

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de L'Enseignement Supérieure et de la Recherche Scientifique
Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene

Faculté de Physique



THESE

Présenté pour l'obtention du **grade** de **DOCTEUR EN SCIENCES**

En: PHYSIQUE

Spécialité : Sciences Nucléaires

Par : MEKHTICHE Abdelhalim

Sujet

**Etude de la transmission d'ions légers à travers des cibles
solides à basse énergie**

Soutenue publiquement, le 15/05/2016, devant le jury composé de :

M. CHAMI Ahmed Chafik,	Professeur, USTHB	Président
Mme KHALAL-KOUACHE Karima,	Professeur, USTHB	Directrice de thèse
M. BENGUERBA Messaoud,	Professeur, USTHB	Examineur
M. DAMACHE Smail,	Directeur de Recherche, CRNA, Alger	Examineur
M. IZERROUKEN Mahmoud,	Directeur de Recherche, CRND, Alger	Examineur
M. KHELIFI Rachid,	Maître de Conférences A, Université de Blida	Examineur

A la mémoire de mon père

A ma mère

A ma femme, mes frères et mes sœurs

Remerciements

Ce travail a été réalisé au laboratoire des Sciences Nucléaires et Interactions Rayonnements-Matière de l'université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene (USTHB).

Tout d'abord je remercie ALLAH, le tout puissant pour m'avoir donné assez de force et de patience pour mener à terme ce travail.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance et ma gratitude envers Mme K. KHALAL-KOUACHE, Professeur à l'USTHB, pour m'avoir proposé ce sujet de thèse, d'avoir enrichi mes connaissances, pour la confiance qu'elle m'a accordée et le temps consacré pour discuter des résultats et avancer la rédaction de la thèse et finalement de m'avoir supporté pendant ces longues années.

Je remercie également le Professeur A.C. CHAMI pour sa disponibilité, sa qualité humaine et pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury de cette thèse.

Mes vifs remerciements à M. M. BENGUERBA, Professeur à l'USTHB, qui m'a fait l'honneur d'accepter de juger ce travail.

Je voudrais remercier M. R. KHELIFI, Maître de conférences A à l'université de Blida, d'avoir accepté de participer à ce jury de thèse et pour son soutien moral.

J'adresse mes plus vifs remerciements à M. S. DAMACHE, Directeur de recherche au CRNA et à M. M. IZERROUKEN, Directeur de recherche au CRND d'avoir accepté d'évaluer le présent travail.

Je souhaite adresser mes remerciements à tous mes collègues de l'université de Médéa, pour leurs encouragements et leur soutien pendant mes années de thèse. Je remercie plus particulièrement mes amis O. CHORROUD, K. BOUCHACHIA, S. HAIRECHE, B. MAZARI, F. BEZOUBIRI et S. MAZIDI. Je leur souhaite une bonne continuation et bon courage pour leurs études.

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

Table des matières

Introduction	9
1. Processus d'interaction ion-matière solide à basse énergie	12
1.1. Introduction	13
1.2. Description classique de la diffusion d'ions à basse énergie	13
1.2.1. Collision élastique	13
1.2.2. Intégrale de diffusion	15
1.3. Potentiel d'interaction	18
1.4. Section efficace de diffusion	21
1.5. Perte d'énergie des ions dans la matière	25
1.5.1. Perte d'énergie inélastique	25
1.5.2. Perte d'énergie élastique	26
1.5.3. Perte d'énergie totale	28
1.6. Diffusions multiples	29
1.6.1. Distributions angulaires d'ions transmis	31
1.6.2. Distributions latérales	31
1.7. Effet de l'échange de charge sur les distributions angulaires.....	32
1.8. Simulation numérique.....	34
1.8.1. Théorie de transport	34
1.8.2. Simulation Monte Carlo	35
1.8.3. Dynamique moléculaire	35
2. Etude de la transmission d'ions à travers une cible solide	36
2.1. Introduction	37
2.2. Modèle de Sigmund et Winterbon	37
2.3. Modèle de Valdés	44
2.4. Modèle de Marwick et Sigmund	48
2.4. Conclusion	52
3. Influence de la perte d'énergie et du potentiel d'interaction sur les distributions angulaires d'ions à travers une cible solide	53

3.1. Introduction	54
3.2. Validité de l'approximation $x \approx L$	54
3.3. Calcul de la fonction de diffusion multiple en utilisant le modèle de Sigmund...56	
3.4. Effet de la perte d'énergie sur les distributions angulaires d'ions à travers une cible solide.....58	
3.4.1. Détermination de la perte d'énergie.....58	
3.4.2. Calcul des distributions angulaires en tenant compte de la perte d'énergie.....59	
3.4.3. Effet de la perte d'énergie sur l'angle à mi-hauteur de la distribution....63	
3.5. Influence du potentiel d'interaction sur les distributions angulaires	65
3.6. Influence simultanée du potentiel d'interaction et de la perte d'énergie sur les distributions angulaires.....66	
3.7. Comparaison à des résultats expérimentaux	68
3.7.1. Comparaison des distributions angulaires calculées avec l'expérience..69	
3.7.2. Comparaison des angles à mi-hauteur avec l'expérience.....74	
3.8. Conclusion	76
4. Approximation de l'énergie moyenne dans le calcul des distributions angulaires d'ions transmis à travers une cible solide	77
4.1. Introduction.....78	
4.2. Approximation de l'énergie moyenne dans le modèle de Sigmund	78
4.3. Résultats et discussion	80
4.4. Conclusion	91
5. Dispersion latérale d'ions transmis à travers une cible solide.....92	
5.1. Introduction.....93	
5.2. Calcul de la fonction de la dispersion latérale.....93	
5.3. Comparaison à des résultats expérimentaux.....98	
5.4. Influence de la perte d'énergie sur le calcul de la dispersion latéral.....102	
5.5. Conclusion.....105	
Conclusion	107
Références	109

Table des figures

Figure 1.1. Schéma représentant une collision binaire entre deux particules dans le système du laboratoire	14
Figure 1.2. Schéma représentant la diffusion de la particule fictive dans le cdm.....	15
Figure 1.3. Variation de la fonction d'écran en fonction de $x=r/a$ pour les trois potentiels ZBL, TFM et LJ.....	19
Figure 1.4. Approximation de la fonction d'écran du potentiel LJ par des fonctions d'écran en puissance.....	20
Figure 1.5. Variation de la section efficace différentielle en fonction de l'angle de diffusion dans le cdm, calculée dans le cas du potentiel TFM et ce pour différentes valeurs de l'énergie réduite	23
Figure 1.6. Variation de la fonction $f(t^{1/2})$ pour les trois potentiels ZBL, TFM et LJ	24
Figure 1.7. Variation des pouvoirs d'arrêt électronique, nucléaire et total en fonction de l'énergie des ions He^+ dans une cible d'aluminium, obtenus à partir du code SRIM [SRI08].....	29
Figure 1.8. Schéma représentant le processus des diffusions multiples.....	30
Figure 1.9. Schéma représentant les deux principales géométries pour l'étude de la diffusion multiple.....	30
Figure 1.10. Distributions angulaires d'ions N^+ de 3,7 MeV transmis à travers une cible de carbone pour différents états de charge des ions à la sortie	33
Figure 2.1. Schéma représentant la géométrie utilisée dans le calcul des distributions angulaires des particules transmises.....	38
Figure 2.2. Variation de la fonction $\Delta(z)$ pour les potentiels de ZBL, TFM et LJ.....	41
Figure 2.3. Variation de la fonction $f(\tau, \hat{\alpha})$ avec $\hat{\alpha}$ pour différentes valeurs de τ dans le cas du potentiel ZBL.....	43
Figure 2.4. Variation de la fonction $P(z, 1)$ pour le potentiel ZBL.....	48
Figure 2.5. Schéma représentant un déplacement latéral ρ des ions transmis à travers une cible d'épaisseur x	49
Figure 2.6. Variation de la fonction Γ avec τ pour les potentiels TF et LJ.....	51
Figure 3.1. Variation des distributions de parcours $\frac{1}{N} \frac{dN}{dL}$ en fonction de $\frac{L}{x}$ pour 2keV-50Å (—○—), 2keV-200Å (—●—), 10keV-200Å (—□—) et 10keV-800Å (—■—).....	55
Figure 3.2. Distributions angulaires de la fonction de distribution multiple $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ pour $\tau=0.2$ et $\tau=0.4$	56
Figure 3.3. Variation de l'angle réduit à mi-hauteur $\tilde{\alpha}_{1/2}$ en fonction de l'épaisseur réduite τ	57

Figure 3.4. Variation de l'énergie E des ions H^+ (10 keV) en fonction du parcours traversé x' dans une cible d'aluminium.....	59
Figure 3.5. Distributions angulaires d'ions He^+ de 4 keV transmis à travers une cible d'argent de 200Å d'épaisseur (avec et sans perte d'énergie). Le potentiel de ZBL est utilisé.....	60
Figure 3.6. Distributions angulaires d'ions He^+ de 10 keV transmis à travers une cible d'argent de 200Å d'épaisseur (avec et sans perte d'énergie). Le potentiel de ZBL est utilisé	61
Figure 3.7. Distributions angulaires calculées pour des ions He^+ de 2 keV transmis à travers une cible d'Ag d'épaisseur 50 Å.....	62
Figure 3.8. Distributions angulaires calculées pour des ions He^+ 2 keV transmis à travers une cible d'Ag d'épaisseur 150 Å et 200 Å. La perte d'énergie totale est considérée (-•-), la perte d'énergie électronique uniquement est considérés (—) et la perte d'énergie est négligée (- - -).....	63
Figure 3.9. Variation du rapport $\beta_{1/2}/\alpha_{1/2}$ en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ pour des ions He^+ de 2 et 10 keV.....	64
Figure 3.10. Distributions angulaires d'ions He^+ (10 keV) transmis à travers une cible d'Ag d'épaisseur 150 Å. Le potentiel ZBL est considéré dans le cas $C_a=1$ (-•-) et $C_a=0.9$ (-■-).....	65
Figure 3.11. Distributions angulaires d'ions He^+ transmis à travers une cible Ag d'épaisseur 160 Å avec ($C_a=1, C_e=1$) et ($C_a=0.9, C_e=3$) pour plusieurs énergies de l'ion incident.....	66
Figure 3.12. Distributions angulaires d'ions He^+ (10 keV) transmis à travers une cible Ag.....	68
Figure 3.13. Distributions angulaires calculées d'ions H^+ de 10 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 159 Å comparées aux résultats expérimentaux [ARC05].....	69
Figure 3.14. Distributions angulaires calculées d'ions H^+ de 9 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 200 Å comparées aux résultats expérimentaux [FAM00].....	70
Figure 3.15. Distributions angulaires d'ions H^+ (6keV) transmis à travers une cible de carbone d'épaisseur 130 Å comparée aux résultats de [CAN11].....	71
Figure 3.16. Distributions angulaires d'ions H^+ (9 keV) transmis à travers une cible Ag d'épaisseur 250 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CAN10].....	72
Figure 3.17. Distributions angulaires d'ions H^+ (9 keV) transmis à travers une cible de Cu d'épaisseur 157 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CAN10].....	73
Figure 3.18. Distributions angulaires d'ions H^+ (9 keV) transmis à travers une cible de Pd d'épaisseur 170 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CEL13].....	74
Figure 3.19. Variation de l'angle réduit à mi-hauteur $\tilde{\alpha}_{1/2}$ en fonction de l'épaisseur réduite.....	75
Figure 4.1. Distributions angulaires d'ions H^+ (10 keV) transmis à travers les cibles Ag(200Å) et Al(200Å), calculées par le modèle VA et par l'approximation de l'énergie moyenne (le modèle SW avec l'énergie moyenne \bar{E}_1).....	81

