plus de cette cellule unité (alors que c'était le cas avec hurricane 1.0). De plus, le nombre total de cellules unités ne doit pas devenir trop grand sous peine d'épuiser les ressources mémoires de l'ordinateur. Typiquement, on devrait éviter d'aller au-delà de 120x120x120 cellules-unités.

En pratique, c'est cette dernière limite qu'il convient de garder à l'esprit. L'ajustement de la boîte totale pourra se faire au début de la simulation comme on le verra plus loin.

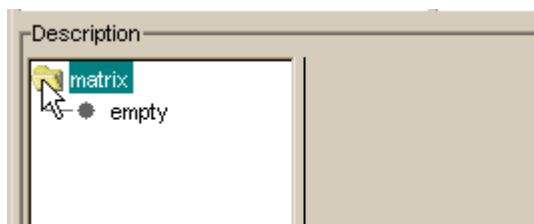
Cliquer sur l'onglet Sample et définir une boîte de calcul XxYxZ de 1000x1000x500 avec une cellule unité de 10x10x10.

Computation Box	Unit Cell
Size in X (nm) 1000	Unit in X (nm) 10
Size in Y (nm) 1000	Unit in Y (nm) 10
Size in Z (nm) 500	Unit in Z (nm) 10

NOTE

l'axe Z est orienté dans le sens de la profondeur croissante de l'échantillon. L'origine Z=0 correspond à la surface de l'échantillon, tandis que le point de coordonnées X=0 et Y=0 correspond à son centre.

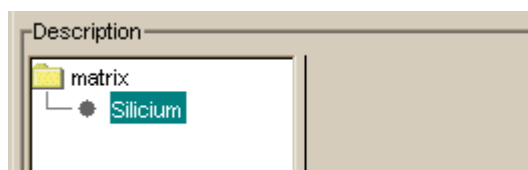
Une fois la boîte de calcul choisie, il faut définir la répartition des différents composés dans l'échantillon. Pour définir un substrat de silicium, double-cliquer avec le bouton gauche de la souris sur le dossier matrix :



Double-cliquer toujours avec le bouton gauche de la souris sur le point en-dessous de matrix. Une fenêtre de choix du composé doit apparaître :

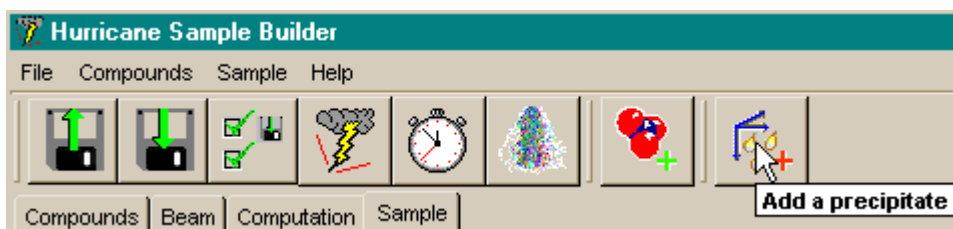


Sélectionner le composé Silicium et cliquer sur le bouton OK. Le composé choisi doit avoir remplacé empty :

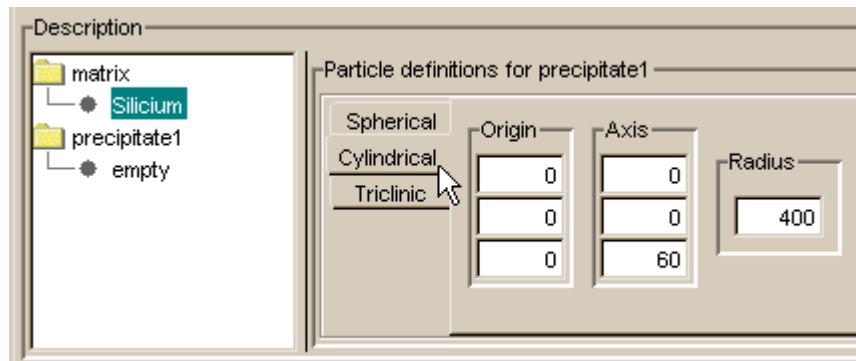


Ajout d'un cylindre

Insérer maintenant en affleurement de surface une galette d'aluminium cylindrique d'épaisseur 60 nanomètres et de rayon 400 nanomètres. Pour cela, cliquer sur le bouton suivant de la barre principale de boutons (ou passer par le menu Sample) :



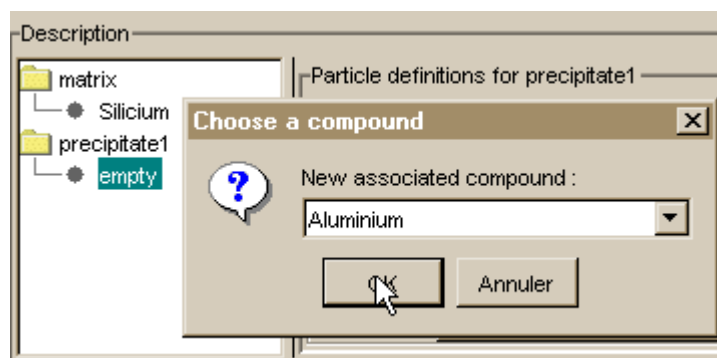
Le cadre Description est alors mis-à-jour avec un nouveau dossier precipitate1 et un panneau de choix du type de particule. Cliquer sur Cylindrical et remplir les champs de coordonnées pour obtenir la vue suivante :



NOTE

le point Origin est situé au centre d'une face circulaire du cylindre, et le vecteur Axis donne à la fois la direction de l'axe et sa longueur.

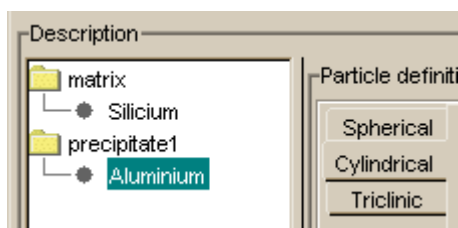
Enfin, ne pas oublier de sélectionner Aluminium comme composé associé au cylindre :



NOTE

le fait de cliquer sur le bouton Annuler de cette fenêtre affecte le composé vide (empty) au contenu du cylindre.

Sélectionner le composé Aluminium et cliquer sur le bouton OK. Le composé choisi doit avoir remplacé empty :



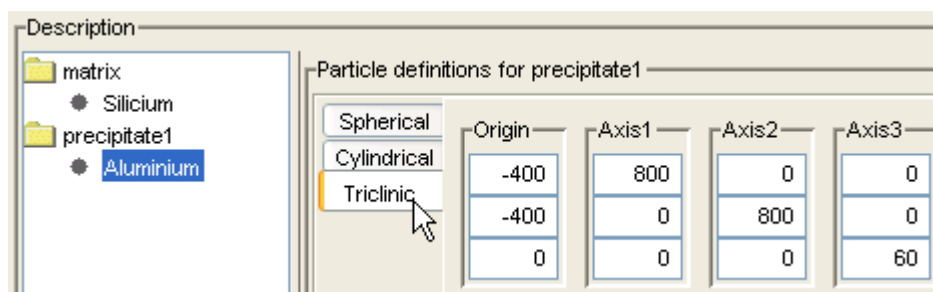
NOTE

il est possible de changer le nom precipitate1 de la même façon que le nom des composés.

Autres primitives géométriques

A part le cylindre, deux autres objets géométriques sont disponibles : la sphère et le rhomboèdre (qualifié ici de triclinique). La sphère est facilement définie par son centre et son rayon.

Voici la définition d'un cube d'aluminium de 800x800x60 nm en utilisant l'objet triclinique, pour un objet analogue du cylindre précédent:



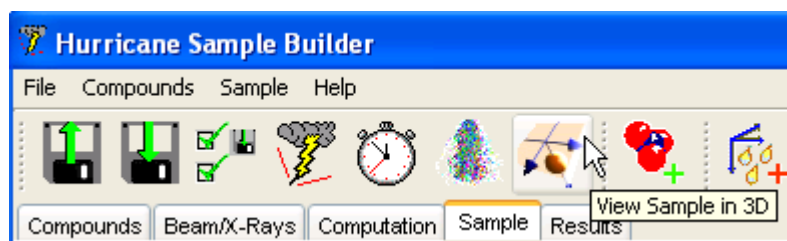
NOTE

placés au point Origin, les 3 axes vecteurs donnent longueur et direction des bords principaux.

Vue 3D de la géométrie

Vue par défaut

A partir de Hurricane 1.3, l'échantillon peut être visualisé en 3 dimensions. Cliquer sur le bouton View Sample in 3D pour ouvrir la fenêtre 3D :



NOTE

si la fenêtre est déjà ouverte, le clic sur le bouton provoque un réaffichage de l'échantillon à partir du point de vue par défaut.

