

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE D'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE.
UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
HOUARI BOUMEDIENE

FACULTE DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

Magister en Physique

Spécialité : Sciences Nucléaires

Par

MEKHTICHE Abdelhalim

Sujet

**Diffusion d'ions de faible énergie
par une surface solide :
Simulation basée sur la théorie de transport pour le
calcul du coefficient de réflexion**

Soutenu le 06/07/2005, devant le jury composé de :

M. M. BOUDJEMA	Professeur (USTHB)	Président
Mme.K. KHALAL-KOUACHE	Maître de Conférences (USTHB)	Directrice de thèse
M. A. C. CHAMI	Professeur (USTHB)	Examineur
M. M. KECHOUANE	Professeur (USTHB)	Examineur
M. M. BENGUERBA	Maître de Conférences (USTHB)	Examineur
M. A. TAHRAOUI	Maître de Conférences (USTHB)	Examineur

A la mémoire de mon père et ma sœurChrifa

A ma mère

A mes frères et mes sœurs

Remerciements:

Ce travail a été réalisé au laboratoire de Physique Nucléaire et Interactions Rayonnements-Matière à l'Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene (USTHB). Il a été dirigé par Madame Khalal-Kouache Karima, Maître de conférences à L'USTHB, à qui j'exprime ma très vive reconnaissance. Je tiens à la remercier pour sa disponibilité et ses précieux conseils qui m'ont beaucoup aidé pour mener à terme ce travail.

Je remercie le professeur M. Boudjema, directeur du Laboratoire des Sciences Nucléaires et Interactions Rayonnements-Matière, pour m'avoir accueilli au sein de son groupe de recherche, et m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance.

Je remercie également le professeur A. C. Chami pour ses qualités humaines et pour ses précieux conseils, ainsi que pour avoir accepté de juger de ce travail.

J'adresse également mes plus vifs remerciements à Messieurs: M. Benguerba, Maître de conférences à l'USTHB, M. Kechouane, Professeur à l'USTHB, A. Tahraoui, Maître de conférences à l'USTHB, pour avoir accepté d'évaluer le présent travail .

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à Messieurs: Y. Boudouma et S. Kessal, Professeurs à l'USTHB, pour leur disponibilité, leurs qualités humaines, et leur soutien moral.

Je remercie également: M. Hamhami, N. Adimi, A. Hidouche et R. Zemih, maîtres assistants à l'USTHB pour leur aide et leur sympathie.

Je remercie tous mes amis et mes collègues qui m'ont aidé pendant la réalisation de ce travail, en particulier : K. Belghanem, K. Bouchachia, S. Mazidi et A. Tassadit.

Mes plus grands remerciements pour ma famille: ma mère, mes frères et mes sœurs.

Table des matières :

<u>INTRODUCTION</u>	4
---------------------	---

CHAPITRE 1 : la physique fondamentale de la diffusion d'ions de basse énergie par une surface solide.

1	Introduction	7
2	Traitement classique de la diffusion ion-surface à basse énergie	7
3	Cinématique de la collision	8
4	Potentiels d'interaction et section efficace de diffusion	9
	4.1 Potentiel d'interaction	9
	4.2 Section efficace de la diffusion élastique	10
5	Perte d'énergie des ions dans la matière	11
	5.1 Perte d'énergie inélastique	11
	5.2 Pertes d'énergie élastique	12
6	Collisions multiples	13
7	Processus d'échanges de charge	14
	7.1 Mécanismes de transfert de charge en surface	14
	7.1.1 Transfert à un électron (mono-électronique)	14
	7.1.2 Transfert à deux électrons (bi-électronique)	15
	7.2 Echange de charge en volume	16
8	le potentiel image	16

CHAPITRE 2 : Description du modèle de simulation utilisé.

1	Introduction	20
2	Simulation numérique	20
	2.1. Simulation Monte Carlo	20
	2.2. Théorie de Transport	21
	2.3 Dynamique Moléculaire	21
3	Le coefficient de réflexion	21
4	Théorie de transport pour l'étude des particules transmises	22
5	Application à la diffusion d'ions par une cible solide	26
	5.1 Probabilité de diffusion ΔP	26
	5.2 Procédure numérique pour le calcul de la probabilité de diffusion	29

6	Calcul du coefficient de réflexion par la simulation Monte Carlo	30
6.1	Présentation générale de TRIM	30
6.2	Le coefficient de réflexion par TRIM	32

CHAPITRE 3 : Résultats et discussion :

1	Introduction	34
2	Distributions en longueurs des particules diffusées par une surface solide	34
3	Le coefficient de réflexion	37
4	Comparaison du coefficient de réflexion obtenu dans la théorie de transport à celui calculé par la simulation Monte Carlo (TRIM)	41
5	Position du rendement maximum θ_{\max}	44
6	Variation du rendement de diffusion maximum en fonction de θ_{\max}	45
7	Etude du coefficient de réflexion en fonction de l'angle de sortie β	47
8	Variation du coefficient de réflexion en fonction de l'énergie des ions incidents	48
9	Conclusion	48

	<u>CONCLUSION GENERALE :</u>	50
--	-------------------------------------	----

INTRODUCTION:

Dans plusieurs domaines de la physique, l'étude des collisions entre des particules chargées et des cibles solides représente un intérêt aussi bien fondamental que pratique pour la compréhension de nombreux phénomènes.

Les techniques utilisées sont basées essentiellement sur la diffusion de particules par des solides. La dépendance de l'énergie, de l'état de charge, et de la distribution angulaire des particules diffusées avec l'état de surface peut nous donner des informations sur l'identification des atomes de surface, leurs positions et les épaisseurs des différentes couches constituant le solide. Parmi ces techniques on peut citer, la diffusion d'ions de basse énergie (LEIS), aussi connue comme la spectroscopie d'ions lents (ISS), qui a été utilisée depuis longtemps pour l'étude de la composition et de la structure des couches au voisinage de la surface [NIE93, ECK78].

La particularité des ions de basse énergie (quelques keV), associée à leur faible profondeur de pénétration dans le solide, suscite un intérêt croissant, notamment dans le domaine de l'analyse de surface, en ouvrant de nouvelles perspectives de structuration des surfaces à l'échelle de quelques angstroms.

Cependant, la nature et la contribution relative des processus élémentaires pouvant être impliqués lors de l'interaction avec la surface ne sont pas tout à fait connus comme le cas des échanges de charge et le processus des collisions multiples, qui deviennent très importants dans cette gamme d'énergie. Ce dernier est traité essentiellement par les méthodes de simulation (Monte Carlo, théorie de Transport, et dynamique moléculaire),

D'autre part, les informations délivrées par les particules diffusées contribuent à l'étude d'autres mécanismes physiques à l'aide des techniques de simulation.

Parmi ces informations, il y a le rapport entre le nombre de particules diffusées et le nombre des particules incidentes. Ce rapport appelé le coefficient de réflexion, représente un intérêt pratique dans différents domaines, tels que la fusion thermonucléaire, l'implantation ionique et l'analyse des surfaces [KUR03].

L'objectif principal de cette thèse est de calculer et d'étudier les distributions angulaires du coefficient de réflexion de particules légères diffusées par une surface solide.

Le plan du manuscrit est le suivant : le premier chapitre résume les mécanismes physiques qui accompagnent l'interaction d'une particule avec une surface solide (potentiel d'interaction, perte d'énergie, cinématique de la collision ion-atome cible, les collisions multiples, l'échange de charge et le potentiel image). Nous donnons aussi une brève description des différentes méthodes

de simulation. Le deuxième chapitre est consacré à la description de la méthode de simulation et des différentes approximations utilisées pour la calcul de la probabilité de diffusion ΔP . Nous obtenons une expression finale ΔP sous la forme d'une intégrale multidimensionnelle. Cette dernière est calculée numériquement par la méthode d'intégration Monte Carlo.

Dans le troisième chapitre, nous présentons des résultats obtenus par cette méthode. Il s'agit du calcul de la probabilité de diffusion et du coefficient de réflexion. Nous avons considéré les systèmes suivants H/Si, He/Si, H/Ni, He/Ni, Li/Ni. Nous avons effectué l'étude du coefficient de réflexion en fonction de plusieurs paramètres tels que : l'angle d'incidence, l'angle de diffusion et l'énergie des ions incidents. Une comparaison de nos résultats à ceux obtenus par un code Monte Carlo, ainsi qu'à d'autres résultats est présentée.

Nous terminons par une conclusion générale dans laquelle nous résumons l'essentiel de notre travail tout en discutant les résultats obtenus.

Les différents grandeurs utilisées dans ce travail, sont exprimées dans le systèmes des unités atomiques ($e = \hbar = m_0 = 1$), où e est la charge de l'électron et m_0 sa masse au repos.

CHAPITRE 1 :

Physique fondamentale de la diffusion d'ions de basse énergie par une surface solide

1. Introduction :

L'étude de la diffusion de particules de basse énergie par des surfaces solides, fait appel à la fois à l'expérience et à la simulation numérique. Cette dernière est liée à la compréhension de tous les processus fondamentaux d'interaction entre la particule incidente et le solide.

En commençant par la validité du traitement classique, nous allons résumer les mécanismes fondamentaux qui gouvernent l'interaction ion-surface solide : cinématique de la collision, potentiel d'interaction et perte d'énergie. Nous discuterons ensuite de l'importance des collisions multiples dans notre gamme d'énergie (quelques keV). Nous présenterons les processus d'échange de charge et l'effet du potentiel image. Une brève description des modèles de simulation est fournie également.

2. Traitement classique de la diffusion ion-surface à basse énergie :

Au cours de l'interaction d'un ion de basse énergie (quelques keV) avec une surface solide, il est possible d'utiliser le traitement classique pour décrire le mécanisme de la collision. Ceci est justifié par le fait que la longueur d'onde associée aux ions incidents, donnée par la relation de De Broglie $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2M_1E_0}}$, est toujours plus petite devant les dimensions des caractéristiques de l'interaction (espace inter-atomique, la distance minimale d'approche, le paramètre d'impact). M_1 et E_0 sont, respectivement, la masse et l'énergie de l'ion incident. h est la constante de Planck.

3. Cinématique de la collision :

L'interaction entre deux atomes de masses respectives M_1 et M_2 , peut être décrite par un potentiel Coulombien écranté $V(r)$. r est la distance entre les deux atomes considérés. Le passage du système de référence lié au laboratoire vers celui lié au centre de masse, permet de

réduire le problème de ces deux corps à un problème à un seul corps de masse réduite

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \text{ et soumis au potentiel } V(r) \text{ (Voir fig.1.1).}$$

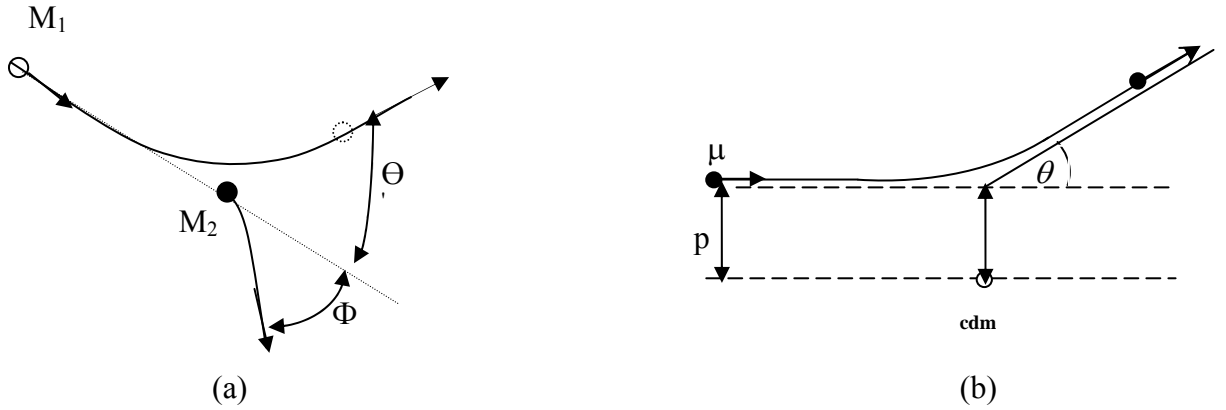


Figure 1.1 : Schéma représentant une collision binaire entre deux particules de masses M_1 et M_2

(a) : dans le système du laboratoire et (b) : dans le système lié au centre de masse.

Les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement, nous permettent de calculer l'angle de diffusion θ dans le système lié au centre de masse. Ce dernier s'écrit en fonction du paramètre d'impact p sous la forme :

$$\theta = \pi - 2p \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{\sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{\text{cdm}}} - \frac{p^2}{r^2}}} \quad (1.1)$$

Cette expression s'appelle intégrale de diffusion.

E_{cdm} est l'énergie disponible dans le centre de masse. Elle est donnée par :

$$E_{\text{cdm}} = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_0 \quad (1.2)$$

r_0 est la distance minimale d'approche, elle est solution de l'équation :

$$1 - \frac{V(r)}{E_{\text{cdm}}} - \frac{p^2}{r^2} = 0 \quad (1.3)$$

Les angles de diffusion Θ et de recul Φ définis dans le référentiel du laboratoire peuvent s'exprimer alors en fonction de l'angle θ par les relations :

$$\Theta = \arctan\left(\frac{A \sin \theta}{1 + A \cos \theta}\right) \quad (1.4)$$

$$\Phi = \frac{\pi - \theta}{2} \quad (1.5)$$

où $A = \frac{M_2}{M_1}$.

Les mêmes lois, citées précédemment, permettent d'obtenir la quantité d'énergie transférée à l'atome cible durant une collision, ainsi que l'énergie E_1 de la particule incidente après la collision. L'énergie E_1 s'écrit :

$$E_1 = KE_0 \quad (1.6)$$

K est appelé facteur cinématique, il est donné par l'expression :

$$K = \left(\frac{\cos \Theta \pm \sqrt{A^2 - \sin^2 \Theta}}{1 + A} \right)^2 \quad (1.7)$$

Dans le cas des collisions pour lesquelles la masse du projectile est inférieure à la masse de l'atome cible ($A > 1$), seul le signe (+) est possible et nous avons alors une énergie unique de la particule diffusée pour chaque angle de diffusion. Par contre, lorsque le projectile est plus lourd que l'atome cible ($\sin \Theta < A < 1$), les deux signes sont possibles et on observe dans ce cas, deux énergies finales pour chaque angle de diffusion.

4. Potentiels d'interaction et section efficace de diffusion :

4.1 Potentiel d'interaction :

L'interaction entre un ion, de numéro atomique Z_1 , et un atome cible, de numéro atomique Z_2 , est décrite par un potentiel Coulombien écranté du type :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (1.8)$$

e est la charge de l'électron, a est le rayon d'écran et $\phi\left(\frac{r}{a}\right)$ est la fonction d'écran donnée par :

$$\phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \exp\left(-\beta_i \frac{r}{a}\right) \quad (1.9)$$

n, α_i et β_i sont des constantes d'ajustement. Ces constantes sont données dans le tableau 1.1 pour les deux potentiels les plus utilisés et qui sont le potentiel universel proposé par Ziegler, Biersack et Littmark (ZBL) [ZIE85] et le potentiel de Molière [MOL47].

$$a_{\text{ZBL}} = \left(\frac{9\pi^2}{128}\right)^{1/3} a_0 \frac{1}{(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} \quad (1.10)$$

a_0 est le rayon de Bohr ($a_0 = 5.29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$).