Figure 4.2. Distributions angulaires d'ions H^+ (10 keV et 50 keV) transmis à travers des cibles d'Al (3000 Å) et d'Ag (2000 Å), calculées par le modèle VA et par l'approximation de l'énergie moyenne (modèle SW avec l'énergie moyenne \bar{E}_1).	82
Figure 4.3. Variation du rapport entre l'énergie moyenne et l'énergie initiale E_0 en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ pour le potentiel ZBL.	84
Figure 4.4. Distributions angulaires d'ions H^+ (10 keV et 50 keV) transmis à travers des cibles d'Al (3000 Å) et d'Ag (2000 Å), calculées par le modèle VA et par l'approximation de l'énergie moyenne (modèle SW avec l'énergie moyenne \bar{E}_{fit}).	85
Fig. 4.5. Variation des angles à mi-hauteur $\beta_{1/2}(\bar{E}_{ex})$ (modèle VA), $\beta_{1/2}(\bar{E}_{fit})$ (modèle SW avec l'énergie \bar{E}_{fit}) et $\beta_{1/2}(\bar{E}_1)$ (modèle SW avec l'énergie \bar{E}_1) en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$.	86
Figure 4.6. Variation du rapport entre l'énergie moyenne et l'énergie initiale E_0 en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ pour le potentiel ZBL.	87
Figure 4.7. Variation du rapport entre l'énergie moyenne et l'énergie initiale E_0 en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ pour le potentiel TFM.	88
Figure 4. 8. Variation du rapport entre l'énergie moyenne et l'énergie initiale E_0 en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ pour le potentiel LJ.	89
Figure 4. 9. Variation des angles à mi-hauteur $\beta_{1/2}(\bar{E}_{ex})$, $\beta_{1/2}(\bar{E}_{fit})$ et $\beta_{1/2}(\bar{E}_1)$ en fonction de l'énergie initiale de l'ion E_0 .	90
Figure 5.1. Variation de la fonction g_1 avec le déplacement réduit de $\tilde{\rho}$ pour $\tau = 2$ dans le cas du potentiel de ZBL. Les valeurs calculées de g_1 pour le potentiel de TF [MAR75] sont également présentées.	94
Figure 5.2. Variation de la fonction g_1 avec le déplacement réduit de $\tilde{\rho}$ pour $\tau = 20$ dans le cas du potentiel de ZBL. Les valeurs calculées de g_1 pour le potentiel de TF [MAR75] sont également présentées.	94
Figure 5.3. Variation de la fonction Γ en fonction de l'épaisseur réduite τ dans le cas du potentiel ZBL.	96
Figure 5.4. Variation de la fonction de dispersion latérale en fonction du déplacement latéral $\tilde{\rho}$ pour $\tau = 1$.	97
Figure 5.5. Variation de la fonction de dispersion latérale en fonction du déplacement latéral $\tilde{\rho}$ pour $\tau = 0.1$.	97
Figure 5.6. Distribution latérale d'ions He^+ transmis à travers une cible de N calculée pour le potentiel de ZBL et comparée aux résultats expérimentaux [SID75-b].	98

Figure 5.7. Distribution latérale d'ions N^+ transmis à travers une cible de Xe calculée pour le potentiel de ZBL et comparée aux résultats expérimentaux [SID75-a].....	99
Figure 5.8. Distribution latérale d'ions Ar^+ transmis à travers une cible de Xe calculée pour le potentiel de ZBL et comparée aux résultats expérimentaux [KNU76-a].	99
Figure 5.9. Variation de $\tilde{\rho}_{1/2}$ en fonction de τ : (•) : expression exacte, (—) : loi d'échelle et (Δ) : valeurs expérimentales [SID75-a].	101
Figure 5.10. Variation de $\tilde{\rho}_{1/2}$ en fonction de τ : (•) : expression exacte, (—) : loi d'échelle et (Δ) : valeurs expérimentales [SID75b].....	102
Figure 5.11. Distribution latérale d'ions H^+ (10 keV) transmis à travers une cible d'Al (300 Å) calculée avec et sans perte d'énergie.....	103
Figure 5.12. Distribution latérale d'ions He^+ (50 keV) transmis à travers une cible d'Ag (600 Å) calculée avec et sans perte d'énergie.....	104

Liste des tableaux

Tableau 1.1. Valeurs des constantes d'ajustement α_i et β_i pour les trois potentiels LJ, TFM et ZBL.	18
Tableau 1.2. Valeurs des constantes λ , m et q pour les potentiels TFM, LJ et TF.....	24
Tableau 3.1. Valeurs de m et C obtenues dans le cas du potentiel de ZBL.....	58
Tableau 5.1. Comparaison entre les valeurs de $g_1(\tau, 0)$ et $g^*_1(\tau, 0)$ pour différentes valeurs de τ	96

Introduction

La détermination de la perte d'énergie des particules chargées dans des cibles élémentaires ou complexes représente un intérêt aussi bien fondamental que pratique pour la compréhension de nombreux phénomènes liés à l'interaction des particules chargées avec la matière. Elle fournit d'importantes informations concernant les propriétés physiques des matériaux traversés en vue de leurs applications dans les différents domaines. A haute énergie, les valeurs du pouvoir d'arrêt sont disponibles pour un large nombre de systèmes [PAU12, PAU13]. En revanche, la détermination de ces valeurs à basse énergie par la technique de transmission d'ions reste une tâche complexe. Sur le plan expérimental, ces difficultés sont liées à la contrainte d'avoir des cibles homogènes et très minces. Sur le plan théorique, la compréhension de tous les mécanismes fondamentaux par lesquels les ions cèdent leurs énergies aux atomes cibles et qui conduisent à la perte d'énergie totale, est nettement moins bien connue à basse énergie.

En fait, le comportement des ions dans la matière peut être traité comme un ensemble de chocs individuels donnant naissance à des déviations et des pertes d'énergie plus ou moins importantes. Les diverses théories de ces phénomènes diffèrent, en plus de leurs développements particuliers, par le nombre moyen d'interactions que les ions subissent au cours de la traversée de la cible. Ce nombre est directement lié à l'épaisseur, à la nature de l'ion incident, son énergie et aux atomes du milieu traversé. On a alors coutume de distinguer les domaines de diffusion simple et celui de la diffusion multiple.

Dans la diffusion simple où le nombre moyen de chocs élastiques est voisin de l'unité, la fonction de distribution angulaire des ions se confond avec la section efficace différentielle de diffusion. Pour des épaisseurs plus grandes, on se trouve dans le domaine de la diffusion multiple qui a été étudiée par de nombreux auteurs, tant sur le plan théorique [MOL48, SCO63-a, SCO63-b, MEY71, SIG74, AMS03] qu'expérimental [AND71, AND74, SUG79, ANN88]. En principe, la résolution de l'équation de transport de Boltzmann est souvent utilisée pour déterminer la distribution angulaire de la diffusion multiple [KHA07-a]. Une solution analytique de cette équation est impossible. Les modèles théoriques font appel donc aux approximations.

Le modèle de Sigmund et Winterbon (SW) [SIG74], utilisé dans ce travail pour le calcul des distributions angulaires d'ions transmis, est valable pour les faibles angles et lorsque la perte d'énergie des ions dans la cible est négligeable. Dans certains cas, un bon

accord entre ce modèle et l'expérience est reporté [AND71, AND74, FAM00]. Dans d'autres cas, le désaccord observé [AND71, HOO75] a été lié essentiellement à l'effet de la perte d'énergie des ions dans le solide qui n'a pas été pris en compte dans les calculs. Dans ce travail, nous avons tenu compte de cet effet à l'aide d'un traitement rigoureux puis en utilisant l'approximation de l'énergie moyenne.

D'autre part, les déviations individuelles qui contribuent à la perte d'énergie totale sont dues essentiellement aux chocs élastiques qui peuvent être déterminées par la section efficace de diffusion, ou plus précisément par le potentiel interatomique. Ce dernier n'est pas tout à fait connu avec précision dans la gamme des basses énergies. Il représente à ce jour l'objet de plusieurs études théoriques [GOE15]. Un moyen efficace pour extraire le potentiel d'interaction ion-atome cible, consiste à déterminer la distribution angulaire et latérale d'ions à travers des cibles solides ou gazeuses. Plusieurs recherches dans ce sens ont été menées durant les dernières décennies. Cet intérêt a été motivé par un grand nombre de résultats expérimentaux [FAM00, FAM02, ARC05, ARC06, CAN10, CAN11] obtenus par la technique de la transmission d'ions à basse énergie.

La contribution relative du potentiel d'interaction et de la perte d'énergie sur la diffusion multiple d'ions transmis à travers une cible solide est l'objectif essentiel de ce travail. A partir de cette problématique nous présentons les différents problèmes résolus dans cette thèse, étayés comme suit:

Le premier chapitre résume les mécanismes physiques qui accompagnent l'interaction d'une particule avec une cible solide (potentiel d'interaction, perte d'énergie, cinématique de la collision ion-atome cible, les collisions multiples).

Le deuxième chapitre est consacré à la description des modèles théoriques et les différentes approximations utilisées pour le calcul de la distribution angulaire de la diffusion multiple. Nous apportons des corrections au modèle SW en tenant compte de la perte d'énergie totale des ions. En s'appuyant également sur la théorie de transport, le modèle théorique de la dispersion latérale d'ions est introduit dans ce chapitre.