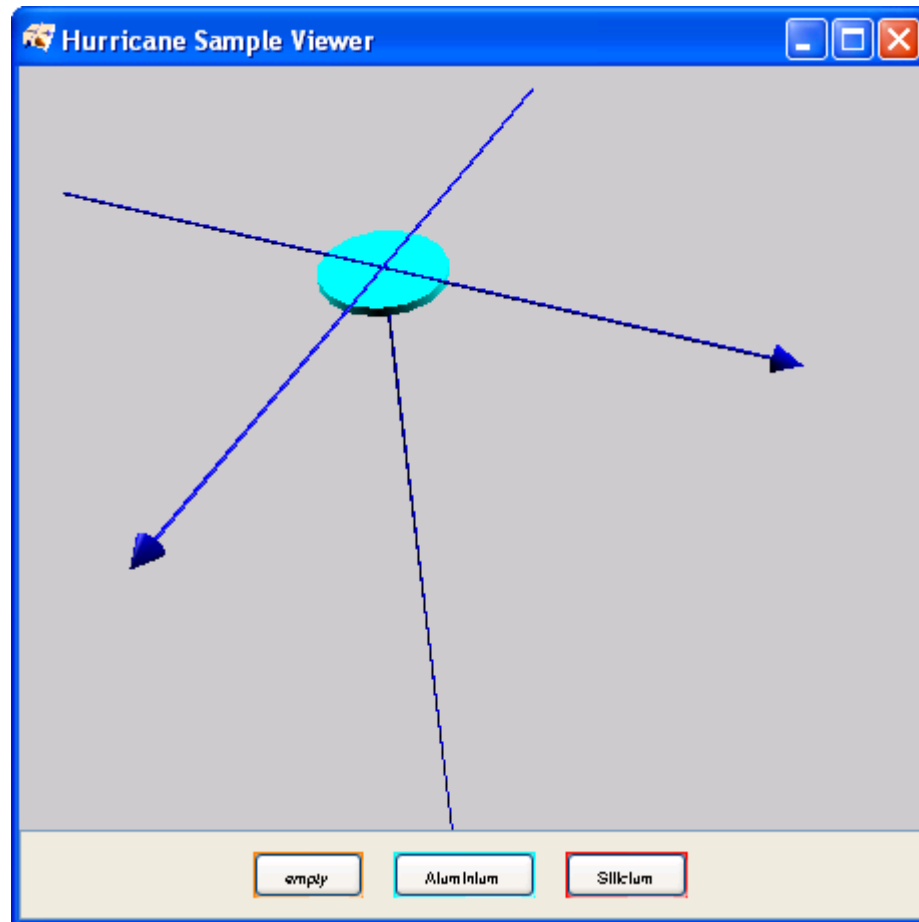
Dans la fenêtre 3D, l'échantillon est montré à partir du point de vue par défaut :

- L'échantillon est vu du dessus du plan X-Y, l'axe Z plonge vers l'arrière plan (c'est-à-dire dans le sens de la profondeur de l'échantillon).
- Le centre de la scène correspond à $X=0$ et $Z=0$.
- L'axe des X est dirigé vers la droite, et l'axe des Y vers le bas.

La vue 3D peut être déplacée à la souris :

- Le bouton gauche permet de tourner l'échantillon.
- Le bouton droit permet de le translater.
- La molette permet de grossir ou diminuer l'échantillon.

Voici une vue possible après déplacements à la souris :



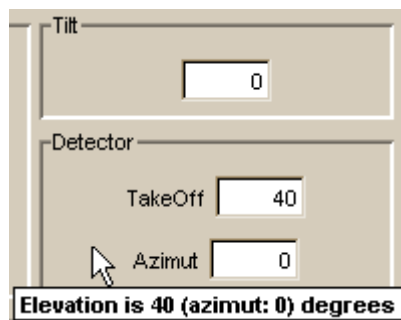
La vue 3D peut aussi être contrôlée au clavier :

- Les flèches actionnent la rotation de l'échantillon autour des axes X et Y.
- Les touches PagePrec/PageSuiv actionnent la rotation de l'échantillon autour de l'axe Z.
- Les mêmes touches combinées avec Alt actionnent la translation suivant chaque axe.
- Les mêmes touches combinées avec Maj accélèrent les mouvements.
- Les touches Plus et Moins contrôlent le grossissement.
- La touche Debut repositionne la vue au point par défaut.

Paramètres du détecteur et angle de tilt

L'onglet Sample

L'onglet Sample comprend aussi un encadré permettant la modification des paramètres du détecteur, ainsi que de l'angle de tilt :



The screenshot shows a software interface with a beige background. At the top, there is a section labeled 'Tilt' with a text input field containing the value '0'. Below this is a section labeled 'Detector'. Inside the 'Detector' section, there are two more input fields: 'TakeOff' with the value '40' and 'Azimut' with the value '0'. A mouse cursor is pointing at the 'Azimut' field. At the bottom of the interface, a status bar displays the text 'Elevation is 40 (azimut: 0) degrees'.

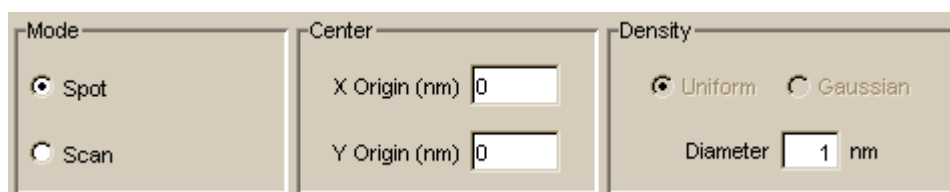
NOTE

l'angle azimuthal est compté dans le plan X-Y dans le sens trigonométrique (inverse des aiguilles d'une montre) à partir de l'axe des X en degrés. L'angle d'orientation du détecteur (TakeOff) est positif au-dessus de l'échantillon et compté à partir du plan horizontal (X-Y) en degrés. L'angle de tilt (inclinaison de l'échantillon) est compté dans le sens trigonométrique dans le plan (X-Z) à partir de l'axe X, l'échantillon pivotant autour de l'axe Y. On rappelle que l'axe des Z est orienté vers le bas.

Autres paramètres du faisceau

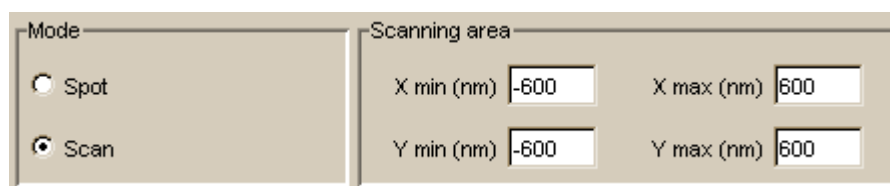
Modes Spot et Scan

L'onglet Beam inclut le réglage d'autres paramètres du faisceau :



The screenshot shows a software interface for beam parameters. It is divided into three main sections: 'Mode', 'Center', and 'Density'. In the 'Mode' section, the 'Spot' radio button is selected. The 'Center' section has two input fields: 'X Origin (nm)' and 'Y Origin (nm)', both set to '0'. The 'Density' section has two radio buttons: 'Uniform' (selected) and 'Gaussian'. Below them is a 'Diameter' input field set to '1' nm.

En mode Spot, le point d'impact (Center) du faisceau est définissable dans le plan X-Y. Note : l'origine est positionnée au centre de l'échantillon, le faisceau est vertical vers le bas lorsque le tilt est nul et son point d'impact est totalement indépendant de la taille de la cellule unité de l'échantillon. La défocalisation (Density) du faisceau est circulaire et uniforme avec un diamètre réglable en nanomètres.



The screenshot shows the same software interface but with the 'Scan' radio button selected in the 'Mode' section. The 'Scanning area' section contains four input fields: 'X min (nm)' and 'X max (nm)' both set to '600', and 'Y min (nm)' and 'Y max (nm)' both set to '-600'.

En mode Scan, les coordonnées du point d'impact du faisceau varient de manière aléatoire au cours de la simulation dans la zone rectangulaire définie dans le cadre Scanning area.

Paramètres de calcul

Paramètres de simulation

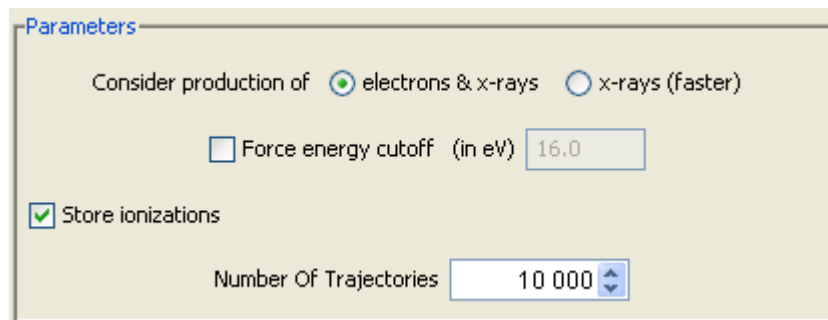
L'onglet Computation permet de régler quelques paramètres de calcul de la simulation :

The screenshot displays the Hurricane software interface with the 'Computation' tab selected. The interface is divided into several sections:

- Parameters:** Includes radio buttons for 'electrons & x-rays' (selected) and 'x-rays (faster)'. A checkbox for 'Force energy cutoff (in eV)' is present with a value of 16.0. A checked checkbox for 'Store ionizations' is shown. A 'Number Of Trajectories' spinner is set to 1 000 000.
- File Name:** A checked 'Automatic' checkbox is followed by the file name 'res_A1_Al_S2_Si_15_1000x1000x500_10x10x10'.
- Directories:** Shows paths for 'Samples' and 'Tracers', both set to 'C:\Program Files\Hurricane'.
- Trajectories:** Includes a 'Store' checkbox, an 'As %' checkbox, and input fields for 'First' (0) and 'Last' (100). A 'Store all BSEs' checkbox is also present.
- Tracers:** A table listing elements and their corresponding file names.

Element	FileName
Al	Auto
Si	Auto

Dans le cadre Parameters, le paramètre le plus important est le nombre de trajectoires électroniques à simuler. Pour des raisons statistiques, ce paramètre devrait être conservé à une valeur élevée (typiquement un million), avec cependant l'inconvénient d'un calcul qui peut être long (à compter en heures). Pour des raisons pratiques de temps de calcul, on peut le diminuer avec prudence suivant notamment les événements que l'on veut étudier (la production d'électrons rétrodiffusés est moins exigeante que celle d'ionisations) et suivant l'énergie et la défocalisation du faisceau (l'exigence croît avec la tension d'accélération et le diamètre de défocalisation). Dans le cas qui nous intéresse, on propose de le positionner à 10000.