Dans l'approximation de Molière, le rayon d'écran a est donné par:

$$a = a_0 \frac{0.885}{(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}} \quad (1.11)$$

	n	α_1	α_2	α_3	α_4	β_1	β_2	β_3	β_4
Molière	3	0.35	0.55	0.1	-	0.3	1.2	6	-
ZBL	4	0.18175	0.50986	0.28022	0.028171	3.1998	0.94229	0.4029	0.216

Tableau 1.1. Valeurs des constantes d'ajustement pour le potentiel de Molière [MOL47] et le potentiel ZBL [ZIE85].

4.2 Section efficace de la diffusion élastique :

La section efficace de diffusion peut s'écrire en fonction du paramètre d'impact :

$$d\sigma = 2\pi p dp \quad (1.12)$$

Par l'introduction des paramètres réduits, Lindhard et al [LIN63] ont donné une expression simplifiée de la section efficace différentielle :

$$d\sigma(t^{1/2}) = \pi a^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \quad (1.13)$$

$f(t^{1/2})$: fonction universelle de diffusion.

$$t^{1/2} = \varepsilon \sin \frac{1}{2}\theta \quad (1.14)$$

θ : angle de diffusion dans le système du centre de masse.

$$\varepsilon = \frac{M_2 E}{M_1 + M_2} / \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a} \right) \quad (1.15)$$

M_1 : masse de l'ion incident.

M_2 : masse de l'atome cible.

Z_1 : numéro atomique de l'ion incident.

Z_2 : numéro atomique de l'atome cible.

E : énergie de la particule incidente.

e : charge de l'électron.

5. Perte d'énergie des ions dans la matière :

L'interaction d'une particule chargée avec les atomes du solide s'accompagne toujours par une perte de son énergie. Cette perte d'énergie est de nature élastique ou inélastique.

5.1 Perte d'énergie inélastique :

Les pertes d'énergie inélastiques (ou électronique) concernent la quantité cédée aux électrons des atomes du solide. Ce phénomène entraîne soit l'ionisation des atomes de la cible au voisinage de la trajectoire de l'ion incident, soit l'excitation des électrons libres de ces atomes.

Le pouvoir d'arrêt inélastique est défini à partir de la perte d'énergie inélastique par unité de longueur en tenant compte de la densité atomique du matériau N .

Lindhard et al [LIN61] ont montré que le pouvoir d'arrêt électronique est proportionnel à la vitesse de l'ion incident v dans le domaine de basse énergie (théorie LSS) :

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right)_e = 8\pi \xi e^2 a_0 \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \frac{v}{v_B} \quad (1.16)$$

Ou : a_0 est le rayon de Bohr

v_B : vitesse de Bohr, donnée par : $v_B = \frac{c}{137}$.

ξ varie entre 1 et 2 et il est approximativement égale à $\chi = Z_1^{1/6}$

5.2 Pertes d'énergie élastique

La perte d'énergie élastique (ou nucléaire) concerne la quantité d'énergie cédée aux noyaux par répulsion coulombienne au cours de la collision. La répulsion est plus ou moins écrantée par le cortège électronique. Cette perte d'énergie entraîne la déviation de la particule incidente de sa trajectoire initiale ainsi que la mise en mouvement des atomes heurtés.

On définit le pouvoir d'arrêt nucléaire comme étant égal à :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = -N \int_{\sigma(T=T_{\min})}^{\sigma(T=T_{\max})} T d\sigma(E) \quad (1.17)$$

Où T est l'énergie transférée durant la collision, comprise entre T_{\min} et T_{\max} . T_{\max} est donné par :

$$T_{\max} = \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (1.18)$$

N : nombre d'atome par unité de volume.

E : énergie de l'ion incident.

$d\sigma$: section efficace de diffusion élastique, (équation (1.13))

En utilisant l'énergie réduite ε (équation 1.15) et le parcours réduit ρ , Lindhard et al [LIN68] ont introduit une expression plus commode du pouvoir d'arrêt dû au ralentissement nucléaire:

$$S_n(\varepsilon) = \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = \int_0^\varepsilon \frac{1}{t^{3/2}} f(t^{1/2}) \frac{dt}{\varepsilon} \quad (1.19)$$

Où :

$$\rho = \frac{4 \pi R a^2 N M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (1.20)$$

R : parcours total de la particule incidente.

$f(t^{1/2})$: la fonction universelle de diffusion.

La perte d'énergie totale est la somme de la perte d'énergie nucléaire et électronique :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_t = \left(\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE}{dx}\right)_n \quad (1.21)$$

6. Collisions multiples :

Lorsque le libre parcours moyen du projectile est de l'ordre de grandeur de la distance inter-atomique dans la cible, les collisions multiples deviennent importantes.

Les collisions multiples jouent un rôle significatif dans la description des spectres énergétiques des particules diffusées.

La forme en *cloche* observée du rendement expérimental des particules diffusées par la surface justifie bien la présence des collisions multiples (figure 1.2). Par contre, un modèle basé sur la collision simple donnerait une décroissance monotone du rendement avec l'angle de diffusion [ARE98].

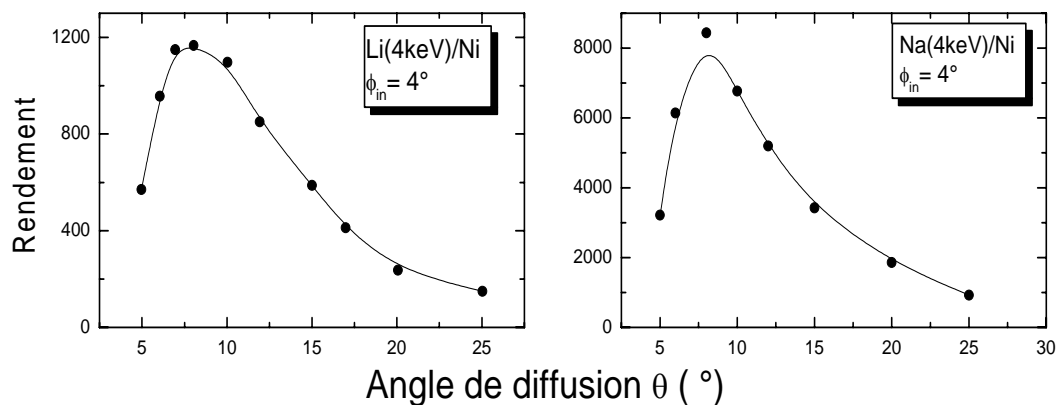


Figure (1.2): Distribution angulaire du rendement expérimental des particules diffusées de Li et de Na par une cible de Nickel [ZEM01].

Dans l'approximation des collisions binaires ou BCA (Binary collision Approximation) [ECK78], il est possible de traiter ces collisions multiples comme une séquence de collision binaires [NIE93]. Cette approximation est valable si l'énergie de la particule incidente est supérieure à quelques dizaines d'eV [RAB93].

7. Processus d'échanges de charge :

L'échange de charge est un processus important dans le régime de faibles vitesses. Il a été observé dans plusieurs expériences de diffusion ion-surface [VER76, SOU90, BEN94, MOU97]. Pour une analyse plus détaillée de la structure de surface, l'influence du transfert de charge devrait être prise en compte.

La neutralisation et la re-ionisation peuvent se produire au cours des phases d'approche et d'éloignement de la surface, mais également durant les collisions avec les atomes de la cible.

Souda et ses collègues [SOU85] ont observé que pour certains atomes cibles, une fraction des ions re-ionisés à l'intérieur du solide (qui sont initialement neutralisés dans la phase l'approche de la surface), peut contribuer au nombre des ions détectés.

7.1 Mécanismes de transfert de charge en surface :

Dans ce type d'échange de charge, le processus de neutralisation ou d'ionisation se produit au voisinage de la surface. Il dépend de la structure de bande de la surface ainsi que des niveaux d'énergie de l'ion incident [HAG54] (figure 1.3).

On peut distinguer, deux types d'échange de charge entre l'ion incident et la surface solide :

7.1.1 Transfert à un électron (mono-électronique) :

(*) Neutralisation résonante : transfert d'un électron de la bande de conduction du solide, vers un niveau atomique de même énergie de l'ion incident. La transition se fait par effet tunnel. Dans ce mécanisme, aucune énergie cinétique n'est transférée durant la transition.

(*) Ionisation résonante: c'est le processus inverse de la neutralisation résonante, qui correspond au transfert d'un électron qui se trouve sur un niveau excité de la particule incidente, à un niveau non rempli du solide.

(*) Transfert quasi résonant: ce processus est analogue au processus résonant mais il se produit lorsque les niveaux des deux partenaires sont plus profonds.

7.1.2 Transfert à deux électrons (bi-électronique)

Dans ce cas, un premier électron est transféré vers le niveau fondamental de l'ion incident. Ce niveau étant situé à une énergie plus faible. L'excédent d'énergie ΔE va permettre à un électron d'être éjecté (à condition d'avoir $\Delta E > \phi$, où ϕ est le travail de sortie du solide).

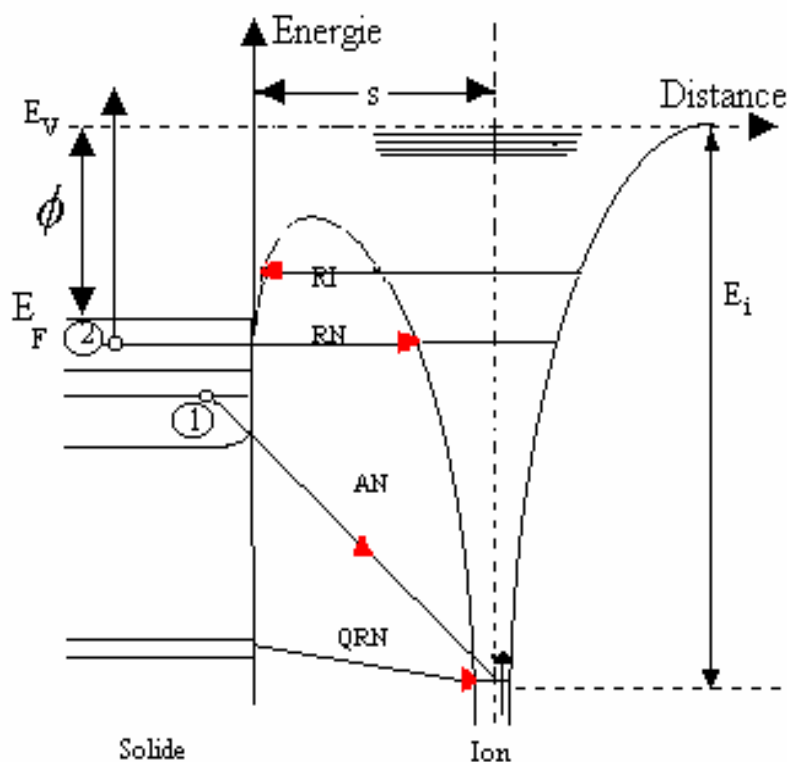


Figure 1.3: Schéma énergétique représentant les différents processus d'échange de charge au voisinage de la surface.

Trois mécanismes sont possibles:

(*) La neutralisation Auger: les deux électrons appartiennent à la bande de valence du solide.

(*) Désexcitation Auger : dans ce cas, un électron provient du solide et le deuxième électron provient du projectile.

(*) Autoionisation : les deux électrons proviennent du projectile.

7.2 Echange de charge en volume :

Indépendamment de la neutralisation et de l'ionisation qui peuvent se produire au voisinage de la surface, l'échange de charge peut se produire également par un processus local lors de la collision avec les centres diffuseurs à l'intérieur de solide, menant à la neutralisation ou la re-ionisation du projectile [SOU86].

Dans ce mécanisme, lors de la collision d'un ion avec une atome cible, et à des distances inter atomiques petites ($<1\text{Å}$), les orbitales moléculaires se recouvrent, il y a donc une formation d'une quasi-molécule de durée de vie très courte (de l'ordre de 10^{-15} s). La promotion d'un électron peut induire la neutralisation ou la re-ionisation du projectile [BAR72].

8. Le potentiel image :

La présence d'une particule chargée au voisinage d'une surface solide, induit l'apparition d'une charge image de signe opposé, à l'intérieur de celle-ci. Ceci est du à la réponse des électrons du solide ayant subi un réarrangement suite au champ coulombien provoqué par la charge de cette particule.

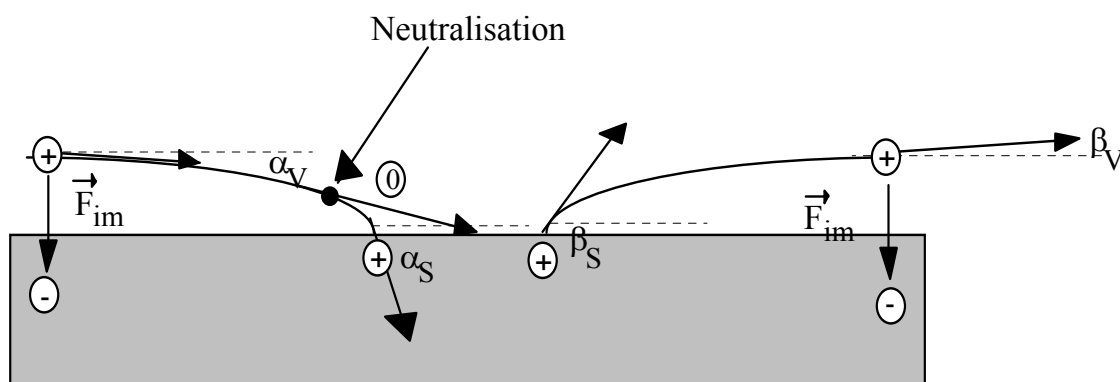


Figure 1.4: schéma représentant l'effet de la force image sur les trajectoires des ions au voisinage d'une surface.

Cela a été vérifié expérimentalement par l'utilisation d'ions en incidence rasante avec la surface cible [WIN92].

L'influence de cette charge image sur la particule incidente peut se traduire par une force image qui va l'attirer vers la surface lors des phases d'approche et d'éloignement. Pour cela, les angles effectifs d'incidence et de sortie (α_s, β_s) seront différents des angles mesurés (α_v, β_v) (Figures 1.4 et 1.5) [KAT88]:

$$\text{tg}(\alpha_s \text{ ou } \beta_s) = \text{tg}(\alpha_v \text{ ou } \beta_v) \left[1 + \frac{V_{im}}{E \sin^2(\alpha_v \text{ ou } \beta_v)} \right]^2 \quad (1.22)$$

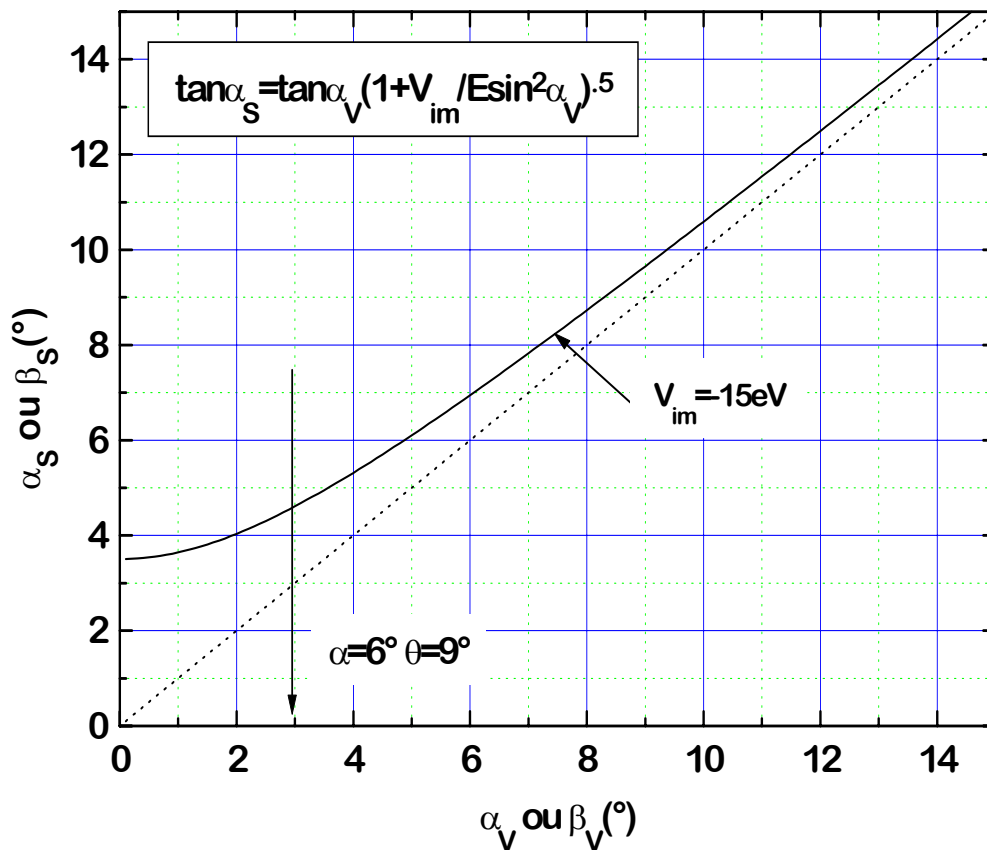


Figure 1.5: Variation des angles effectifs (α_s ou β_s) en fonction de angles mesurés (α_v ou β_v) pour $V_{im} = -15 \text{ eV}$.