Dans le troisième chapitre, nous présentons des résultats obtenus pour les distributions angulaires d'ions H^+ et He^+ transmis à travers des cibles de C, Al, Cu, Ag et Pd. Nous étudions d'une manière séparée puis simultanée l'effet de la perte d'énergie et du potentiel d'interaction sur la diffusion multiple. Une comparaison de nos résultats à ceux obtenus expérimentalement est présentée.

Le quatrième chapitre se focalise sur l'étude de l'approximation de l'énergie moyenne dans le calcul de la distribution angulaire de la diffusion multiple.

Le chapitre cinq synthétise les résultats obtenus lors du calcul des distributions latérales d'ions à travers un milieu diffusif. La relation entre les distributions angulaires et latérales d'ions transmis sera étudiée dans cette partie et une comparaison avec les résultats expérimentaux est également présentée.

Enfin, nous terminons cette étude par une conclusion générale dans laquelle nous résumons l'essentiel de notre travail.

CHAPITRE 1

Processus d'interaction ion-matière solide à basse énergie

1.1. Introduction:

L'étude des diffusions multiples d'ions de basse énergie dans une cible solide, 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 aspects fondamentaux qui gouvernent l'interaction ion-cible solide : cinématique de la collision, potentiel d'interaction et perte d'énergie. Nous présentons brièvement la théorie des diffusions multiples. Une description des modèles de simulation est fournie également.

1.2. Description classique de la diffusion d'ions à basse énergie:

Au cours de l'interaction d'ions avec une surface solide, il est possible d'utiliser les lois de la mécanique classique pour décrire le mécanisme de la collision. Le traitement classique est valable lorsque la longueur d'onde associée aux ions incidents, donnée par la relation de De Broglie $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2M_1E}}$, est toujours plus petite devant les dimensions caractéristiques de l'interaction (espace interatomique, distance minimale d'approche et paramètre d'impact) [MOT65]. M_1 et E sont, respectivement, la masse et l'énergie de l'ion incident. h est la constante de Planck. Dans cette étude, nous considérons des ions légers de basse énergie, la condition décrite précédemment est toujours vérifiée.

1.2.1. Collision élastique:

Dans une collision élastique entre un projectile et un atome cible, l'énergie cinétique et la quantité du mouvement totales sont conservées. Dans ce cas, les structures électroniques respectives du projectile et de l'atome cible restent inchangées.

La figure 1.1 représente une collision élastique entre deux corps : un projectile de masse M_1 et de vitesse \vec{v} entre en collision avec un atome cible de masse M_2 au repos. D'après les lois de la mécanique classique, le transfert d'énergie T entre les deux masses s'écrit:

$$T = 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \cos^2 \Phi \quad (1.1)$$

E est l'énergie initiale du projectile et Φ est l'angle de déviation de l'atome cible par rapport à la direction initiale du projectile.

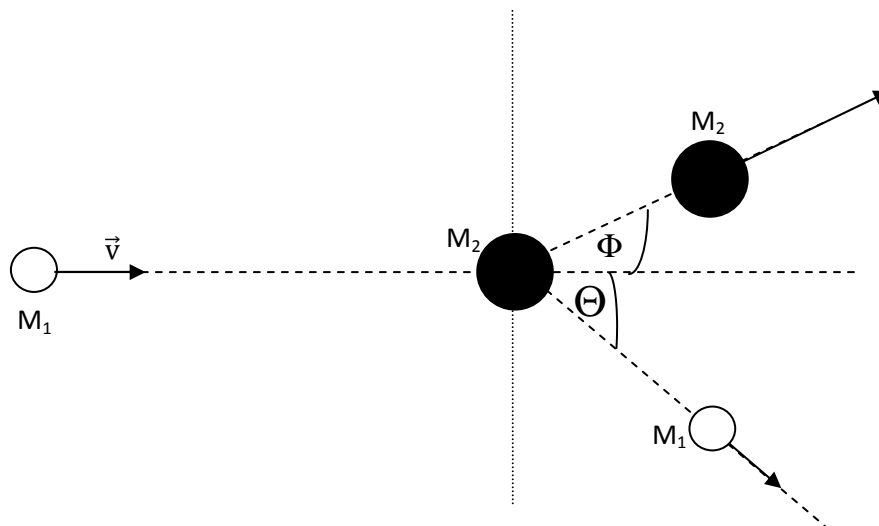


Figure 1.1. Schéma représentant une collision binaire entre deux particules de masses M_1 et M_2 dans le système du laboratoire.

Le facteur cinématique K correspond au rapport entre l'énergie du projectile E' après la collision et son énergie initiale E . Il est donné en fonction de l'angle de diffusion du projectile Θ par la relation :

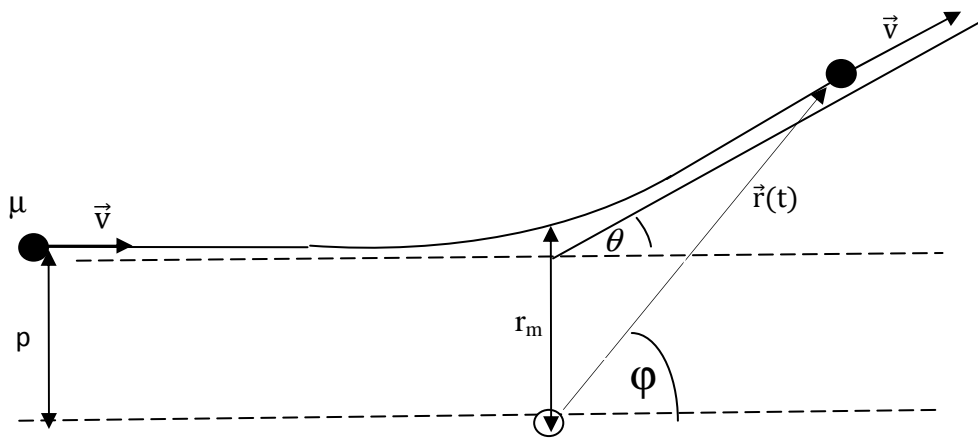
$$K = \frac{E'}{E} = \left(\frac{M_1 \cos \Theta \pm \sqrt{M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \Theta}}{M_1 + M_2} \right)^2 \quad (1.2)$$

Dans le cas des collisions pour lesquelles la masse du projectile est inférieure à la masse de l'atome cible, 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, les deux signes sont possibles et on observe dans ce cas, deux énergies finales pour chaque angle de diffusion.

1.2.2. Intégrale de diffusion:

Du fait que le potentiel d'interaction $V(r)$ possède une symétrie sphérique, le passage du système de référentiel lié au laboratoire vers celui lié au centre de masse (cdm), permet de réduire le problème de ces deux corps à un problème à un seul corps de masse réduite

$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ et soumis au potentiel $V(r)$ (figure 1.2).



Centre de force

Figure 1.2. Schéma représentant la diffusion de la particule fictive dans le cdm où p est le paramètre d'impact.

On considère la particule fictive de masse μ , de vitesse \bar{v} et de position $\vec{r}(r, \varphi)$ (figure 1.2). Si cette particule est soumise à un potentiel central $V(r)$, son équation du mouvement, exprimée dans le repère du centre de masse s'écrit [GOL02] :

$$E_{\text{cdm}} = \frac{\mu}{2} \left[\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right] + V(r) \quad (1.3)$$

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

$$E_{\text{cdm}} = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E \quad (1.4)$$

La conservation du moment cinétique L donne:

$$r^2 \frac{d\varphi}{dt} = v p \quad (1.5)$$

p est le paramètre d'impact (figure 1.2).

En combinant les équations (1.3) et (1.5), on obtient :

$$\frac{dr}{dt} = v \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{\text{cdm}}} - \left(\frac{p}{r} \right)^2} \quad (1.6)$$

On définit la distance minimale d'approche r_m , qui correspond à $\frac{dr}{dt} = 0$, soit :

$$r_m = \frac{p}{\left(1 - \frac{V(r_m)}{E_{\text{cdm}}} \right)^{1/2}} \quad (1.7)$$

A partir des équations (1.5) et (1,6), on trouve :

$$d\varphi = \frac{p}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{\text{cdm}}} - \frac{p^2}{r^2}}} dr \quad (1.8)$$

L'angle de diffusion θ , défini dans le système lié au centre de masse, est alors obtenu par l'intégration de l'équation (1.8) autour de toutes les trajectoires possibles. On trouve donc :

$$\theta = \pi - 2p \int_{r_m}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{\text{cdm}}} - \frac{p^2}{r^2}}} \quad (1.9)$$

Cette expression porte le nom d'intégrale de diffusion. Elle dépend de l'expression du potentiel d'interaction interatomique ainsi que des deux paramètres qui caractérisent la collision à savoir le paramètre d'impact p et l'énergie initiale E_1 .

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:

$$\Theta = \arctan\left(\frac{A \sin \theta}{1 + A \cos \theta}\right) \quad (1.10)$$

$$\Phi = \frac{\pi - \theta}{2} \quad (1.11)$$

$$\text{où } A = \frac{M_2}{M_1}.$$

Pour déterminer la trajectoire des ions dans le solide, des procédures numériques sont souvent utilisées pour le calcul de l'intégrale de diffusion (équation 1.9). Cependant, il existe des approximations analytiques qui permettent de calculer l'angle de diffusion en fonction du paramètre d'impact. C'est le cas de la méthode d'Oen [OEN83] et la formule magique de Biersack et al [BIE80, ZIE85].

1.3. Potentiel d'interaction :

En présence d'une force coulombienne répulsive entre deux noyaux en interaction, un ion de numéro atomique Z_1 , va être diffusé en s'approchant d'un atome cible, de numéro atomique Z_2 . Cette force n'est pas purement coulombienne parce que les électrons qui entourent les deux noyaux vont diminuer partiellement la charge nucléaire des deux partenaires. Pour tenir compte de cet effet, le potentiel coulombien est multiplié par une fonction d'écran $\chi\left(\frac{r}{a}\right)$:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \chi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (1.12)$$

e est la charge élémentaire et a est le rayon d'écran.

Les potentiels les plus utilisés dans le domaine de l'interaction d'ions de faible énergie avec des solides sont les potentiels de Thomas-Fermi TF [TOR72], de Lenz-Jensen (LJ) [LEN32-a, LEN32-b], de Thomas-Fermi-Molière (TFM) [MOL47] et celui de Ziegler, Biersack et Littmark (ZBL) [ZIE85].

