

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
« HOUARI BOUMEDIENE »

FACULTE DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du Diplôme de

MAGISTER EN PHYSIQUE

Spécialité : **Sciences Nucléaires et Interaction Rayonnement Matière**

Par : NEFFAI Mohammed

Thème :

*SIMULATION DE LA DIFFUSION D'IONS He⁺ (4keV)
PAR UNE SURFACE DE SILICIUM*

Soutenu publiquement, le 14 / 06 / 2012, devant le jury composé de :

Mme A.H. Hamici	Maître de conférences A à l'USTHB	Présidente
Mme K. Khalal-Kouache	Professeur à l'USTHB	Directrice de thèse
Mr S. Ouichaoui	Professeur à l'USTHB	Examineur
Mr M. Djebli	Professeur à l'USTHB	Examineur
Mme L. Rouaiguia	Maître de conférences A à l'USTHB	Examinatrice
Mr A. Mekhtiche	Maître assistant à l'université de Médéa	Invité

Dédicaces

Je dédie ce travail :

A ma grande mère.

*A mes très chers parents pour leur grande affection,
leur soutien et leur encouragement tout au long de ma
formation.*

Merci chers parents

A mes frères et mes sœurs.

Sans oublier tout mes amis .

Mohammed

Remerciements

El hamdou li ALLAH, après lui.

Je n'aurais pu mener à bien ce travail sans l'aide et la présence de certaines personnes.

Je remercie en premier lieu, ma promotrice Madame Khalal-Kouache Karima, pour avoir accepté de diriger ce travail, pour sa patience et ses encouragements, pour le soin qu'il a apporté à la correction de ce mémoire.

Je remercie le professeur S. Kessal,, responsable du Laboratoire des Sciences Nucléaires et Interactions Rayonnements-Matière, pour m'avoir accueilli au sein de son groupe de recherche.

J'exprime ma reconnaissance à Madame A.H.Hamici, Maître de conférences à l'USTHB de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance. Qu'elle trouve ici l'expression de mon profond respect.

J'adresse également mes plus vifs remerciements à Messieurs:

S. Ouichaoui, Professeur à l'USTHB, M. Djabli, Professeur à l'USTHB, Melle L. Rouaiguia, Maître de conférences à l'USTHB, pour avoir accepté d'évaluer le présent travail.

Je remercie aussi tous mes enseignants de SNIRM qui ont contribué à ma formation, en particulier Messieurs : Y. Boudouma, A.C.Chami et M. Boudjema, Professeurs à l'USTHB.

Je remercie tout le groupe de recherche de laboratoire SNIRM.

En fin j'exprime ma profonde et sincère gratitude à toutes les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de ce travail et qui m'ont encouragé et soutenu tout au long de ce travail.

Mohammed

Table des matières

Introduction	6
Chapitre I : Généralités sur les mécanismes d'interaction ion-matière à basse énergie	9
I.1. Introduction	10
I.2. Diffusions multiples.....	11
I.3. Cinématique de la collision élastique.....	12
I.4. Potentiel d'interaction.....	15
I.5. Section efficace de diffusion.....	16
I.6. Perte d'énergie.....	17
I.6.1. Perte d'énergie élastique.....	17
I.6.2 Perte d'énergie inélastique.....	18
I.7. Potentiel image.....	19
I.8. Processus d'échange de charge.....	21
I.8.1. Processus de transfert de charge en surface.....	21
I.8.1.1. Transfert mono-électronique.....	22
I.8.1.2. Transfert bi-électronique	22
I.8.2. Echange de charge en volume : collision proche.....	22
Chapitre II : Description de la méthode de simulation	23
II.1 Introduction.....	24
II.2.Théorie de transport.....	24
II.3. Dynamique Moléculaire.....	25
II.4. Simulation Monte Carlo.....	25
II.5. Le code TRIM.....	26
II.6. Construction des spectres TOF.....	30

Chapitre III : Résultats et discussion

.....	31
III.1.Introduction.....	32
III.2. Exemple de spectre de diffusion simulé.....	32
III.3. Effet de la perte d'énergie électronique sur les spectres de diffusion.....	33
III.4. Effet du potentiel d'interaction sur les spectres de diffusion.....	39
III.5. Comparaison des spectres simulés à des spectres expérimentaux.....	45
III.5.1. Introduction.....	45
III.5.2. Comparaison des spectres simulés à des spectres expérimentaux.....	48
III.6. Conclusion	54
Conclusion générale	57
Références	59

Introduction

Introduction

Les importants progrès des sciences des matériaux sont intimement liés au développement de méthodes permettant de caractériser un solide à l'échelle microscopique. Quel que soit le type de matériau: métal, semi-conducteur, ou isolant, ses propriétés macroscopiques dépendent énormément de ses caractéristiques microscopiques. Aujourd'hui, de nombreuses techniques sont utilisées pour l'analyse des matériaux.

Certaines techniques utilisent les faisceaux d'ions pour l'analyse des cibles solides (RBS : Rutherford Backscattering Spectroscopy, ERDA : Elastic Recoil Detection Analysis, NRA : Nuclear Reaction Analysis)[FEL86].

Lorsque l'énergie des ions est faible (de l'ordre du keV), ces faisceaux d'ions nous permettent d'étudier les surfaces solides. C'est le cas des techniques LEIS (Low Energy Ion Scattering) et ISS (Ion Scattering Spectroscopy). [RAB94].

La simulation numérique est devenue un outil nécessaire pour l'interprétation des résultats obtenus au cours des expériences de diffusion d'ions par une surface solide [ECK91]. Le perfectionnement des méthodes de calcul et l'augmentation rapide de la puissance des ordinateurs ont rendu la simulation particulièrement attractive pour une meilleure compréhension des processus d'interaction ion-surface et ainsi une meilleure interprétation des résultats expérimentaux obtenus dans ce cadre.

A basse énergie, différents processus d'interaction entre le projectile et la cible solide sont présents : diffusions multiples, perte d'énergie, échange de charge ...

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la diffusion d'ions $^4\text{He}^+$ d'énergie $E_0 = 4 \text{ keV}$ par une surface de silicium amorphe. Différentes valeurs de l'angle d'incidence et de diffusion ont été considérées. Nous avons étudié l'effet du potentiel d'interaction et celui de la perte d'énergie électronique sur les spectres de diffusion simulés. Nous avons utilisé pour cela, un code de simulation basé sur la méthode Monte Carlo. Ce code est basé sur l'approximation des collisions binaires et il tient compte des diffusions multiples dans le solide.

Introduction

Nous avons effectué également une comparaison entre nos spectres simulés et ceux obtenus expérimentalement.

Le manuscrit est organisé comme suit : dans le premier chapitre, nous allons présenter les mécanismes d'interaction ion-matière à basse énergie (potentiel d'interaction, perte d'énergie, échange de charge et potentiel image).

Le deuxième chapitre sera consacré à la description de la méthode de simulation utilisée dans ce travail pour le calcul des spectres de diffusion en temps de vol.

Dans le troisième chapitre, nous allons présenter les résultats relatifs à l'étude de l'effet de la perte d'énergie électronique et celui du potentiel d'interaction sur les spectres simulés. Nous y présenterons également une comparaison des spectres simulés à des spectres expérimentaux suivie d'une discussion.

Les principaux résultats de ce travail seront résumés dans la conclusion.

CHAPITRE I

Généralités sur les mécanismes d'interaction

ion-matière à basse énergie

I.1. Introduction :

Les faisceaux d'ions ont été utilisés pour l'analyse et la caractérisation structurale des cibles solides [DRA04, TAG04]. Lorsque l'énergie des ions incidents est faible (de l'ordre de quelques keV), l'interaction se fait essentiellement avec la surface (quelques centaines d'Angstrom), ce qui permet d'effectuer une analyse chimique et une caractérisation structurale des surfaces solides [RAB94, SMI97].

La technique LEIS (Low Energy Ion Scattering) [RAB94] est largement utilisée dans ce cadre. Cette technique consiste à envoyer un faisceau d'ions lents sur une cible solide et à détecter les particules diffusées dans une direction donnée (figure I.1). α et θ sont les angles d'incidence et de diffusion respectivement. Le temps de vol (TOF : Time Of Flight) est le temps que met la particule diffusée pour parcourir la distance cible-détecteur. Ce temps est mesuré pour chaque particule détectée.

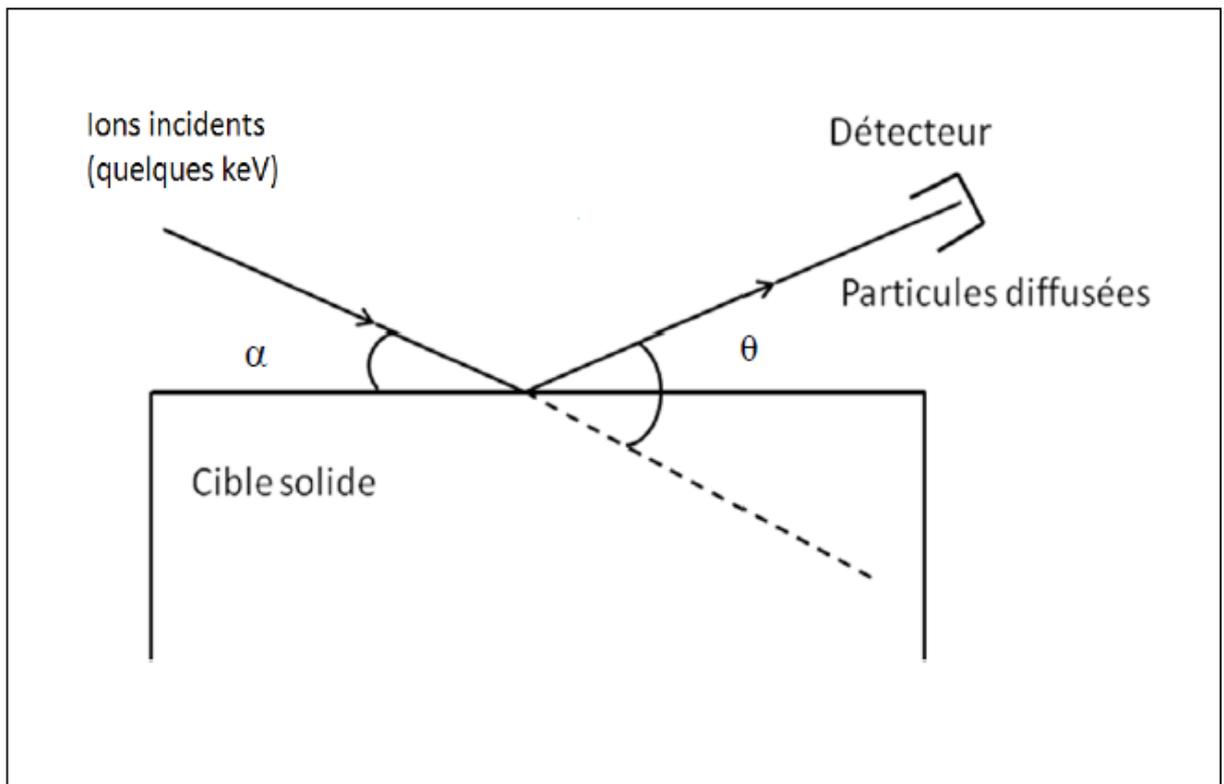


Figure I.1. Diffusion d'ions lents par une surface solide.

Dans le cas de l'interaction d'ions lents avec la matière, différents processus sont présents et font l'objet de nombreuses études théoriques [FEL86] et expérimentales [WIN02] : diffusions multiples, perte d'énergie, processus d'échange de charge ...

La simulation numérique des spectres de diffusion en temps de vol constitue un bon outil pour une meilleure compréhension de tous ces processus.

Il est à noter qu'au cours de l'interaction d'un ion de basse énergie avec une surface solide, il est possible d'effectuer un traitement classique pour décrire le mécanisme de la collision. Ceci est justifié par le fait que la longueur d'onde λ associée à l'ion incident de masse M_1 et d'énergie E_0 et qui est donnée par la relation de De Broglie $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2M_1E_0}}$, est toujours plus petite devant la distance interatomique (de l'ordre de l'Angstrom). h est la constante de Planck.

I.2. Diffusions multiples :

Dans cette gamme d'énergie (quelques keV), le calcul des spectres de diffusion, basé uniquement sur des collisions simples, ne peut pas expliquer l'élargissement des spectres observés expérimentalement [ARE97]. En effet, la section efficace de diffusion augmente lorsque l'énergie diminue et le libre parcours moyen du projectile devient de l'ordre de grandeur de la distance interatomique dans la cible. Les collisions multiples deviennent importantes. Ainsi, le projectile effectue plusieurs collisions successives dans la cible solide avant sa diffusion ou son arrêt [AND97].

Par ailleurs, il est possible de décrire la trajectoire de chaque projectile dans la cible comme une séquence de collisions binaires [NIE93]. L'approximation de la BCA (Binary Collision Approximation) est valable dans cette gamme d'énergie. Ainsi et dans chaque collision, le projectile n'interagit qu'avec un seul atome cible à la fois.

I.3. Cinématique de la collision élastique:

Considérons la collision élastique entre une particule de masse M_1 animée d'une vitesse \vec{V}_0 avec une particule au repos de masse M_2 . Après la collision, le projectile acquiert une vitesse \vec{V}_1 et l'atome cible une vitesse \vec{V}_2 . θ est l'angle de diffusion du projectile et ϕ est l'angle de recul de l'atome cible par rapport à la direction d'incidence (figure I.2). Ces grandeurs sont définies dans le référentiel du laboratoire.

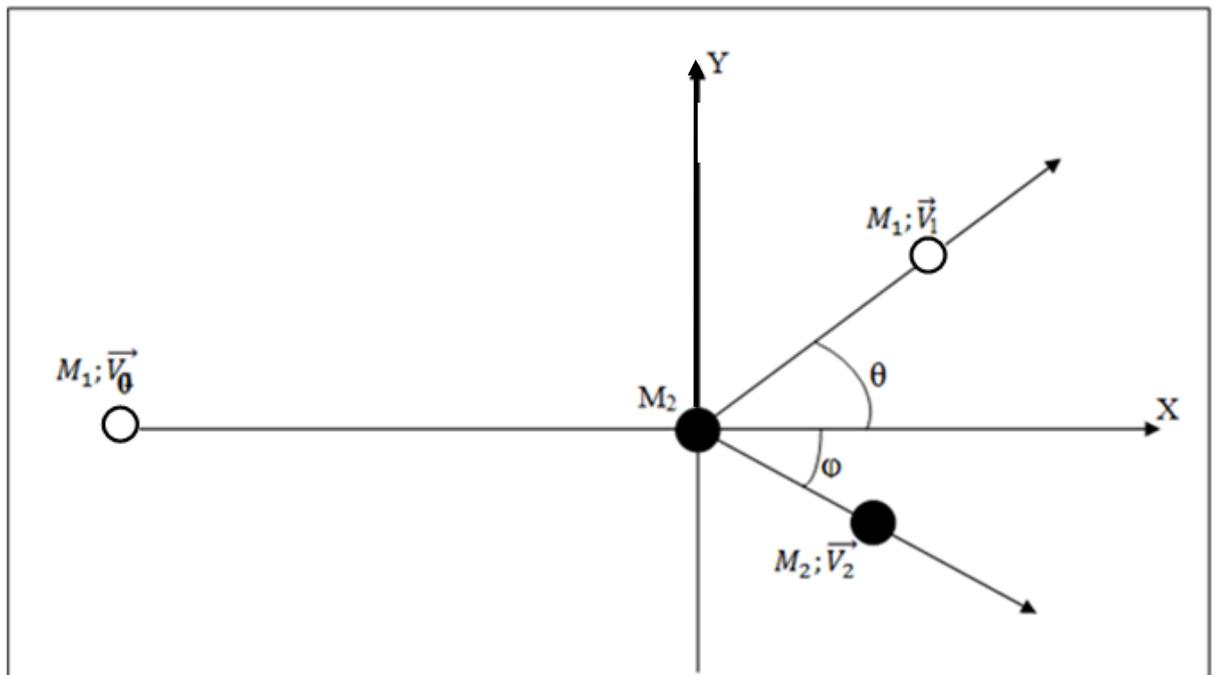


Figure I.2. Représentation schématique de la collision élastique d'un ion de masse M_1 avec un atome de la cible de masse M_2 .