Où :

V_{im} : valeur du potentiel image.

E : énergie de la particule incidente.

Cette relation montre que la différence entre les angles effectifs et les angles mesurés peut devenir importante aux très faibles angles d'incidence et de sortie (figure 1.5).

CHAPITRE 2 :

Description du modèle de simulation utilisé

1. Introduction :

Considérons un faisceau d'ions incident sur une cible solide, chaque ion va subir une ou plusieurs collisions avec les atomes de la cible, avant d'être diffusé, transmis ou arrêté dans la cible. À basse énergie, les collisions multiples deviennent importantes, ces derniers ont été l'objet de plusieurs études théoriques [**SIG74**, **WIN75**, **SIG78**].

De nombreux auteurs se sont intéressés à la détermination des distributions angulaires et énergétiques des particules diffusées [**FIR67**, **FIR68**, **FIR70**, **MAS85**], en tenant compte les collisions multiples.

Le calcul de la distribution angulaire des particules diffusées peut être effectué en utilisant les différentes méthodes de simulation (dynamique moléculaire, simulation Monte Carlo, théorie de transport).

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés au calcul de la distribution angulaire des particules diffusées dans le plan d'incidence par une surface solide à basse énergie.

2 Simulation numérique :

La simulation numérique est devenue une complémentarité nécessaire aux expériences de diffusion de surface. Le perfectionnement des méthodes de calcul et l'augmentation rapide de la puissance des ordinateurs ont rendu la simulation particulièrement attractive, tant comme outil de modélisation théorique que comme aide à l'interprétation des résultats expérimentaux.

Dans le domaine d'interaction ion-surface solide, il existe trois principales techniques de simulation :

2.1. Simulation Monte Carlo :

Le principe de cette méthode est de suivre l'histoire d'un très grand nombre de particules incidentes diffusées par des atomes cibles. Parmi les divers codes existant dans la simulation Monte Carlo dans le domaine ion surface solide, on peut citer ici le code TRIM [**ZIE85**], et le code MARLOWE [**ROB74**].

Nous allons utiliser dans notre étude une version modifiée du code TRIM (Transport of Ions in Matter) [**KHA98**, **KHA02**], pour l'étude de la réflexion des ions par une surface solide.

2.2. Théorie de Transport :

Les équations intégral-différentielles de transport sont des outils standard dans le traitement rigoureux des collisions multiples, comme c'est le cas des phénomènes de ralentissement des neutrons, et la diffusion d'électrons et des rayons X [SIG82].

Dans le domaine de l'interaction ion-surface, cette méthode est largement utilisée dans l'étude des particules transmises par des cibles solides [SIG74, LIT80], la distribution spatiale de l'énergie des particules diffusées [WIN70], l'étude de l'énergie transférée par des gaz rares à des surfaces [LUO93], ainsi que pour l'étude du sputtering [HOF78].

En se basant sur cette théorie, de nombreux modèles qui traitent le problème de la réflexion par une surface solide ont été élaborés [MAS85, LUO02, FIR70, REM80]. Chaque modèle est caractérisé par des hypothèses et des approximations utilisées, ainsi que des méthodes pour la résolution de l'équation de Boltzmann.

2.3 Dynamique Moléculaire :

L'évolution temporelle du système (projectile + cible) peut être déterminée en résolvant les équations de Newton de toutes les particules [SMI95].

Les techniques de simulation de la dynamique moléculaire, utilisées pour modéliser l'interaction atome-surface, sont plus appropriées pour les collisions à très faible énergie. Dans ce cas, l'énergie est partagée entre plusieurs particules et l'approximation des collisions binaires n'est plus valable [MOR89].

3 Le coefficient de réflexion :

Le coefficient de réflexion $R(\theta, \phi_{in})$ est défini comme étant le rapport entre le nombre des particules diffusées N_{diff} par une surface solide à un angle θ , et le nombre N_0 de particules incidentes pour un angle d'incidence ϕ_{in} mesuré par rapport à la surface cible.

$$R(\theta, \phi_{in}) = \frac{N_{diff}(\theta)}{N_0(\phi_{in})} \quad (2.1)$$

4 Théorie de transport pour l'étude des particules transmises :

Considérons un faisceau d'ions initialement collimaté, provenant d'une source ponctuelle à l'origine, et qui traverse un milieu homogène et isotrope avec N centres diffuseurs par unité de volume.

La quantité $F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) d^3r dE d^2\Omega$ représente le nombre de projectiles qui se trouvent dans la cible à l'instant t dans la position \vec{r} (d^3r) avec une énergie E (dE) et dirigés suivant la direction $\vec{\Omega}$ ($d^2\Omega$).

La fonction de distribution obéit à l'équation de Boltzmann [WAL92] :

$$\frac{\partial}{\partial t} F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) + v \vec{\Omega} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = N \int dE' d^2\Omega' \left\{ \tilde{K}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega}) v' F(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) - \tilde{K}(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') v' F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \right\} \quad (2.2)$$

v : est la vitesse du projectile d'énergie E .

$\tilde{K}(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') dE' d^2\Omega'$: est la section efficace différentielle de la diffusion d'une particule qui a initialement une énergie E et une direction $\vec{\Omega}$ vers la direction $(\vec{\Omega}', d^2\Omega')$ et avec une énergie (E', dE') .

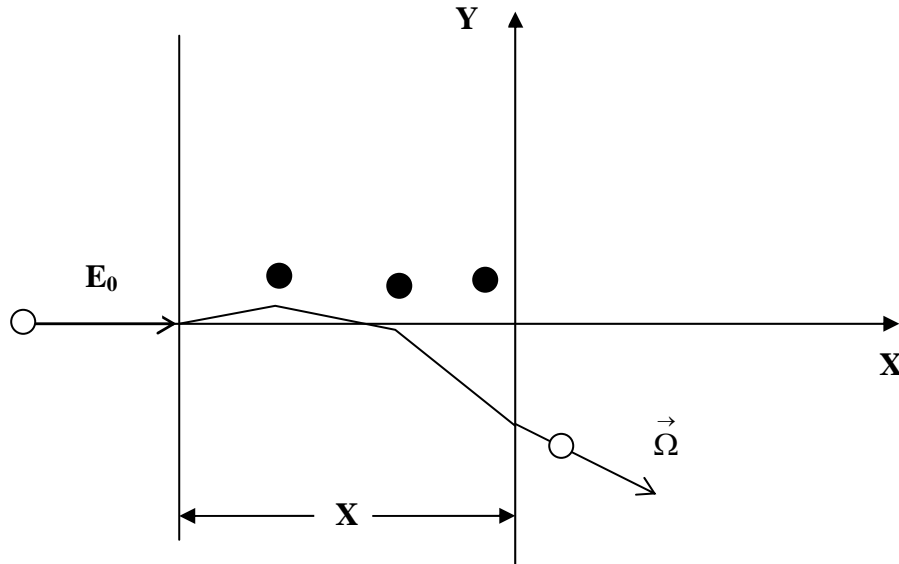


Figure 2.1 : Schéma représentant la géométrie utilisée dans le calcul des distributions angulaires des particules transmises.

Ce traitement a été effectué pour l'étude des particules transmises à travers une cible solide d'épaisseur x (figure 2.1) [SIG74].

Dans le cas stationnaire et lorsque la perte d'énergie est négligée, l'équation de transport s'écrit [MAR75] :

$$-\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} F = N \int d\vec{\Omega}' \{ F \tilde{K}(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') - F' \tilde{K}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) \} \quad (2.3)$$

Dans l'approximation des faibles angles de diffusion, $\vec{\Omega}$ et \vec{r} peuvent s'écrire comme :

$$\vec{\Omega} = (1, \vec{\alpha}) \quad \text{et} \quad \vec{r} = (x, \vec{\rho}) \quad (2.4)$$

Où $\vec{\alpha}$ et $\vec{\rho}$ sont deux vecteurs du plan (yoz)

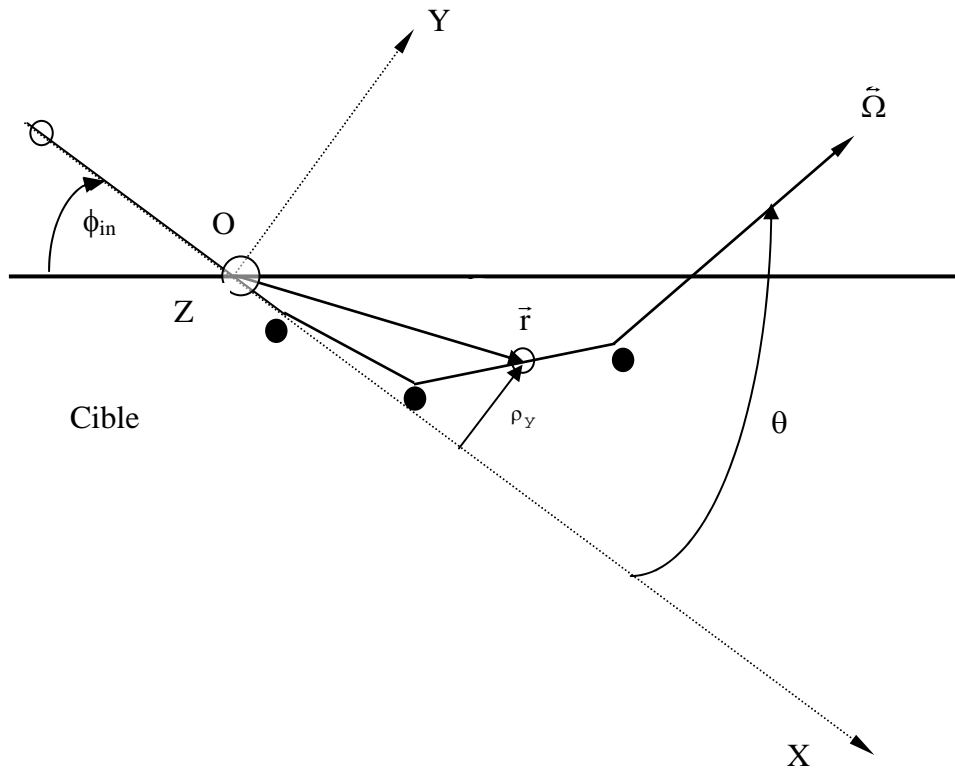


Figure 2.2. Schéma représentant la géométrie utilisée dans le calcul de la probabilité de diffusion. (O) : ion incident et (●) : atome cible. La direction initiale est suivant Ox.

En utilisant une transformée de Fourier d'une dimension d'ordre deux, la fonction de distribution s'écrit alors [MAR75] :

$$F(x, \bar{\rho}, \bar{\alpha}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{x^2} \int \cos(\bar{K} \bar{\gamma} + \bar{k} \bar{\alpha}) \exp[-N \int_0^1 \sigma_0(\bar{k} - \beta \bar{K} | d\beta)] d\bar{k} d\bar{K} \quad (2.5)$$

Où $\sigma_0(k) = \int_0^\infty d\sigma(\Phi) [1 - J_0(k\Phi)]$: est la section efficace différentielle de diffusion.

\bar{k} et \bar{K} sont deux vecteurs du plan (yoz), qu'on peut écrire en coordonnées polaires :

$$\bar{k}(k, \theta_1) \text{ et } \bar{K}(K, \theta_2)$$

$J_0(k)$: fonction de Bessel d'ordre zéro et du premier type.

Φ : angle de diffusion simple défini dans le système du laboratoire.

$$d\sigma(\Phi) = \frac{\partial \sigma}{\partial \Phi} d\Phi : \text{section efficace différentielle.}$$

$$\bar{\gamma} = \frac{\bar{\rho}}{x} - \bar{\alpha} \quad (2.6)$$

Dans cette théorie, nous avons utilisé les approximations suivantes :

1. distribution aléatoire et homogène des atomes cibles.
2. les collisions sont binaires avec une symétrie azimutale de diffusion (potentiel central).
3. la perte d'énergie totale est négligée (électronique et nucléaire).
4. les angles de diffusion sont faibles.

La première hypothèse signifie que le fait de négliger les corrélations entre les centres diffuseurs, revient à remplacer le milieu diffuseur par un gaz de points matériels. La deuxième hypothèse exclut la prise en compte de plusieurs cas, comme la diffusion par des phonons ou par des particules polarisées, qui deviennent importants à haute énergie (de l'ordre de MeV). La troisième hypothèse est justifiée dans le domaine des faibles énergies et aussi dans la limite des faibles angles de diffusion. La quatrième hypothèse est essentielle pour la validité de la résolution de l'équation de Boltzmann.

Nous avons mentionné dans le chapitre 1, que la section efficace différentielle de diffusion pouvait s'écrire sous la forme :

$$d\sigma(t^{1/2}) = \pi a^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \quad (2.7)$$

a : rayon d'écran

$f(t^{1/2})$: Fonction universelle de diffusion.

$$t^{1/2} = \varepsilon \sin \frac{1}{2} \theta \quad (2.8)$$

θ : l'angle de diffusion dans le système du centre de masse.

$$\varepsilon = \frac{M_2 E}{M_1 + M_2} \sqrt{\left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a} \right)} \quad (2.9)$$

M_1 : masse de l'ion incident.

M_2 : masse de l'atome cible.

Z_1 : numéro atomique de l'ion incident.

Z_2 : numéro atomique des atomes cibles.

E : énergie de la particule incidente.

e : charge de l'électron.

Dans la limite des faibles angles, on a :

$$t^{1/2} = \frac{E a}{2 Z_1 Z_2 e^2} \phi \quad (2.10)$$

ϕ : angle de la diffusion simple dans le système du laboratoire.