Parameters

Consider production of ☒ electrons & x-rays ☐ x-rays (faster)

☐ Force energy cutoff (in eV) 16.0

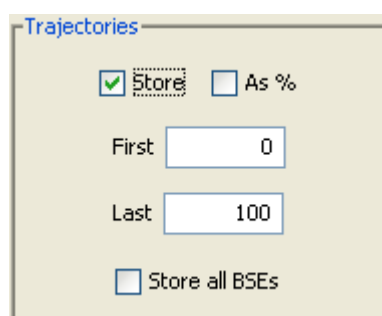
☒ Store ionizations

Number Of Trajectories 10 000

NOTE

on ne recommande pas de changer les autres paramètres de ce cadre. Il est certes possible de choisir de raccourcir les trajectoires électroniques avec l'option x-rays (faster) qui prend en compte une énergie de coupure en dessous de laquelle aucune ionisation n'est possible (c'est donc un gain de temps de calcul), mais cela entraîne un biais inacceptable dans la détermination des électrons rétrodiffusés. De façon intermédiaire, il est possible (depuis Hurricane 1.5) d'augmenter l'énergie de coupure (cocher Force energy cutoff) avec les mêmes gains et inconvénients, tout en prenant garde à ce que cette valeur ne soit pas inférieure à l'énergie minimale de la gamme d'énergie choisie. Inversement, on peut choisir de ne pas conserver les ionisations (décocher Store ionizations) dans chaque boîte unité (c'est donc seulement un gain de capacité mémoire), mais il n'est alors pas possible de calculer l'intensité émergente des éléments.

En cochant la case Store du cadre Trajectories, on peut conserver les trajectoires simulées indiquées de la première (First) à la dernière (Last) pour affichage ultérieur :



The image shows a dialog box titled "Trajectories". Inside, there are two checkboxes: "Store" (checked) and "As %" (unchecked). Below these are two input fields: "First" with the value "0" and "Last" with the value "100". At the bottom, there is another checkbox labeled "Store all BSEs" which is unchecked.

NOTE

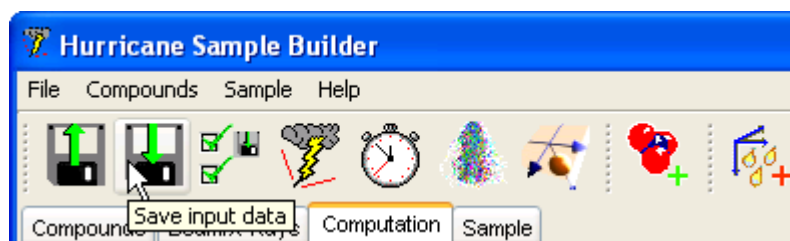
il est possible de spécifier l'intervalle en pourcentage du nombre total de trajectoire. On ne le recommande cependant pas, d'abord parce que l'affichage devient confus au-delà de 300 trajectoires, et ensuite parce que le fichier temporaire généré (xeyeze.dat) devient vite d'une taille incontrôlable.

Les cadres Directories et Tracers peuvent être ignorés dans la version 1.2 de Hurricane : Directories est purement informatif (le répertoire de stockage des échantillons ne peut être modifié) et Tracers (calcul automatique de pseudo-standards) est réservé pour une version ultérieure de Hurricane. Le cadre Filename n'a d'importance qu'en mode de traitement par lots (dit Batch).

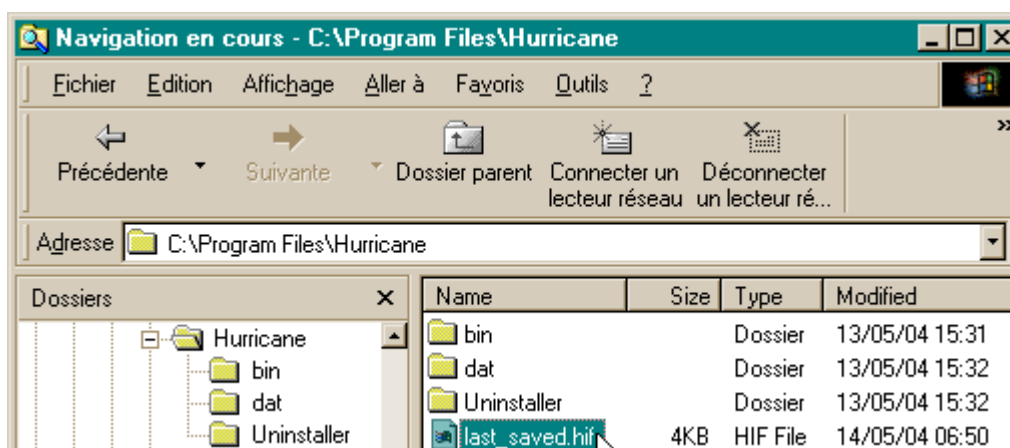
Sauvegarde des paramètres

Sauvegarde de la configuration

Pour sauver (presque) tous les paramètres précédemment entrés, cliquer sur le bouton suivant (ou passer par le menu File→Save) :



Cette action a pour effet de créer un fichier de sauvegarde last_saved.hif dans le répertoire C:\Program Files\Hurricane :



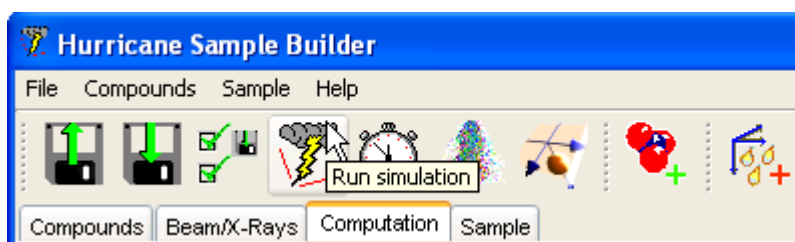
NOTE

attention, toute sauvegarde antérieure est écrasée sans avertissement !

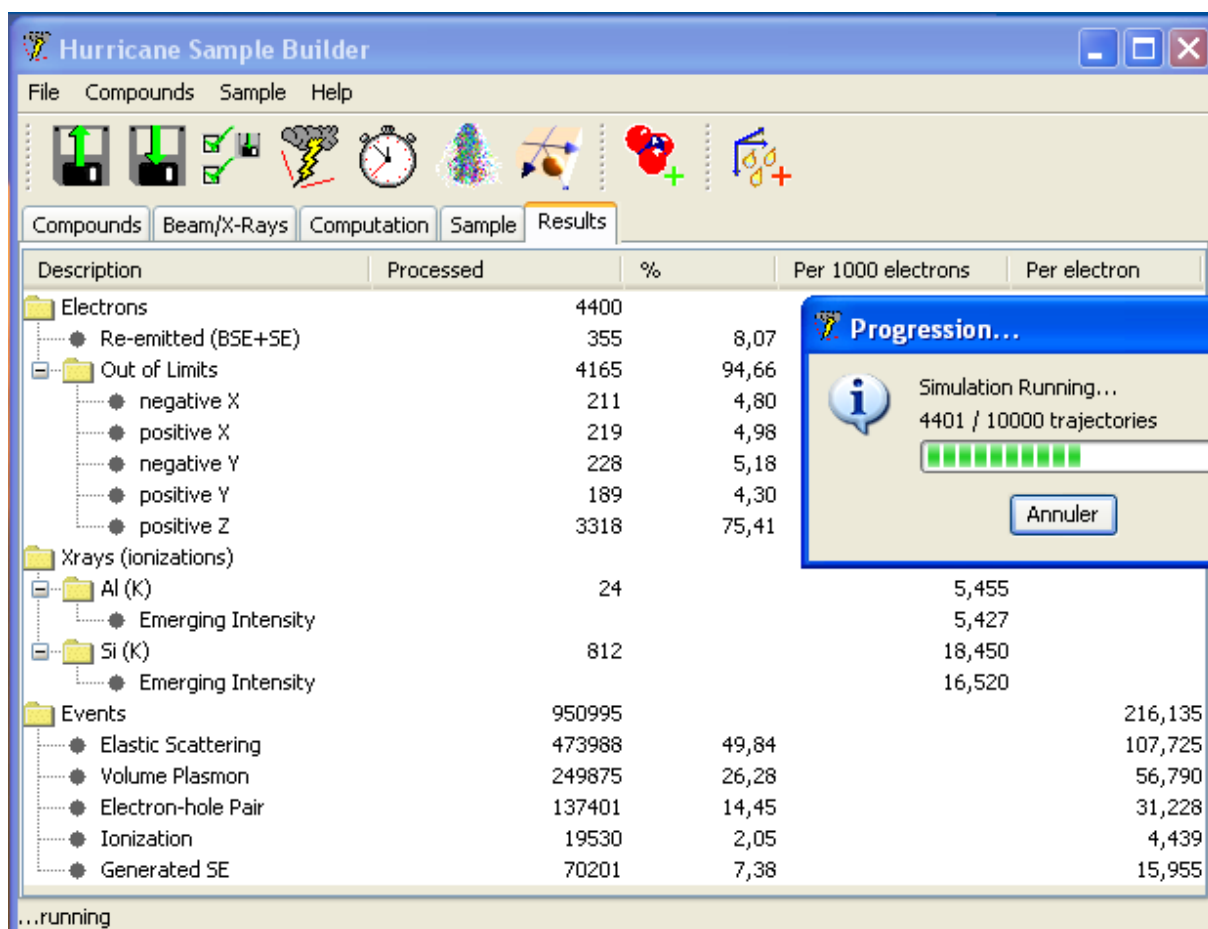
Lancement de la simulation

Commencer la simulation

Pour lancer la simulation, cliquer sur le bouton suivant (ou passer par le menu File→Run) :