L'interaction entre ces deux particules est décrite par le potentiel $V(r)$ où r est la distance entre ces deux particules.

La collision est dite élastique si l'énergie cinétique totale de ces particules est conservée. Ainsi, la configuration électronique des deux particules n'est pas modifiée.

Les règles de conservation de l'énergie cinétique et de la quantité de mouvement totale du système formé par ces deux particules, nous permet de calculer E_1 , l'énergie du projectile après la diffusion :

$$E_1 = K E_0 \tag{I.1}$$

E_0 est l'énergie initiale de la particule incidente et K est le facteur cinématique défini par la relation suivante :

$$K = \left(\frac{\cos \theta \pm \sqrt{A^2 - \sin^2 \theta}}{A+1} \right)^2 \tag{I.2}$$

Où :

$$A = \frac{M_2}{M_1} \tag{I.3}$$

Si $A > 1$, seul le signe (+) est considéré dans l'équation (I.2).

En étudiant la collision dans le référentiel lié au centre de masse (cdm), le problème de deux particules est réduit à celui d'une particule fictive de masse μ donnée par [FEL86] :

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \tag{I.4}$$

La figure I.3 représente une collision élastique dans le système du centre de masse où p est le paramètre d'impact.

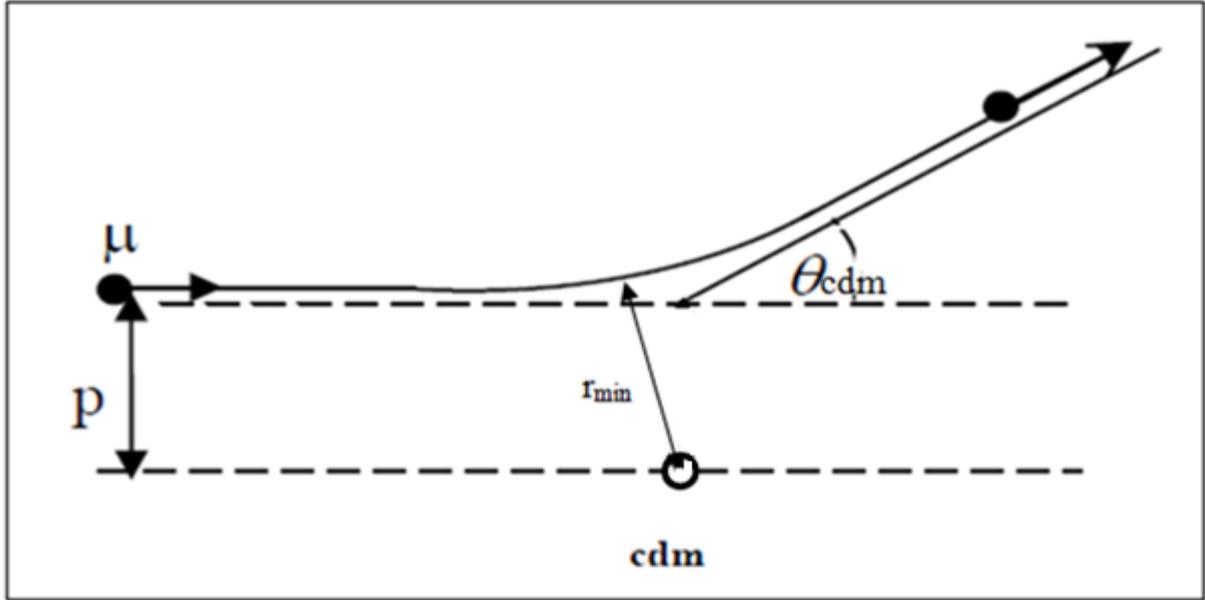


Figure I.3. Schéma représentant une collision binaire entre deux particules dans le système lié au centre de masse.

Les lois de conservation de l'énergie et du moment cinétique permettent de calculer l'angle de diffusion dans le système lié au centre de masse θ_{cdm} [RAB94] :

$$\theta_{cdm} = \pi - 2p \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{dr}{\sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{cdm}} - \frac{p^2}{r^2}}} \quad (I.5)$$

E_{cdm} est l'énergie cinétique disponible dans le référentiel du centre de masse, elle est donnée par la relation :

$$E_{cdm} = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_0 \quad (I.6)$$

$V(r)$: est le potentiel d'interaction entre les deux particules.

r_{min} est la distance minimale d'approche. C'est la solution de l'équation suivante:

$$1 - \frac{V(r_{min})}{E_{cdm}} - \frac{p^2}{r_{min}^2} = 0 \quad (I.7)$$

L'angle de diffusion dans le système du laboratoire θ peut être exprimé en fonction de l'angle de diffusion dans le système de centre de masse θ_{cdm} comme suit [FEL86] :

$$\tan \theta = \frac{\sin \theta_{cdm}}{\frac{M_1}{M_2} + \cos \theta_{cdm}} \quad (\text{I.8})$$

I.4. Potentiel d'interaction :

L'interaction du projectile avec l'atome cible, de numéros atomiques respectifs Z_1 et Z_2 , est décrite en utilisant un potentiel coulombien écranté par la présence d'électrons. Ce potentiel s'écrit sous la forme [RAB 94]:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (\text{I.9})$$

e est la charge de l'électron, $\Phi\left(\frac{r}{a}\right)$ est la fonction d'écran et a est le rayon d'écran. Les fonctions d'écran de Thomas-Fermi-Molière $\Phi(\text{TFM})\left(\frac{r}{a}\right)$ [MOL47] et de Ziegler-Biersack-Littmark $\Phi(\text{ZBL})\left(\frac{r}{a}\right)$ [ZIE85] sont les plus utilisées. La fonction d'écran de TFM est une approximation analytique de la fonction de Thomas-Fermi obtenue numériquement dans le cadre du modèle statistique de Thomas-Fermi [MOL47]. La fonction de ZBL a été obtenue moyennant un calcul basé sur la méthode de Hartree-Fock-Slater et effectué pour plusieurs couples (Z_1, Z_2) .

Généralement, la fonction d'écran se met sous la forme suivante :

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \exp\left(-\beta_i \frac{r}{a}\right) \quad (\text{I.10})$$

α_i et β_i sont des constantes semi-empiriques.

Avec :

$$\sum \alpha_i = 1 \quad (\text{I.11})$$

Les valeurs des constantes α_i et les β_i pour les potentiels ZBL et TFM sont données dans le tableau I.1.

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

Tableau I.1. Valeurs des constantes α_i et β_i pour les potentiels ZBL [ZIE85] et TFM [MOL47].

Le rayon d'écran utilisé pour le potentiel ZBL est :

$$a_{\text{ZBL}} = \frac{0.8853 a_0}{\sqrt{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}}} \quad (\text{I.12})$$

Alors que pour le potentiel TFM, on utilise le rayon d'écran suivant :

$$a_{\text{MOL}} = \frac{0.8853 a_0}{\sqrt{(Z_1^{\frac{1}{2}} + Z_2^{\frac{1}{2}})^{\frac{2}{3}}}} \quad (\text{I.13})$$

Dans les équations (I.12) et (I.13), a_0 désigne le rayon de Bohr qui est donné par la relation :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \quad (\text{I.14})$$

Où m est la masse de l'électron.

I.5. Section efficace de diffusion :

La section efficace différentielle de diffusion est définie par :

$$\sigma = \pi p^2 \quad (\text{I.15})$$

$$d\sigma = 2\pi p dp \quad (\text{I.16})$$

L'introduction des paramètres réduits par Lindhard et al [LIN63] a permis d'avoir une expression simplifiée de la section efficace:

$$d\sigma = \frac{\pi a^2}{2} \frac{f(t^{\frac{1}{2}})}{t^{\frac{3}{2}}} dt \quad (\text{I.17})$$

$f(t^{\frac{1}{2}})$ est la fonction universelle de diffusion.

$$t^{\frac{1}{2}} = \varepsilon_e \sin \frac{\theta_{cdm}}{2} \quad (\text{I.18})$$

ε_e est l'énergie réduite, elle est définie par :

$$\varepsilon_e = \frac{aM_2}{Z_1Z_2(M_1+M_2)e^2} E_0 \quad (\text{I.19})$$

I.6. Perte d'énergie :

Lors de son déplacement dans la cible, le projectile perd de l'énergie. La perte d'énergie est un élément fondamental dans l'étude de l'interaction des ions avec la matière.

I.6.1. Perte d'énergie élastique :

Le projectile perd de l'énergie au cours d'une collision élastique avec un atome de la cible. Cette perte d'énergie est également appelée perte d'énergie nucléaire.

L'énergie transmise à la particule cible se met sous la forme :

$$T = \frac{T_{max}}{1 + \left(\frac{2p}{r_{min}}\right)^2} \quad (\text{I.20})$$

L'énergie maximale transférée T_{max} correspond à un choc frontal (où le paramètre d'impact est nul et l'angle de diffusion est égal à 180°). Elle est donnée par la relation [FEL86] :

$$T_{max} = \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \quad (\text{I.21})$$

La perte d'énergie nucléaire est définie par [LIN63]:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = -N \int_{\sigma(T_{min})}^{\sigma(T_{max})} T d\sigma(T, E_0) \quad (\text{I.22})$$

Où N est le nombre d'atomes par unité de volume dans la cible et σ la section efficace de transfert d'énergie.

En utilisant la fonction universelle et la distance réduite ρ définie par la relation :

$$\rho = 4\pi a^2 x N \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (\text{I.23})$$

le pouvoir d'arrêt nucléaire réduit s'écrit sous la forme [LIN63] :

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = \frac{1}{\varepsilon} \int_0^\varepsilon f\left(t^{\frac{1}{2}}\right) dt^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.24})$$

I.6.2. Perte d'énergie inélastique:

L'interaction du projectile avec le cortège électronique des atomes de la cible correspond à la perte d'énergie inélastique ou électronique.

Pendant la collision, chaque ion incident peut interagir de façon inélastique avec les atomes de la cible ce qui conduit à des excitations électroniques et à l'ionisation des atomes au voisinage de la trajectoire des ions. Les interactions inélastiques entre les ions incidents et les atomes cibles sont beaucoup plus complexes que les interactions élastiques. Ceci est dû au fait que les interactions inélastiques ne peuvent pas être décrites par des chocs entre deux corps. En effet, au cours de ces collisions, chaque ion incident interagit avec plusieurs électrons qui sont eux-mêmes liés aux noyaux de la cible. Le pouvoir d'arrêt électronique est proportionnel à la vitesse v de l'ion à basse énergie et il est souvent décrit par le modèle LSS exprimé comme suit [LIN63]:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = 8\pi e^2 a_0 \frac{Z_1^{\frac{7}{2}} Z_2}{(Z_1^{\frac{3}{2}} + Z_2^{\frac{3}{2}})^2} \frac{v}{v_0} \quad (\text{I.25})$$

v_0 : vitesse de Bohr.

En première approximation, les collisions élastiques et inélastiques considérées comme indépendantes, nous pouvons écrire :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_T = \left(\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE}{dx}\right)_n \quad (\text{I.26})$$

I.7. Potentiel image :

Lors du passage d'une particule chargée au voisinage d'une surface solide, une charge image de signe opposé est créée à l'intérieur du solide [WIN02]. Sous l'effet de la force image \vec{F}_{im} (figure I.4), la trajectoire de l'ion incident subit alors une courbure à l'entrée et à la sortie de la surface solide. Ainsi, l'angle d'incidence effectif α_s sera différent de l'angle mesuré α_v . Il en sera de même pour les angles de sortie β_s et β_v comme le montre la figure I.4.

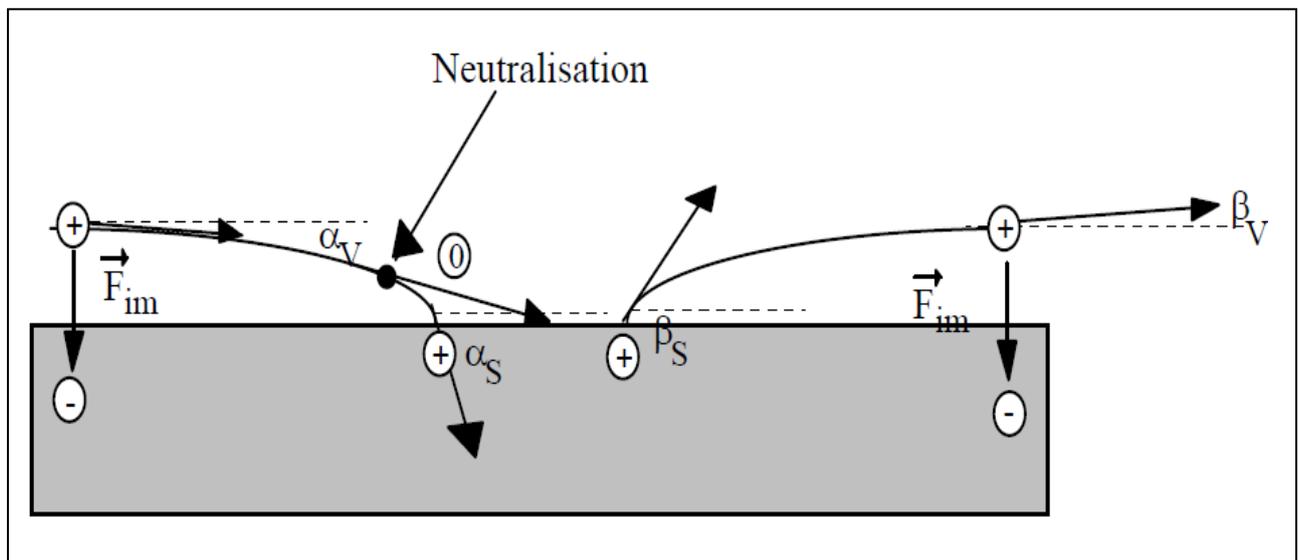


Figure I.4. Effet de la force image sur les trajectoires des ions au voisinage d'une surface dans les voies d'entrée et de sortie.

L'angle α_s (ou β_s) peut être déterminé à partir de la relation suivante [AND97] :

$$\tan \alpha_s = \tan \alpha_v \left(1 + \frac{V_{im}}{E \sin^2 \alpha_v} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.27})$$

V_{im} : potentiel image

E : énergie de l'ion.

La variation des angles effectifs (α_s, β_s) en fonction des angles expérimentaux (α_v, β_v) est représentée (figure I.5) pour $E_0 = 4\text{keV}$ et $V_{im}=15\text{eV}$ [ARE97].

Cette courbe montre que l'effet du potentiel image sur la trajectoire des ions incidents devient important pour des angles d'incidence et d'émergence rasants.