On introduit les variables de Thomas-Fermi [LIN68] :

$$\tilde{\phi} = \frac{E a}{2 Z_1 Z_2 e^2} \phi = t^{1/2} \quad (2.11)$$

et

$$\tau = \pi a^2 N x \quad (2.12)$$

et la variable :

$$z = \frac{E a}{2 Z_1 Z_2 e^2} |\vec{k} - \beta \vec{K}| \quad (2.13)$$

La fonction de distribution peut s'écrire alors :

$$F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{x^2} \int \cos(\vec{K} \vec{\gamma} + \vec{k} \vec{\alpha}) \exp[-\tau \int \Delta(z) d\beta] d\vec{k} d\vec{K} \quad (2.14)$$

telle que $\Delta(z)$ est la section efficace de transport réduite [MEY71], qui est définie comme :

$$\Delta(z) = \int_0^{\infty} d\tilde{\phi} \frac{f(\tilde{\phi})}{\tilde{\phi}^2} [1 + J_0(z\tilde{\phi})] \quad (2.15)$$

Ce qui nous permet d'avoir l'expression finale de la fonction de distribution :

$$F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{x^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} k.K \cos(\vec{K} \cdot \vec{\gamma} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp[-\tau \int_0^1 \Delta(z) d\beta] dk dK d\theta_1 d\theta_2 \quad (2.16)$$

5 Application à la diffusion d'ions par une cible solide :

5.1 Probabilité de diffusion ΔP :

La probabilité pour qu'une particule soit diffusée d'un angle θ (direction $\vec{\Omega}$), dans l'angle solide $\Delta\Omega$ et pour qu'elle soit repérée au moment de sa diffusion par un vecteur \vec{r} dont l'abscisse est comprise entre x et $x + \Delta x$ (voir figure 2.3) est :

$$\Delta P = \int_{\rho_z=-\infty}^{+\infty} \int_{\rho_{y1}}^{\rho_{y2}} F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) d\rho_z d\rho_y \Delta\Omega \quad (2.17)$$

Nous considérons les particules diffusées dans le plan xOy et donc $\vec{\alpha}(\alpha_y = \theta, \alpha_z = 0)$.

Pour le choix des limites d'intégration sur ρ_y , nous avons considéré les deux situations limites suivantes (voir figure 2.3) :

- la particule quitte la cible à partir du point A d'abscisse x .
- la particule quitte la cible à partir du point C d'abscisse $x + \Delta x$. Nous supposons qu'elle n'a pas eu de diffusions entre les points B et C (l'abscisse du point B est x).

Nous avons :

$$\text{tg } \theta = \frac{\rho_{y3} - \rho_{y1}}{\Delta x} \quad (2.18)$$

$$\text{tg } \phi_{\text{in}} = \frac{\rho_{y3} - \rho_{y2}}{\Delta x} \quad (2.19)$$

et

$$\text{tg } \phi_{\text{in}} = \frac{\rho_{y2}}{x} \quad (2.20)$$

Alors on trouve :

$$\rho_{y2} = x \cdot \text{tg } \phi_{in}, \quad \rho_{y3} = x \cdot \text{tg } \phi_{in} + \Delta x \cdot \text{tg } \phi_{in}, \quad \rho_{y1} = x \text{ tg } \phi_{in} - \Delta x (\text{tg } \theta - \text{tg } \phi_{in}) \quad (2.21)$$

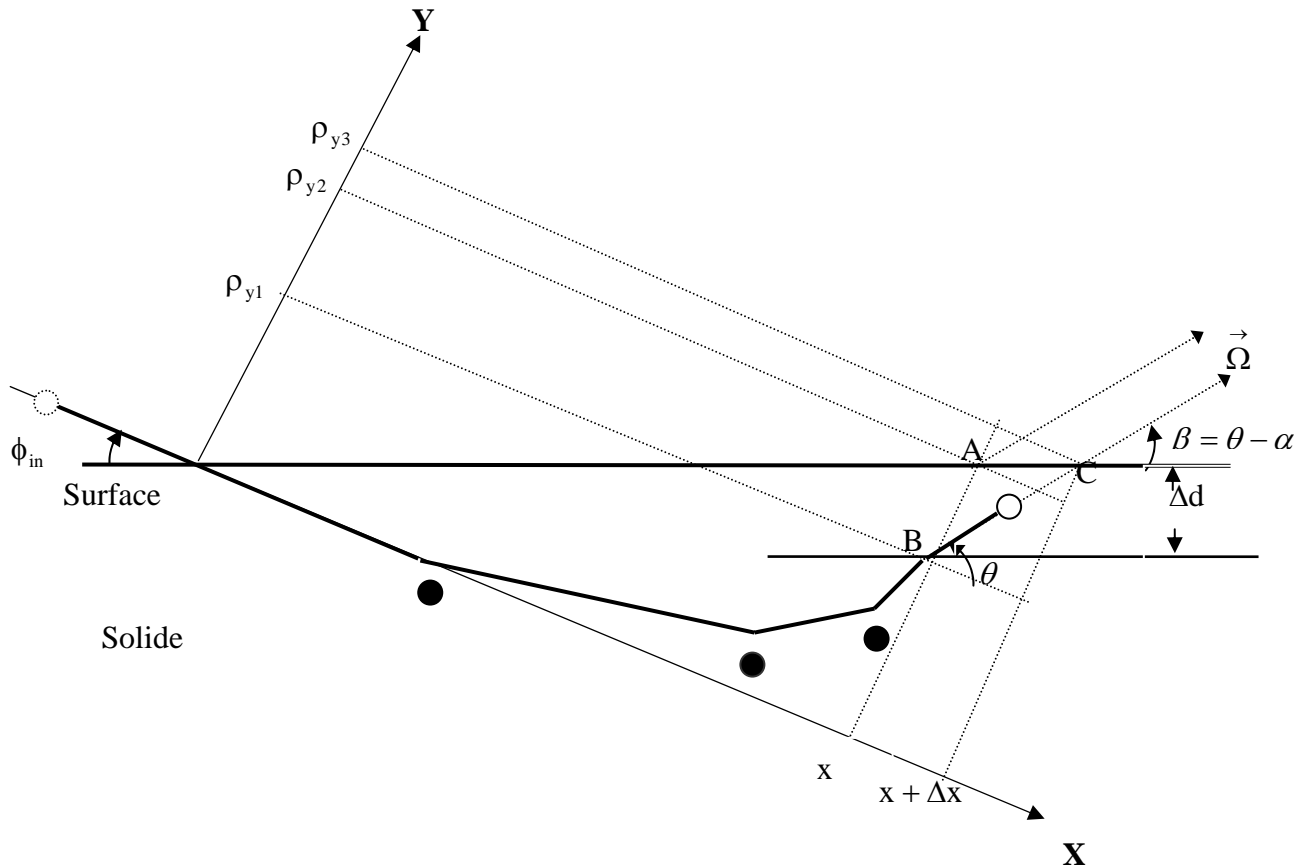


Figure 2.3 : Schéma représentant la géométrie utilisée pour le calcul des limites d'intégration sur ρ_y .

Dans la limite des faibles angles de diffusion on peut faire l'approximation suivante :

$$\text{tg } \phi_{in} \approx \phi_{in} \text{ et } \text{tg } \theta \approx \theta \quad (2.22)$$

La probabilité de diffusion s'écrit alors :

$$\Delta P = \frac{1}{(2\pi)^4 x^2} \int_{\rho_z = -\infty}^{+\infty} \int_{\rho_y = x \Phi_{in} - \Delta x (\theta - \phi_{in})}^{\rho_{y2} = x \Phi_{in}} F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) d\rho_y d\rho_z \Delta \Omega \quad (2.23)$$

on suppose que la fonction $F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha})$ varie très peu entre ρ_{y1} et ρ_{y2} , d'où :

$$\Delta P \approx \frac{1}{(2\pi)^4 x^2} \int_{\rho_z = -\infty}^{+\infty} F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) d\rho_z (\theta - \phi_{in}) \Delta x \Delta \Omega \quad (2.24)$$

Pour faciliter le calcul de ΔP et vu que la fonction F est paire par rapport à ρ_z , nous l'écrivons comme suit :

$$\Delta P = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{2}{x^2} \int_0^{\rho_{z \text{ limite}}} F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) d\rho_z (\theta - \phi_{in}) \Delta x \Delta \Omega \quad (2.25)$$

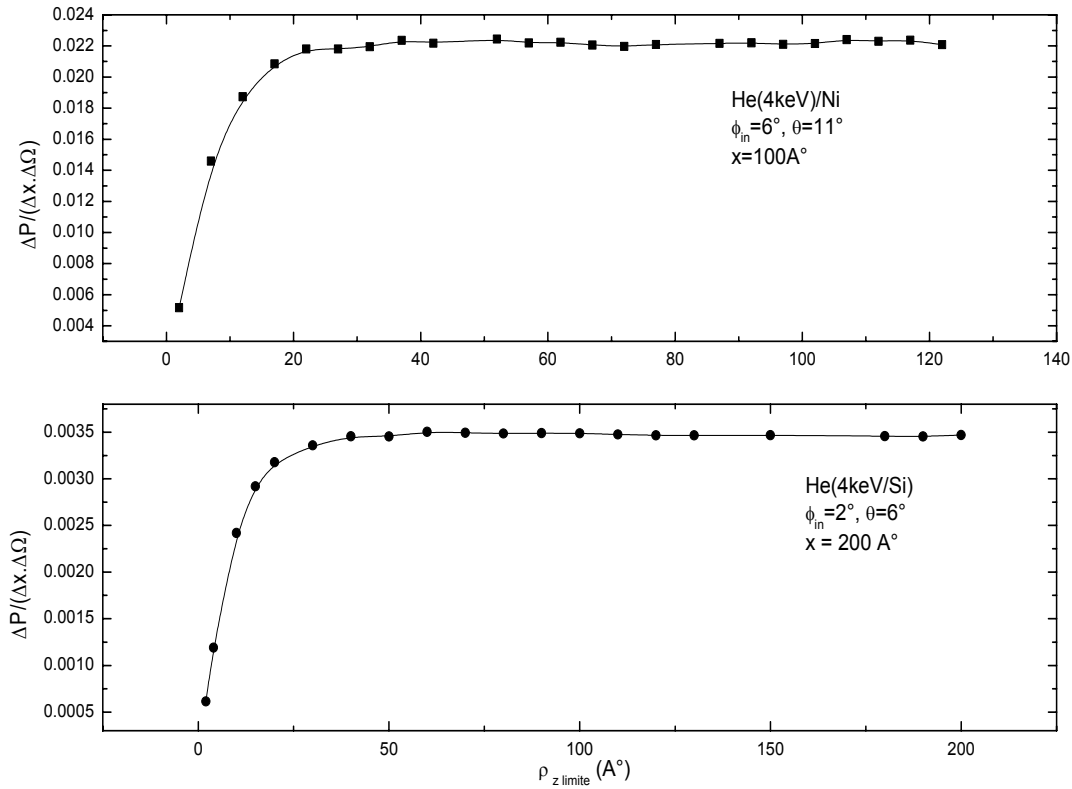


Figure 2.4 : variation de la probabilité de diffusion ΔP en fonction du paramètre $\rho_{z \text{ limite}}$.

En calculant la valeur de ΔP pour différents valeurs de $\rho_{z \text{ limite}}$ (voir figure 2.4), nous pouvons conclure qu'il est possible de prendre :

$$\rho_{z\text{ limite}} = \frac{x}{2} \quad (2.26)$$

D'où l'expression finale de la probabilité de diffusion ΔP :

$$\Delta P = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{2}{x^2} \int_{\rho_z=0}^{x/2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} (\theta - \phi_{in}) \cos(\vec{K} \cdot \vec{\gamma} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp\left(-N_c x \int_0^1 \sigma_0(|\vec{k} - \beta \vec{K}|) d\beta\right) d\theta_1 d\theta_2 d\rho_z dx d\Omega \quad (2.27)$$

Pour $x=0$, nous avons utilisé l'approximation de la diffusion simple pour calculer ΔP :

$$\Delta P = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) N_c \Delta x \Delta \Omega \quad (2.28)$$

Tel que : $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)$ est la section efficace différentielle (définie dans l'équation 2.7).

5.2 Procédure numérique pour le calcul de la probabilité de diffusion :

Pour le calcul de la probabilité de diffusion, nous avons utilisé la méthode d'intégration Monte Carlo, qui est une méthode très efficace pour le calcul des intégrales multidimensionnelles.

Dans le calcul de ΔP , cinq variables interviennent (k, K, θ_1, θ_2 et ρ_z)

$$\Delta P = \int_{V_1} \dots \int_{V_5} f(x_1, x_2, \dots, x_5) dx_1 dx_2 \dots dx_5 \quad (2.29)$$

Où : x_1, x_2, x_3, x_4 et x_5 sont les variables k, K, θ_1, θ_2 et ρ_z respectivement.

V_k est le domaine d'intégration de la variable x_k ; tel que $k = 1, \dots, 5$.

Dans cette méthode, pour chaque épreuve i , on tire 5 variables aléatoires $(x_1^i, x_2^i, \dots, x_5^i)$ qui sont distribuées uniformément dans les intervalles (v_1, v_2, \dots, v_5) respectivement, la valeur moyenne de la fonction f est donnée par :

$$\langle f \rangle = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f(x_1^i, x_2^i, \dots, x_5^i) \quad (2.30)$$

Où m est le nombre total des épreuves.

L'efficacité de cette méthode peut paraître pour les intégrales multiples d'ordre élevé, car le calcul de $f(x_1^i, x_2^i, \dots, x_5^i)$ pour un épreuve i se fait une seule fois, ce qui rend cette méthode plus rapide que les autres méthodes pour ce type d'intégrale.

En effectuant un très grand nombre m d'épreuves, la valeur de l'intégrale ΔP est donné par :

$$\Delta P = \langle f \rangle \cdot v_1 \cdot v_2 \cdot \dots \cdot v_5 \pm (v_1 \cdot v_2 \cdot \dots \cdot v_5) \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{m}} \quad (2.31)$$

où :

$$\langle f^2 \rangle = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f^2(x_1^i, x_2^i, \dots, x_5^i) \quad (2.32)$$

Il est possible d'améliorer cette méthode (réduire le temps de calcul), en passant d'une distribution uniforme sur un intervalle v_k ($k=1, \dots, 5$) à une autre distribution, de manière à favoriser les régions pour lesquelles l'intégrale a plus d'importance par rapport aux autres régions.

6 Calcul du coefficient de réflexion par la simulation Monte Carlo :

6.1 Présentation générale de TRIM :

Le programme TRIM (Transport of Ions in Matter) est inclus dans la familles des codes de calcul qui utilisent l'approximation des collisions binaires (BCA). Il permet de simuler les trajectoires d'un très grand nombre de particules dans le solide. Son principe de base est le suivant :

Considérons une particule chargée de masse M_1 , de numéro atomique Z_1 , et d'énergie E_0 , qui arrive avec une direction donnée sur une cible de densité atomique N . M_2 et Z_2 sont respectivement la masse et le numéro atomique de l'atome cible.

La première collision entre la particule et un atome cible, a lieu après un parcours L traversé par cette particule et défini aléatoirement par : $L=R_1 \text{ MIN}(L_s, C_w)$.

Où : R_1 est un nombre aléatoire tiré de façon uniforme entre 0 et 1.

L_s : le libre parcours moyen entre deux chocs successifs, il est donné en fonction du paramètre d'impact maximal P_{\max} et de la densité atomique N .

$$L_s = \frac{1}{\pi N P_{\max}^2} \quad (2.33)$$

C_w , est la distance entre deux atomes voisins.

P_{MAX} est lié au l'angle minimal de diffusion ψ_{min} (équation 1.1 du chapitre 1). ψ_{min} est défini par l'utilisateur (généralement on prend $\psi_{min}=1^\circ$).