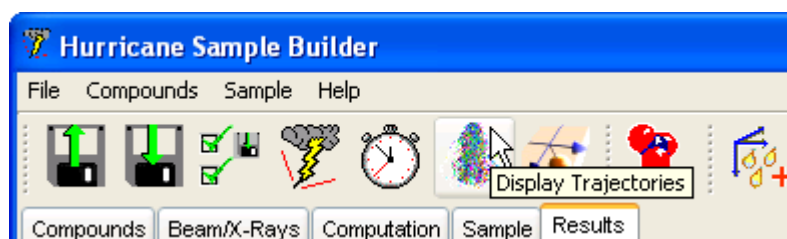
Le calcul doit alors se lancer et la fenêtre principale prend l'aspect suivant :



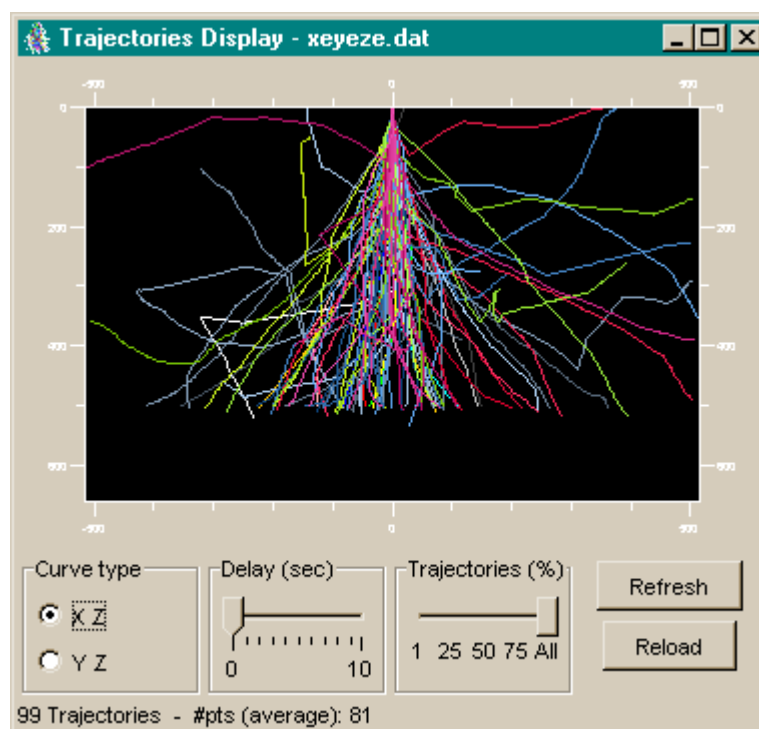
Réglage des dimensions de la boîte de calcul

Régler les dimensions

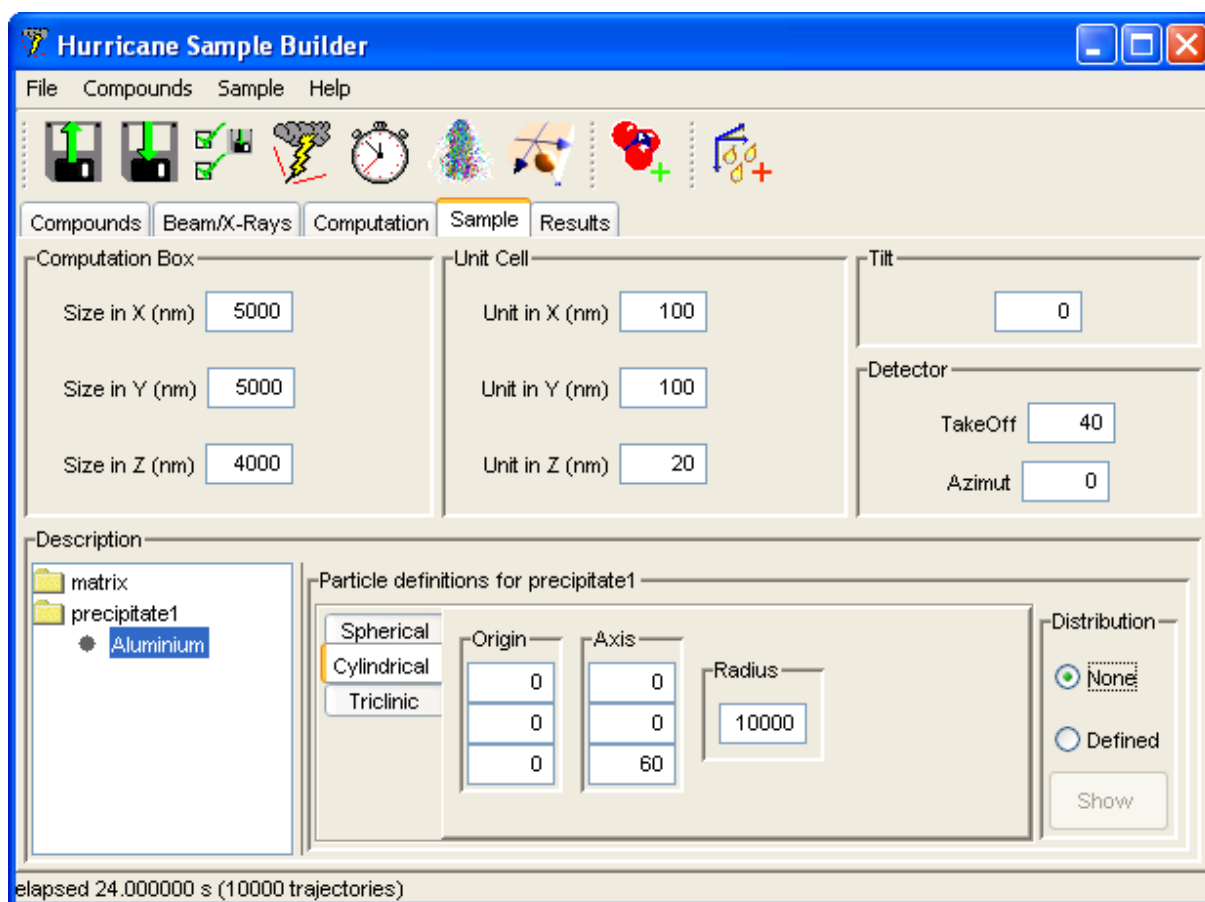
Il apparaît immédiatement que le taux d'électrons hors limites (Out of Limits) de la boîte de calcul est bien trop élevé (plus de 90%). On peut aussi s'en apercevoir à la visualisation des trajectoires en cliquant sur le bouton suivant :



Ce qui a pour effet de faire apparaître la fenêtre suivante :



Il est absolument indispensable de ne pas dépasser le taux de 1,5% d'électrons hors limites. Il est donc nécessaire de régler expérimentalement les dimensions de la boîte de calcul et de lancer plusieurs fois la simulation jusqu'à atteindre ce but. Voici une proposition concernant l'exemple donné :



NOTE

la largeur de la galette d'aluminium a été considérablement élargie pour en faire une simili-couche mince. Ne pas oublier de sauvegarder la configuration en appelant le menu File→Save.