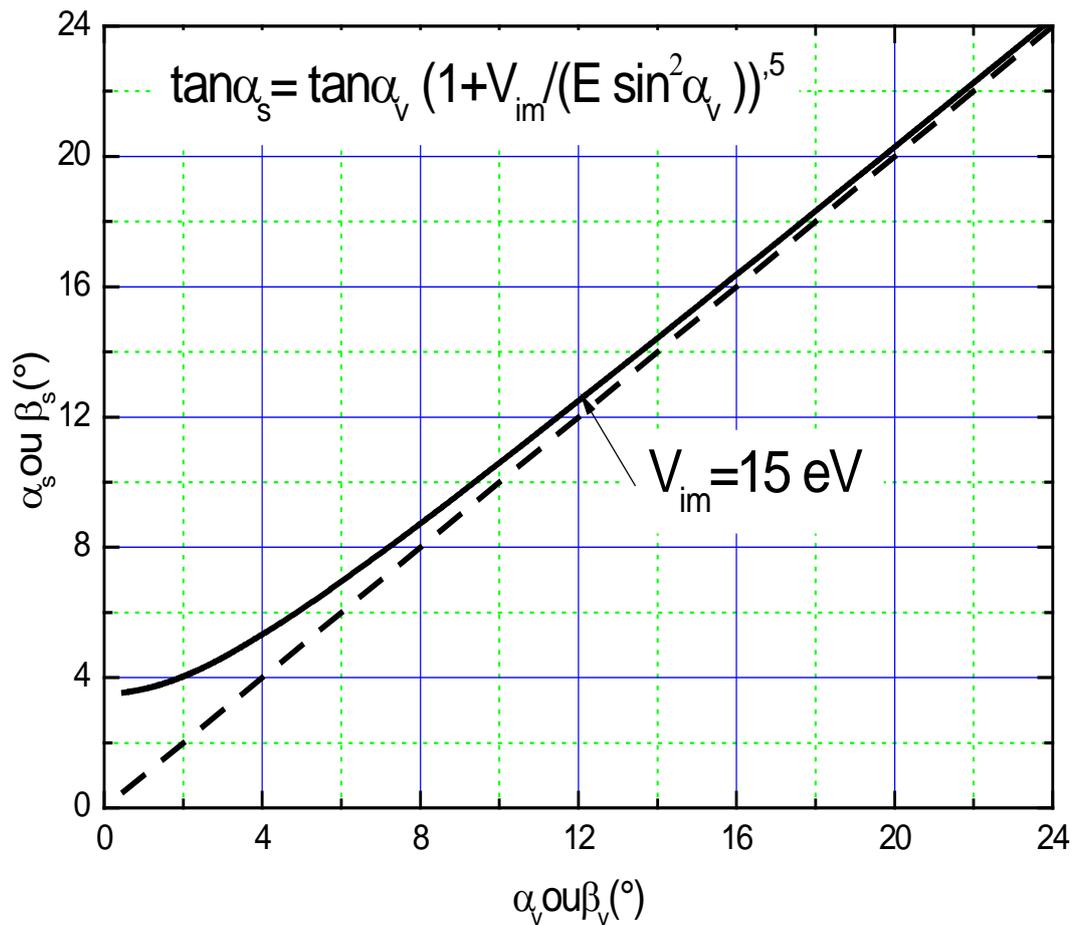


Figure I.5. Variation des angles effectifs (α_s, β_s) en fonction des angles mesurés (α_v, β_v) pour $V_{im}=15\text{eV}$ et $E_0=4\text{keV}$.

I.8. Processus d'échange de charge :

Au cours de la diffusion du projectile par la surface solide, il y a échange d'électrons entre le projectile et la surface. Cet échange de charge peut se produire dans les phases d'approche et d'éloignement mais également dans la phase d'interaction en volume.

I.8.1. Processus de transfert de charge en surface:

Ce processus de transition électronique se produit au voisinage de la surface lors des phases d'approche ou d'éloignement de l'ion de la surface [WIN02]. On peut distinguer deux types d'échange de charge qui peuvent être résumés par le diagramme de la figure I.6.

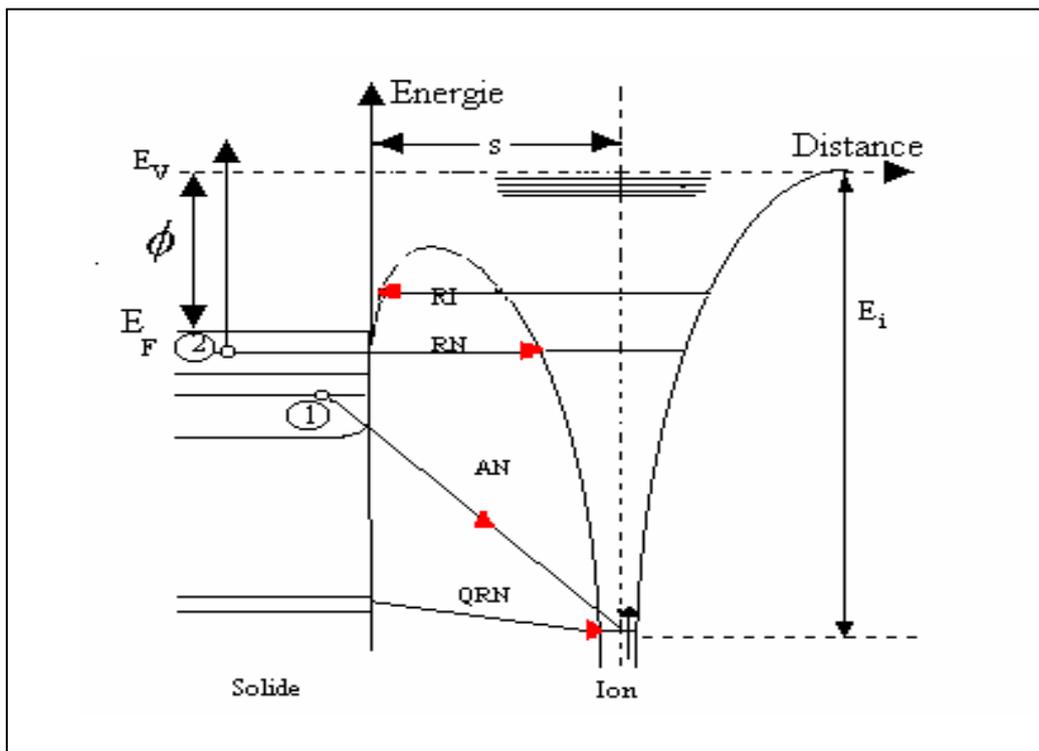


Figure I.6. Schéma énergétique représentant des différents processus d'échange de charge au voisinage de la surface.

I.8.1.1. Transfert mono-électronique :

La neutralisation résonnante (RN) correspond à la transition d'un électron par effet tunnel de la bande de conduction du métal vers un niveau discret du projectile. Le transfert est dit résonnant car l'électron transféré conserve son énergie. Le processus inverse est appelé ionisation résonnante (RI).

Lorsque les niveaux des atomes du solide sont plus profonds, une capture quasi-résonnante d'un électron par le projectile peut aussi avoir lieu (QRN).

I.8.1.2. Transfert bi-électronique :

Trois mécanismes sont possibles (voir figure I.6):

(*) La neutralisation Auger (AN): se manifeste pour des distances faibles (inférieures à 2\AA) faisant intervenir deux électrons appartenant à la bande de valence du solide. Un premier électron est transféré vers un état lié de l'ion, l'énergie libérée qui doit être supérieure au travail de sortie du solide, permet au second électron d'être éjecté vers le vide [WIN02].

Les autres mécanismes analogues sont :

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

(*) L'auto ionisation: les deux électrons proviennent du projectile.

I.8.2. Echange de charge en volume : collision proche :

De nombreuses expériences de diffusion [WIN02] montrent que 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 ré-ionisation du projectile.

Dans ce mécanisme et lors de la collision d'un ion avec un atome cible (à des distances inter atomiques petites correspondant au recouvrement des orbitales atomiques des deux partenaires), une quasi-molécule de durée de vie très courte se forme. La promotion d'un ou de plusieurs électrons peut conduire à la neutralisation ou la ré-ionisation du projectile.

Chapitre II

Description de la méthode de simulation

II.1.Introduction :

La simulation numérique (ou expérience numérique) permet de reproduire sur un ordinateur un phénomène physique complexe dont on souhaite étudier l'évolution. Elle repose sur la programmation de modèles théoriques ou mathématiques (intégration des équations du mouvement, d'équations différentielles, etc...) qui sont adaptés aux moyens numériques. Ces simulations sont devenues incontournables pour la modélisation des systèmes en physique, chimie et biologie, mais également pour d'autres systèmes en économie et en sciences sociales pour lesquels les expériences sont difficiles, coûteuses voire impossibles [PAS09].

La naissance de la simulation numérique remonte aux débuts des années mille neuf cent cinquante où les premiers ordinateurs ont été utilisés dans le domaine civil [PAS09]. La simulation apporte des informations complémentaires aux outils théoriques.

Il existe aujourd'hui plusieurs codes de calcul [MET49] (basés sur le principe de la méthode stochastique dite de "Monté Carlo") dédiés à la simulation du phénomène de transport des ions dans la matière.

Un certain nombre de méthodes de simulation (Monte-Carlo, Dynamique Moléculaire, Equation de transport) ont été développées pour modéliser les processus intervenant lors de l'interaction ion-surface solide afin de mieux comprendre les processus d'interaction ce qui permet une bonne interprétation des résultats expérimentaux.

II.2.Théorie de transport :

Les équations intégro-différentielles de transport basées sur l'équation de Boltzmann 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 [SIG82]. Dans le domaine de l'interaction ion-surface, cette méthode est largement utilisée pour l'étude des

particules transmises à travers des cibles solides mais également pour l'étude des particules diffusées par une surface solide [MEK05, AIS07].

II.3. Dynamique Moléculaire:

L'évolution temporelle du système (projectile + cible) peut être déterminée en résolvant les équations de Newton de toutes les particules [SID75]. Les techniques de simulation basées sur la dynamique moléculaire dans le cas de l'étude de l'interaction ion-surface sont plus appropriées pour les collisions à très faible énergie (quelques eV). Dans ce cas, l'approximation des collisions binaires n'est plus valable [MOR89].

II.4. Simulation Monte Carlo:

Le principe de cette méthode consiste à suivre l'histoire d'un très grand nombre de particules incidentes sur une surface solide [PAS09].

La simulation Monte Carlo repose sur l'utilisation d'un générateur de nombres aléatoires qui doit fournir des nombres issus d'une distribution uniforme. Pour que ces nombres soient vraiment aléatoires, il est nécessaire de satisfaire un certain nombre de critères à la fois. La moyenne, la variance, mais aussi tous les moments de la distribution doivent être ceux d'une distribution uniforme [PAS09].

Au début les premiers temps, les générateurs utilisaient une représentation des nombres sur 8 bits; les périodes étaient très courtes et les résultats non satisfaisants pour les simulations Monte Carlo.

Pour des simulations avec un grand nombre de tirages, il est indispensable de s'assurer que la période du générateur reste très supérieure au nombre de tirages. D'autres qualités sont nécessaires, comme l'absence de corrélation entre les séquences de nombres. L'initialisation correcte du générateur reste un point encore trop souvent négligé.

Pour obtenir des générateurs de nombres pseudo-aléatoires, il est possible d'utiliser un type d'algorithme qui est basé sur la congruence linéaire [PAS09]:

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \bmod(m) \quad (\text{II.1})$$

a et b sont des entiers.

Ce type de relation génère une suite (pseudo-aléatoire) de nombres entiers compris entre 0 et $m-1$. m donne la période du générateur.

Parmi les générateurs utilisant cette relation, on trouve les fonctions randu d'IBM, drand48 sur les machines Unix... etc. Les périodes de ces suites de nombres vont de 2^{29} à 2^{48} [PAS09].

Comme il est possible d'obtenir un "bon" générateur de nombres aléatoires uniformes, il existe de nombreuses situations physiques, où il est nécessaire de pouvoir générer des nombres selon une distribution de probabilité $f(x)$ sur un intervalle I, telle que (condition de normalisation de la probabilité):

$$\int f(x)dx = 1 \quad (\text{II.2})$$

II.5. Le code TRIM :

Dans ce paragraphe, nous présentons le code de simulation utilisé dans cette étude. Il est basé sur la méthode de Monte Carlo que nous avons adaptée ici pour étudier la diffusion des particules par une surface solide. C'est une approche statistique qui repose sur la génération de nombres aléatoires.

Il existe aujourd'hui plusieurs codes de calcul de type Monte Carlo dédiés à la simulation du transport des ions dans la matière. Le code TRIM (TRAnsport of Ions in Matter) [ZIE85] permet de simuler la trajectoire d'un ion dans un solide, les déplacements atomiques résultant de son ralentissement, son parcours et sa perte d'énergie. Les résultats obtenus par TRIM sont souvent cités comme référence de comparaison avec des résultats expérimentaux.

Le code de calcul TRIM permet la détermination du profil d'implantation des ions dans les solides. La version du code TRIM utilisée dans notre cas est valable pour des cibles amorphes ou polycristallines.

Différents paramètres, relatifs au projectile et à la cible, doivent être fixés avant l'utilisation du code TRIM. Il faut donc préciser la nature des projectiles, leur énergie et l'angle d'incidence. La nature de la cible doit être définie également (numéro atomique, nombre de masse, densité, épaisseur). Les directions correspondant aux détecteurs ainsi que l'ouverture angulaire sont fixées.

Le code TRIM suit l'histoire de chaque projectile, à travers la détermination de sa trajectoire, jusqu'à sa diffusion, son arrêt ou sa transmission à travers la cible. Il est à rappeler qu'il est possible de fixer une valeur limite de l'énergie E_F au dessous de laquelle le projectile n'est plus suivi. TRIM utilise des nombres aléatoires compris entre 0 et 1.

Ce code est basé sur l'approximation des collisions binaires. L_{pw} est le libre parcours moyen entre deux chocs successifs. Il est déterminé à partir du paramètre d'impact maximal P_{max} et de la densité atomique N comme suit [ZIE 85]:

$$L_{pw} = \frac{1}{\pi N P_{max}^2} \quad (\text{II.3})$$

P_{max} est calculé de telle sorte que l'angle de diffusion minimal ainsi obtenu soit $\psi_{min}=1^\circ$. Cette valeur correspond à l'ouverture angulaire considérée dans cette étude.

La première collision entre le projectile et un atome cible, a lieu après un parcours L dans le solide. L est donné par [ZIE 85]:

$$L = R_1 d_{min} \quad (\text{II.4})$$

R_1 est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1. d_{min} est la valeur la plus faible de C_w et L_w où C_w est la distance la plus proche entre deux atomes dans la cible. Dans le cas de la cible de silicium, nous avons pris $C_w=2.35 \text{ \AA}$. Pour chaque collision, le paramètre d'impact p est calculé à partir de la relation suivante [ZIE 85]:

$$p = p_{max} \sqrt{R_2} \quad (\text{II.5})$$

R_2 est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1.

L'interaction projectile-atome cible est décrite en utilisant un potentiel coulombien écranté. Dans le cadre de notre travail, nous avons utilisé les fonctions d'écran Thomas-Fermi Molière (TFM) et de Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL). Le potentiel d'interaction permet de calculer l'angle de diffusion ψ au niveau de chaque collision atomique pour un paramètre d'impact p donné. L'énergie perdue au cours de cette collision atomique (ΔE_n) est calculée également en tenant compte du potentiel considéré (voire figure II.1)

L'angle azimutal de diffusion φ est calculé en utilisant un autre nombre aléatoire R_3 ($0 \leq R_3 \leq 1$) [ZIE 85]:

$$\varphi = 2\pi R_3 \quad (\text{II.6})$$

Dans le cadre de notre travail, nous avons calculé des spectres de diffusion d'ions $^4\text{He}^+$ (4 keV) par une surface de silicium amorphe. Les valeurs de la perte d'énergie électronique (ΔE_e) ont été obtenues à partir de la compilation SRIM2010 [ZIE10].

Ainsi, l'énergie de chaque projectile diffusé et détecté est déterminée. Nous pouvons calculer également son parcours total dans la cible ainsi que le nombre total de chocs subis dans le solide.

La figure II.1 représente une séquence de collisions subies par le projectile dans le solide jusqu'à sa diffusion.