La direction de la particule après la première collision est déterminée par le tirage de deux autres nombres aléatoires R_2, R_3 compris entre les valeurs 0 et 1. Le premier permet de calculer le paramètre d'impact par : $P= P_{MAX} \sqrt{R_2}$. Le deuxième permet de calculer l'angle azimutal ϕ par : $\phi = 2\pi R_3$. L'angle de diffusion θ et l'énergie de la particule après la diffusion sont calculés.

La deuxième collision aura lieu après un parcours L_s et de la même façon, la direction et l'énergie de la particule seront connues. La même procédure est répétée pour d'autres collisions.

Les situations suivantes peuvent être rencontrées :

- la particule atteint une énergie E_f (définie par l'utilisateur), pour laquelle la particule est considérée comme à l'arrêt.
- la particule quitte complètement la cible (transmission ou réflexion)

L'opération est relancée pour un très grand nombre de particules. L'histoire de chacune (l'énergie de l'état final, le parcours dans la cible) est stockée.

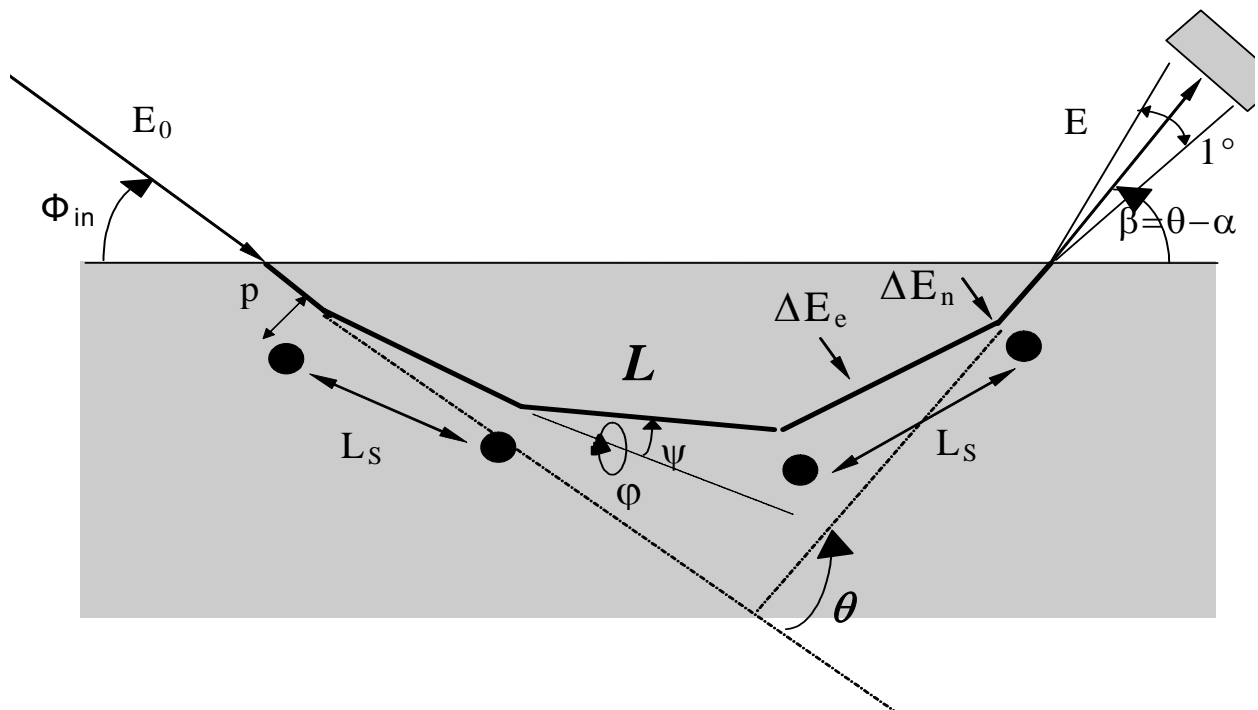


Figure 2.5: Schéma représentant les séquences de collisions dans le solide.

Enfin, il est nécessaire de noter que le code TRIM utilise le potentiel ZBL (paragraphe 4.1 du chapitre 1), et que cette version ne tient pas compte des effets des échanges de charge ni de l'effet image.

6.2 Le coefficient de réflexion par TRIM :

Toutes les informations, sur les particules diffusées par la surface solide, obtenues par le code TRIM sont stockées dans des fichiers de sortie (énergie, parcours, nombre des collisions à l'intérieur de solide, angles intermédiaires)

Ces informations nous permettent d'obtenir les courbes des distributions en longueurs parcourues, ainsi les distributions angulaires du coefficient de réflexion.

CHAPITRE 3 :

Résultats et discussion

1. Introduction :

Dans ce chapitre, nous allons présenter nos résultats concernant les distributions en longueurs et le coefficient de réflexion. Ces résultats seront comparés à ceux obtenus en utilisant le code de calcul TRIM, ainsi qu'à d'autres modèles théoriques. Une discussion détaillée de ces résultats sera donnée.

2. Distributions en longueurs des particules diffusées par une surface solide :

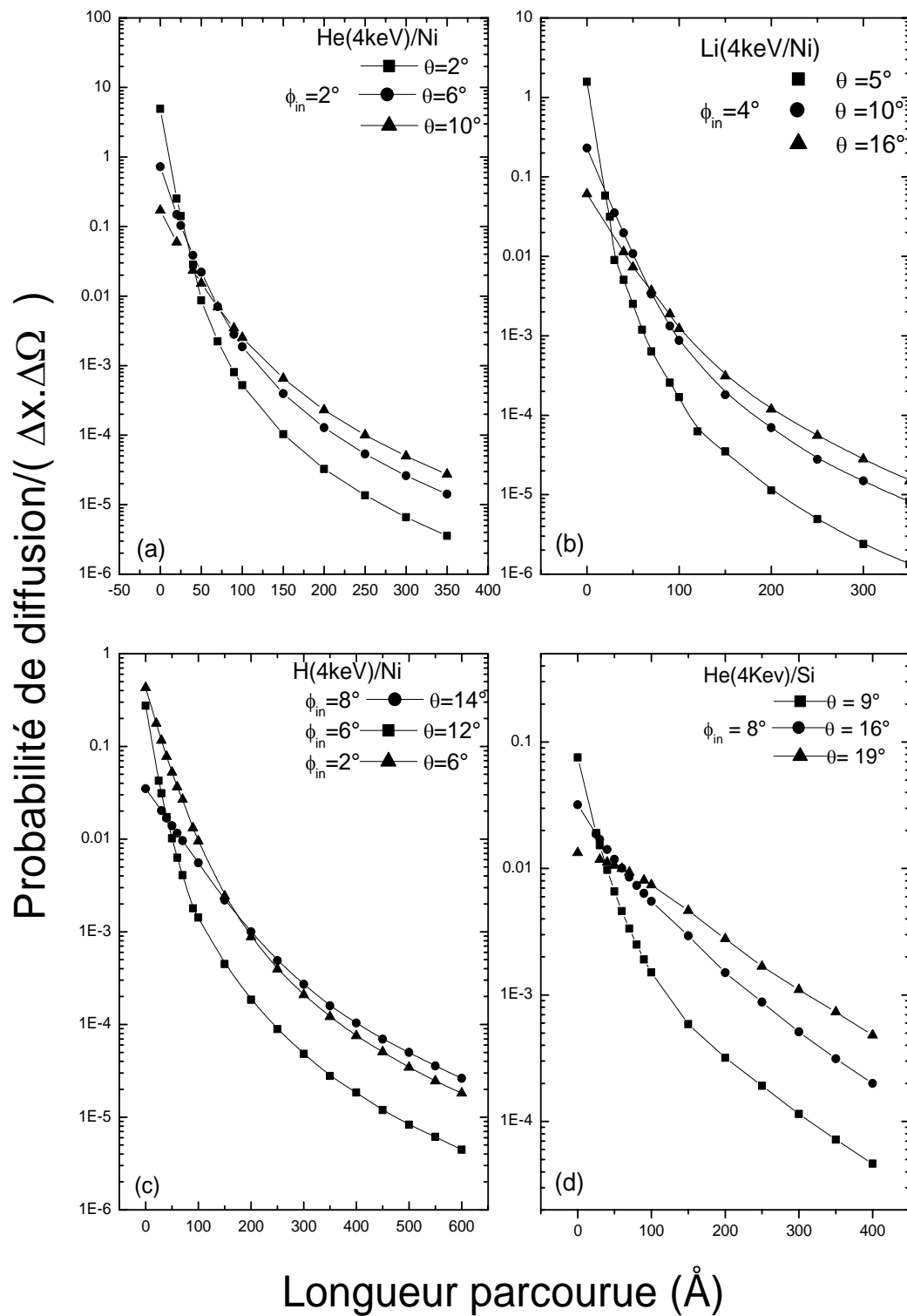
La probabilité de diffusion décrite par notre méthode de simulation (équation 2.27 du chapitre 2) nous a permis de tracer les distributions en longueurs parcourues par les particules incidentes (H, He, Li) sur des surfaces de silicium et de Nickel et ce pour différentes valeurs (jusqu'à 20°) de l'angle d'incidence et de diffusion (figure 3.1)[MEK04a].

Il faut noter ici que nous avons utilisé l'approximation suivante [KHA02] : $x \approx L$. Où x est l'abscisse du point de sortie de la particule diffusée et L est son parcours total dans la cible.

Sur les figures 3.2, nous avons tracé les distributions en longueurs déduites à partir du code de simulation Monte Carlo (TRIM) ainsi que celles obtenues par notre méthode de simulation. La comparaison est effectuée en valeur absolue.

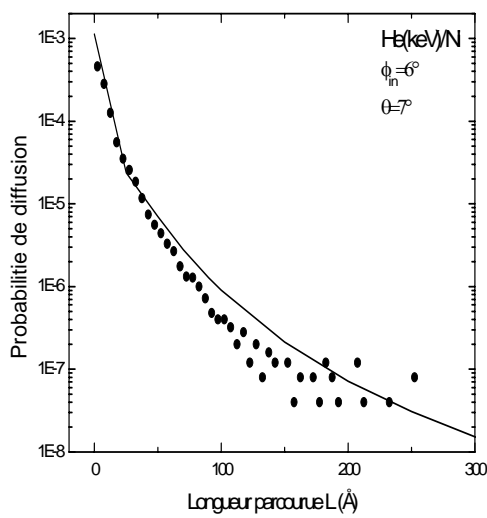
Pour les faibles valeurs du parcours L , un bon accord est obtenu entre notre modèle et la simulation Monte Carlo. Pour les grandes valeurs de L , un léger désaccord est observé. Ce dernier devient plus important pour les grands angles d'incidence et de diffusion. Ceci est attribué au fait que dans notre modèle, la perte d'énergie est négligée. Cette dernière devient importante, et donc non négligeable, pour les grands parcours ainsi que pour les grands angles d'incidence et de diffusion.

Il faut souligner cependant, que la perte d'énergie est plus faible pour des ions incidents légers [WAL92] et pour des angles de diffusion faibles (c'est le cas de notre étude).

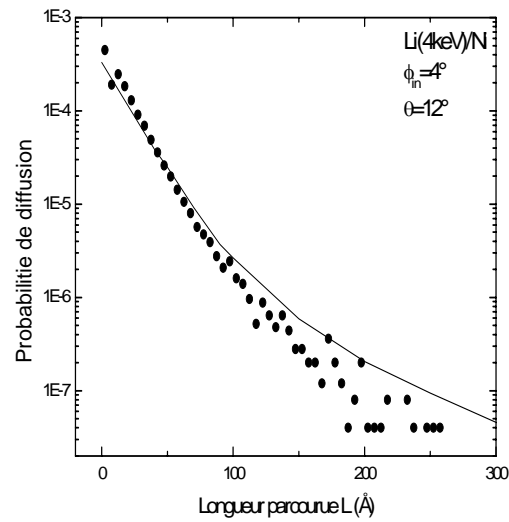


Fig

ure 3.1. Variation de la probabilité ΔP en fonction de la distance totale parcourue pour les systèmes (a) He(4keV)/Ni, (b) Li(4keV)/Ni, (c)H(4keV)/Ni et (d) He(4keV)/Si.



(a)



(b)

Figure 3.2. Distributions en longueurs des particules diffusées : (—) : théorie de transport et (●) : simulation Monte Carlo et ce pour les systèmes (a) : He(4keV)/Ni et (b) : Li(4keV)/Ni.

Les spectres de la figure 3.3 correspondent à la diffusion d'ions H^+ (4keV) par une cible de silicium, pour un angle d'incidence $\phi_{in} = 4^\circ$ et pour différentes valeurs de l'angle de diffusion θ . Les particules diffusées à un grand angle θ perdent plus d'énergie (spectres en énergie plus larges) que celles diffusées à un angle θ faible.

Le problème majeur de cette méthode réside dans le calcul de la probabilité de diffusion ΔP pour les faibles parcours. Les temps de calcul deviennent importants pour des parcours de l'ordre de quelques dizaines d'Angstrom, car dans ce cas la fonction F (équation 2.23 de chapitre 2) devient fortement oscillante.

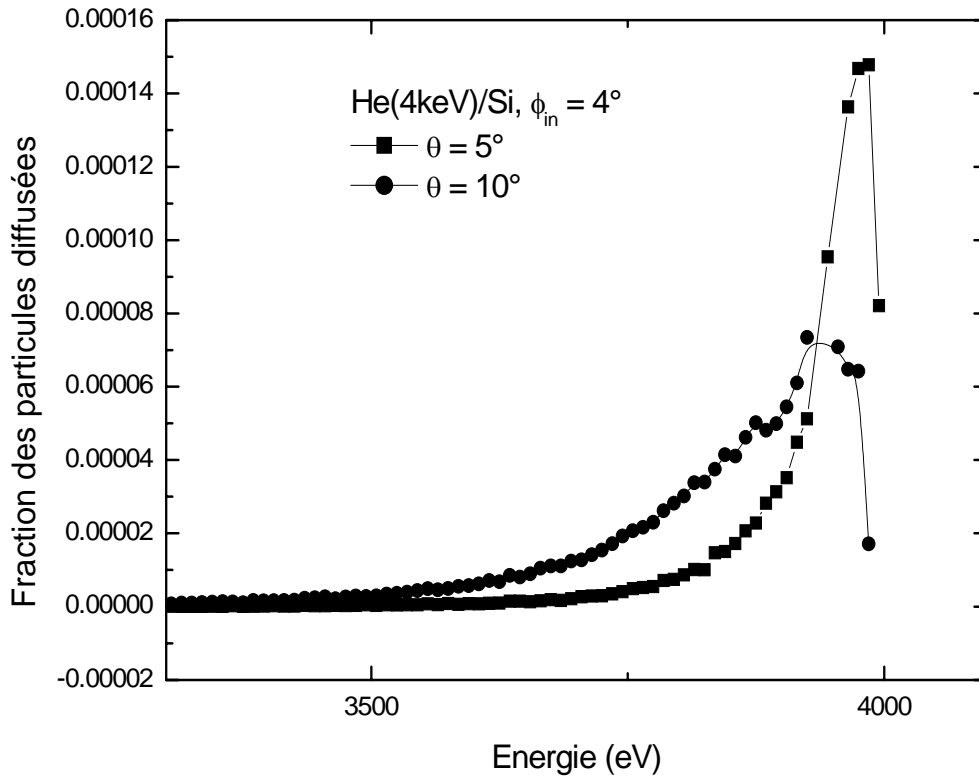


Figure 3.3. Spectres en énergie d'ions He⁺ d'énergie $E_0 = 4\text{keV}$ diffusés par une surface de silicium pour un angle d'incidence $\phi_{in} = 4^\circ$ et différentes valeurs de l'angle de diffusion (simulation Monte Carlo).