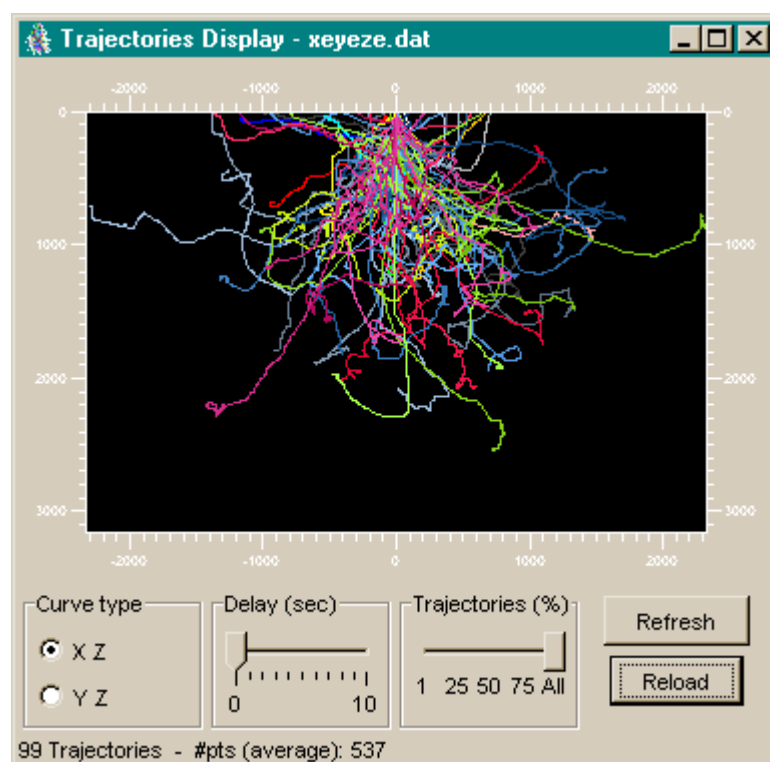
Résultats

Fenêtre de résultat

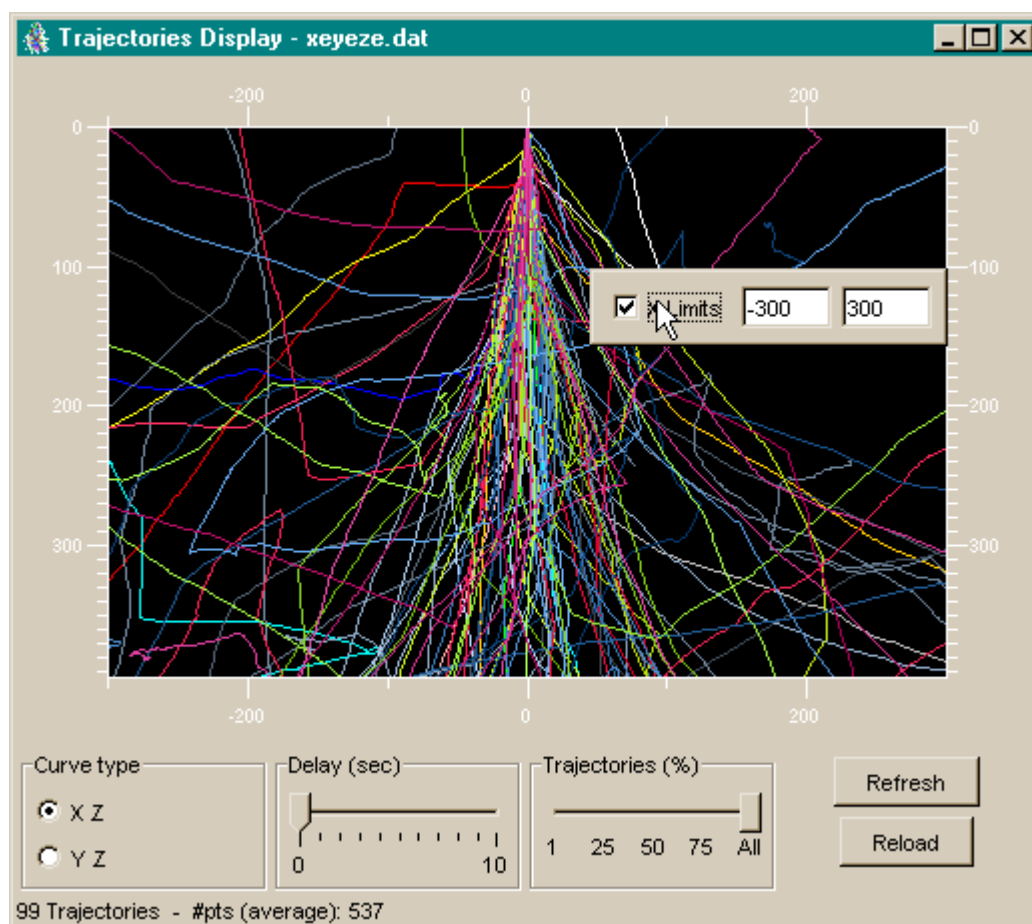
Voici les résultats obtenus :

Compounds	Beam/X-Rays	Computation	Sample	Results
Description	Processed	%	Per 1000 electrons	Per electron
Electrons	10000			
● Re-emitted (BSE+SE)	2266	22,66		
+ Out of Limits	30	0,30		
Xrays (ionizations)				
Al (K)	63		6,300	
● Emerging Intensity			6,263	
Si (K)	964		96,400	
● Emerging Intensity			81,030	
Events	14774855			1477,486
● Elastic Scattering	7301994	49,42		730,199
● Volume Plasmon	3831114	25,93		383,111
● Electron-hole Pair	2243514	15,18		224,351
● Ionization	272746	1,85		27,275
● Generated SE	1125487	7,62		112,549

Voir aussi le contenu de la fenêtre des trajectoires en cliquant sur le bouton Reload :



A partir de la version 1.2.1 de Hurricane, il est possible de fixer les limites de l’affichage sur l’axe X des trajectoires. Il suffit pour cela de cliquer avec le bouton droit de la souris dans la fenêtre des trajectoires pour faire apparaître un menu contextuel, de remplir les champs des limites voulues et de cocher la case X Limits :



De plus, il est possible de déplacer les trajectoires dans la fenêtre en déplaçant la souris avec le bouton gauche maintenu enfoncé. Et la molette de la souris (lorsqu’elle en comporte une) permet en la tournant d’agrandir ou de diminuer le champ de vision, à condition cependant que le bouton X Limits ait été coché.

Réduction de la variance des ionisations

Techniques de réduction de variance

La fenêtre Results ci-dessous montre que moins de 100 ionisations Aluminium K ont été produites, ce qui est un nombre d'événements très bas, nettement en dessous de l'usage statistique dans le monde aléatoire. Or ce problème est fréquent du fait de la nature des ionisations qui sont des événements beaucoup moins probables que les autres interactions.

Compounds	Beam/X-Rays	Computation	Sample	Results
Description	Processed	%	Per 1000 electrons	Per electron
Electrons	10000			
Re-emitted (BSE+SE)	2430	24,30		
Out of Limits	34	0,34		
Xrays (ionizations)				
Al (K)	55		5,500	
Emerging Intensity			5,469	
Si (K)	931		93,100	
Emerging Intensity			78,220	
Events	14614164			1461,416
Elastic Scattering	7227712	49,46		722,771
Volume Plasmon	3790477	25,94		379,048
Electron-hole Pair	2214338	15,15		221,434
Ionization	270433	1,85		27,043
Generated SE	1111204	7,60		111,120

A partir de la version 1.3 de Hurricane, il est possible d'appliquer des techniques de réduction de variance pour produire plus de ionisations sans augmenter le nombre d'électrons incidents, proportionnel au temps de calcul. Dans la fenêtre de l'onglet Beam/X-Rays, il est possible de renforcer sélectivement la probabilité des ionisations par raie en choisissant le facteur (par exemple, on appliquera un facteur 100 pour Al/K et 10 pour Si/K):

Compounds	Beam/X-Rays	Computation	Sample	Results
Accelerating Voltage 15.0 keV		Mode <input checked="" type="radio"/> Spot <input type="radio"/> Scan	Center X Origin (nm) 0 Y Origin (nm) 0	
Energy Range 16 eV - 30 keV		Density <input checked="" type="radio"/> Uniform <input type="radio"/> Gaussian Diameter 1 nm		
X-Ray Lines Selection				
Element	X-Ray Lines	Variance Reduction Factor		
Al	K	100		
Si	K	10		

En relançant la simulation, Hurricane produit plus de ionisations, améliorant grandement les résultats d'un point de vue statistique. Pour compenser les biais induits par ce fonctionnement, les ionisations en excès n'ont pas d'influence sur les variations de trajectoire, et les facteurs de réduction de variance sont inversement pris en compte dans les calculs des intensités brutes et émergentes.

Compounds Beam/X-Rays Computation Sample Results				
Description	Processed	%	Per 1000 electrons	Per electron
Electrons	10000			
● Re-emitted (BSE+SE)	2375	23,75		
+ Out of Limits	26	0,26		
Xrays (ionizations)				
Al (K)	5330		5,330	
● Emerging Intensity			5,300	
Si (K)	9528		95,280	
● Emerging Intensity			80,160	
Events	14679427			1467,943
● Elastic Scattering	7261895	49,47		726,190
● Volume Plasmon	3808840	25,95		380,884
● Electron-hole Pair	2222780	15,14		222,278
● Ionization	270872	1,85		27,087
● Generated SE	1115040	7,60		111,504

Utilisation du Batch

Introduction

L'exemple précédent permet de calculer un cas sur un échantillon. Comment évolueraient les grandeurs calculées si l'épaisseur de la couche d'aluminium augmentait ?

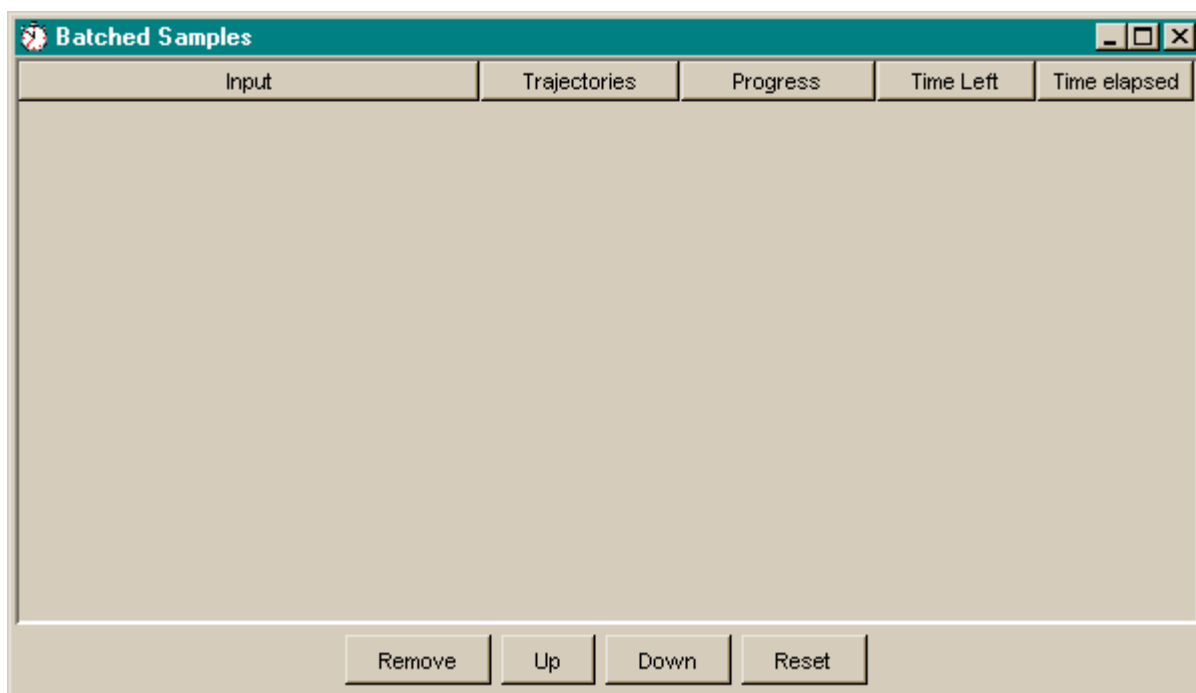
De façon générale, on souhaite généralement lancer plusieurs simulations sur des échantillons similaires pour lesquels seul un paramètre est modifié (par exemple, la tension d'accélération, ou bien l'angle de tilt). Malheureusement, la simulation nécessite un temps de calcul conséquent au bout duquel il faudrait modifier le paramètre choisi et ré-itérer le processus.

Le traitement par lots (Batch) permet d'automatiser cette procédure de façon à décharger l'utilisateur de la tâche fastidieuse de reconfigurer les paramètres et de relancer le calcul à chaque étape.