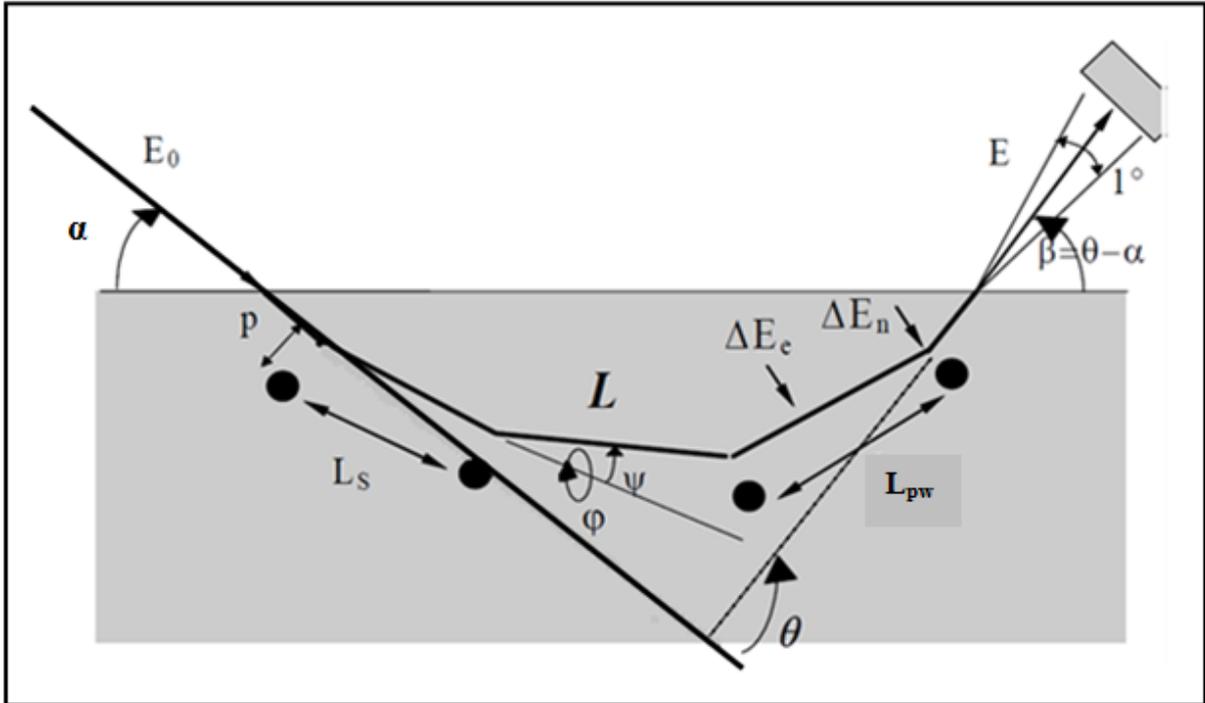


Figure II.1. Schéma représentant les séquences de collisions du projectile dans le solide.

β : l'angle de détection.

θ : l'angle de diffusion.

Il est à noter que différentes géométries ont été considérées dans ce travail (c'est-à-dire différentes valeurs des angles d'incidence et de diffusion).

II.6. Construction des spectres TOF

L'énergie de sortie E de chaque projectile de masse M_1 est convertie en temps de vol suivant la relation suivante :

$$\text{TOF(us)} = \frac{2.28 D(\text{m})}{\sqrt{\frac{2E(\text{KeV})}{M_1(\text{uma})}}} \quad (\text{II.7})$$

D est la distance cible-détecteur ($D = 0.63\text{m}$) (Figure I.1).

Pour chaque détecteur correspondant à un angle de diffusion donné, les histogrammes ainsi obtenus sont convolués en utilisant une gaussienne normée et d'écart type $\sigma = 15\text{ns}$ représentant la résolution en temps du système de détection.

Pour obtenir des spectres de diffusion avec une bonne statistique, nous avons effectué des calculs en considérant en général un nombre de projectiles supérieur à 1 milliard.

Chapitre III.

Résultats et discussion

III.1. Introduction :

Dans ce chapitre, nous allons présenter l'ensemble des résultats obtenus par simulation en utilisant le code TRIM dans le cas de la diffusion d'ions ${}^4\text{He}^+$ d'énergie initiale $E_0=4\text{keV}$ par une surface de silicium amorphe. Nous avons étudié l'effet de la perte d'énergie électronique ainsi que celui du potentiel d'interaction sur les spectres de diffusion en temps de vol. Différentes valeurs des angles d'incidence et de diffusion ont été considérées. Nous avons enfin comparé les spectres de diffusion simulés à des spectres obtenus expérimentalement. Nous avons considéré pour cela un angle d'incidence de 20° et différentes valeurs de l'angle de diffusion.

III.2. Exemple de spectre de diffusion simulé:

La figure III.1 représente un spectre de diffusion en temps de vol obtenu par simulation Monte Carlo dans le cas de la diffusion d'ions ${}^4\text{He}^+$ (4 keV) par une surface de silicium amorphe pour un angle d'incidence $\alpha = 6^\circ$ et un angle de diffusion $\theta = 15^\circ$. Ce spectre est obtenu en utilisant le potentiel d'interaction ZBL ainsi que les valeurs de la perte d'énergie électronique obtenues par SRIM2010 [ZIE10].

Les particules diffusées ont des parcours dans la cible appartenant à une large gamme de longueurs. Pour tenir compte de toutes ces particules, nous avons utilisé une échelle logarithmique en ordonnée.

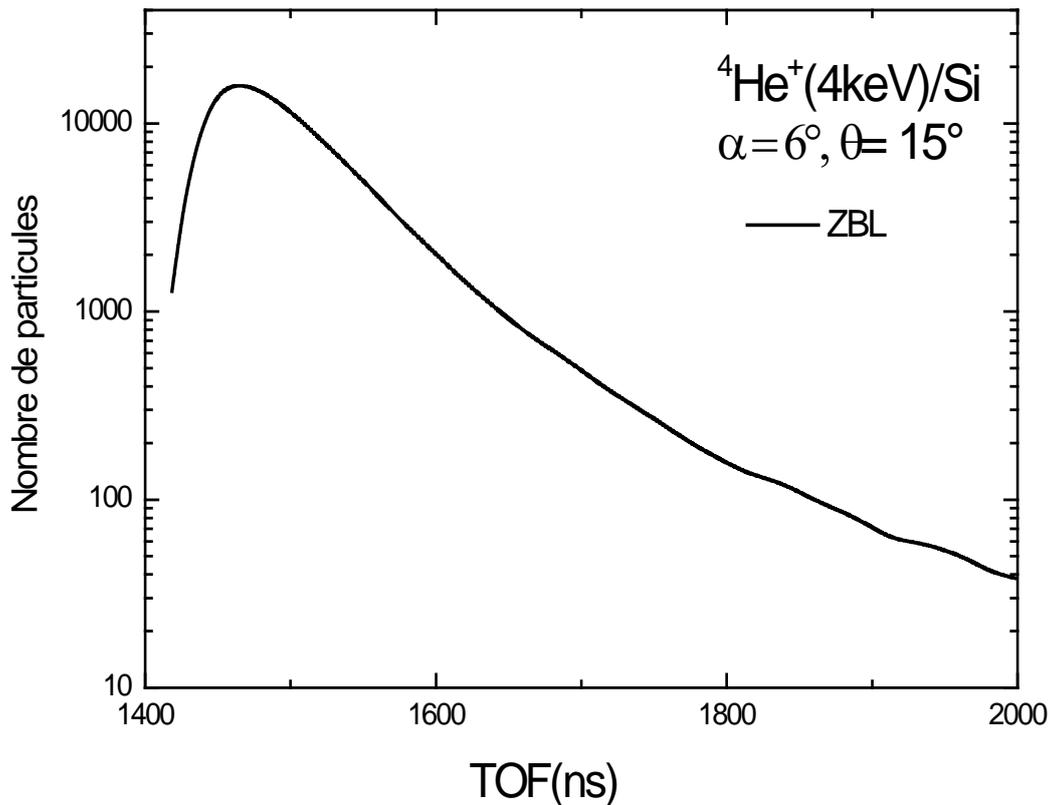


Figure III.1. Spectre simulé de diffusion en temps de vol d'ions ${}^4\text{He}^+$ (4 keV) par une surface de silicium amorphe pour un angle d'incidence $\alpha = 6^\circ$ et un angle de diffusion $\theta = 15^\circ$

III.3. Effet du pouvoir d'arrêt électronique sur les spectres de diffusion :

Dans ce paragraphe, nous allons présenter les résultats relatifs à l'étude de l'effet de la perte de pouvoir d'arrêt électronique sur les spectres simulés de diffusion d'ions ${}^4\text{He}^+$ (4keV) par une surface de silicium amorphe. Dans cette étude, nous avons utilisé le potentiel ZBL pour décrire l'interaction projectile-atome cible. Pour la perte d'énergie électronique, nous avons également considéré trois cas : les valeurs obtenues à partir de SRIM 2010 (F=1) [ZIE10], ensuite les mêmes valeurs multipliées par les facteurs F=0.9 puis F=1.1. La figure III.2 montre la variation de la perte d'énergie électronique avec l'énergie des ions pour ces trois cas.

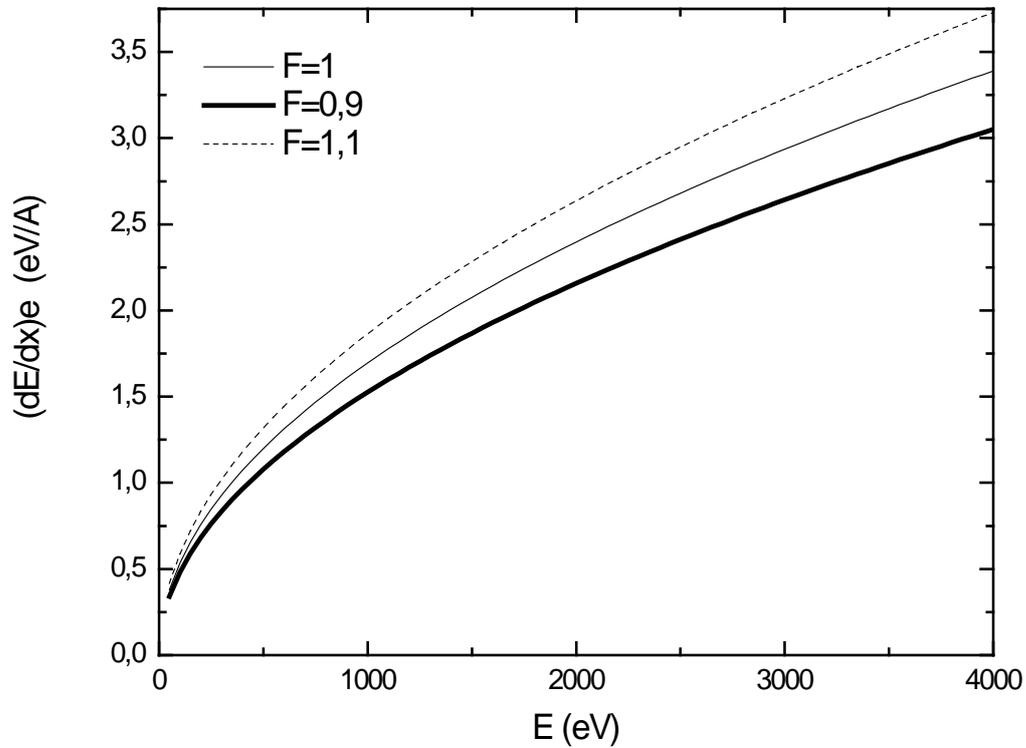


Figure III.2. Variation de la perte d'énergie électronique considérée dans cette étude (pour $F=1,0,9$ et $1,1$) avec l'énergie du projectile.

Nous avons ainsi calculé les spectres de diffusion en temps de vol, pour les quatre cas suivants :

- *angle d'incidence $\alpha = 4^\circ$ et angle de diffusion $\theta = 15^\circ$.
- *angle d'incidence $\alpha = 4^\circ$ et angle de diffusion $\theta = 17^\circ$.
- *angle d'incidence $\alpha = 10^\circ$ et angle de diffusion $\theta = 35^\circ$.
- *angle d'incidence $\alpha = 10^\circ$ et angle de diffusion $\theta = 45^\circ$.

Pour chaque géométrie, trois spectres ont été calculés correspondant aux différentes valeurs de la perte d'énergie électronique. Les résultats obtenus sont présentés dans les figures III.3, III.4, III.5 et III.6.

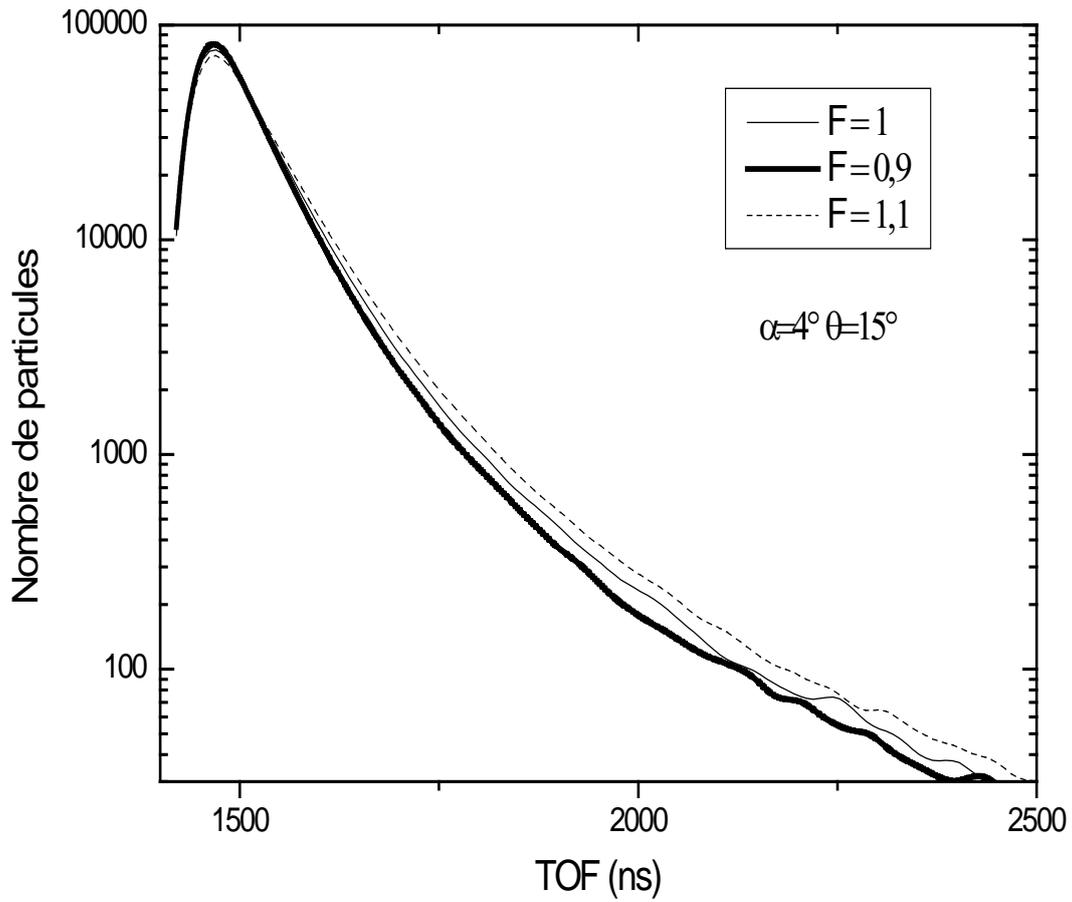


Figure III.3. Spectres simulés de diffusion en temps de vol d'ions ${}^4\text{He}^+$ (4 keV) par une surface de silicium amorphe pour un angle d'incidence $\alpha = 4^\circ$ et un angle de diffusion $\theta = 15^\circ$. Différentes valeurs de la perte d'énergie électronique ont été considérées.