Pour les potentiels LJ, TFM et ZBL, la fonction d'écran s'écrit sous la forme:

$$\chi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \exp\left(-\beta_i \frac{r}{a}\right) \quad (1.13)$$

n , α_i et β_i sont des constantes d'ajustement. Ces constantes sont données dans le tableau 1.1.

	n	α_1	α_2	α_3	α_4	β_1	β_2	β_3	β_4
LJ	3	0.7466	0.2433	0.01018	0	1.038	0.3876	0.206	0
TFM	3	0.35	0.55	0.1	0	0.3	1.2	6	0
ZBL	4	0.18175	0.50986	0.28022	0.028171	3.1998	0.94229	0.4029	0.2016

Tableau 1.1. Valeurs des constantes d'ajustement α_i et β_i pour les trois potentiels LJ, TFM et ZBL.

Le rayon d'écran pour les potentiels TF, TFM et LJ s'écrit:

$$a = \frac{0.8853 a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (1.14)$$

Pour le potentiel ZBL, nous avons:

$$a = \frac{0.8853 a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \quad (1.15)$$

a_0 est le rayon de Bohr ($a_0 = 0.529 \text{ \AA}$).

La variation de la fonction d'écran en fonction du paramètre $x=r/a$ est représentée dans la figure 1.3 pour les trois potentiels ZBL, TFM et LJ.

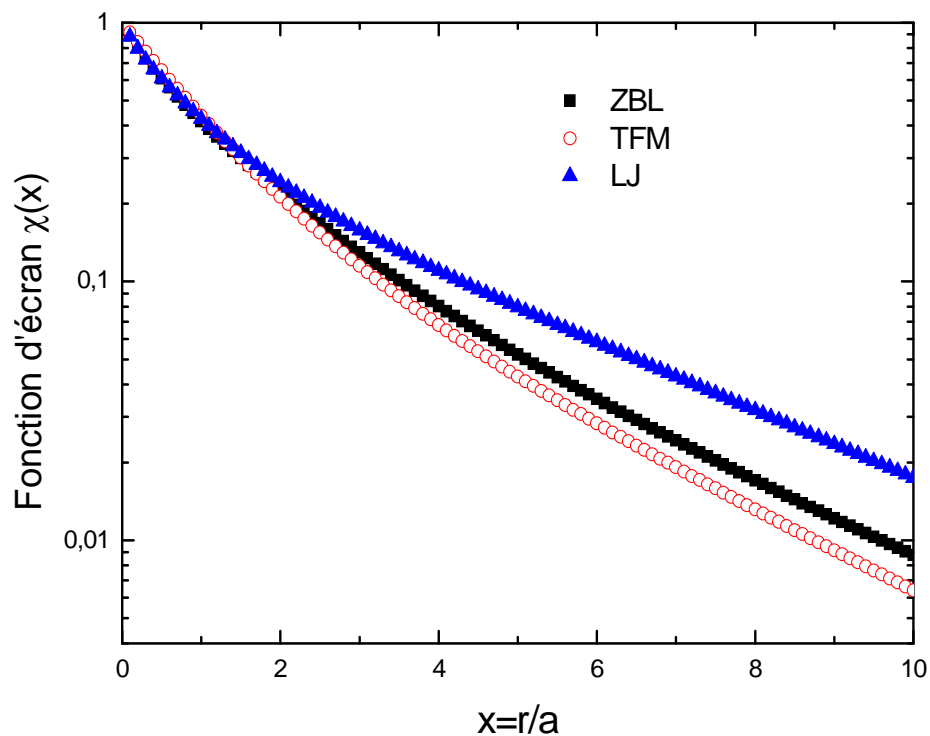


Figure 1.3. Variation de la fonction d'écran en fonction de $x=r/a$ pour les trois potentiels ZBL, TFM et LJ.

Il est souvent commode d'écrire le potentiel d'interaction sous la forme : $V(r) \sim r^{-1/m}$ (qu'on appellera potentiel en puissance). La fonction d'écran dans ce cas s'écrit [BOH48]:

$$\chi\left(\frac{r}{a}\right) = m k_m \left(\frac{r}{a}\right)^{1-1/m} \quad (1.16)$$

Où k_m est une constante qui dépend de m .

En effet, le calcul de l'intégrale de diffusion devient plus simple dans ce cas. Les potentiels écrantés sont parfois remplacés par des potentiels en puissance [NAS96]. Les paramètres m et k_m sont ajustés suivant le domaine des valeurs de r/a considérées.

Un exemple est présenté dans la figure 1.4 dans lequel la fonction d'écran de LJ est approximée par des fonctions en puissance de m .

La valeur $m=1$ correspond à un potentiel purement coulombien.

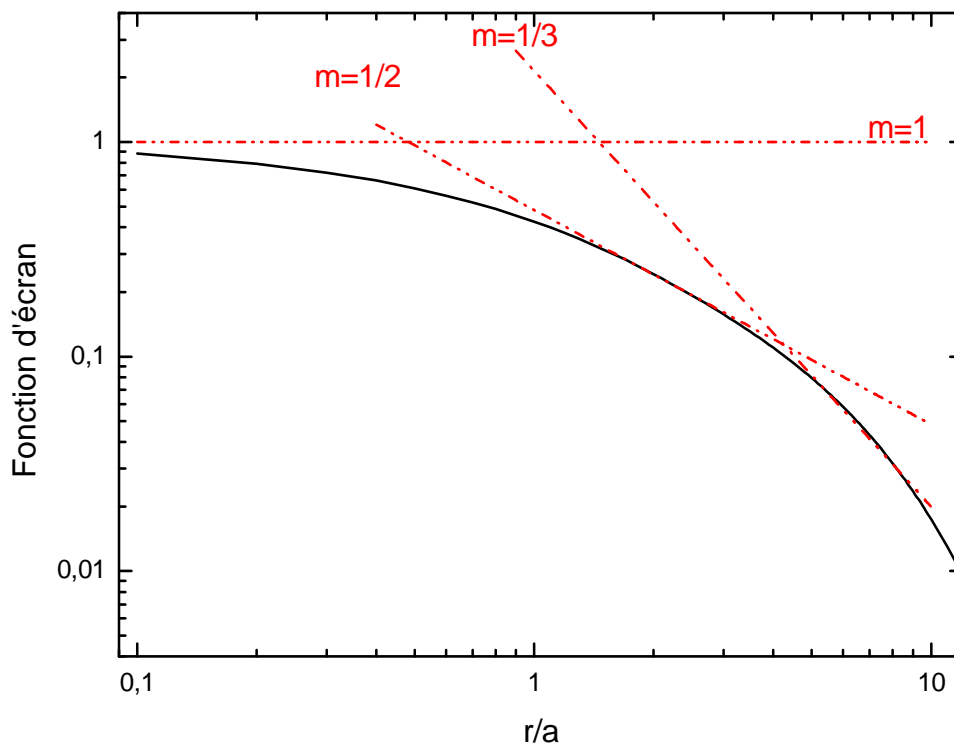


Figure 1.4. Approximation de la fonction d'écran du potentiel LJ par des fonctions d'écran en puissance.

Le choix de la meilleure fonction d'écran a été discuté dans plusieurs références [LAN60, TOR72, ROB74, MAS80, O'CO86, PAR87, ECK95]. Les comparaisons des résultats

expérimentaux avec les prévisions théoriques ont abouti à la conclusion que le potentiel ZBL donne souvent les meilleurs résultats [CRU82, PAR87].

De plus et comme les potentiels interatomiques cités précédemment ne donnent pas toujours des résultats satisfaisants avec l'expérience, un ajustement du potentiel d'interaction est souvent utilisé. Ainsi et pour reproduire les résultats expérimentaux, le rayon d'écran est multiplié par un facteur C. Cette méthode a été utilisée dans plusieurs études [HEI76, O'CO77, O'CO86, TAS01, DRA06] comme un outil simple et efficace pour modifier le potentiel d'interaction.

Selon O'Connor [O'CO86], ce facteur dépend des numéros atomiques de l'ion et de l'atome cible comme suit :

$$C = 0,54 + 0,0054 \left(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2} \right) \quad (1.17)$$

1.4. Section efficace de diffusion:

La section efficace différentielle de diffusion est une grandeur importante dans la description de l'interaction ion-atome solide. Elle donne la valeur de la probabilité d'un transfert d'énergie dans un intervalle entre T et T+dT à un atome cible, ou la probabilité de diffusion du projectile dans un angle compris entre θ et $\theta+d\theta$.

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

$$d\sigma = 2\pi p dp \quad (1.18)$$

On peut l'exprimer en fonction de l'angle de diffusion par la relation :

$$d\sigma = 2\pi p \left| \frac{dp}{d\theta} \right| d\theta \quad (1.19)$$

Pour un potentiel coulombien écranté, la section efficace différentielle est obtenue à partir de la dérivée de l'angle de diffusion dans le centre de masse (équation 1.9) par rapport au paramètre d'impact p, selon la relation suivante [MAS52]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = -\frac{p}{\sin\theta} \left(1 / \frac{d\theta}{dp} \right) \quad (1.20)$$

Si le potentiel d'interaction est purement coulombien, la section efficace (appelée section efficace de Rutherford) devient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{16} \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_{\text{cdm}}} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (1.21)$$

La figure 1.5 représente la variation de la section efficace différentielle en fonction de l'angle de diffusion dans le cdm [ECK91]. Ces calculs ont été effectués dans le cas du potentiel TFM et pour plusieurs valeurs de l'énergie réduite ε . L'énergie réduite ε est définie par :

$$\varepsilon = \frac{M_2 E}{M_1 + M_2} / \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a} \right) \quad (1.22)$$

Lindhard, Nielsen, et Scharff [LIN63] ont montré que l'expression de $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ qui dépend des deux variables θ et ε peut être réduite, avec une assez bonne approximation, à une fonction d'une seule variable $t^{1/2}$. Ils ont obtenu une expression universelle de la section efficace valable avec une précision raisonnable:

$$d\sigma(t^{1/2}) = \pi a^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \quad (1.23)$$