Pour faire apparaître la fenêtre de gestion de batch, cliquer sur le bouton correspondant :



ce qui fait apparaître la fenêtre suivante :

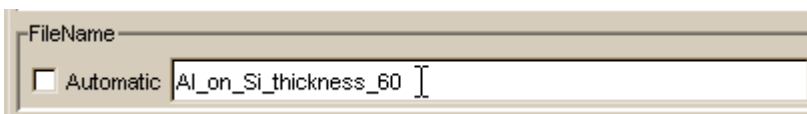


Chargement d'une configuration de calcul

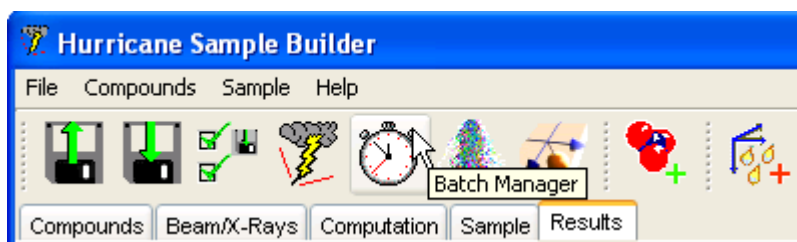
Avant de placer les paramètres d'entrée actuels dans la fenêtre de batch, il faut d'abord choisir le nom du fichier de sortie. Cliquer sur l'onglet Computation, dans lequel le contenu du cadre FileName doit correspondre à ce qui suit:



Pour désactiver la génération automatique du nom, décocher la case Automatic. Taper alors le nom désiré, par exemple :



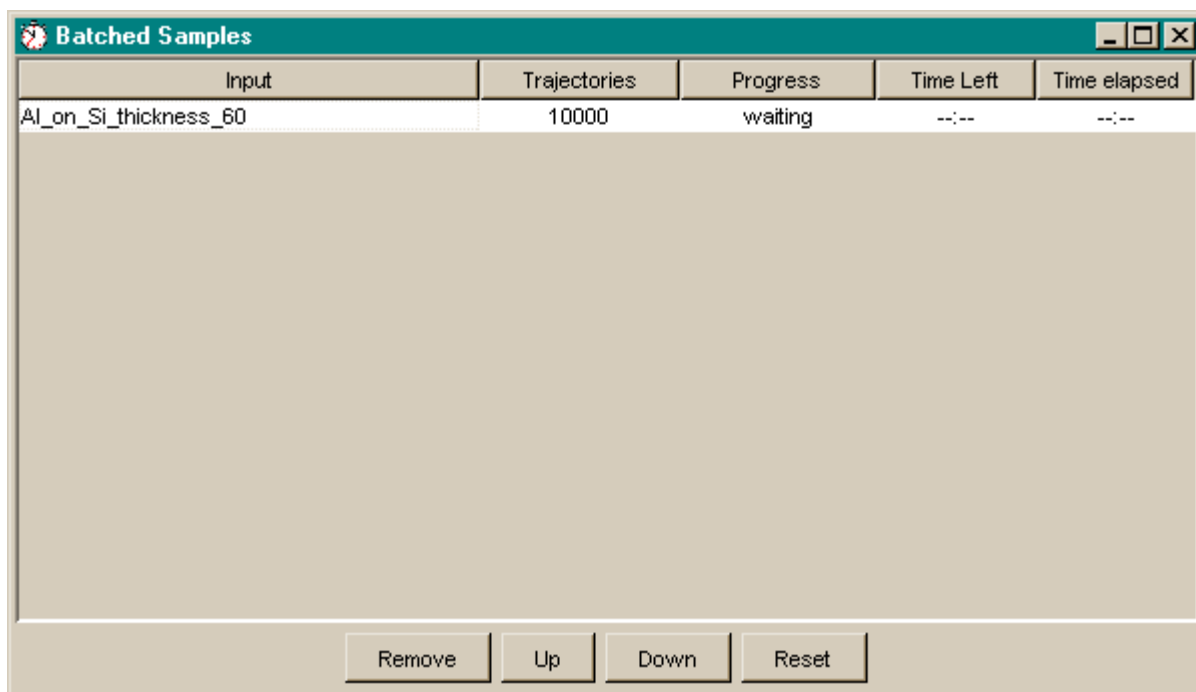
Pour ajouter la configuration de calcul dans la fenêtre de batch, cliquer sur le bouton suivant (ou passer par le menu File→Batch) :



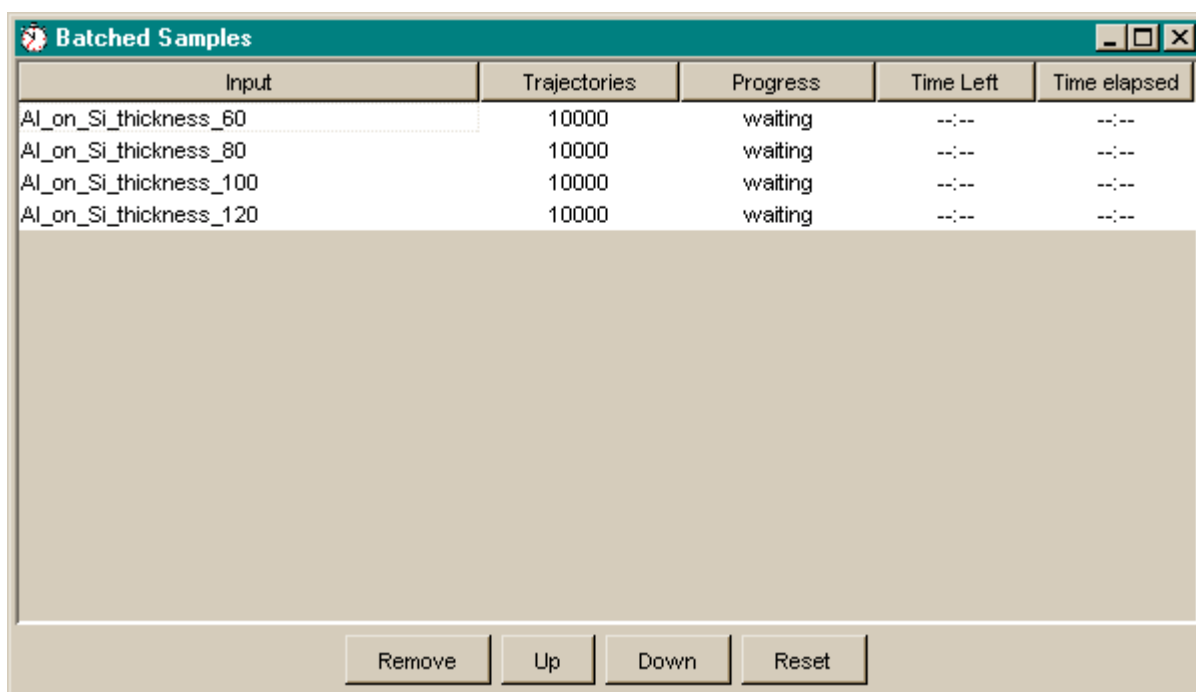
NOTE

l'effet de ce bouton varie suivant que la fenêtre de batch est ouverte ou non : ouverte, la configuration courante y est chargée à la fin de la liste des tâches, fermée, la fenêtre est montrée.

Le contenu de la fenêtre de batch doit ressembler à ce qui suit :

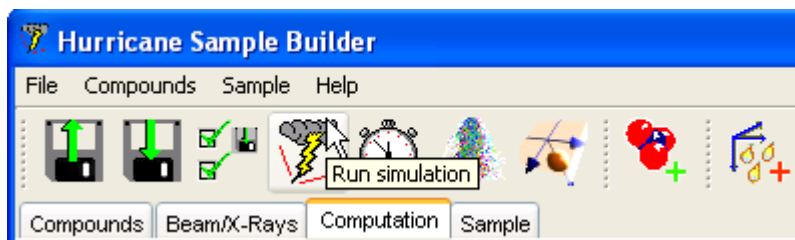


Pour étudier les cas des épaisseurs d'aluminium 80, 100 et 120, il suffit de modifier le paramètre d'épaisseur dans le cadre Description de l'onglet Sample, de modifier le nom du fichier de résultats et de re-cliquer sur le bouton du batch (ou de passer par le menu File→Batch). La fenêtre de batch doit maintenant ressembler à ceci :

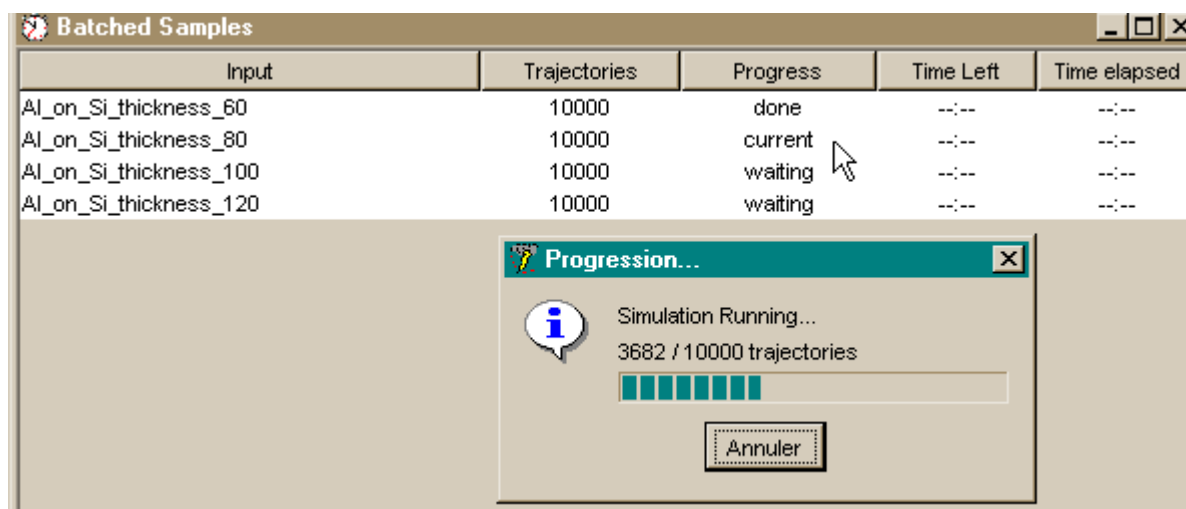


Lancement de la simulation en batch

Pour lancer la simulation , cliquer sur le bouton suivant (ou passer par le menu File→Run) :