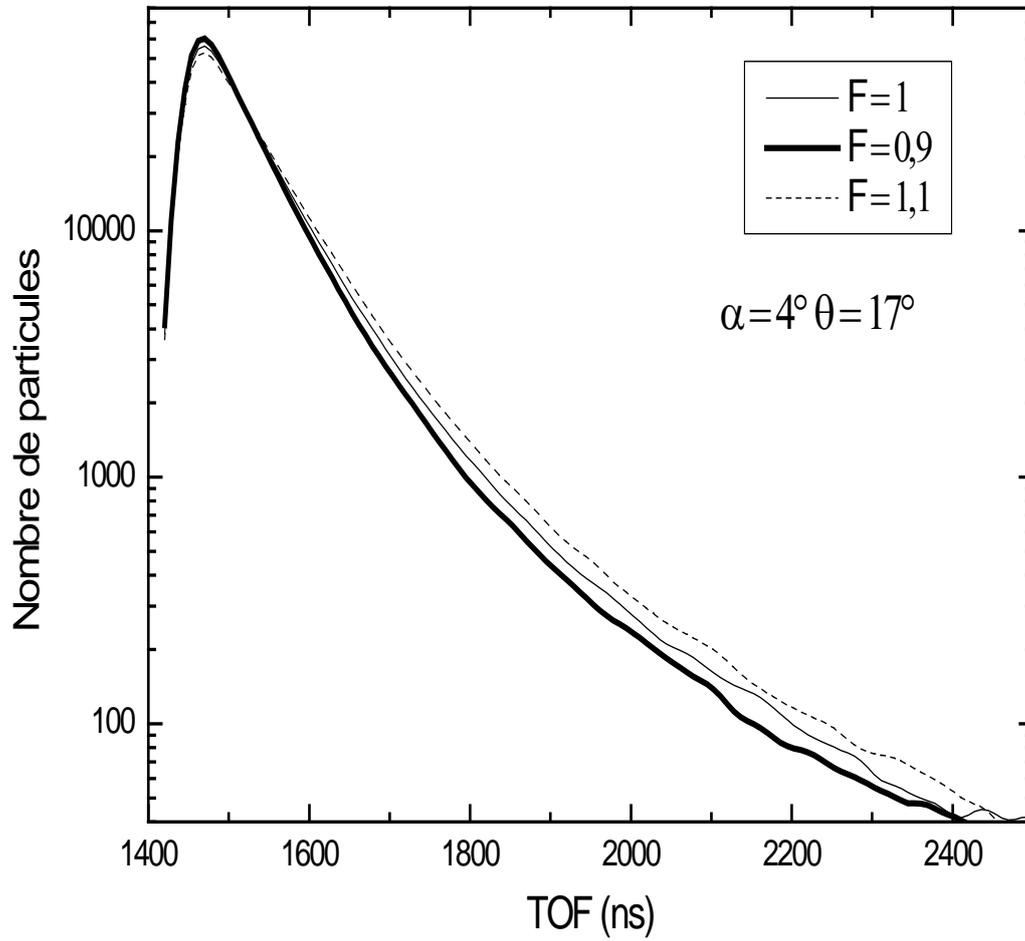


Figure III.4. Spectres simulés de diffusion en temps de vol d'ions $^4\text{He}^+$ (4 keV) par une surface de silicium amorphe pour un angle d'incidence $\alpha = 4^\circ$ et un angle de diffusion $\theta = 17^\circ$. Différentes valeurs de la perte d'énergie électronique ont été considérées.

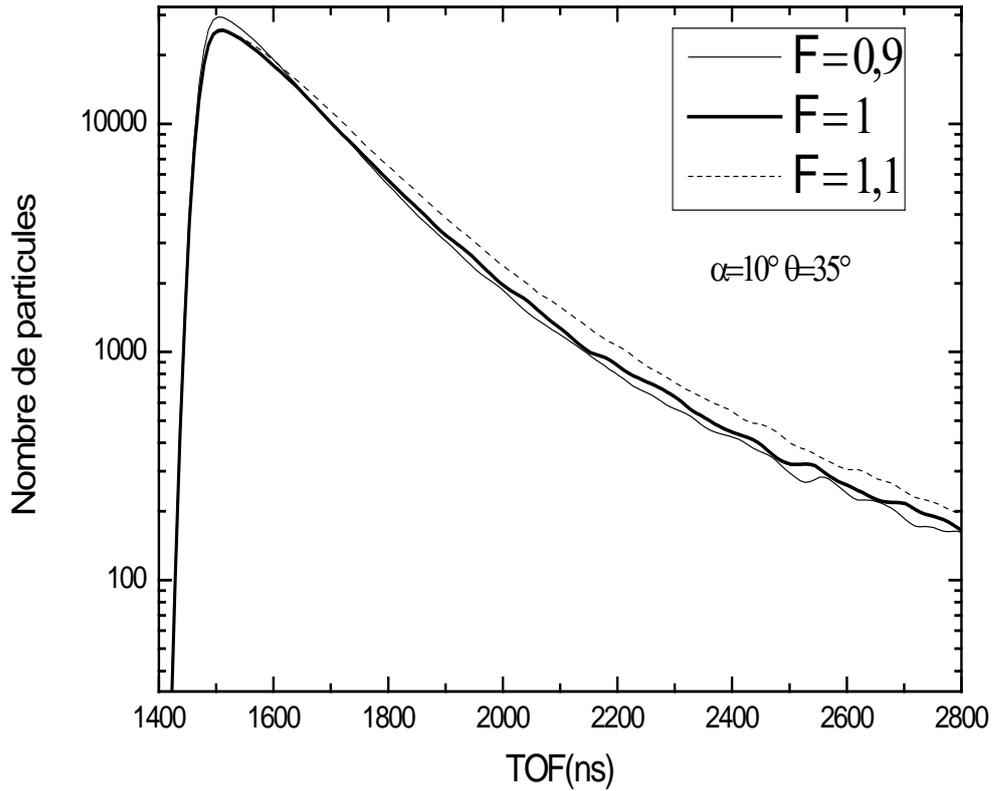


Figure III.5. Spectres simulés de diffusion en temps de vol d'ions $^4\text{He}^+$ (4 keV) par une surface de silicium amorphe pour un angle d'incidence $\alpha = 10^\circ$ et un angle de diffusion $\theta = 35^\circ$. Différentes valeurs de la perte d'énergie électronique ont été considérées.

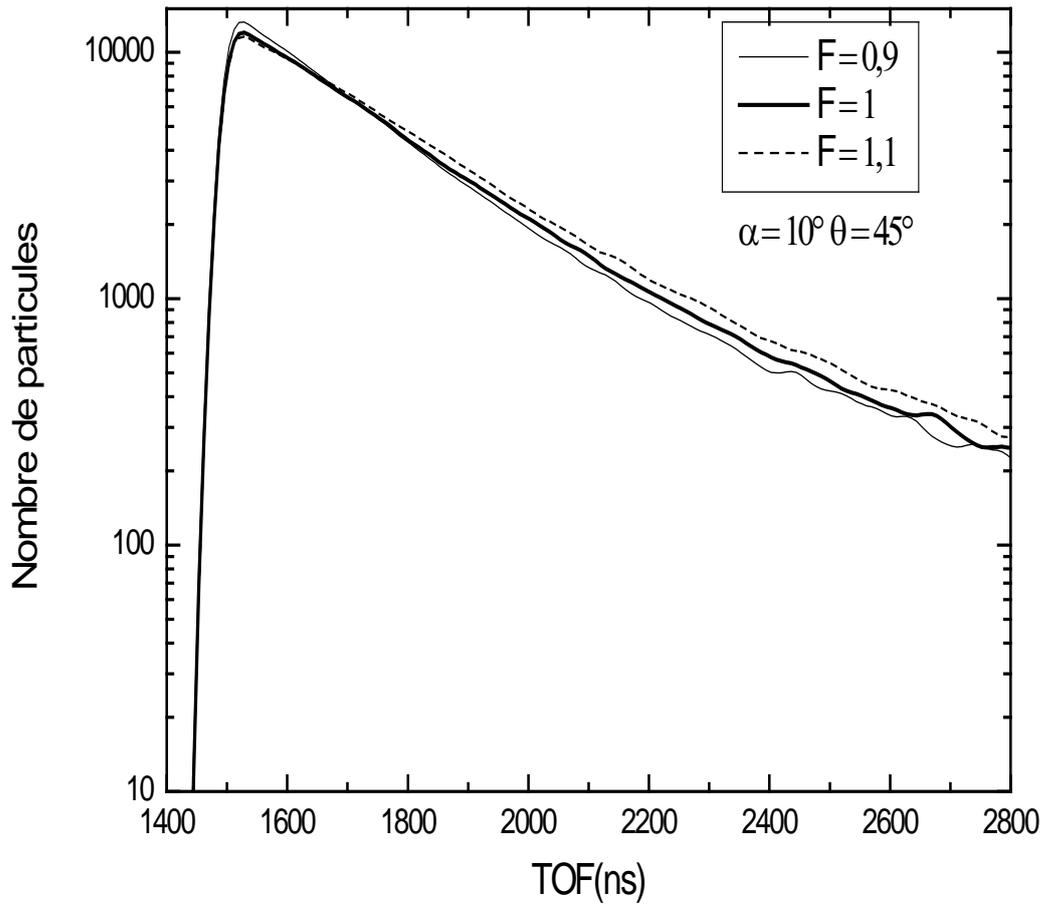


Figure III.6. Spectres simulés de diffusion en temps de vol d'ions He^+ (4 keV) par une surface de silicium amorphe pour un angle d'incidence $\alpha = 10^\circ$ et un angle de diffusion $\theta = 45^\circ$. Différentes valeurs de la perte d'énergie électronique ont été considérées.

Il est à noter d'abord que les spectres de diffusion sont sensibles à une variation de 10% sur la perte d'énergie électronique. Pour les différentes géométries considérées ici, nous remarquons que les spectres de diffusion deviennent plus larges pour $F=1.1$ et ils sont plus fins pour $F=0.9$ lorsque nous les comparons aux spectres calculés avec $F=1$. Ainsi et dans la partie du spectre correspondant aux grandes valeurs du temps de vol, la pente de décroissance devient plus faible lorsque la perte d'énergie électronique est plus grande.

Lorsque la perte d'énergie électronique dans la cible augmente, les particules diffusées sont détectées avec des énergies plus faibles, ce qui correspond à des temps de vol TOF plus grands. Ceci explique l'élargissement des spectres lorsque la perte d'énergie électronique augmente.

III.4.Effet du potentiel d'interaction sur les spectres de diffusion:

Nous allons présenter dans ce qui suit, les résultats relatifs à l'étude de l'effet du potentiel d'interaction sur les spectres de diffusion en temps de vol. Dans ce cas, nous avons utilisé les valeurs du pouvoir d'arrêt électronique de la compilation SRIM 2010 [ZIE10] ($F=1$), et nous avons considéré les deux potentiels ZBL [ZIE85] et TFM [MOL47].

La figure III.7 montre la variation des fonctions d'écran correspondant à ces deux potentiels. L'écrantage des noyaux par les électrons est plus important dans le cas du potentiel ZBL. La perte d'énergie nucléaire est alors plus faible dans le cas du potentiel ZBL, comme le montre la figure III.8 qui représente la variation de la perte d'énergie nucléaire en fonction de l'énergie pour les deux potentiels ZBL et TFM et pour le système ${}^4\text{He}^+/\text{Si}$.

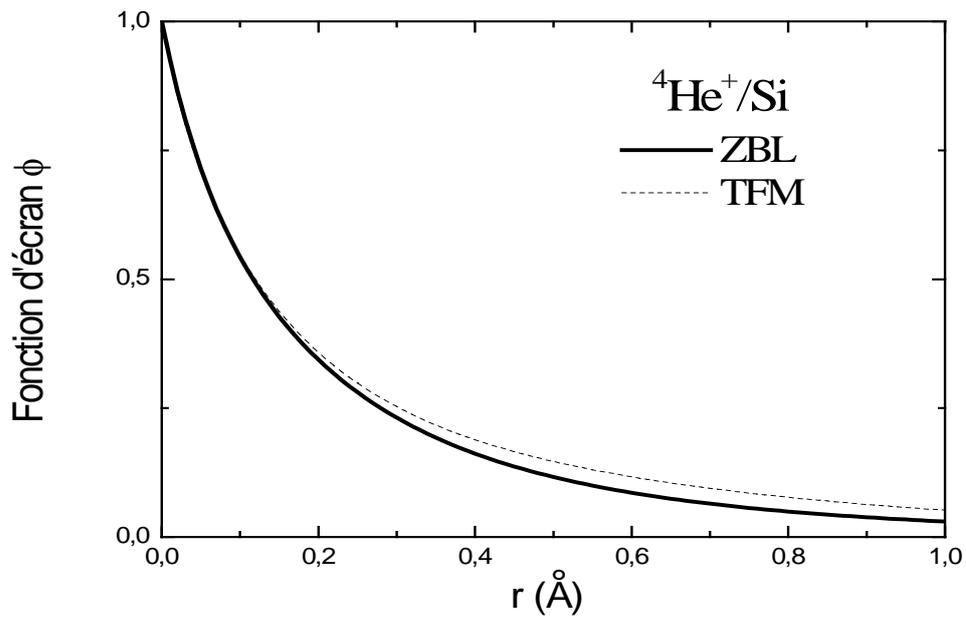


Figure III.7. Variation de la fonction d'écran en fonction de la distance r pour les potentiels d'interaction ZBL et TFM pour le système ${}^4\text{He}^+/\text{Si}$.

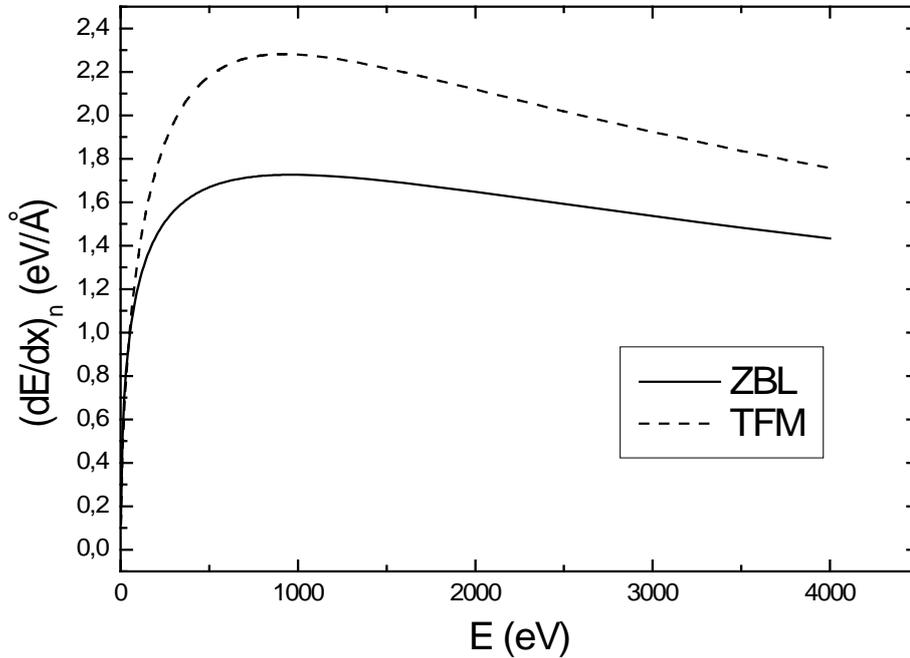


Figure III.8. Variation de la perte d'énergie nucléaire $\left. \frac{dE}{dx} \right|_n$ en fonction de l'énergie du projectile E pour les deux potentiels d'interaction ZBL et TFM et pour le système ${}^4\text{He}^+/\text{Si}$.

Nous avons calculé les spectres de diffusion en temps de vol pour les quatre cas précédents correspondant à différentes géométries. Pour chaque géométrie, deux spectres ont été calculés et ce pour les deux potentiels ZBL et TFM. Les valeurs de la perte d'énergie électronique sont celles de SRIM2010. Les résultats obtenus sont présentés dans les figures III.9, III.10, III.11 et III.12.