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

$$t^{1/2} = \varepsilon \sin \frac{1}{2} \theta \quad (1.24)$$

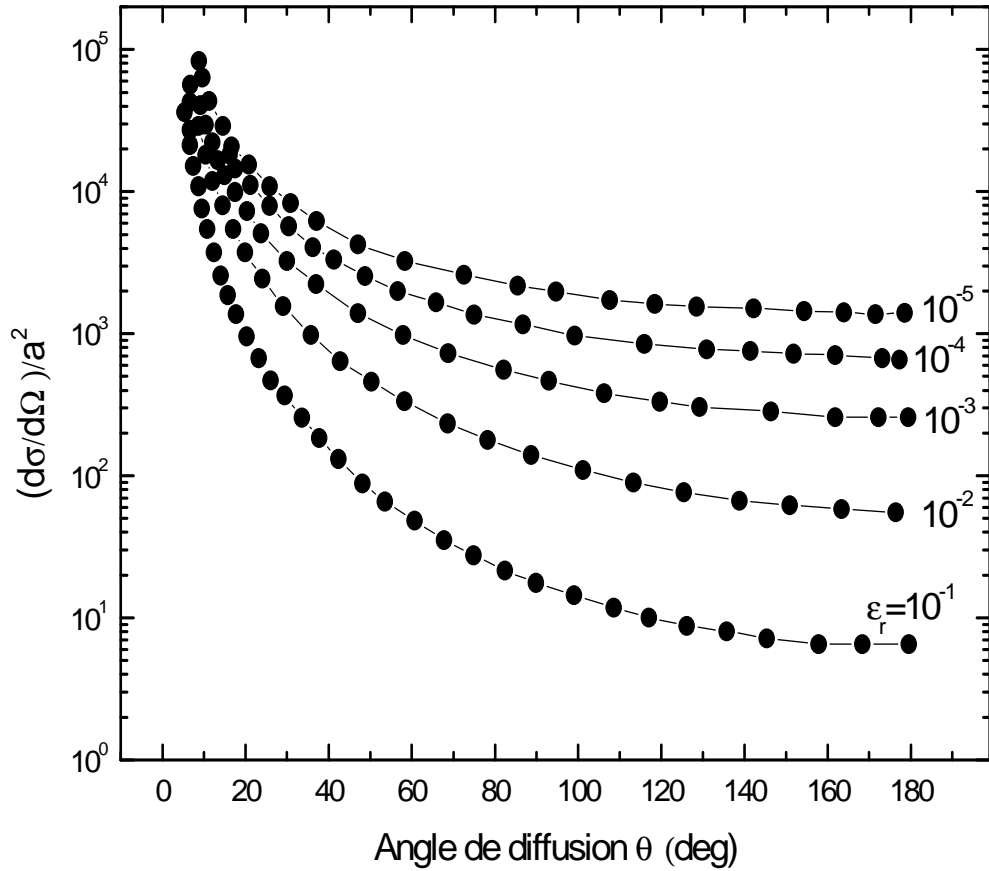


Figure 1.5. Variation de la section efficace différentielle par unité de a^2 (a est le rayon d'écran) en fonction de l'angle de diffusion dans le cdm, calculée dans le cas du potentiel TFM et ce pour différentes valeurs de l'énergie réduite ε [ESK91].

Winterbon, Sigmund et Sanders [WIN70] ont donné une expression approximative de la fonction $f(t^{1/2})$:

$$f(t^{1/2}) = \lambda t^{1/2-m} \left[1 + (2\lambda t^{1-m})^q \right]^{-1/q} \quad (1.25)$$

Les valeurs des constantes λ , m et q sont données dans le tableau 1.2 pour les potentiels TFM, LJ et TF (Thomas-Fermi).

Potentiel	λ	m	q
TFM	1.309	0.333	0.667
LJ	2.92	0.191	0.512
TF	1.7	0.311	0.588

Tableau 1.2. Valeurs des constantes λ , m et q pour les potentiels TFM, LJ et TF.

La figure 1.6 représente la variation de la fonction $f(t^{1/2})$ pour les trois potentiels ZBL, TFM et LJ.

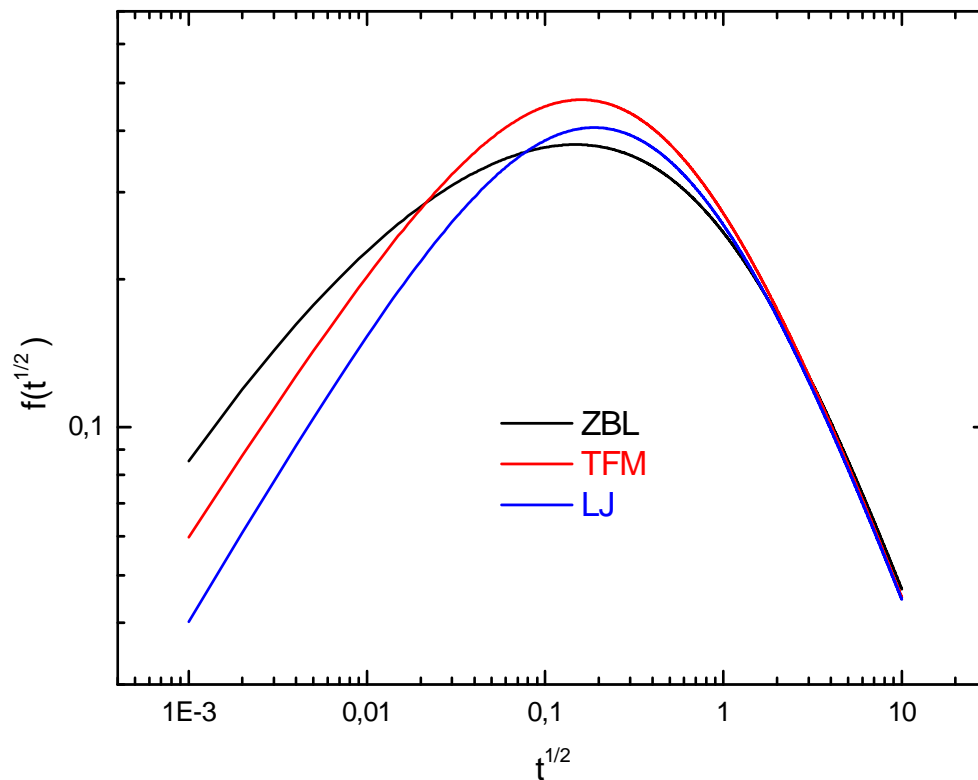


Figure 1. 6. Variation de la fonction $f(t^{1/2})$ pour les trois potentiels ZBL, TFM et LJ.

Dans le cas d'un potentiel en puissance ($V(r) \sim r^{-1/m}$), la fonction $f(t^{1/2})$ est donnée par l'expression [LIN68] :

$$f(t^{1/2}) = \lambda_m t^{1/2-m} \quad (1.26)$$

Où λ_m est une constante dépendante de m.

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

Lorsqu'un ion pénètre dans la matière, il subit de nombreuses interactions avec les atomes de la cible et perd ainsi graduellement son énergie. Pour définir la perte d'énergie moyenne au cours de ces différentes collisions, on est amené à considérer deux types de perte d'énergie:

1.5.1. Perte d'énergie inélastique :

La perte d'énergie inélastique (ou électronique) résulte des collisions inélastiques entre la particule incidente et les électrons du matériau cible. Le transfert d'énergie de la particule incidente aux électrons de l'atome cible est dû aux processus fondamentaux intervenant lors de la collision inélastique. Les processus essentiels sont : l'excitation ou l'ionisation électronique de l'atome cible et la capture électronique par l'ion projectile. La contribution de chaque mécanisme dépend de la nature du projectile et de sa vitesse ainsi que de la nature de la cible. La capture est prédominante à basse énergie et à haute énergie l'excitation et l'ionisation sont les phénomènes dominants. Quand aux énergies intermédiaires, les trois processus sont en compétition. Les trois processus sont quasi équiprobables lorsque la vitesse du projectile v est proche de la vitesse de Bohr $v_0 = \frac{e^2}{\hbar}$.

Dans le régime des hautes vitesses, l'ion incident est totalement épluché de ses électrons. Sa charge peut alors être considérée comme ponctuelle. La modélisation du pouvoir d'arrêt est donnée par la formule de Bethe [BET53] :

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right)_e = 4\pi e^4 N \frac{Z_1^2 Z_2}{m_e v^2} \ln \frac{2m_e v^2}{I} \quad (1.27)$$

m_e est la masse de l'électron, N est nombre d'atomes cibles par unité de volume et I est le potentiel d'excitation et d'ionisation moyen de l'atome qui dépend des propriétés quantiques de celui-ci. Pour les cible de $Z_2 \geq 10$, une formule approximative a été proposée par Block [BLO33] en utilisant le modèle de l'atome de Thomas-Fermi : $I (Z_2) \approx 10 \cdot Z_2 \text{ eV}$.

Pour des vitesses du projectile inférieures à la vitesse de Bohr ($v \leq v_0$), le pouvoir d'arrêt électronique peut être calculé dans le cadre de la théorie de Lindhard, Scharff et Schiøtt (théorie LSS) [LIN63, LIN68] :

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = 8\pi\xi e^2 a_0 \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \frac{v}{v_0} \quad (1.28)$$

ξ varie entre 1 et 2 et il est approximé par $\xi = Z_1^{1/6}$.

Pour des vitesses intermédiaires, des phénomènes de capture d'électrons entre l'ion incident et les atomes interviennent. Le dépôt d'énergie devient maximum et dans cette région on trouve le 'pic de Bragg'.

1.5.2. Perte 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 :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = -N \int_{\sigma(T=T_{\min})}^{\sigma(T=T_{\max})} T d\sigma(E) \quad (1.29)$$

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

$$T_{\max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (1.30)$$

E : énergie de l'ion incident.

$d\sigma$: section efficace de diffusion élastique.

Lindhard et al [LIN64, LIN68] ont introduit les variables réduites, ϵ et ρ respectivement proportionnelles à l'énergie E et au parcours R de l'ion:

$$\epsilon = \frac{M_2 E}{M_1 + M_2} \left/ \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a} \right) \right. \quad \text{et} \quad \rho = 4\pi N a^2 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} R \quad (1.31)$$

En utilisant ce formalisme, le pouvoir d'arrêt réduit $S_n(\epsilon)$ est relié au pouvoir d'arrêt réel par:

$$S_n(\epsilon) \equiv \left(\frac{d\epsilon}{d\rho} \right)_n = \frac{\epsilon}{\pi a^2 \gamma E} \left(\frac{dE}{dx} \right)_n \quad (1.32)$$

$$\text{avec : } \gamma = \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (1.33)$$

En fait, la théorie LSS donne une expression plus commode de $S_n(\epsilon)$ en utilisant la fonction universelle de diffusion $f(t^{1/2})$:

$$S_n(\epsilon) = \int_0^\epsilon \frac{1}{t^{3/2}} f(t^{1/2}) \frac{dt}{\epsilon} \quad (1.34)$$

D'après Ziegler et al [ZIE85], le fit des valeurs numériques de la perte d'énergie élastique permet d'écrire $S_n(\epsilon)$ pour le potentiel ZBL sous la forme:

$$S_n(\epsilon) = \frac{0.5 \ln(1 + 1.1383\epsilon)}{\epsilon + 0.01321\epsilon^{0.21226} + 0.19593\epsilon^{0.5}} \quad \text{pour } \epsilon \leq 30 \quad (1.35)$$

$$S_n(\epsilon) = \frac{\ln \epsilon}{2\epsilon} \quad \text{pour } \epsilon > 30 \quad (1.36)$$

Le pouvoir d'arrêt nucléaire est utilisé parfois pour déterminer la fonction d'écran à partir de l'expression inverse de l'équation (1,34) [NAS96] :

$$f(x) = \frac{d}{dx} [x S_n(x)] \quad \text{avec : } x = t^{1/2} \quad (1.37)$$

En injectant l'expression de S_n donnée par les équations (1.35) et (1.36) dans l'équation (1.37), nous pouvons déduire une expression analytique approchée de la fonction $f(x)$ pour le potentiel ZBL :

$$f(x) = 0.5 \eta_1^{-2} \left[\frac{1.1383 \eta_1}{\eta_0} - \ln \eta_0 \cdot \frac{d\eta_1}{dx} \right] \quad (1.38)$$

$$\text{Avec : } \eta_0 = 1 + 1.1383 x \quad \text{et} \quad \eta_1 = 1 + 0.01321 x^{-0.78774} + 0.19593 x^{-0.5} \quad (1.39)$$

C'est la fonction universelle de diffusion utilisée au cours de cette étude.