Le calcul doit alors se lancer et la fenêtre de batch prend l'aspect suivant :



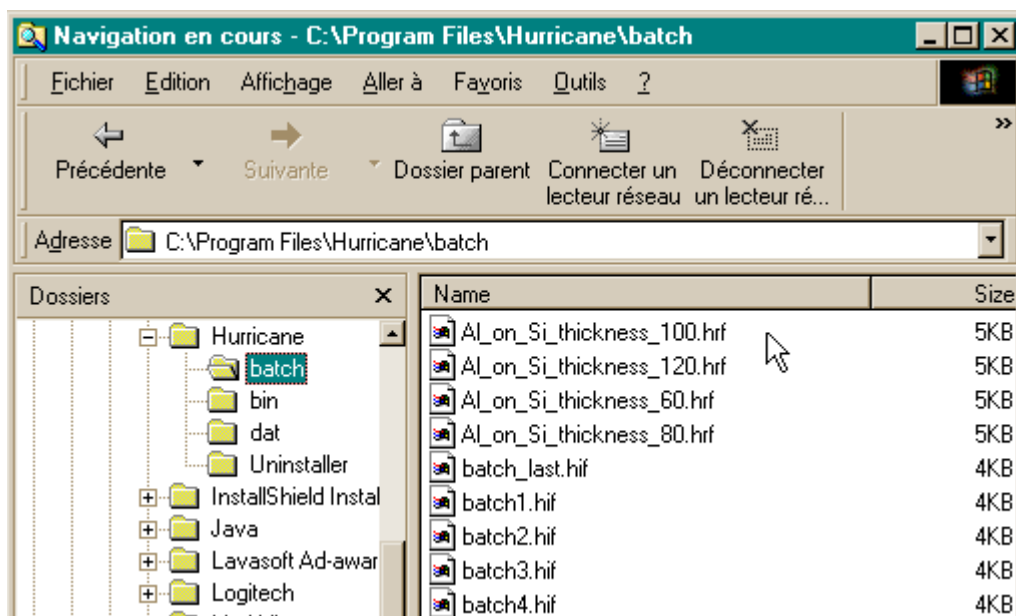
NOTE

il est possible d'interrompre la simulation en cours en cliquant sur le bouton Annuler. Dans ce cas, une fenêtre propose d'interrompre complètement le batch ou non : si la réponse est non, la simulation continue à partir de l'échantillon suivant, si la réponse est oui, l'itération est complètement arrêtée. Il est toujours possible de relancer le batch, qui repartira de la première tâche interrompue (canceled) ou en attente (waiting).

Résultats des simulations en batch

Pour afficher le résultat d'une simulation, double-cliquer sur la ligne correspondante de la fenêtre du batch, ce qui aura pour conséquence de mettre à jour tous les paramètres et résultats et de montrer l'onglet Results dans la fenêtre principale.

Les fichiers correspondants ont été créés dans le répertoire C:\Program Files\Hurricane\batch :



NOTE

attention, en cas de relance telle quelle des simulations en batch, ces fichiers seront écrasés avec les nouveaux résultats sans avertissement !

Il est toujours possible lors d'une session ultérieure de Hurricane de relire le contenu de ces fichiers un par un en le sélectionnant avec le bouton gauche de la souris maintenu enfoncé dans l'explorateur de fichier du système et en le lâchant dans la fenêtre principale de Hurricane.

Pour exporter une donnée de résultat (une seule à la fois) vers une application externe, triple-cliquer dans la case de la donnée pour la sélectionner, copier dans le presse-papier par la combinaison de touches CTRL-C, et coller le résultat dans l'application externe (typiquement un tableur).

Enfin, dans l'exemple précédent, il ne faudrait pas oublier de calculer en plus les standards purs d'Aluminium et de Silicium dans les mêmes conditions de façon à pouvoir normaliser les intensités émergentes comme les microanalystes ont l'habitude de le faire.

Personnalisation de la gamme d'énergie

Quand est-ce nécessaire ?

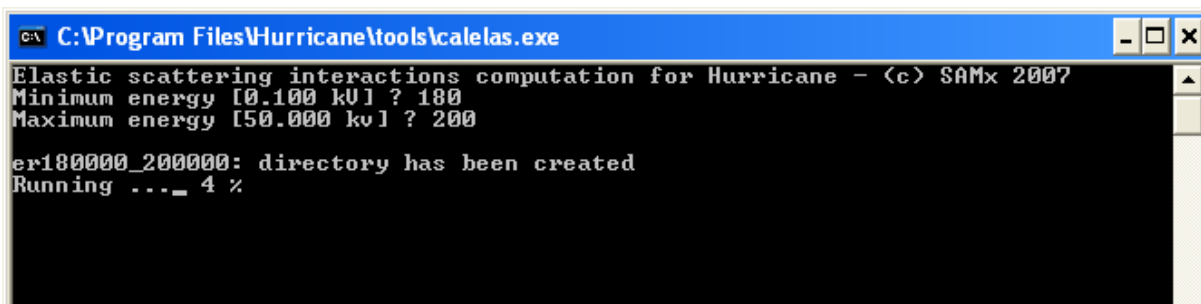
Par défaut, Hurricane prend en compte les énergies variant de 16 eV à 30 keV. Si cela suffit dans la plupart des cas, il arrive que ce domaine de variation soit insuffisant, notamment dans les deux cas suivants:

- La tension d'accélération dépasse le maximum des gammes disponibles (études en transmission).
- L'énergie de coupure n'est pas assez basse pour étudier les électrons de basse énergie.

Utilisation du programme « calelas »

Pour définir une nouvelle gamme d'énergie, une étape de calcul préalable est requise en dehors de l'interface graphique de Hurricane à l'aide d'un utilitaire spécial.

Le programme en ligne de commande calelas est disponible dans le répertoire C:\Program Files\Hurricane\tools. Une fois lancé en double-cliquant dessus, le programme demande les énergies minimale et maximale, puis effectue les calculs (à noter que le temps d'exécution peut être non négligeable, jusqu'à plus d'une demi-heure dans le cas des hautes énergies). Voici l'exemple du calcul de la gamme variant de 180 keV à 200 keV, typiquement utilisable dans l'étude d'échantillons minces en transmission :

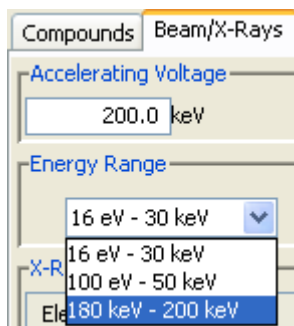


```
C:\Program Files\Hurricane\tools\calelas.exe
Elastic scattering interactions computation for Hurricane - (c) SAMx 2007
Minimum energy [0.100 kU] ? 180
Maximum energy [50.000 kv] ? 200

er180000_200000: directory has been created
Running ... 4 %
```

Sélection de la gamme d'énergie

Une fois que le calcul précédent est terminé, et après redémarrage de Hurricane, la nouvelle gamme est automatiquement disponible et sélectionnable dans la fenêtre à l'onglet Beam/X-Rays :



Classification des électrons sortants

Etude des électrons sortants

Dans les paragraphes précédents, on a accentué l'importance de bien dimensionner la boîte de calcul de façon à éviter qu'un nombre important d'électrons n'en intersectent les bords. Cependant, on peut être amené à s'intéresser précisément à ces électrons sortants, et notamment à leur direction et leur énergie.

A partir de Hurricane version 1.2, les électrons sortants sont automatiquement classés suivant leur direction (angles theta et phi de la géométrie sphérique) et leur énergie résiduelle dans six fichiers au format texte, chaque fichier contenant les répartitions angulaires et énergétiques des électrons sortants de chaque face de la boîte de calcul.

Les angles theta et phi sont comptés dans un repère relatif à chaque face concernée de la boîte de calcul. Chacun de ces repères locaux est construit comme un repère direct avec un axe local z orthogonal à la face concernée et dirigé vers l'extérieur de la boîte. L'angle phi varie entre 0 et 90 degrés et représente une déviation angulaire par rapport à l'axe z local (pour phi égal à 0, il n'y a donc pas de déviation et l'électron sort à la perpendiculaire de la face concernée). L'angle theta varie entre 0 et 360 degrés et représente l'orientation locale de la direction de sortie de l'électron projetée dans la face correspondante de la boîte. Il est compté dans le sens trigonométrique du repère local et son axe local x d'origine est toujours horizontal.

NOTE

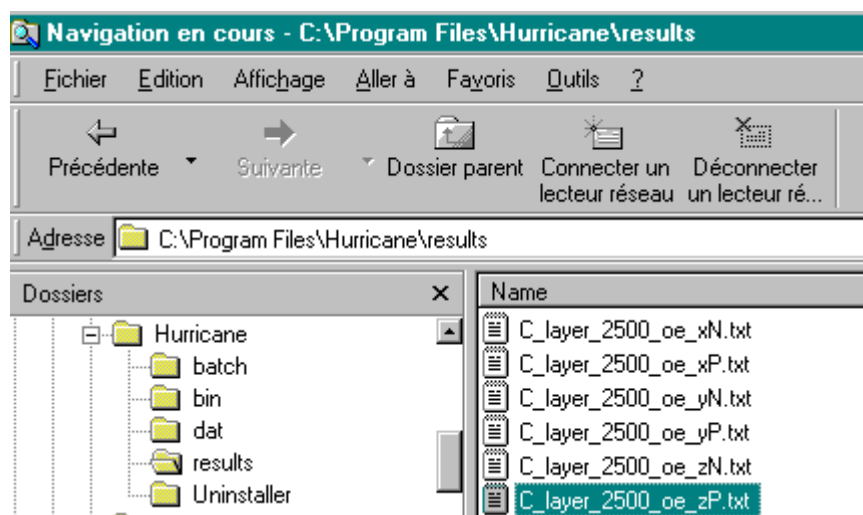
attention, en cas d'échantillon tilté, ces repères locaux seront également tiltés !