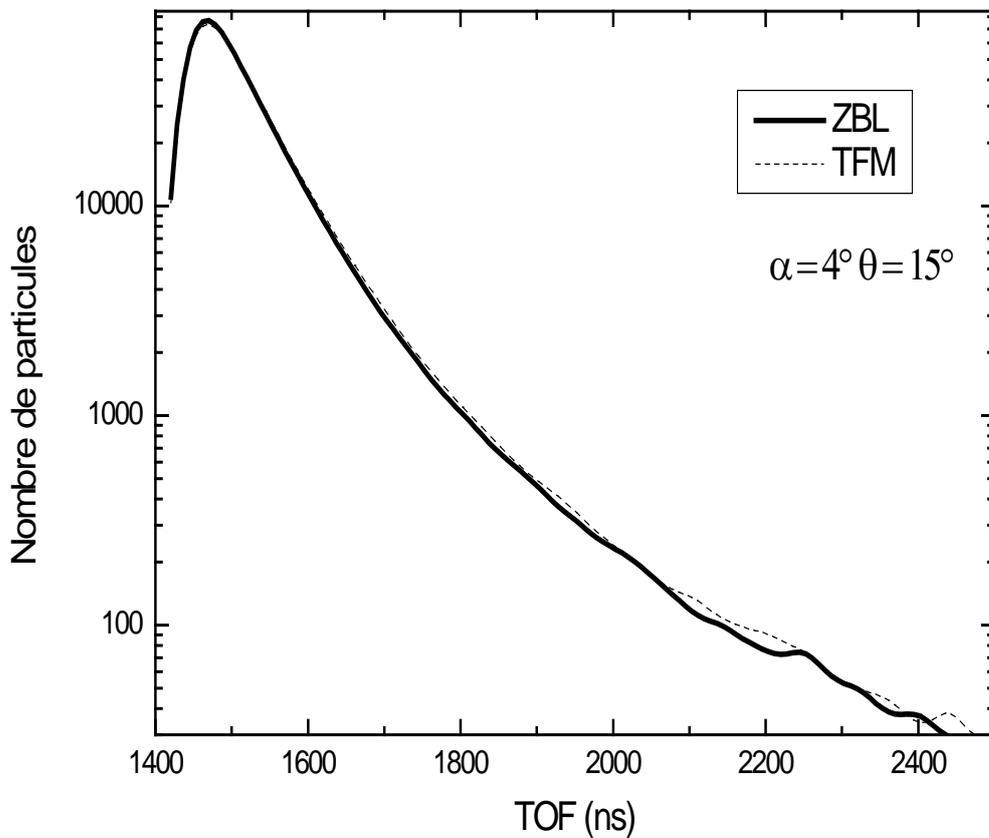


Figure III.9. Spectres simulés de diffusion en temps de vol d'ions ${}^4\text{He}^+$ (4 keV) par une surface de silicium amorphe pour les potentiels ZBL et TFM et pour un angle d'incidence $\alpha = 4^\circ$ et un angle de diffusion $\theta = 15^\circ$.

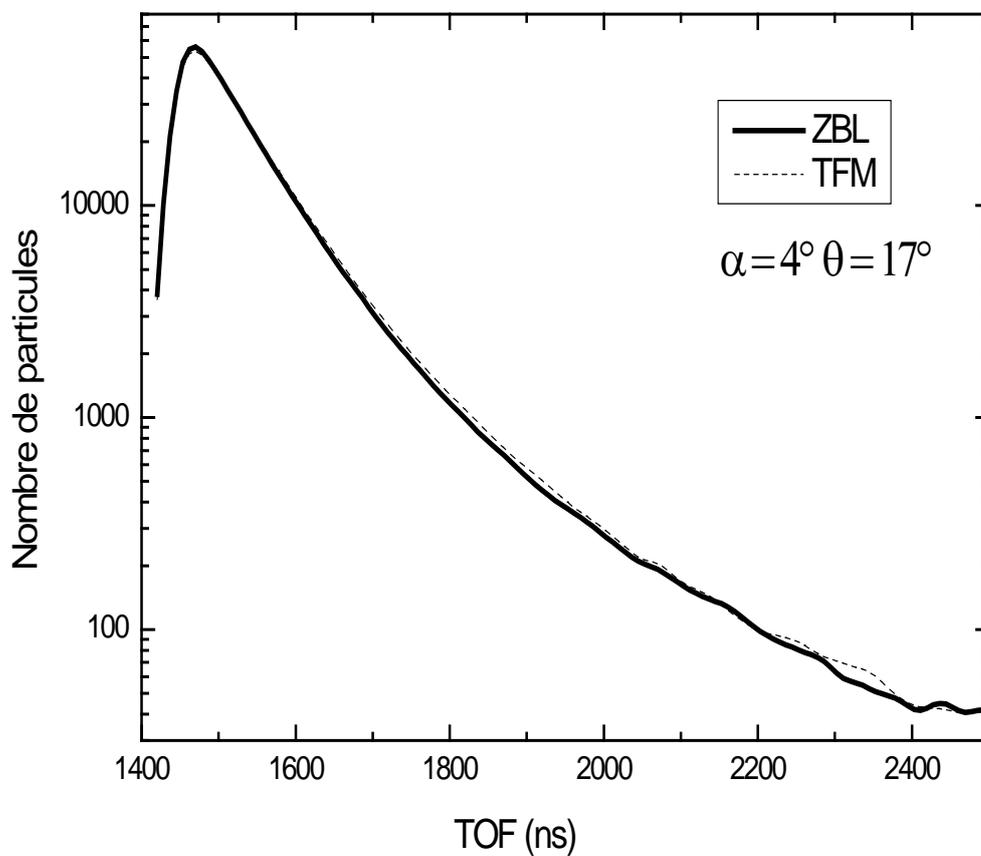


Figure III.10. Spectres simulés de diffusion en temps de vol d'ions $^4\text{He}^+$ (4 keV) par une surface de silicium amorphe pour les potentiels ZBL et TFM et pour un angle d'incidence $\alpha = 4^\circ$ et un angle de diffusion $\theta = 17^\circ$.

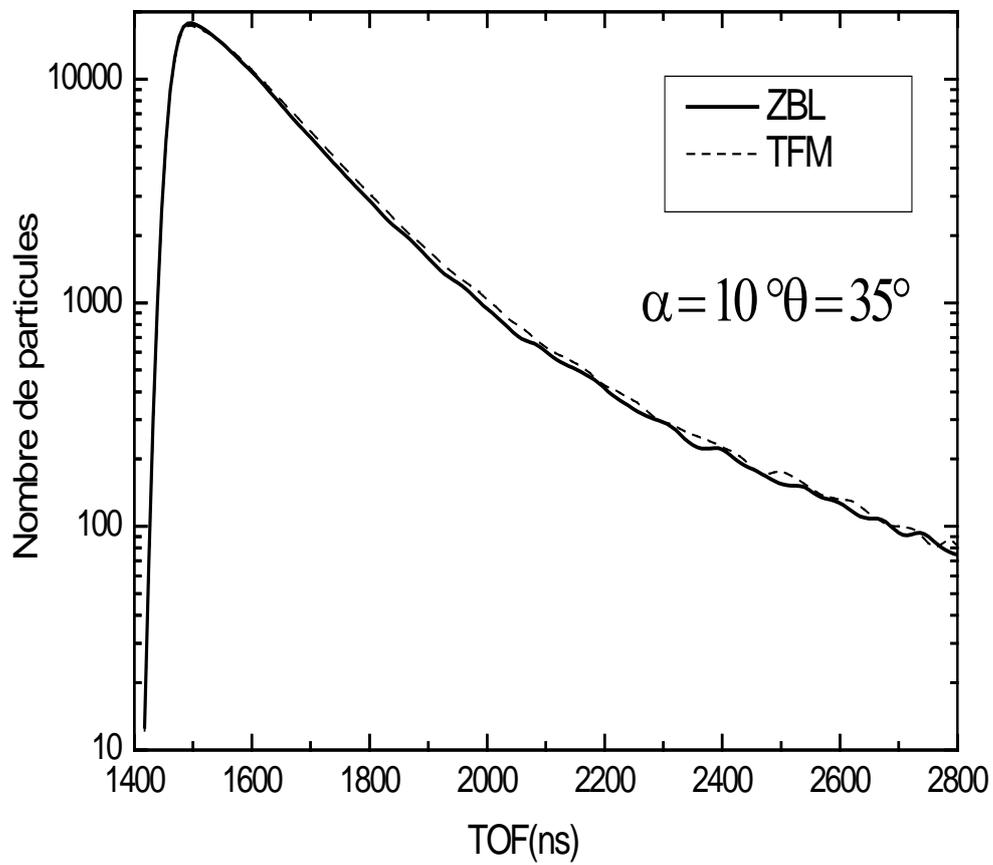


Figure III.11. Spectres simulés de diffusion en temps de vol d'ions $^4\text{He}^+$ (4 keV) par une surface de silicium amorphe pour les potentiels ZBL et TFM et pour un angle d'incidence $\alpha = 10^\circ$ et un angle de diffusion $\theta = 35^\circ$.

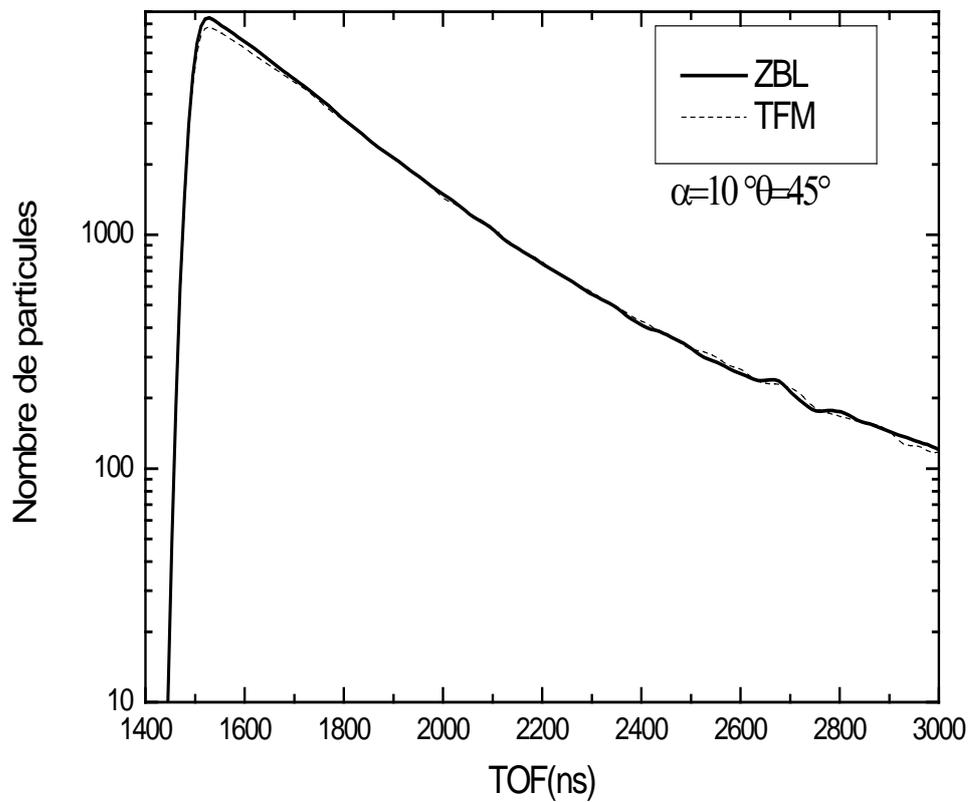


Figure III.12. Spectres simulés de diffusion en temps de vol d'ions $^4\text{He}^+$ (4 keV) par une surface de silicium amorphe pour les potentiels ZBL et TFM et pour un angle d'incidence $\alpha = 10^\circ$ et un angle de diffusion $\theta = 45^\circ$.

Nous remarquons pour chaque géométrie, que les spectres calculés avec les potentiels ZBL et TFM sont pratiquement identiques. Les spectres simulés avec le potentiel TFM sont légèrement plus larges que ceux obtenus avec le potentiel ZBL. Ceci peut être attribué au fait que la perte d'énergie nucléaire est plus grande pour le potentiel TFM comme le montre la figure III.8. Il est important de signaler ici que la section efficace de diffusion dépend également du potentiel. C'est ce qui peut expliquer le fait que la différence observée sur les spectres calculés avec des potentiels différents (figures III.9 à III.12) ne soit pas aussi importante que celle déjà observée lorsque la perte d'énergie électronique a été considérée (figures III.3 à III.6). Ainsi, les spectres simulés de diffusion dépendent peu du potentiel d'interaction choisi.

III.5. Comparaison des spectres simulés à des spectres expérimentaux :

III.5.1. Introduction :

Nous allons considérer pour cela des spectres de diffusion obtenus expérimentalement lors d'une précédente étude [ARE97]. Il s'agit de la diffusion d'ions ${}^4\text{He}^+$, d'énergie initiale $E_0=4\text{keV}$, par une cible de silicium amorphe. L'angle d'incidence est $\alpha=20^\circ$ et différentes valeurs de l'angle de diffusion ont été considérées.

La figure III.13 montre un spectre expérimental pour un angle de diffusion $\theta=50^\circ$ pris à titre d'exemple.

Comme nous l'avons déjà signalé au chapitre I, les projectiles peuvent échanger des électrons avec les atomes de la cible. Ainsi, les ions diffusés peuvent avoir des états de charge différents (positif, négatif ou neutre). Dans le cas de cette étude, deux états de charge ont été observés expérimentalement : ${}^4\text{He}^0$ et ${}^4\text{He}^+$. Expérimentalement, la séparation entre les particules ${}^4\text{He}^0$ et ${}^4\text{He}^+$ diffusées est possible grâce à une tension accélératrice appliquée avant leur détection. Les ions ${}^4\text{He}^+$ ainsi accélérés arriveront au détecteur avec des temps de vol plus courts (voir figure III.13).

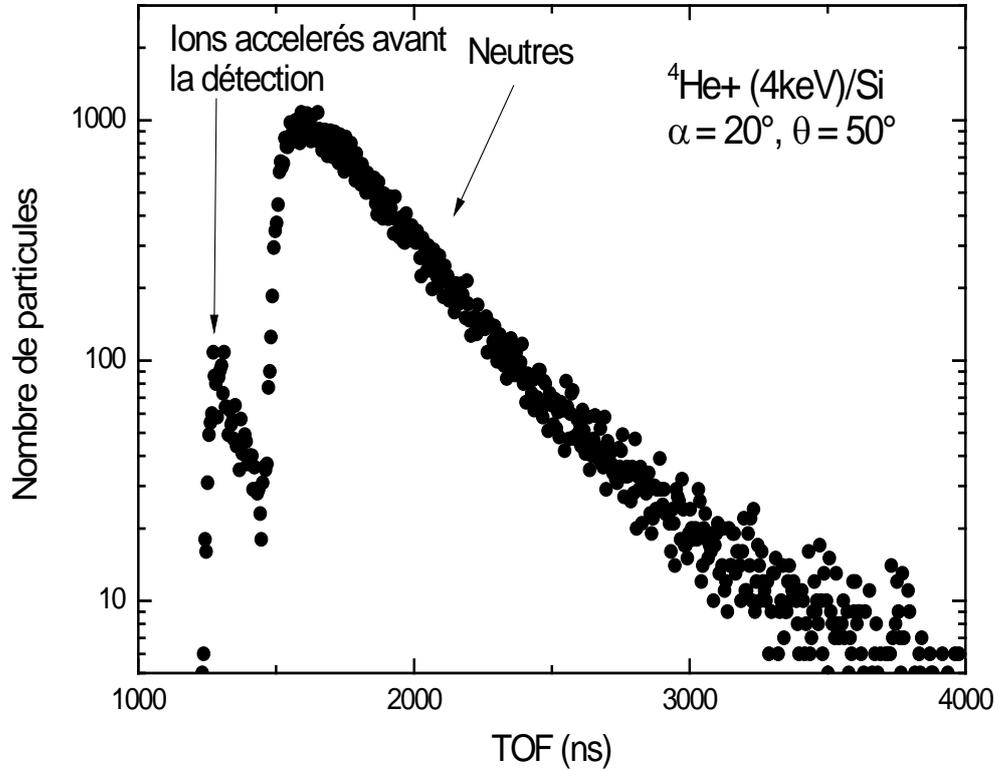


Figure III.13. Spectre expérimental de diffusion d'ions ${}^4\text{He}^+$ (4keV) par une surface de silicium amorphe. L'angle d'incidence est $\alpha=20^\circ$ et l'angle de diffusion est $\theta=50^\circ$.