1.5.3. Perte d'énergie totale:

L'énergie moyenne de la particule incidente à une profondeur x donnée dans le matériau cible est telle que:

$$E(x) = E - \Delta E \quad (1.40)$$

Où ΔE représente la perte d'énergie totale (électronique et nucléaire). Elle s'exprime en fonction du pouvoir d'arrêt total $\left(\frac{dE}{dx} \right)$ selon l'expression :

$$\Delta E = \int_0^x \left(\frac{dE}{dx} \right) dx \quad (1.41)$$

Le pouvoir d'arrêt total subi par la particule incidente est obtenu en sommant les pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire :

$$\left(\frac{dE}{dx} \right) = \left(\frac{dE}{dx} \right)_e + \left(\frac{dE}{dx} \right)_n \quad (1.42)$$

Les valeurs du pouvoir d'arrêt des ions dans la matière sont tabulées [NOR70, HUB90, BER05, PAU]. Le programme SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter [SRI08]) permet aussi d'obtenir le pouvoir d'arrêt à partir des différents modèles théoriques et des données expérimentales.

La figure 1.7 donne à titre d'exemple, la variation du pouvoir d'arrêt obtenue par SRIM2008 [SRI08] pour des ions He^+ dans une cible d'aluminium en fonction de l'énergie incidente. On peut constater dans ce cas, la faible contribution du pouvoir d'arrêt nucléaire au pouvoir d'arrêt total.

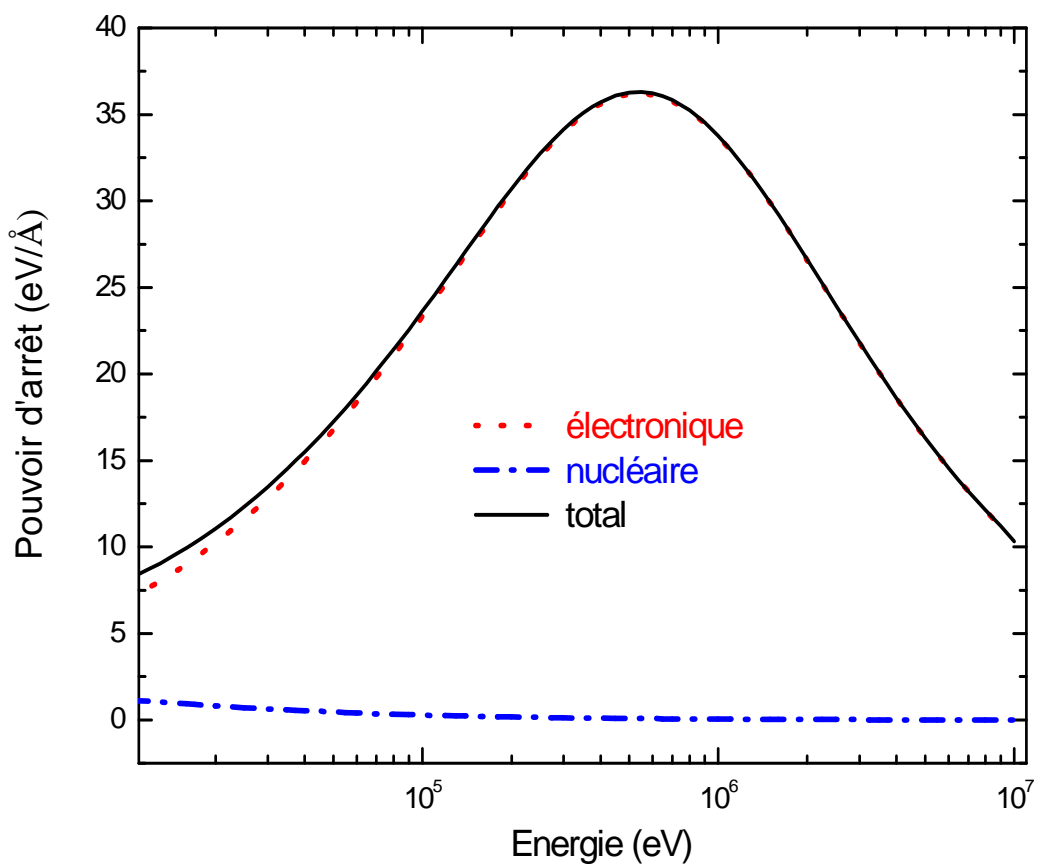


Figure 1.7. Variation des pouvoirs d'arrêt électronique, nucléaire et total en fonction de l'énergie des ions He^+ dans une cible d'aluminium, obtenus à partir du code SRIM [SRI08].

1.6. Diffusions multiples:

Lorsqu'un ion traverse une cible solide, il subit plusieurs collisions successives appelées diffusions multiples. Si l'on considère la transmission des ions à travers une cible

solide très mince, la majorité des ions quittent la cible sans interaction significative ($\theta \approx 0$). La section efficace de diffusion diminue quand l'angle de diffusion augmente. De ce fait, la majorité des ions font des collisions avec de faibles angles de diffusion. Si la cible contient plusieurs centres diffuseurs, les ions vont subir de nombreuses collisions successives jusqu'à la sortie du solide. Chaque collision est caractérisée par un angle de déviation donné sachant qu'on a une forte probabilité pour que cet angle soit faible. Ceci nous permet d'avoir à la sortie de la cible une distribution angulaire d'ions qui se ressemble à une distribution gaussienne autour de $\theta=0$ (Voir figure 1.8).

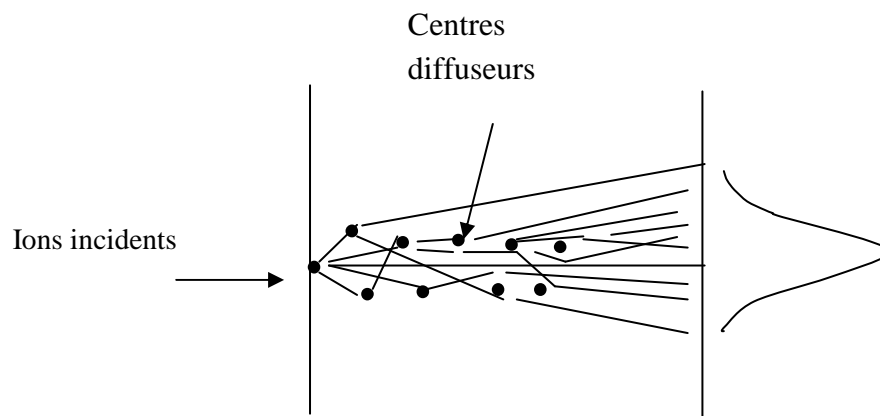


Figure 1.8. Schéma représentant le processus des diffusions multiples.

La diffusion multiple d'ions joue un rôle important dans plusieurs domaines de la physique, comme dans l'analyse par faisceau d'ions IBA (Ion Beam Analysis), l'implantation ionique, la lithographie par faisceaux d'ions, la détection des particules, le transport d'ions dans les accélérateurs, la fusion thermonucléaire et la thérapie par faisceaux d'ions [AMS03].

L'étude expérimentale de la diffusion multiple d'ions dans un solide est basée sur la détermination de leur distribution angulaire et latérale comme c'est illustré sur la figure 1.9.

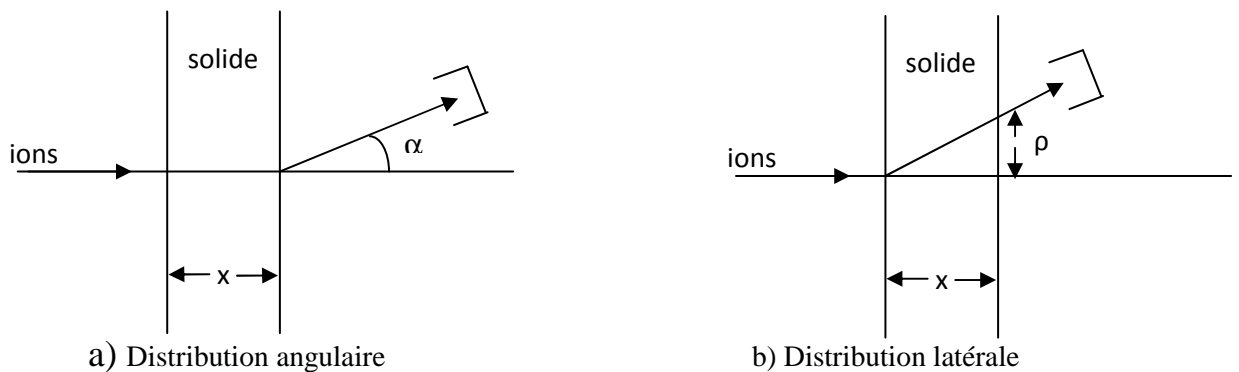


Figure 1.9. Schéma représentant les deux principales géométries pour l'étude de la diffusion multiple. α et ρ sont l'angle de déviation et le déplacement latéral d'ions respectivement.

1.6.1. Distributions angulaires d'ions transmis à travers une cible solide :

Le calcul des distributions angulaires des particules chargées transmises à travers un milieu contenant plusieurs centres diffuseurs a été l'objet de plusieurs traitements théoriques [WIL39, GOU40, ROS41, LEW50, MOL47, BET53, SNY49, SCO52]. Les diverses théories diffèrent principalement dans le traitement de la diffusion simple d'une part et du choix du potentiel d'interaction d'autre part. Un aperçu général de ce sujet est donné dans les références [SCO63-a, AMS03].