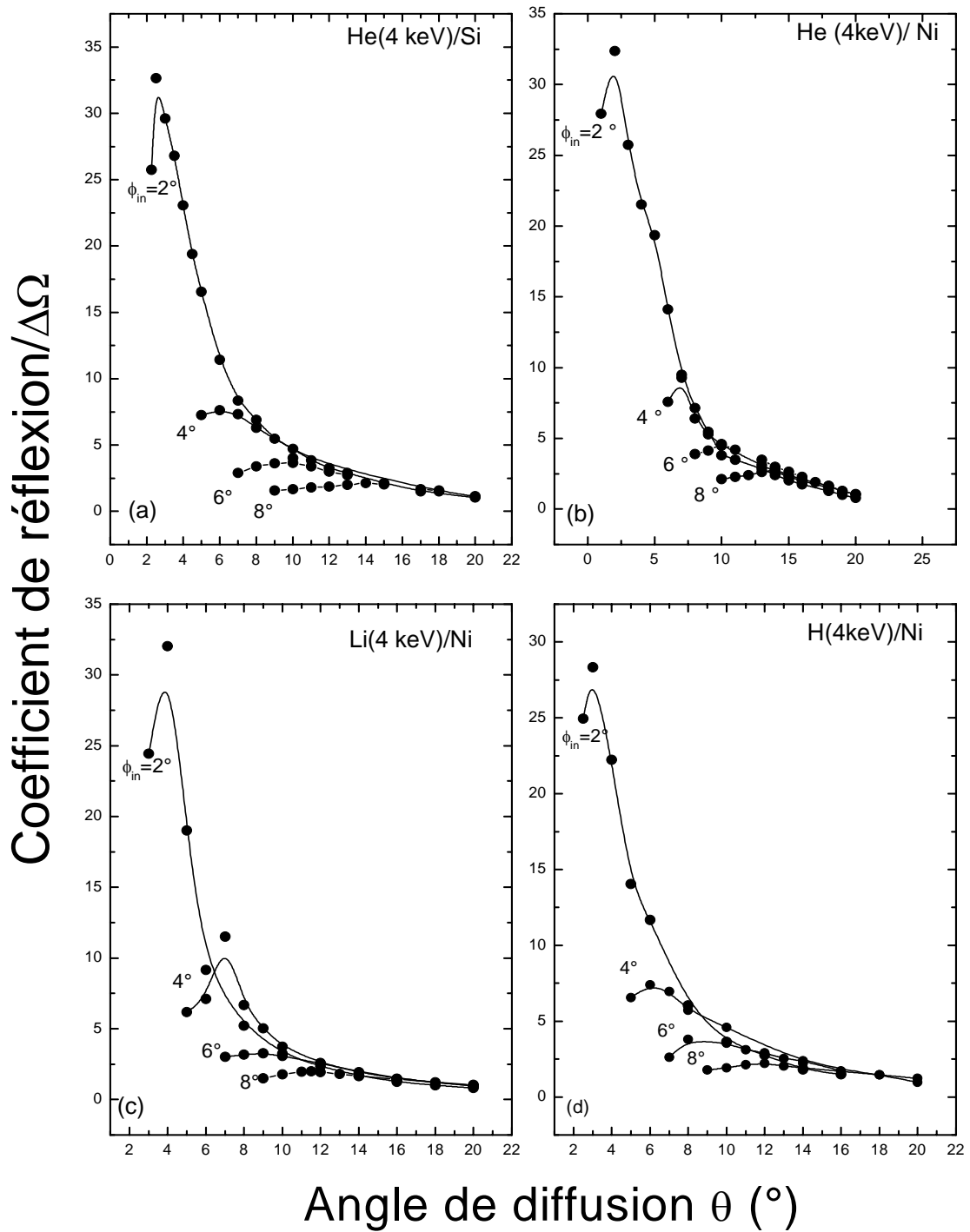
3. Le coefficient de réflexion :

$\Delta P(\theta, \phi_{in}, L, \Delta L)$ est la probabilité pour une particule d'être diffusée dans le plan d'incidence, dans la direction θ et après avoir parcouru dans la cible une distance comprise entre L et $L + \Delta L$. ϕ_{in} est l'angle d'incidence. Le coefficient de réflexion $R(\theta, \phi_{in})$ peut être calculé à partir de cette probabilité en utilisant la relation :

$$R(\theta, \phi_{in}) = \int_0^{\infty} \frac{\Delta P(\theta, \phi_{in}, L, \Delta L)}{\Delta L} dL \quad (3.1)$$

Les figures 3.4 représentent les distributions angulaires du coefficient de réflexion pour des particules incidentes H^+ , He^+ , et Li^+ sur des cibles de Ni et de Si et pour une énergie incidente $E_0 = 4keV$ [MEK04b].

Nous retrouvons bien une courbe en cloche qui présente un maximum pour un angle de diffusion θ_{max} puis décroît. Cette forme est une signature de la présence des collisions multiples. C'est la même allure qui est obtenue dans les résultats expérimentaux (figure 3.5) [MAS63, ZEM01] ainsi que dans les résultats de la simulation Monte Carlo (figure 3.6) et ceux de Firsov [FIR68] et de Remizovich [REM80] (figure 3.7).



Figures 3.4 : Distributions angulaires du coefficient de réflexion calculées dans la théorie de transport, pour les différents angles d'incidence et pour les systèmes (a) :He(4keV)/Si, (b) : He(4keV)/Ni, (c) : Li(4keV)/Ni et (d) : H(4keV)/Ni.

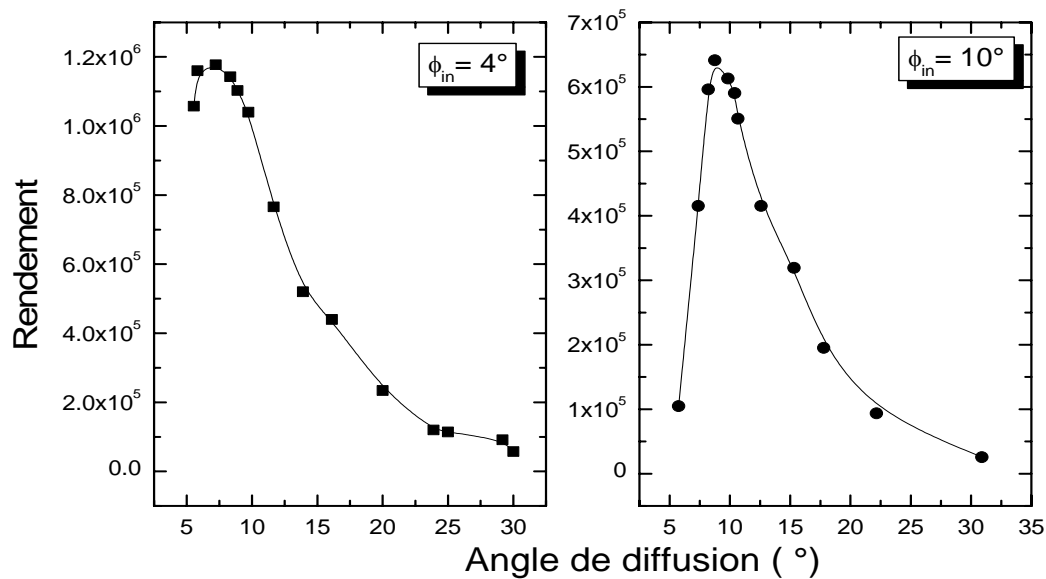


Figure 3.5 : Distribution angulaire du coefficient de réflexion expérimental pour le système Ne(4keV)/Ni [ZEM01].

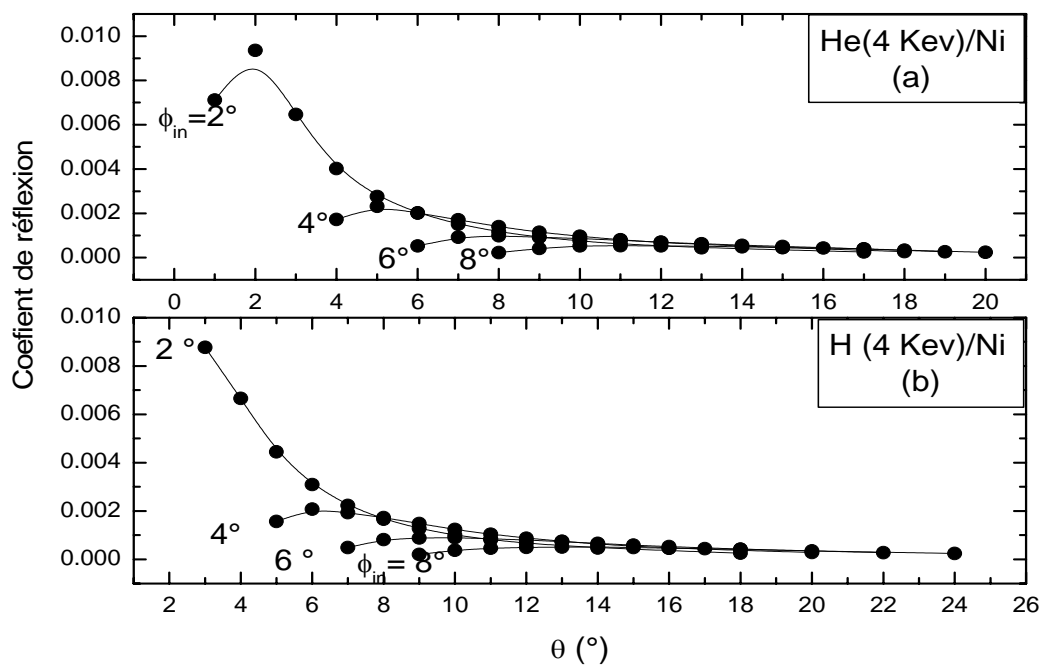


Figure 3.6: Distributions angulaires du coefficient de réflexion obtenues par simulation Monte Carlo pour les systèmes (a) : He(4keV)/Ni et (b) : H(4keV)/Ni.

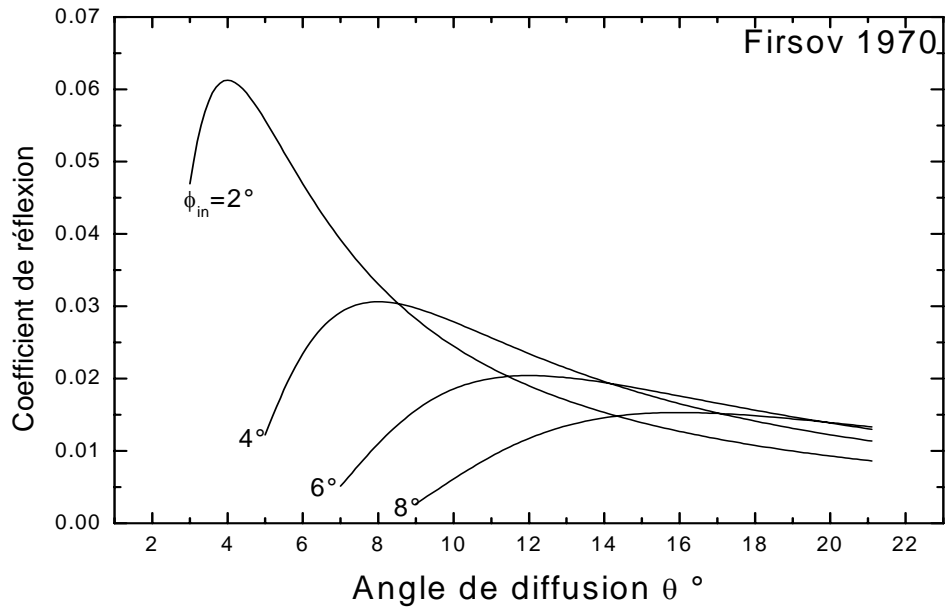


Figure 3.7: Variation du coefficient de réflexion en fonction de l'angle de diffusion θ obtenue par Firsov [FIR70].

4. Comparaison du coefficient de réflexion obtenu dans la théorie de transport à celui calculé par la simulation Monte Carlo (TRIM) :

Le coefficient de réflexion que nous avons calculé dans la théorie de transport a été comparé, en valeur absolue, à celui obtenu par la simulation Monte Carlo (TRIM) et ce pour différents systèmes H(4keV)/Si, $\phi_{in} = 2^\circ$ (figure 3.8) ; He(4keV)/Ni, $\phi_{in} = 6^\circ$ (figure 3.9) , Li(4keV)/Ni, $\phi_{in} = 2^\circ$ (figure 3.10) et H(4keV)/Si, $\phi_{in} = 6^\circ$ (figure 3.11) . D'une façon générale, un assez bon accord est observé entre les deux courbes du coefficient de réflexion. Le désaccord observé, surtout aux faibles angles de diffusion, est lié à la forme de la probabilité de diffusion à ces angles qui décroît très vite dans une gamme de faibles parcours où il est difficile de calculer la probabilité de diffusion ΔP (voir figure 3.1).

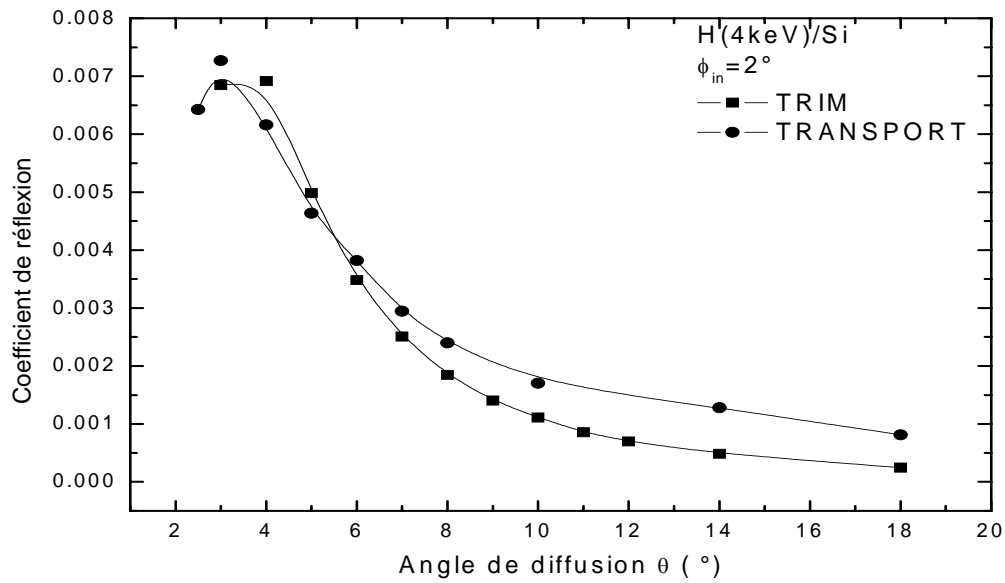


Figure 3.8 : Distribution angulaire du coefficient de réflexion : comparaison théorie de transport-TRIM pour le système H(4keV)/Si, $\phi_{in} = 2^\circ$.