La fraction de charge positive FC est définie par la relation suivante :

$$FC = \frac{N(\text{He}^+)}{N(\text{He}^+) + N(\text{He}^0)} \quad (\text{III.1})$$

Où $N(\text{He}^+)$ et $N(\text{He}^0)$ sont respectivement les nombres de projectiles ${}^4\text{He}^+$ et neutres ${}^4\text{He}^0$ mesurés expérimentalement. La fraction de charge FC a été calculée pour les différentes valeurs de l'angle de diffusion θ . La figure III.14 montre la variation de FC avec l'angle de diffusion.

Nous remarquons dans ce cas, que la fraction de charge est faible, elle ne dépasse pas la valeur de 3%. Les particules diffusées sont dans leur grande majorité neutres. Dans notre simulation, nous n'allons donc pas tenir compte des processus d'échange d'électrons entre le projectile et les atomes de la cible.

Par ailleurs, nous avons vu au chapitre I que la force image a pour effet de courber la trajectoire des projectiles chargés dans les voies d'entrée et de sortie. Nous n'allons pas tenir compte de cet effet dans la voie de sortie, vu que les particules sont majoritairement neutres. En utilisant l'équation (I.26), la valeur calculée de l'angle effectif d'incidence est $\alpha_s = 20.29^\circ$ qui est très voisine de la valeur de l'angle d'incidence mesuré $\alpha_v = 20^\circ$. L'effet du potentiel image sur la trajectoire des ions dans la voie d'entrée peut ainsi être négligé également. Cet effet devient important pour les incidences et émergences rasantes comme le montre la figure I.5.

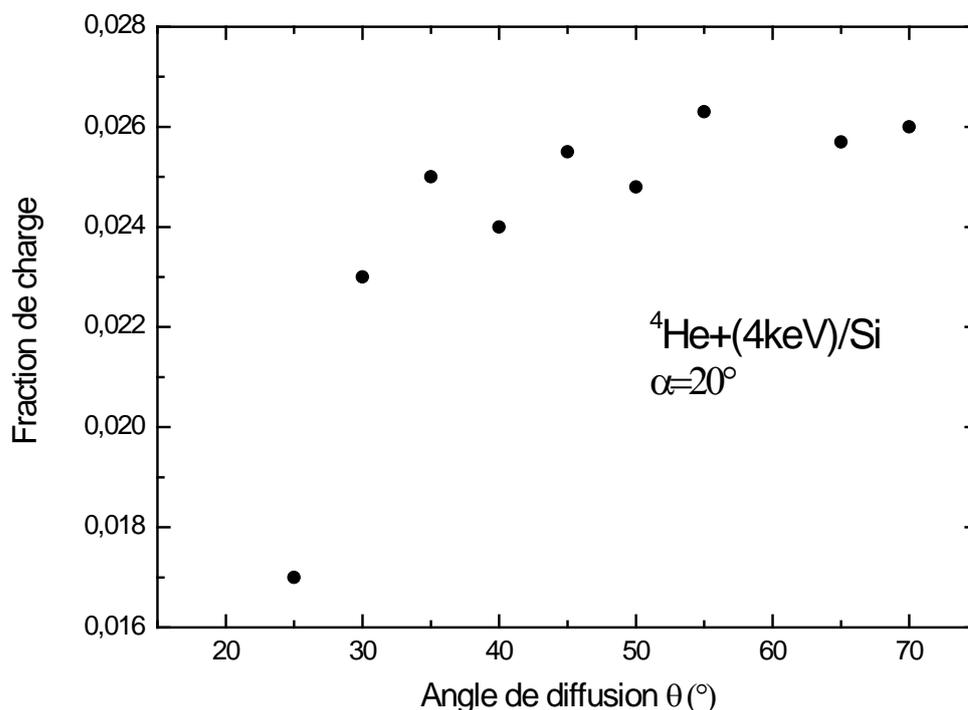


Figure III.14. Variation de la fraction de charge mesurée FC en fonction de l'angle de diffusion θ dans le cas de la diffusion d'ions ${}^4\text{He}^+$ (4keV) par une surface de silicium amorphe pour un angle d'incidence $\alpha=20^\circ$.

III.5.2. Comparaison des spectres simulés à des spectres expérimentaux :

Nous allons présenter dans ce qui suit les spectres de diffusion en temps de vol simulés puis comparés à des spectres expérimentaux. Pour rappel, dans cette simulation, nous n'avons pas tenu compte des processus d'échange de charge ni de l'effet de la force image sur la trajectoire des particules dans les voies d'entrée et de sortie. Nous avons effectué une normalisation entre les spectres simulés et les spectres expérimentaux.

Cette normalisation est faite pour que la surface sous chaque spectre simulé soit égale à la surface sous le spectre expérimental (même nombre de projectiles).

Nous avons d'abord commencé notre simulation en utilisant le potentiel ZBL ainsi que les valeurs de la perte d'énergie électronique données par SRIM 2010. Différentes valeurs de l'angle de diffusion ont été considérées. Nous présentons à titre d'exemples, les cas des angles de diffusion 35° , 50° et 55° (voir figures III.15, III.16 et III.17).

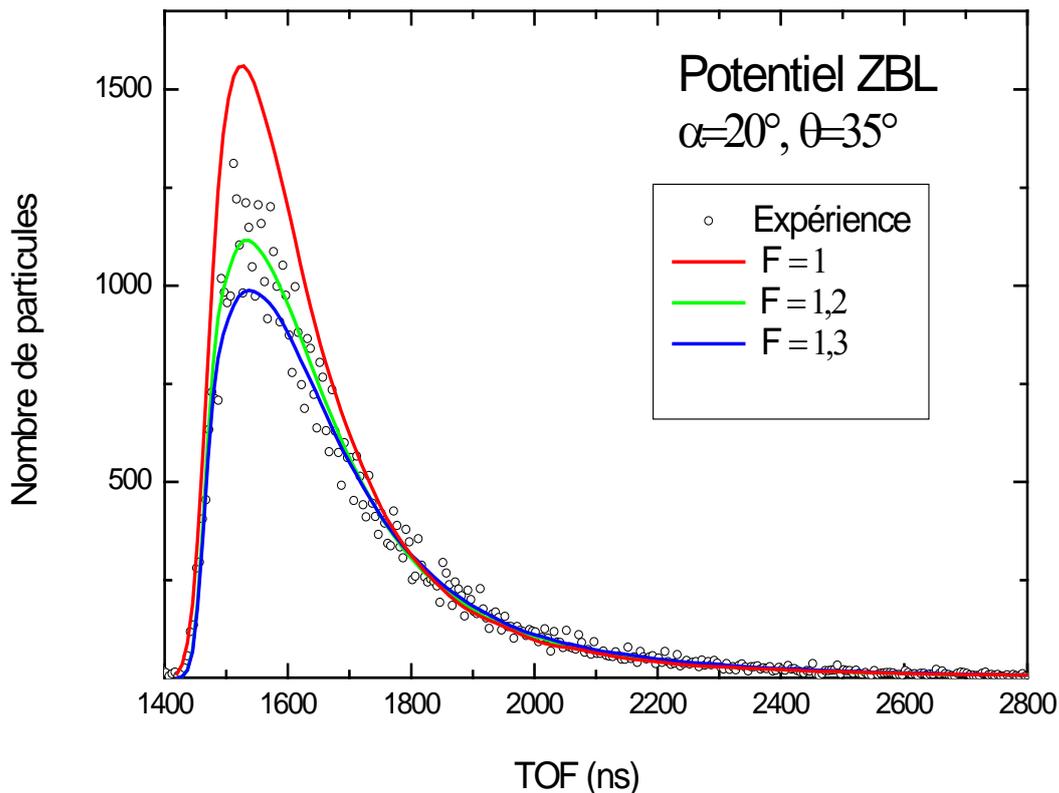


Figure III.15. Comparaison des spectres simulés avec le potentiel ZBL à un spectre expérimental pour un angle de diffusion $\theta=35^\circ$. Différentes valeurs pour la perte d'énergie électronique ont été considérées.

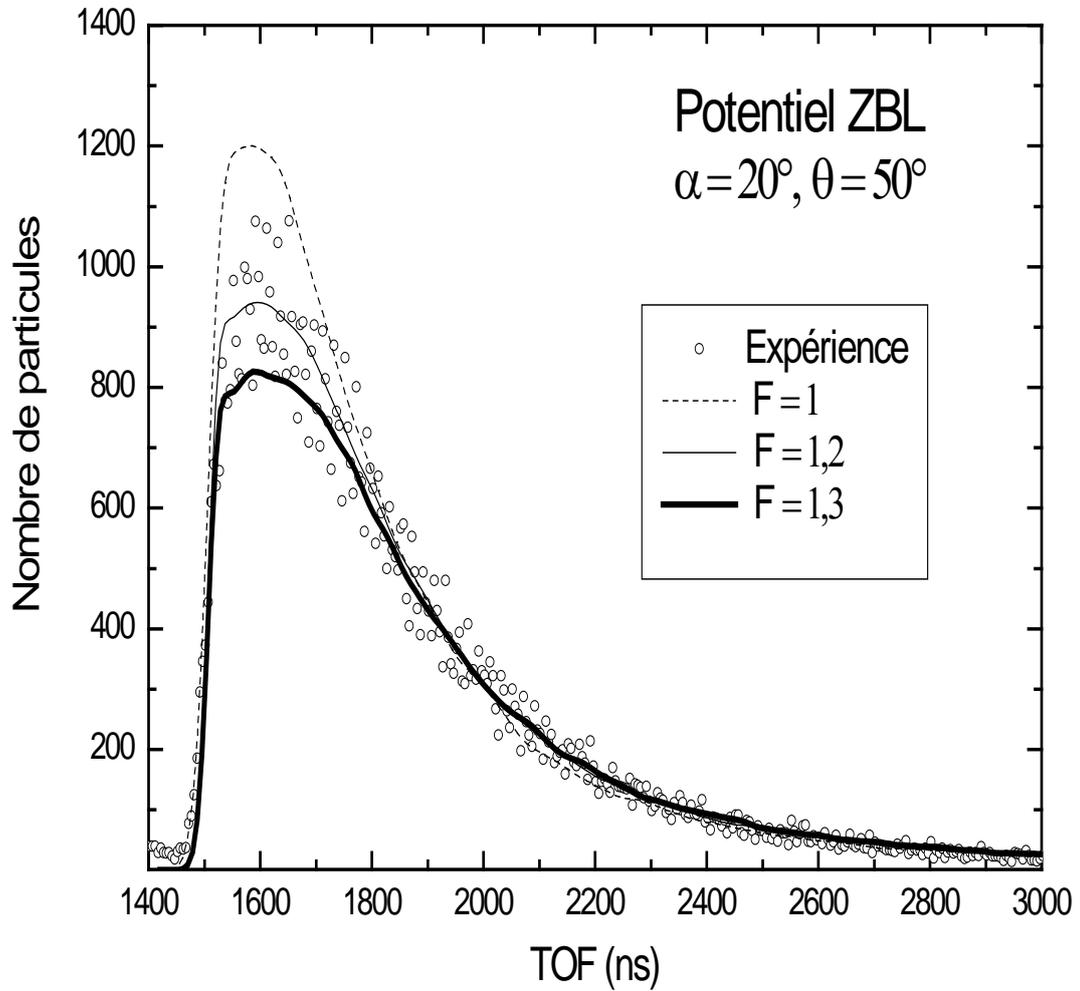


Figure III.16. Comparaison des spectres simulés avec le potentiel ZBL à un spectre expérimental pour un angle de diffusion $\theta=50^\circ$. Différentes valeurs pour la perte d'énergie électronique ont été considérées.

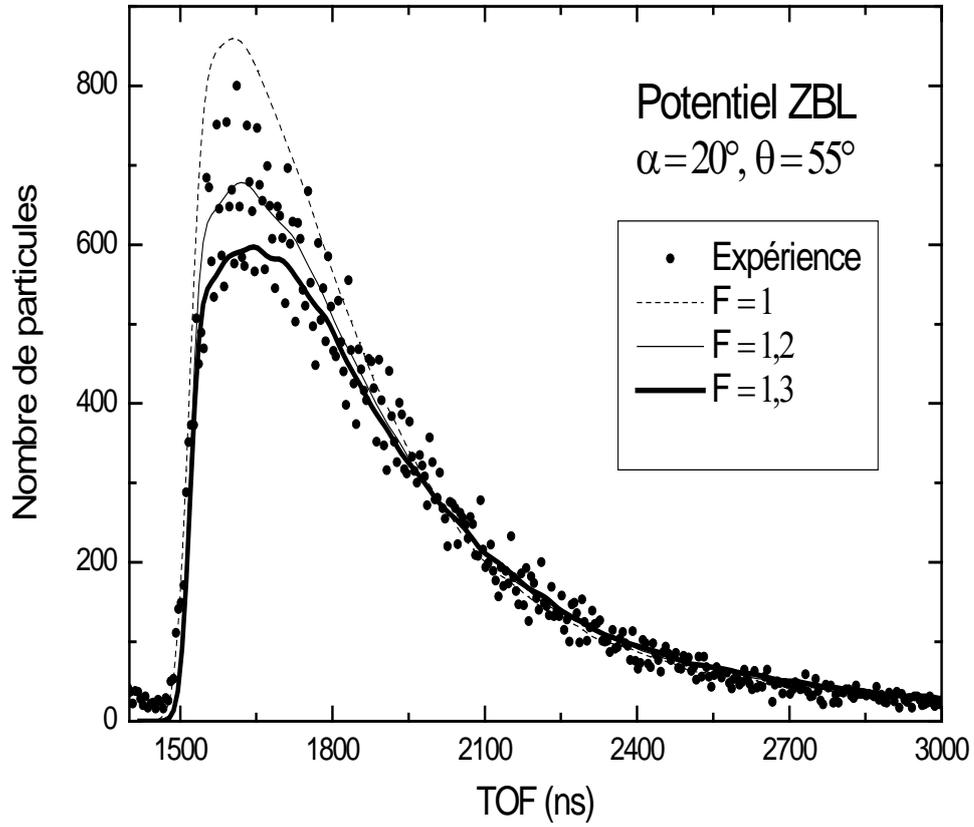


Figure III.17. Comparaison des spectres simulés avec le potentiel ZBL à un spectre expérimental pour un angle de diffusion $\theta=55^\circ$. Différentes valeurs pour la perte d'énergie électronique ont été considérées.

Ces figures montrent bien que les spectres simulés en utilisant la perte d'énergie électronique donnée par SRIM 2010 (celles qui correspondent au facteur multiplicatif $F=1$) ne reproduisent pas bien les spectres expérimentaux. D'autres spectres ont été simulés en multipliant la perte d'énergie électronique de SRIM 2010 par un facteur F . Le meilleur accord est obtenu pour la valeur $F=1.2$. Sur les courbes III.15, III.16 et III.17 nous avons montré également les spectres simulés avec le facteur $F=1.3$.

D'autres spectres TOF ont été simulés, mais en considérant cette fois le potentiel TFM pour décrire l'interaction projectile-atome cible. Dans ce cas aussi, le meilleur accord expérience-simulation a été obtenu en multipliant la perte d'énergie électronique de SRIM 2010 par le facteur $F=1.2$ (voir figures III.18, III.19 et III.20).