Le modèle de Molière [MOL47, MOL48] qui est basé sur la méthode de sommation des collisions simples, utilise la section efficace de Rutherford pour décrire l'interaction ion-atome cible. L'effet d'écran dans ce modèle est considéré en utilisant un paramètre nommé 'le paramètre angulaire d'écran χ_a '.

En se basant sur le modèle de Molière, Meyer [MEY71] a déterminé la distribution angulaire de la diffusion multiple. Ses résultats, pour une large gamme d'énergie, montrent que l'angle à mi-hauteur de la distribution est inversement proportionnel à l'énergie initiale des ions.

En utilisant l'expression de la section efficace introduite par Lindhard [LIN63], la théorie de la diffusion multiple a été réévaluée plus tard par Sigmund et Winterbon [SIG74] pour donner une estimation numérique de la distribution angulaire d'ions transmis. Les potentiels de TF et LJ ont été utilisés pour décrire l'interaction ion-atome cible..

Un bon accord entre ces modèles avec les résultats expérimentaux a été reporté par plusieurs auteurs [AND74, EFK75, HOO75, KNU77].

1.6.2. Dispersion latérale:

En plus du changement de leur direction, les ions transmis subissent également un déplacement latéral. La dispersion latérale qui décrit le profil du faisceau dans la matière a été étudiée par Marwick et al [MAR75]. Ces derniers ont montré que les distributions angulaire et latérale sont liées. La distribution angulaire-latérale (combined angular-lateral spread) qui a été décrite initialement par Fermi [SCO49] a été calculée par la suite par Sigmund et ses collaborateurs [SIG78]. En fait, la corrélation qui existe entre les deux distributions a été utilisée pour réduire leur combinaison à une seule expression qui contient uniquement la distribution angulaire.

Récemment, il a été montré que la dispersion latérale des ions gouverne la résolution de l'image dans la microscopie ionique [WHI09]. Elle gouverne aussi la verticalité des parois dans la lithographie ionique et la résolution en profondeur lors de l'analyse par faisceaux d'ions [WHI13].

1.7. Effet de l'échange de charge sur les distributions angulaires:

Un échange de charge peut se produire lors de la collision d'un projectile avec un atome dans le solide, menant la neutralisation ou la ré-ionisation du projectile [SOU86]. Au cours de cette collision et à des distances interatomiques petites ($<1\text{\AA}$), les orbitales atomiques se croisent, 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 par excitation peut induire la neutralisation ou la ré-ionisation du projectile [BAR72].

Cet échange de charge peut avoir un effet sur les distributions angulaires des ions transmis. En effet, le changement de la charge de l'ion est accompagné d'un changement de son impulsion. De plus, la section efficace de la diffusion élastique est gouvernée par le potentiel interatomique qui dépend de la charge du projectile.

La figure 1.10 représente les distributions angulaires expérimentales des ions N^+ de 3,7 MeV transmis à travers une cible de carbone [KAN83]. Chaque distribution correspond à un état de charge q du projectile à la sortie de la cible : $q=0,1,2,\dots,7$. Ces distributions sont quasi-identiques pour q variant entre 1 et 5. Elles deviennent significativement différentes pour les valeurs $q=6$ et $q=7$.

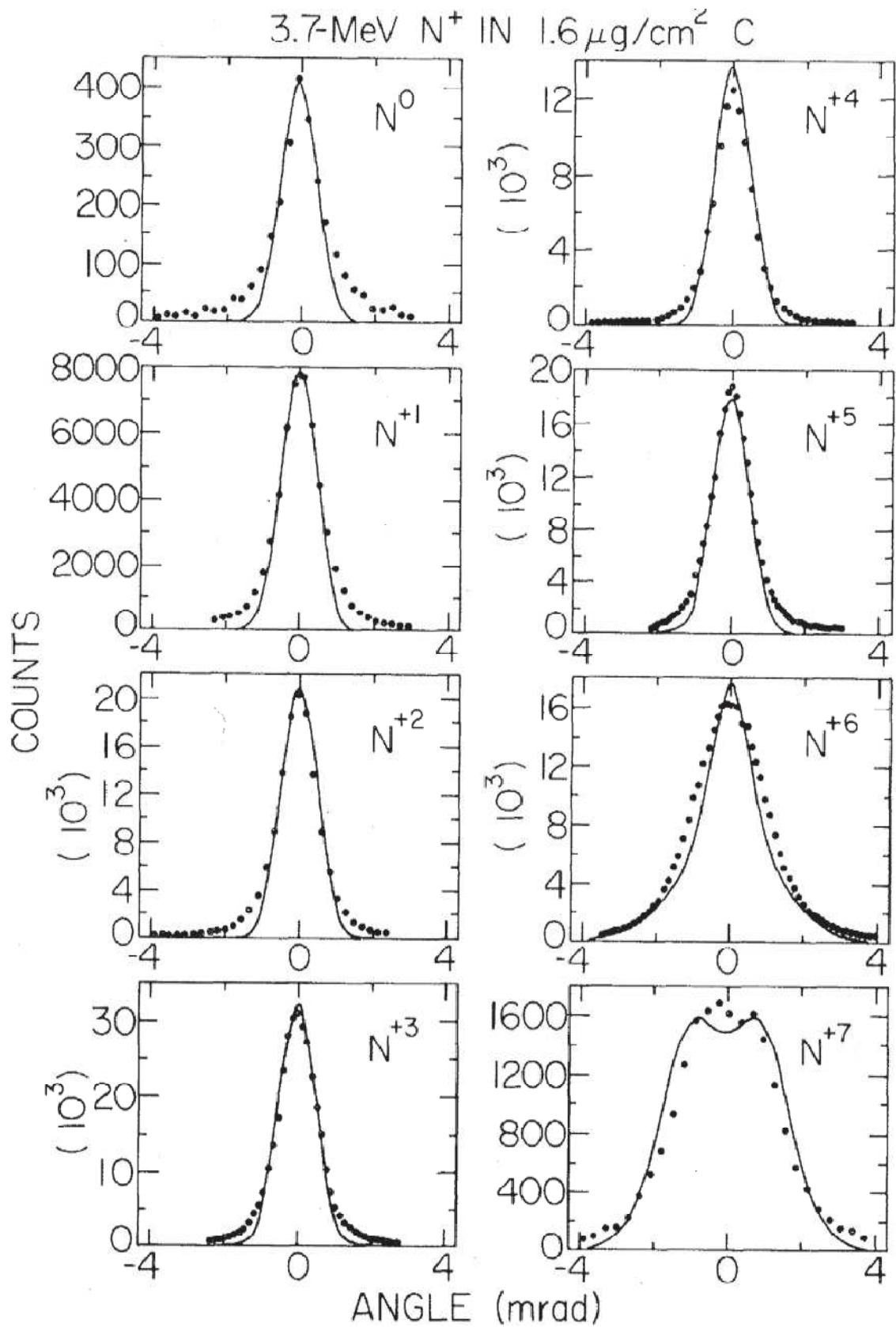


Figure 1.10. Distributions angulaires des ions N^+ de 3,7 MeV transmis à travers une cible de carbone d'épaisseur $1.6 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ et pour différents états de charge des ions à la sortie $q=1-7$ [KAN83].

1.8. Simulation numérique:

Il existe plusieurs approches pour modéliser les diffusions multiples des ions à l'intérieur d'une cible solide.

1.8.1. Théorie de transport:

La théorie de transport a été initialement établie pour décrire le comportement de gaz dilués. Cependant, il a été montré qu'elle peut être appliquée à un grand nombre de types de particules (électrons, ions, phonons...) qui sont en interaction et qui suivent une certaine distribution statistique.

Pour des échelles de grandeur de l'ordre ou supérieures à la longueur d'onde associée à des ions, les effets quantiques peuvent être négligés et la modélisation du transport des ions à l'intérieur d'un solide peut être faite grâce à l'équation de transport de Boltzmann.

Cette équation décrit l'évolution temporelle de la fonction de distribution $F(\vec{r}, \vec{v}, t)$ d'ions, dont la position est \vec{r} et la vitesse est \vec{v} à l'instant t .

La forme générale de l'équation intégral-différentielle de transport est la suivante :

$$\frac{\partial F(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} F(\vec{r}, \vec{v}, t) = \left. \frac{\partial F(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} \right|_{\text{collisions}} \quad (1.43)$$

Le membre de droite de l'équation 1.41 est un terme de collision qui représente tous les processus susceptibles d'affecter et faire varier la fonction de distribution. Ces collisions sont dans notre cas les interactions ion-atome cible.

Pour modéliser la transmission d'ions dans le solide par la théorie du transport, la difficulté majeure dans la résolution de l'équation de Boltzmann se situe dans l'expression du terme de collision, qui dépend de la section efficace de diffusion ou plus précisément du potentiel d'interaction. Dans l'approximation des faibles angles de diffusion et lorsque la perte d'énergie est négligée, cette équation possède des solutions analytiques uniquement pour un potentiel exprimé en puissance. Pour un potentiel écranté, des solutions numériques sont utilisées.

1.8.2. Simulation Monte Carlo :

Cette méthode est basée sur l'approximation des collisions binaires ou BCA (Binary Collision Approximation). Son principe consiste à suivre en détail, la trajectoire et l'énergie d'un très grand nombre d'ions transmis à travers le solide. La direction de l'ion après chaque diffusion et son parcours entre deux collisions successives sont choisis en utilisant les nombres aléatoires.

Cette simulation donne des résultats très satisfaisants et permet un grand gain de temps de calcul. Ainsi l'histoire de chaque ion peut être suivie jusqu'à son arrêt ou sa sortie de la cible.

1.8.3. Dynamique moléculaire:

La dynamique moléculaire simule l'interaction des ions avec les atomes cibles à travers une force déterminée à partir du potentiel interatomique. Les positions et les quantités de mouvement des particules dans la cible sont déterminées par l'intégration sur le temps des équations classiques du mouvement de Newton [ECK91]. Le déplacement des particules est suivi en temps réel, c'est à dire que l'on peut considérer par exemple, des interactions simultanées d'un ion avec plusieurs atomes. De plus, deux atomes mobiles peuvent interagir l'un avec l'autre. Ces simulations reproduisent donc une cascade fidèle à la réalité. Ces calculs sont extrêmement gourmands en temps de calcul.