Fichiers de résultats de classification

Répertoire des résultats

Les fichiers de résultats de la classification se trouvent dans le répertoire C:\Program Files\Hurricane\results. Leurs noms commencent par la racine définie dans l'onglet Computation et finissent par le motif _oe_ suivi de deux lettres identifiant le plan de sortie de l'électron par l'axe orthogonal (x,y ou z) et le sens (N pour négatif, P pour positif).

Voici un exemple de contenu du répertoire C:\Program Files\Hurricane\results :



Importation d'un fichier de classification dans un tableur

Fichiers de résultats

Les fichiers de résultats, étant au format texte séparé par des tabulations, peuvent être ouverts dans n'importe quel éditeur de texte de base :

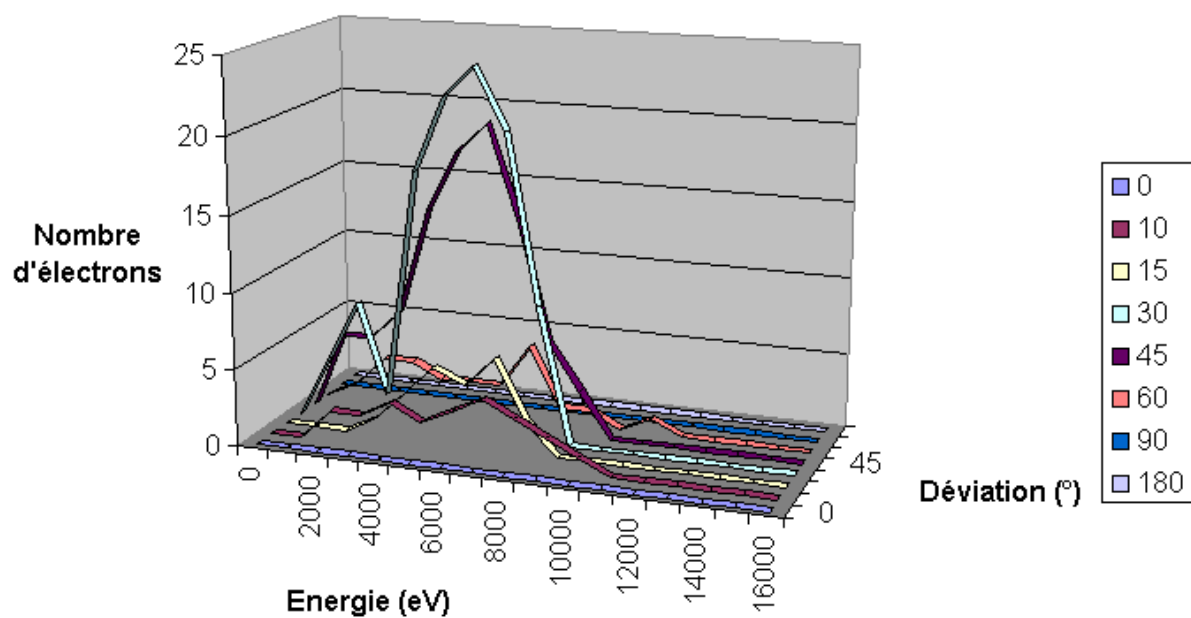
Fichier	Edition	Rechercher	?										
theta_deg	2			0.0	360.0								
phi_deg	9			-180.0	0.0	10.0	15.0	30.0	45.0	60.0	90.0	180.0	
energy	18			-1000000000.0	0.0	1000.0	2000.0	3000.0	4000.0	5000.0	6000.0		
7000.0	8000.0	9000.0	10000.0	11000.0	12000.0	13000.0	14000.0	15000.0	16000.0				
theta1	0.0	360.0											
phi1	-180.0	0.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
phi2	0.0	10.0	0	0	2	2	3	2	3	4	3		
2	1	0	0	0	0	0	0						
phi3	10.0	15.0	0	0	0	1	3	5	4	6	2		
0	0	0	0	0	0	0	0						
phi4	15.0	30.0	0	4	8	2	17	22	24	20	9		
0	0	0	0	0	0	0	0						
phi5	30.0	45.0	0	5	5	7	14	18	20	14	6		
3	0	0	0	0	0	0	0						
phi6	45.0	60.0	0	1	3	3	2	2	2	5	1		
1	0	1	0	0	0	0	0						
phi7	60.0	90.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
0	0	0	0	0	0	0	0						
phi8	90.0	180.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
0	0	0	0	0	0	0	0						

Le format de ces fichiers est particulièrement simple :

- Toutes les valeurs sont séparées par des tabulations.
- Les 3 premières lignes définissent les limites des classes des trois paramètres pris en compte, les angles theta et phi, et l'énergie résiduelle energy.
- Sur chaque ligne de définition des classes, on trouve un identifiant indiquant le paramètre concerné (theta_deg), le nombre de limites de classe, et toutes les valeurs des limites. L'extension _deg de l'identifiant indique que les angles sont comptés en degrés.
- Les comptages correspondants à chaque classe d'énergie sont ensuite rassemblés sur une ligne commençant par phi pour chaque classe de phi. Les bornes de l'intervalle de phi sont rappelées aux deuxième et troisième colonnes.
- Chaque ensemble de lignes de variation de phi est précédé d'une ligne commençant par theta et donnant les bornes de l'intervalle de theta, toujours aux deuxième et troisième colonnes.

Un tel format permet une importation facile dans un tableur externe et le tracé d'un graphique comme le suivant :

Electrons transmis (C 2500 nm)



Paramétrage de la classification

Définir la classification

Par défaut, Hurricane propose un découpage pré-défini (1 seule classe de theta, 16 classes comparables de phi, classes d'énergie de 1 keV) qui ne conviendra pas dans tous les cas. Il est possible de définir sa propre classification en suivant exactement le format des 3 lignes d'entête des fichiers de résultats dans un nouveau fichier `oe_param.txt` qu'il faut créer dans le répertoire `C:\Program Files\Hurricane`. Il est de plus possible d'individualiser la classification des électrons sortant par chaque face de la boîte de calcul en créant un fichier `oe_param_<axe,SENS>.txt` toujours dans le même répertoire (par exemple, pour les électrons transmis, il s'agira du fichier `oe_param_zP.txt`).

A partir de Hurricane 1.5, il est possible de laisser Hurricane calculer des classes comparables de phi, par leur nombre, et optionnellement leur étendue angulaire (de 0 à 90 degrés par défaut), en n'entrant pas les limites des classes après leur nombre dans le fichier de paramétrage. Voici un exemple de contenu du fichier `oe_param.txt` pour définir 10 classes comparables de phi entre 45 et 60 degrés :

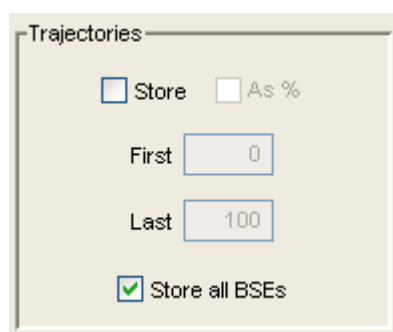
```
theta_deg      2          0.0    360.0
phi_deg 10_45_60
energy  17          0.0  1000.0  2000.0  3000.0  4000.0  5000.0  6000.0  7000.0  8000.0
9000.0 10000.0 11000.0 12000.0 13000.0 14000.0 15000.0 16000.0
```

Sauvegarde de tous les électrons ré-émis

Dans l'onglet Computation

A partir de la version 1.3 de Hurricane, il est possible de sauvegarder tous les électrons ré-émis dans un fichier texte.

Pour valider cette option, cliquer sur l'onglet Computation et cocher la dernière case du cadre Trajectories :



Après exécution de la simulation, le fichier de sortie se trouve dans le répertoire C:\Program Files\Hurricane\results. Le nom du fichier a comme racine celle définie dans l'onglet Computation et se termine avec l'extension _bse.txt. En voici un exemple:

Al_on_Si_thickness_60_bse.txt - Bloc-notes					
Fichier	Edition	Format	Affichage	?	
point_x_nm	point_y_nm	direction_x	direction_y	direction_z	energy_ev
-242,5	1821,2	-0,642363	0,734303	-0,219474	12103,8
96,5	64,1	0,035080	0,338049	-0,940475	2592,9
1078,5	-1008,6	-0,150332	-0,390328	-0,908320	10615,8
-200,1	-737,7	0,297546	0,761897	-0,575308	7882,6
-577,6	-125,4	-0,725017	-0,505554	-0,467724	13895,9
-47,1	-369,1	0,162614	-0,720713	-0,673891	13351,3
133,7	-533,8	-0,686493	0,621534	-0,377389	7819,2
-574,0	1326,3	-0,642889	0,425018	-0,637223	5205,7
265,1	607,6	0,100742	0,556520	0,806577	6145,2

Le format texte du fichier est très simple :

- Un électron ré-émis par ligne.
- Sur chaque ligne, toutes les valeurs sont séparées par des tabulations.
- La première ligne est un simple entête rappelant le sens de chaque colonne : coordonnées X et Y d'émergence en nm, coordonnées X, Y et Z de la direction normalisée de l'électron, et énergie de l'électron en eV.