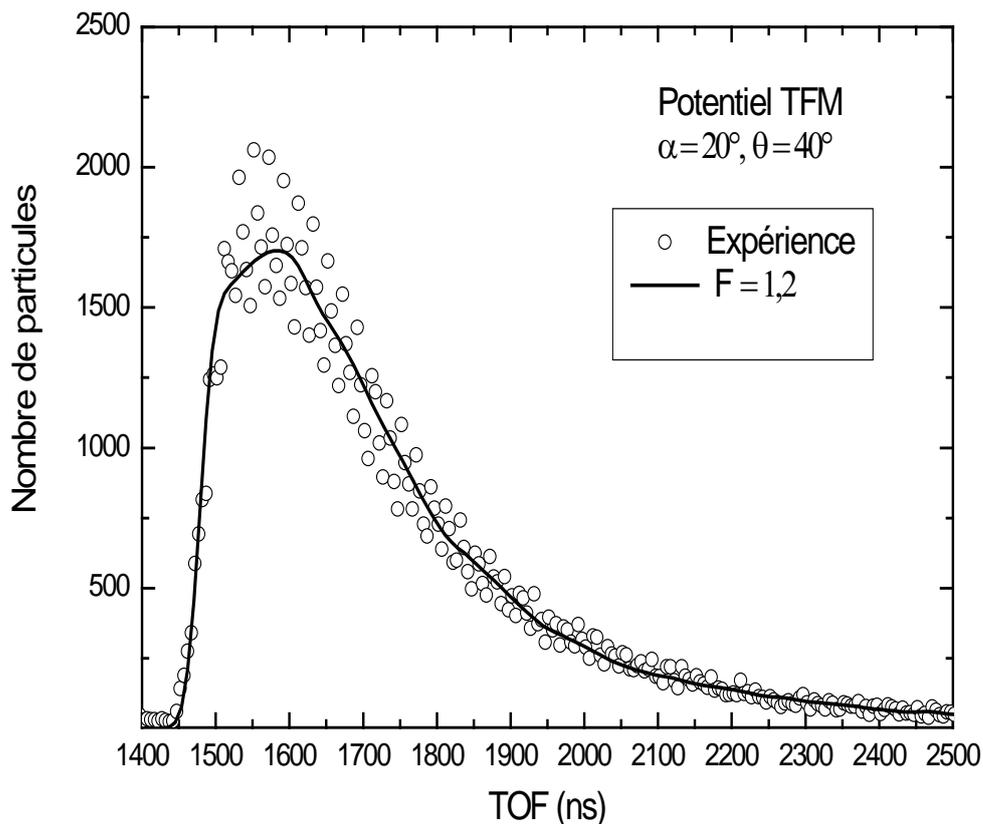


Figure III.18. Comparaison du spectre simulé avec le potentiel TFM à un spectre expérimental pour un angle de diffusion $\theta=40^\circ$.

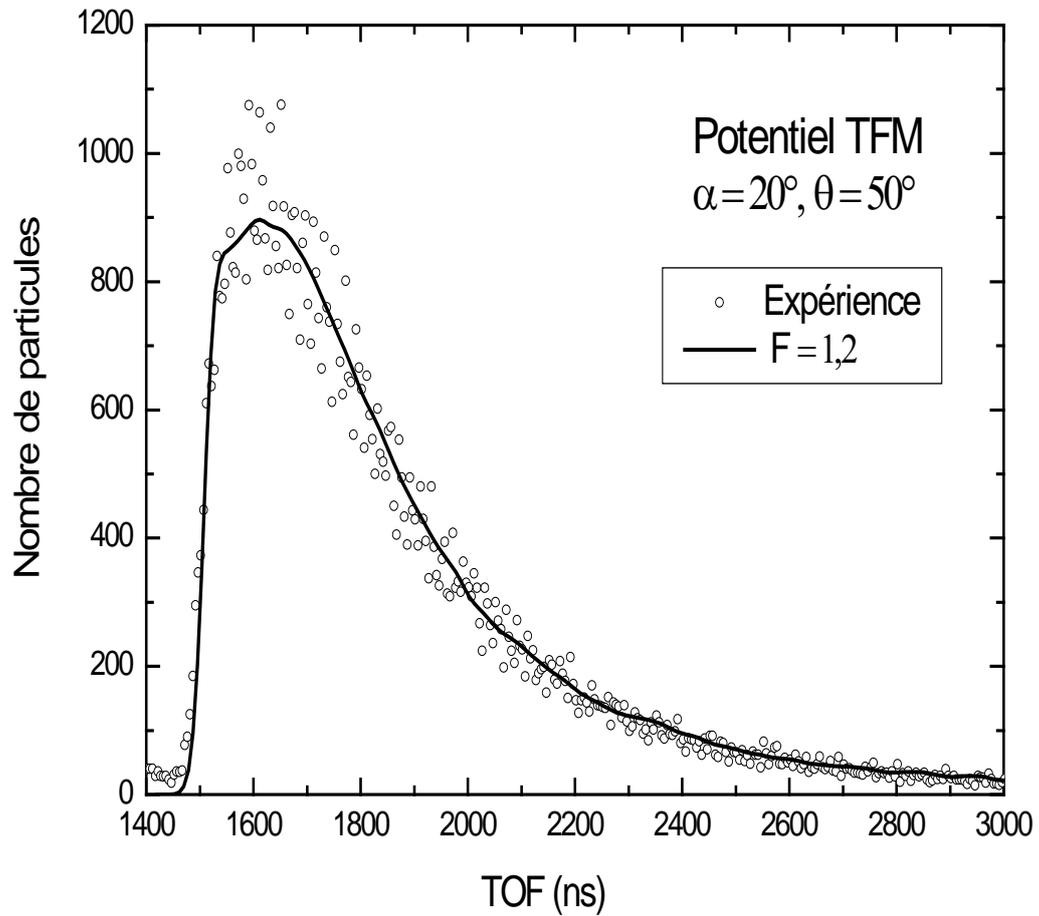


Figure III.19. Comparaison du spectre simulé avec le potentiel TFM à un spectre expérimental pour un angle de diffusion $\theta = 50^\circ$.

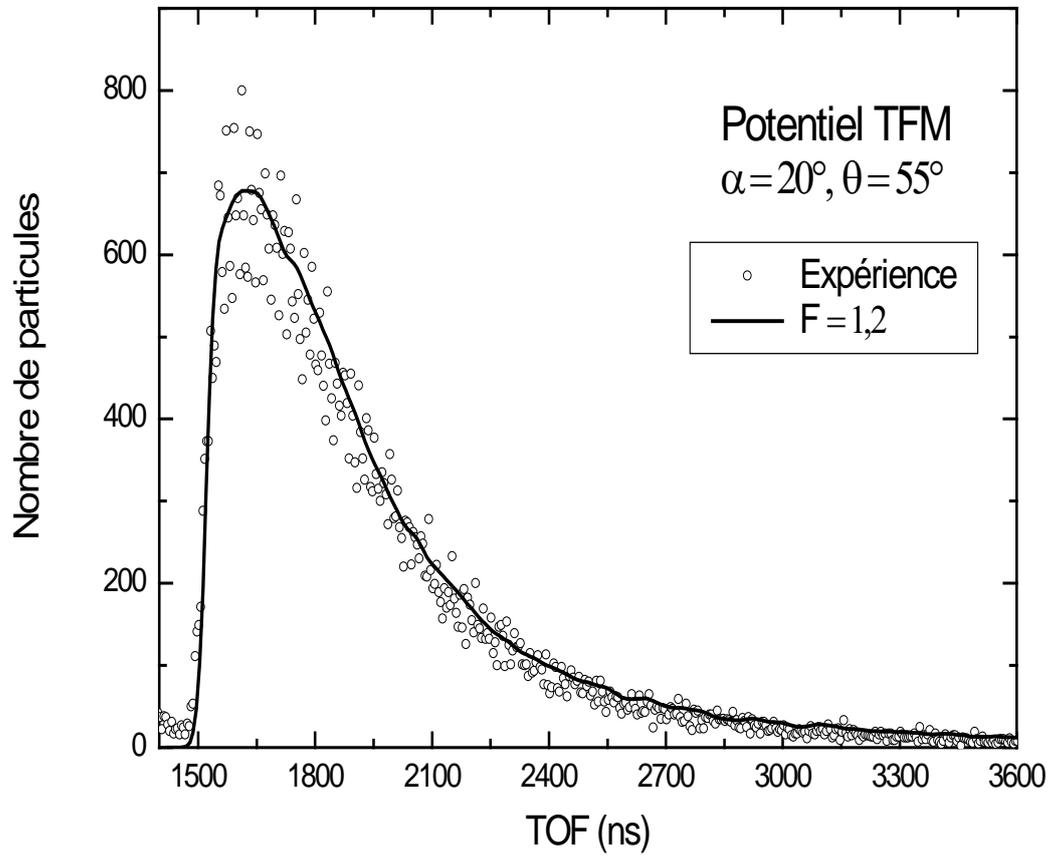


Figure III.20. Comparaison du spectre simulé avec le potentiel TFM à un spectre expérimental pour un angle de diffusion $\theta = 55^\circ$.

Tous les spectres expérimentaux correspondant à différentes valeurs de l'angle de diffusion ont été bien reproduits en effectuant une simulation numérique et en considérant le potentiel ZBL. Cependant, cet accord a été obtenu en multipliant les valeurs de la perte d'énergie électronique par un facteur $F=1.2$, ce qui amène la valeur du pouvoir d'arrêt électronique des projectiles ${}^4\text{He}^+$ dans la cible de silicium à 4 keV de $\left(\frac{dE}{dx}\right) e = 3.39 \text{ eV}/\text{Å}$ à $\left(\frac{dE}{dx}\right) e = 4.07 \text{ eV}/\text{Å}$. Des résultats analogues ont été obtenus en considérant le potentiel TFM. Pour rappel, nous avons déjà montré que les spectres TOF étaient plus sensibles à un changement au niveau de la perte d'énergie électronique qu'à un changement au niveau du potentiel d'interaction.

III.6. Conclusion :

Nous avons considéré la diffusion d'ions ${}^4\text{He}^+$, d'énergie $E_0 = 4\text{keV}$, par une surface de silicium amorphe. Différentes valeurs de l'angle d'incidence et de diffusion ont été considérées. Nous avons utilisé une simulation de type Monte Carlo pour calculer les spectres de diffusion en temps de vol.

Dans une première étape, nous avons montré que ces spectres étaient très sensibles à la perte d'énergie électronique. Les spectres simulés devenaient plus larges, et la pente de décroissance plus faible lorsque la perte d'énergie électronique considérée était plus élevée. Par ailleurs, nous avons étudié également l'effet du potentiel d'interaction sur les spectres de diffusion simulés. Deux potentiels ont été considérés dans cette étude : le potentiel ZBL et le potentiel TFM. Nous avons montré dans cette étude que les spectres de diffusion simulés dépendaient très peu du potentiel d'interaction. Un résultat analogue a été obtenu lors de l'étude de la probabilité de diffusion par une surface solide en utilisant un modèle de simulation basé sur la résolution de l'équation de transport dans la théorie de transport [BEN12].

Par ailleurs, nous avons comparé les spectres de diffusion simulés à des spectres expérimentaux pour un angle d'incidence $\alpha=20^\circ$ et où différentes valeurs de l'angle de diffusion ont été considérées. Un bon accord expérience-simulation a été obtenu en multipliant la perte d'énergie électronique déduite de SRIM2010 par un facteur $F=1.2$ ce qui amène la valeur du pouvoir d'arrêt des projectiles ${}^4\text{He}^+$ dans la cible de silicium à 4 keV de

$\left(\frac{dE}{dx}\right) e = 3.39 \text{ eV}/A$ à $\left(\frac{dE}{dx}\right) e = 4.07 \text{ eV}/A$. Il est à noter que ceci était valable aussi bien pour le potentiel ZBL que le potentiel TFM.

Conclusion Générale

Dans ce travail, nous avons utilisé une simulation basée sur le code TRIM [ZIE85]. Cette simulation est de type Monte Carlo et tient compte des diffusions multiples dans le solide. Elle est basée sur l'approximation de la collision binaire. Au niveau de chaque collision, la perte d'énergie nucléaire est calculée et la nouvelle direction du projectile est ainsi déterminée. L'énergie de sortie de chaque particule diffusée et détectée est convertie en temps de vol TOF. Des spectres en temps de vol ont été ainsi calculés pour différentes géométries.

Nous avons considéré la diffusion d'ions $^4\text{He}^+$, d'énergie $E_0 = 4\text{keV}$, par une surface de silicium amorphe. Différentes valeurs de l'angle d'incidence et de diffusion ont été considérées.

Dans une première étape, nous avons montré que ces spectres étaient très sensibles à la perte d'énergie électronique. Les spectres simulés devenaient plus larges, et la pente de décroissance plus faible lorsque la perte d'énergie électronique considérée était plus élevée.

Nous avons étudié également l'effet du potentiel d'interaction sur les spectres de diffusion simulés. Deux potentiels ont été considérés dans cette étude : le potentiel ZBL et le potentiel TFM. Nous avons montré dans cette étude que les spectres de diffusion simulés dépendaient très peu du potentiel d'interaction. Un résultat analogue a été obtenu lors de l'étude de la probabilité de diffusion par une surface solide en utilisant un modèle de simulation basé sur la résolution de l'équation de Boltzmann dans la théorie de transport [BEN12].

Par ailleurs, nous avons comparé les spectres de diffusion simulés à des spectres expérimentaux pour un angle d'incidence $\alpha=20^\circ$ et où différentes valeurs de l'angle de diffusion ont été considérées. La fraction de charge mesurée expérimentalement étant très faible, nous n'avons pas tenu compte des processus d'échange de charge dans la simulation. L'effet du potentiel image sur la trajectoire des particules chargées est faible dans ce cas.

Conclusion générale

Un bon accord expérience-simulation a été obtenu en multipliant la perte d'énergie électronique de SRIM2010 par un facteur $F=1.2$, ce qui amène la valeur du pouvoir d'arrêt des projectiles ${}^4\text{He}^+$ dans la cible de silicium à 4 keV de $\left(\frac{dE}{dx}\right) e = 3.39 \text{ eV}/\text{Å}$ à $\left(\frac{dE}{dx}\right) e = 4.07 \text{ eV}/\text{Å}$.

Il est à noter que ceci était valable aussi bien pour le potentiel ZBL que le potentiel TFM.

Références

- [AIS07] B. Aissous. mémoire de magister, USTHB, 2007.
- [AND97] André Muis, J.R. Mason, M.KATO and R.S Williams Nucl. Instr. And. Meth Phys. Res. B 125(1997) 332.
- [ARE97] B. Arezki, Thèse de Magister, USTHB, 1997.
- [BEN12] M. Benrekia, Mémoire de Magister, USTHB, 2012.
- [DRA04] M. Draxler , S.N. Markin , R. Beikler , E. Taglauer , F. Kastner, M. Bergsmann , P. Bauer, Nucl. Instr. And. Meth. Phys. Res B 219–220 (2004) 578.
- [ECK91] W. Eckstein, Computer simulation of ion-solid interactions, Springer Verlag Series in Materials Science. Vol10, 1991.
- [FEL86] L.C.Feldman,J.W.Mayer, Fundamentals of surface and thin film analysis.USA.1986
- [LIN63] J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schiott, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Sels. 33 (1963) 14.
- [MEK05] A. Mekhtiche, mémoire de Magister, USTHB, (2005).
- [MET49] Metropolis N., S. Ulam, “The Monte Carlo, J. of the Am. Stast,”,Asso. 44. 335, (1949).
- [MOL47] G. Molière, Z. Naturforsch. 2a (1947) 133.
- [MOR89] W.L. Morgan, Appl. Phys. Lett. 55 (2) (1989) 106.
- [NIE93] H. Niehus, W. Heiland and E .Taglauer, Surf. Sci. Rep. 17(1993) 213.
- [PAS09] V.Pascal, Simulation numérique en physique statistique, Paris. 2009.
- [RAB94] J.W.Rabalais, Low Energy Ion-Surface Interactions, USA (Wiley series Chemistry and Physics) 1994.
- [SID75] G. Sidenius, N. Andersen , Nucl. Instr. Meth. 126 (1975) 317.
- [SIG82] P. Sigmund. Physica Scripta. 28 (1982) 257.
- [SMI97] R.Smith, Atomic And Ion Collision In Solids And At Surfaces U.K 1997.
- [TAG04] Edmund Taglauer, Robert Beikler, Vacuum 73 (2004) 9 .
- [WIN02] H. Winter, Physics Reports 367 (2002) 387.
- [ZIE85] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids. Pergamon Press. New York (1985).
- [ZIE10] James F. Ziegler, M.D. Ziegler, J.P. Biersack, SRIM - The stopping and range of ions in matter volumes 2 - 6, Pergamon Press, New York (2010).