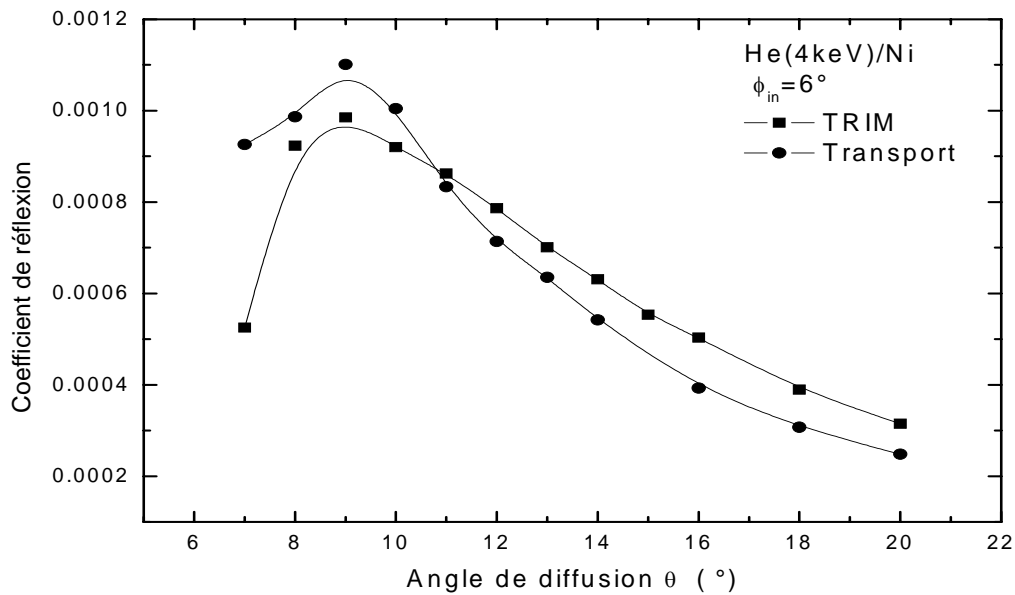


Figure 3.9. : Distribution angulaire du coefficient de réflexion : comparaison théorie de transport-TRIM pour le système He(4keV)/Ni, $\phi_{in} = 6^\circ$.

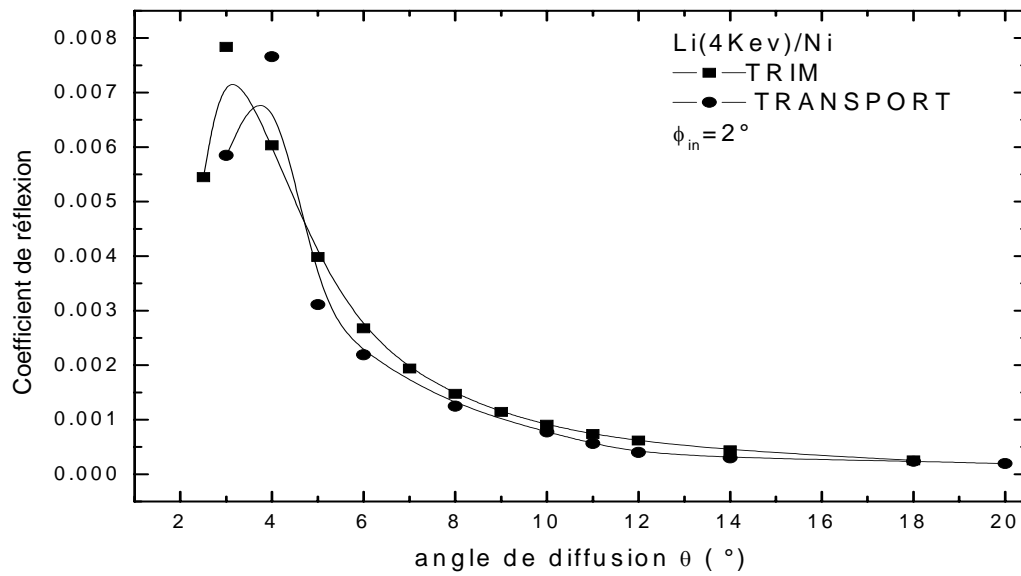


Figure 3.10 .: Distribution angulaire du coefficient de réflexion : comparaison théorie de transport-TRIM pour le système Li(4keV)/Ni, $\phi_{in} = 2^\circ$.

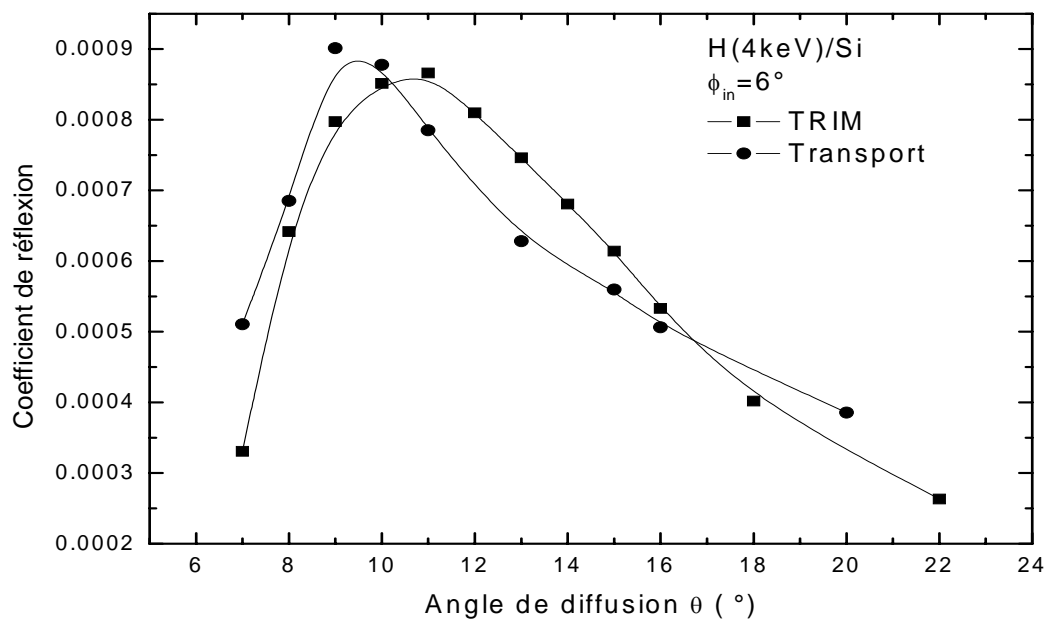


Figure 3.11 .: Distribution angulaire du coefficient de réflexion : comparaison théorie de transport-TRIM pour le système H (4keV)/Si, $\phi_{in} = 6^\circ$.

5. Position du rendement maximum θ_{\max} :

θ_{\max} est la valeur de l'angle de diffusion pour lequel le coefficient de réflexion prend sa valeur maximale (figure 3.4). En étudiant la variation de θ_{\max} en fonction de l'angle d'incidence ϕ_{in} , nous avons trouvé la variation linéaire suivante, et ce pour tous les systèmes étudiés :

$$\theta_{\max} = \eta \cdot \phi_{\text{in}} \quad (3.2)$$

Les figures 3.12 représentent la variation de θ_{\max} en fonction de ϕ_{in} pour les systèmes He(4keV)/Si et He(4keV)/Ni.

Les valeurs obtenues de η , pour les différents systèmes étudiés (He/Si, He/Ni, H/Ni, H/Si et Li/Ni, $E_0 = 4\text{keV}$) sont données et comparées avec ceux obtenues par le code TRIM dans le tableau 3.1. Elles varient légèrement entre 1.5 et 1.6. Firsov et Remisovich trouvent une valeur de η indépendante du système en interaction. Ils obtiennent respectivement $\eta = 1.85$ [FIR68] et $\eta = 1.65$ [REM81]. D'autre part, nous avons remarqué que la simulation Monte Carlo donnait un paramètre η dépendant du choix du parcours C_w avant la première collision. Il a été montré [ZEM01], que η tendait vers la valeur 1.85 pour une valeur $C_w=10\text{\AA}$. Les résultats expérimentaux effectués au cours de cette étude [ZEM01]. donnent une valeur $\eta = 1.65$.

Nous pouvons ainsi dire que les valeurs de η obtenues au cours de notre étude sont assez voisines de celles trouvées dans la littérature.

<i>Système</i>	H/Si	He/Ni	H/Ni	Li/Ni	He/Ne
η					
Transport	1.60	1.58	1.54	1.51	1.51
TRIM	1.75	1.73	1.61	1.44	1.43

Tableau 3.1: Valeurs obtenues du paramètre η pour les différents systèmes étudiés.

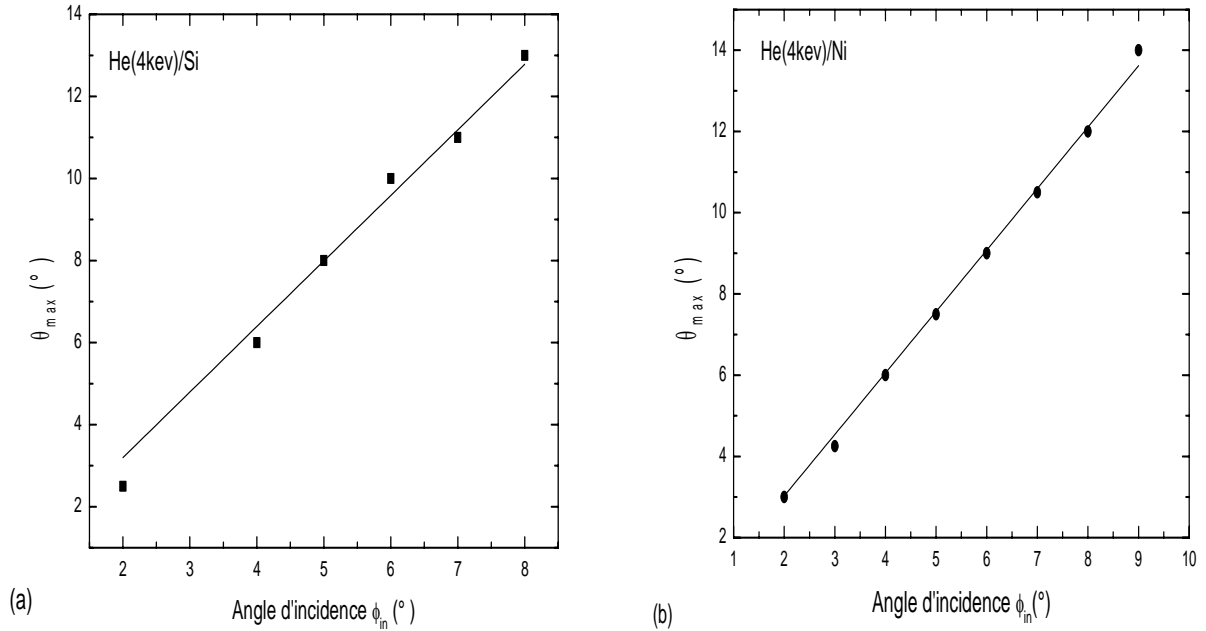


Figure 3.12 : Variation de l'angle de diffusion θ_{\max} en fonction de l'angle d'incidence ϕ_{in} pour les systèmes (a) He(4keV)/Si et (b) He(4keV)/Ni :

6. Variation du rendement de diffusion maximum en fonction de θ_{\max} :

Nous avons étudié la variation de la valeur du rendement maximum R_{\max} en fonction de l'angle de diffusion θ_{\max} et nous avons trouvé la relation suivante :

$$R_{\max} = \frac{B}{\theta^\chi} \quad (3.3)$$

Où B et χ sont des constantes.

La variation de R_{\max} en fonction de θ_{\max} est représentée (figures 3.13) pour les systèmes H(4keV)/Ni et He(4keV)/Ni.

Les valeurs de χ obtenues pour les différents systèmes étudiés dans le cadre de notre travail sont données dans le tableau 3.2. Ces valeurs varient entre 1.63 et 1.95 et sont du même ordre de grandeur que celles obtenues en utilisant la simulation Monte Carlo (TRIM) et le code Marlowe [ZEM01] (voir tableau 3.2).

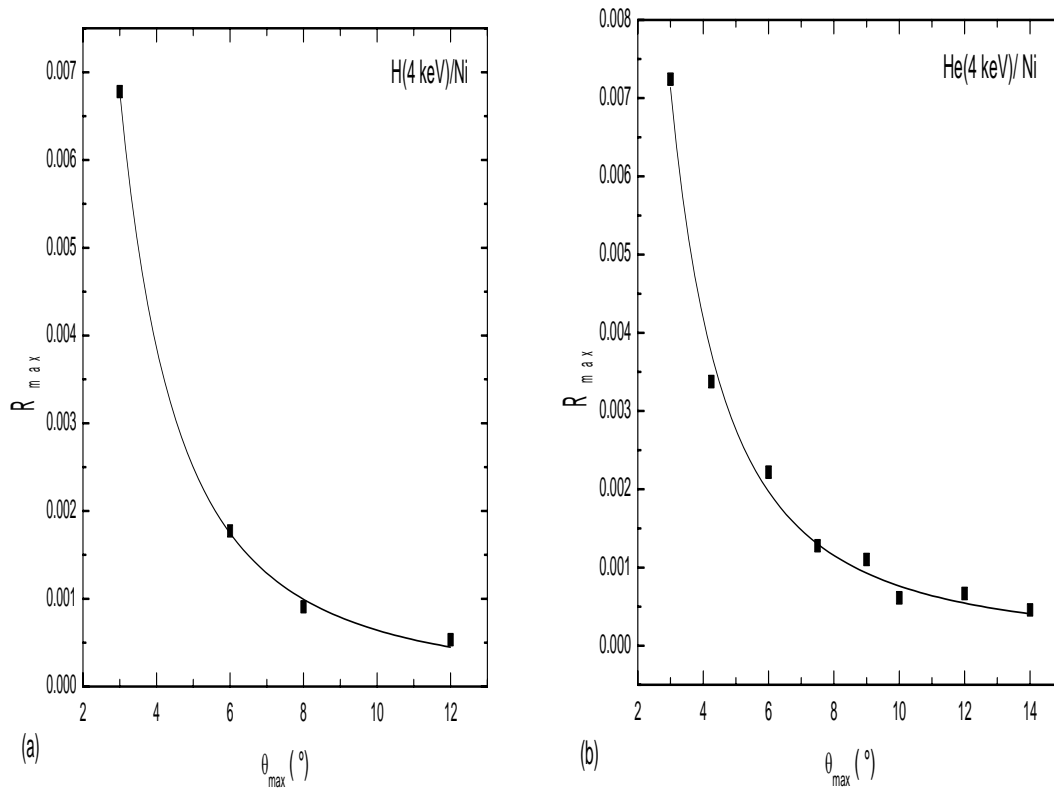


Figure 3.13 : Variation du rendement maximum R_{max} en fonction de l'angle de diffusion θ_{max} pour les systèmes (a) H(4keV)/Ni et (b) He(4keV)/Ni: (■) : valeurs calculées et (—) : valeurs ajustées par la relation: (3.3).

Système	He/Si	He/Ni	H/Ni	Li/Ni	H/Si
Transport	1.63	1.85	1.95	1.72	1.72
TRIM	1.81	1.43	1.61	1.44	2.07
MARLOWE	1.65				

Tableau 3.2 : Valeurs du paramètre χ obtenues dans le cadre de notre étude ainsi que celles obtenues par TRIM et MARLOWE [ZEM01].

7. Etude du coefficient de réflexion en fonction de l'angle de sortie β :

Nous avons tracé le coefficient de réflexion en fonction de l'angle de sortie β pour le système He(4keV)/Ni (figure 3.14). β est mesuré à partir de la surface (voir figure 2.3 du chapitre 2). Pour une valeur donnée de β , le rendement prend sa plus grande valeur pour la plus petite valeur de l'angle d'incidence ϕ_{in} . Ce résultat peut être utilisé expérimentalement lors de la mesure de la fraction de charge due à un transfert résonant. Cette fraction ne dépend pas de la voie d'entrée mais dépend fortement de la voie de sortie. Pour pouvoir mesurer un grand taux de comptage, à un angle β donné, il serait intéressant de se mettre à la plus petite valeur possible de ϕ_{in} en tenant compte des problèmes liés à la rugosité de surface.

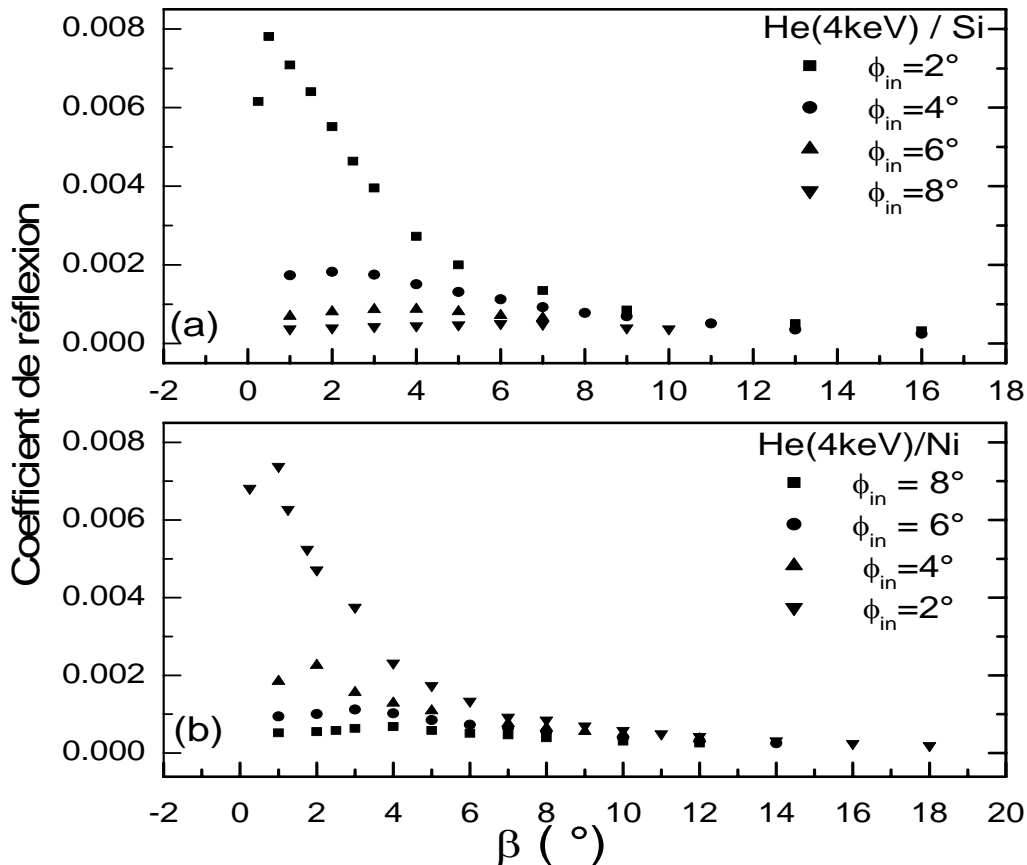


Figure 3.14 : Variation du coefficient de réflexion en fonction de l'angle de sortie β pour les systèmes (a) He(4keV)/Si et (b) He(4keV)/Ni pour différentes valeurs de l'angle d'incidence ϕ_{in}

8. Variation du coefficient de réflexion en fonction de l'énergie des ions incidents :

Nous avons effectué une étude de la variation de la distribution angulaire du coefficient de réflexion en fonction de l'énergie des ions incidents pour le système He/Si et pour un angle d'incidence $\phi_{in} = 4^\circ$. La gamme d'énergie considérée est 2keV-8keV (figure 3.15).

Nous remarquons que le coefficient de réflexion varie très peu lorsque l'énergie augmente. C'est le même résultat auquel a abouti l'étude effectuée [ZEM01] en utilisant la simulation Monte Carlo.

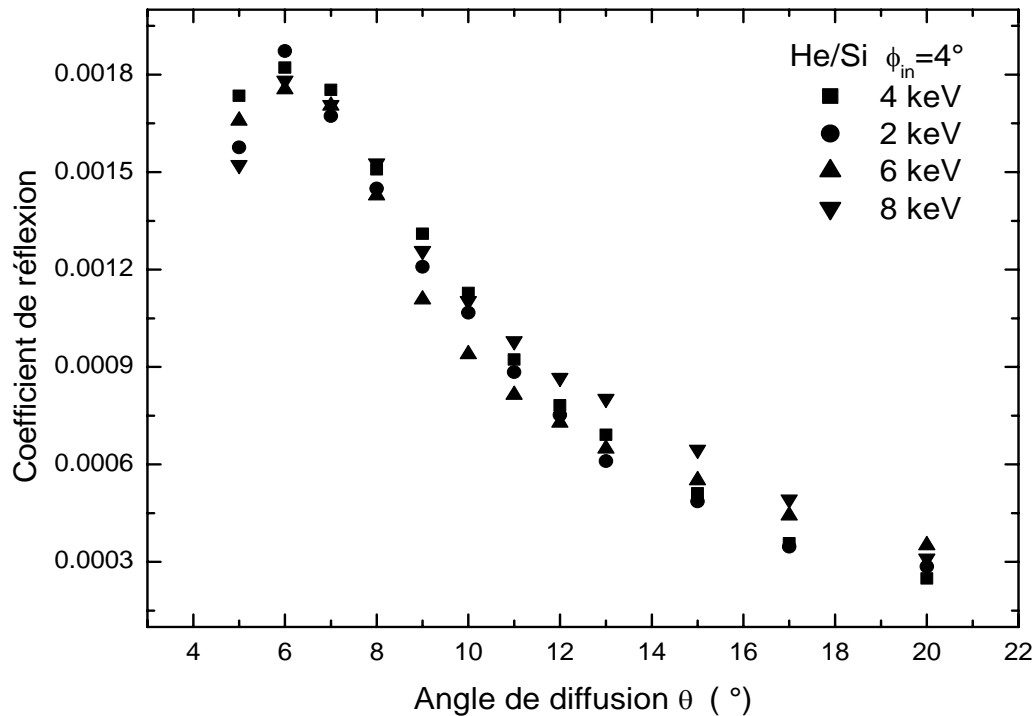


Figure 3.15 : Variation de la distribution angulaire du coefficient de réflexion en fonction de l'énergie des ions incidents pour le système He/Si.

9. Conclusion :

Nous avons étudié dans cette partie la réflexion d'ions légers de basse énergie par des surfaces solides dans la théorie de transport. Nous avons calculé les distributions en longueurs

des ions de H^+ , He^+ , Li^+ par des surfaces de silicium amorphe et de nickel polycristallin. Nous avons considéré le cas des faibles angles d'incidence et de diffusion. A partir de ces dernières, nous avons obtenu les distributions angulaires du coefficient de réflexion.

La comparaison de nos résultats à ceux obtenus expérimentalement ainsi qu'à ceux calculés dans le cadre d'une simulation Monte Carlo montre un bon accord. Le désaccord observé dans certains cas est lié surtout à la difficulté de calculer ΔP aux faibles parcours ainsi qu'aux hypothèses utilisées dans ce modèle (liées essentiellement à la perte d'énergie négligée).

CONCLUSION GENERALE :

Dans ce mémoire, nous présentons une étude du coefficient de réflexion des ions H^+ , He^+ et Li^+ diffusés par des surfaces de silicium et de nickel.

Nous avons utilisé une méthode basée sur la résolution de l'équation de transport, qui a été initialement envisagée pour l'étude des particules transmises à travers une cible solide ayant une certaine épaisseur.

Les probabilités de diffusion des ions en fonction de leurs parcours ont été calculées dans la limite des faibles angles d'incidence et de diffusion et pour les différents systèmes. A partir de ces dernières, le coefficient de réflexion est obtenu. Les distributions angulaires du coefficient de réflexion ont été ainsi calculées pour les systèmes H/Si, He/Si, H/Ni, He/Ni, Li/Ni.

L'étude de la position du rendement maximum θ_{max} en fonction de l'angle d'incidence ainsi que celle de la valeur du rendement maximum R_{max} en fonction de l'angle de diffusion θ sont effectuées. L'effet de l'énergie des ions incidents (gamme 2keV-8keV), sur la valeur du coefficient de réflexion est également étudié.

La comparaison de l'ensemble de nos résultats à ceux obtenus par la méthode de simulation Monte Carlo (TRIM), ou à d'autres résultats trouvés dans la littérature, montre un assez bon accord.

Le léger désaccord observé peut être attribué d'une part aux hypothèses utilisées (perte d'énergie négligée) et d'autre part au fait que le calcul de ΔP devient difficile pour les faibles parcours.

Nous signalons finalement qu'il serait intéressant de trouver un moyen pour calculer la probabilité ΔP plus rapidement pour les faibles distances parcourues. Ceci nous permettrait de compléter ce travail en donnant une expression analytique du coefficient de réflexion.

REFERENCES :

Références:

- [ARE98]: B. Arezki, thèse de magister. USTHB. Alger 1998.
- [BAR72]: M. Barat and H. Lichten Phys. Rev. **A6** (1972) 221.
- [BEN94]: C. Benazeth, P. Benoit-Cattin, P. Cafareli, P. Reyevés, Z. P. Ziesel et N. Benazeth. Nuc. Instr. Meth. B94(1994)581.
- [ECK78]: W. Eckstein, V.A. Molchanov and H. Verbeek. Nuc. Instr. Meth **149** (1978) 599.
- [ECK91]: W. Eckstein. Computer simulation of ion-solid interactions, Springer Verlag Series in Materials Science. Vol10, 1991.
- [FIR68]: O. B. Firsov. O.B1967 Fiz. Tverd. Tela 9.2145 [1968, Sov. Phys-Solide State 9,1687]
- [FIR70]: O. B. Firsov , E. S. Mashkova ,V. A. Molchanov ,and V. A. Snisar. Nucl. Instr. Meth. **132** (1970)695.
- [FIR71]: O. B. Firsov Zh. Teck. Fiz. SSSR 40, 83 [1970, Sov. Phys.-Tech. Phys. 15, 773]
- [HAG54]: H. D. Hagstrum, Phys. Rev. **94** (1997) 332.
- [HOF78]: T. J. Hoffman, H. L. Dodds, M. T Robinson and D. K. Holmes Nuc. Sci. and Eng. **68** (1978) 204.
- [JAC80]: M. M. Jakas and M. M. R Wiliams. J. Phys. D: Appl. Phys. **13** (1980) 1169.
- [KHA98]: K. Khalal-Kouache, A.C. Chami, M. Boudjema, Y. Boudouma, B. Arezki, Alg.J.Adv.Mat. **2** (1998) 87.
- [KHA02]: K. Khalal-Kouache. thèse de doctorat. Alger 2002.
- [KAT88]: M Kato, R.S. Wiliams and M. Aono Nucl. Instr. Meth **B 33** (1988) 462.
- [LIN61]: J. Lindhard M. Scharff, 1961, Phys. Rev. **124**, 128.
- [LIN63]: J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schiott, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Sels. **33** (1963) 14.
- [LIN68]: J. Lindhard, V. Nielsen and M. Scharff. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk **36**, no 10. (1968).
- [LUO93]: Z. Luo, Q. Hou. J. Appl. Phys. Vol **74**. no10 (1993) 6007.
- [LUO02]: Z. A. Luo, C. Gou, Q. Hou, Nucl. Instr. Meth **B193** (2002) 576.
- [MAR75]: A. D. Marwick and P. Sigmund, Nucl. Instr. Meth. **128** (1975) 271.
- [MAS63]: E. S. Mashkova and Molchanov 1962 Doklady Akad, Naur SSSR 146,558 [1963, Sov. Phy. Dokl 7.829]

- [MAS85]: Mashkova E. S. and Molchanov V. A, 1985. Medium Energy Ion Reflection from Solids (North Holland, Amestrdam)
- [MEK04a]: A Mekhtiche, K Khalal-Kouache, A. C. Chami et M. Boudjema . Première Conférence des Rayonnements et ces Application. Alger CNRA2004.
- [MEK04b]: A Mekhtiche, K Khalal-Kouache, A. C. Chami et M. Boudjema. Sixième congrès National de la Physique et ses Application. Tizi-Ouzou. CNPA2004.
- [MEY71]: L. Meyer; Phys. Stat. Sol. **44** (1971) 253.
- [MOL47]: G. Z. Molière. Naturf, **A2**, (1947) 133.
- [MOR89]: W.L. Morgan. Appl. Phys. Lett. **55** (2) (1989)106.
- [MOU97]: S. Mouhammed. These de Doctorat. Toulouse (1997).
- [MUI97]: A Muis and J R Manson, Nucl. Instr. Meth. **B125** (1997) 332.
- [NIE93]: H. Niehus, W. Heiland and E . Taglaurer. Surf. Sci. Rep. **17**(1993) 213.
- [RAB93]: J. W. Rabalais. Low Energy Ion-Surface Interactions 1993 (Wiley series Chemistry and Physics)
- [REM80]: V.S. Remizovich, M.I. Ryazanov, I.S. Tilinin, Zh. Sov. Phys.JETP **25** (1980) 225.
- [REM81]: V.S. Remizovich, M.I. Ryazanov, I.S. Tilinin, Sov. Phys-Tech. Phys, 25(1980)883
- [ROB74]: M T Robinson and I M Torens. Phys. Rev **B9**, 5008(1974).
- [SCO63]: W. T. Scoot, 1963. Rev. Modern Phys. **35**, 231.
- [SID75]: G. Sidenius, N. Andersen , Nucl. Instr. Meth. **126** (1975) 317.
- [SIG74]: P. Sigmund and K. B. Winterbon, Nucl. Instr. Meth. **119** (1974) 541.
- [SIG78]: P. Sigmund J. Heinemeier, F. Besenbacher, P. Hvelplund and H, Knudsen, Instr. Meth **150** (1978) 150.
- [SIG82]: P. Sigmund. Physica Scripta. **28** (1982) 257.
- [SOU85]: R. Souda. M. Aono, C. Oshima, S. Otani and Y. Ishizawa. Surface Sci. **150** (1985) 159.
- [SOU86]: R. Souda, M. Aono, Nucl. Instr. Meth. **B15** (1986) 114.
- [SOU90]: R. Souda, T. Aizawa, C. Oshima, Y. Ishizawa. Nucl. Instr. Meth. **B45** (1990) 364.
- [VER76]: L. K. Verhey, B. Poelsema and A. L. Boers Nucl. Instr. Meth **B 132** (1976) 565
- [WAL92]: K. T. Waldeer, H. M. Urbassek. J. Phys. A: Math. Gen. **25** (1992)807.
- [WIN70]: K. B. Winterbon, P, Sigmund and J. B. Sanders. Mat. Fys. Medd. Dan Vid. Selsk. 37, no **14** (1970).
- [WIN92]: H . Winter, Europhys. Left. 18 (1992) 207.

[ZEM01]:R. Zemih. Thèse de Magister. Alger 2001.

[ZEM02]: R. Zemih, M. Boudjema, C. Benazeth, Y. Boudouma, A.C.Chami. Nucl. Instr. and Meth. **B193** (2002) 396.

[ZIE85]: J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark. The stopping and ranges of ions in solids Interaction. Pergamon Press. New York 1985.