CHAPITRE 2

Etude de la transmission d'ions à travers une cible solide

2.1. Introduction :

La théorie des diffusions multiples a fait l'objet de plusieurs études. Initialement développée par Bothe [BOT21], cette théorie a été ré-annoncée, dans la limite des faibles angles de diffusion, par plusieurs auteurs [MOL48, SCO63, MEY71, SIG74] dans le but principal de calculer les distributions angulaires d'ions transmis à travers une cible solide. D'autre part, l'étude théorique des diffusions multiples est d'une grande importance pour l'interprétation de certains résultats expérimentaux [JAR89].

Le modèle de Sigmund (SW) [SIG74] est basé sur la résolution de l'équation de transport et repose sur plusieurs approximations. A titre d'exemple, la perte d'énergie totale de l'ion incident dans la cible est négligée. Cependant, dans le cas des cibles épaisses, un désaccord a été observé entre les résultats expérimentaux et les calculs théoriques [AND71, HOO75]. Ce désaccord peut être lié essentiellement à la perte d'énergie des ions dans le solide qui n'a pas été prise en compte dans les calculs.

Dans le présent chapitre, nous présentons les modèles théoriques de la diffusion multiple. Nous introduisons le modèle SW et les approximations utilisées. Nous présentons aussi les améliorations que nous avons apportées à ce modèle pour tenir compte de la perte d'énergie totale (électronique et nucléaire) des ions dans le solide dans le calcul des distributions angulaires des particules transmises à travers une cible solide. Nous présentons également le modèle de Marwick et Sigmund pour le calcul des distributions latérales d'ions.

2.2. Modèle de Sigmund et Winterbon (SW):

Pour un faisceau d'ions monoénergétiques initialement collimaté, provenant d'une source ponctuelle à l'origine, et qui traverse le long de l'axe des x un milieu homogène d'épaisseur x avec N centres diffuseurs par unité de volume (figure 2.1), l'équation de Boltzmann s'écrit:

$$-\frac{\partial F(\vec{r}, \vec{v}, x)}{\partial t} - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} F(\vec{r}, \vec{v}, x) = -N \int d^3 v' \left[v F(\vec{r}, \vec{v}, x) K(\vec{v}, \vec{v}') - v' F(\vec{r}, \vec{v}', x) K(\vec{v}', \vec{v}) \right] \quad (2.1)$$

Où F est la fonction de distribution des ions. $d\sigma = K(\vec{v}, \vec{v}')d^3v'$ représente la section efficace de diffusion d'une particule qui a initialement une vitesse \vec{v} et qui va être diffusée vers un intervalle de vitesse (\vec{v}', d^3v') .

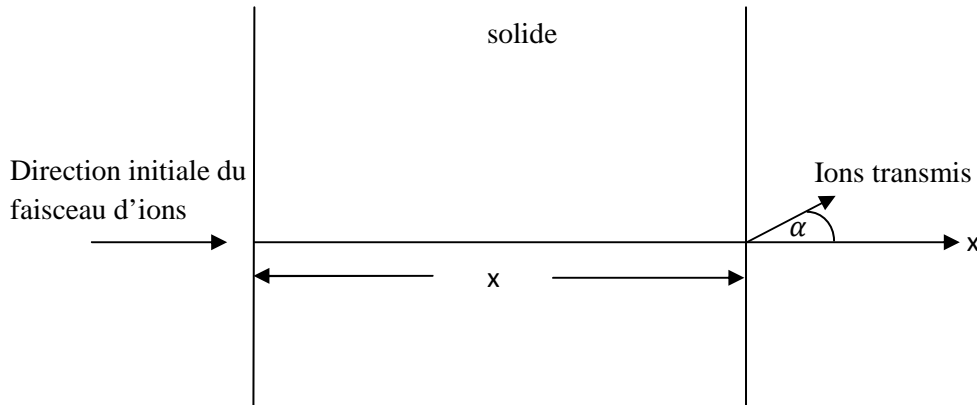


Figure 2.1. Schéma représentant la géométrie utilisée dans le calcul des distributions angulaires des particules transmises.

Le traitement utilisé ici pour le calcul des distributions angulaires d'ions transmis à travers une cible solide est basé sur les approximations suivantes :

- Distribution aléatoire et homogène des atomes cibles.
- Les collisions sont binaires avec une symétrie azimutale de diffusion.
- La perte d'énergie totale est négligée (électronique et nucléaire).
- Les angles de diffusion sont faibles.

La première hypothèse spécifie le cas de la diffusion multiple incohérente qui exclut la diffusion dans les conditions de canalisation ou de diffraction. Cette hypothèse signifie que le fait de négliger les corrélations entre les centres diffuseurs, revient à remplacer le milieu diffuseur par un ensemble 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 sont négligées dans notre gamme d'énergie. La troisième hypothèse, qui implique des simplifications dans la résolution de l'équation du transport, est justifiée dans la limite des faibles angles de diffusion et des faibles épaisseurs traversées. La quatrième hypothèse est essentielle pour la validité de la résolution de l'équation de Boltzmann. Molière [MOL48] a

précisé que le terme ‘faibles angles’ signifie que les angles de diffusion dans le système de laboratoire sont inférieurs à 20°.

La résolution de l'équation 2.1 donne [BOT21] :

$$F(x, \alpha)d\Omega = \frac{d\Omega}{2\pi_0} \int_0^\infty k dk J_0(k\alpha) \exp[-N x \sigma_0(k)] \quad (2.2)$$

Où:

α : angle total de diffusion.

$d\Omega$: angle solide de diffusion.

J_0 : fonction de Bessel d'ordre zéro et de premier type.

$$\sigma_0(k) = \int_0^\infty d\sigma(\phi)[1 - J_0(k\phi)] \quad (2.3)$$

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

Nous avons vu (chapitre 1) que dans le cas d'un potentiel écranté, la section efficace différentielle peut s'écrire sous la forme:

$$d\sigma = \pi a^2 \frac{dt^{1/2}}{t} f(t^{1/2}) \quad (2.4)$$

Dans la limite des faibles angles de diffusion, nous avons:

$$t^{1/2} = \tilde{\phi} = \frac{E a}{2Z_1 Z_2 e^2} \phi \quad (2.5)$$

Tel que :

Z_1 : numéro atomique de l'ion incident.

Z_2 : numéro atomique de la cible

E : énergie initiale de l'ion incident.

a : rayon d'écran

En injectant l'expression de $d\sigma$ dans l'équation 2.3, l'équation 2.2 devient [SIG74]:

$$F(x, \alpha)d\Omega = \tilde{\alpha} d\tilde{\alpha} \int_0^\infty z dz J_0(z\tilde{\alpha}) \exp(-\tau\Delta(z)) \quad (2.6)$$

L'épaisseur réduite τ et l'angle réduit $\tilde{\alpha}$ sont définis respectivement par :

$$\tau = \pi a^2 N x \quad (2.7)$$

$$\tilde{\alpha} = \frac{E a}{2Z_1 Z_2 e^2} \alpha \quad (2.8)$$

La fonction de diffusion $\Delta(z)$ de l'équation 2.6 est donnée par l'expression suivante :

$$\Delta(z) = \int_0^{\infty} \frac{d\tilde{\phi}}{\tilde{\phi}^2} f(\tilde{\phi}) [1 - J_0(z\tilde{\phi})] \quad (2.9)$$

Avec :

$$z = \frac{2Z_1 Z_2}{E_0 a} k \quad (2.10)$$

La figure 2.2 représente la variation de la fonction $\Delta(z)$ pour les potentiels ZBL, TFM et LJ. Pour les petites valeurs de z , les valeurs de $\Delta(z)$ des potentiels ZBL et LJ sont très proches. Pour les grandes valeurs de z , les valeurs de $\Delta(z)$ calculées pour le potentiel ZBL s'approchent de celles calculées pour le potentiel TFM.

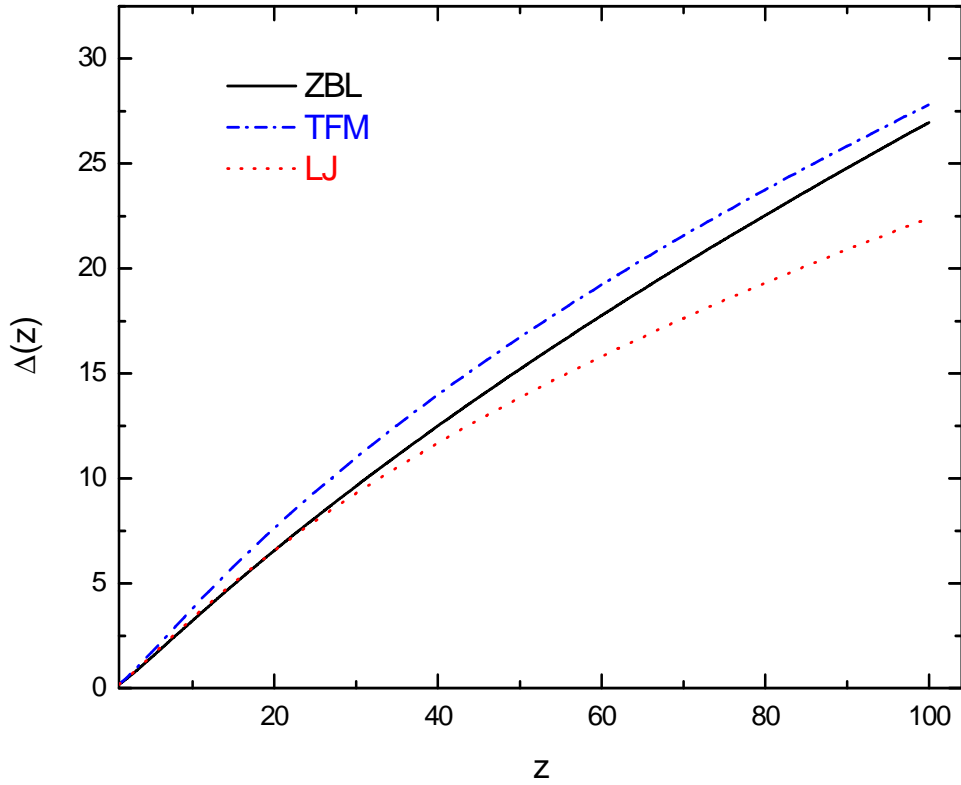


Figure 2.2. Variation de la fonction $\Delta(z)$ (équation 2.9) pour les potentiels de ZBL, TFM et LJ.

En introduisant la fonction $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ (appelée fonction de diffusion multiple) [SIG74], l'équation (2.6) s'écrit:

$$F(x, \alpha) d\Omega = \tilde{\alpha} d\tilde{\alpha} f_1(\tau, \tilde{\alpha}) \quad (2.11)$$

$$\text{Où : } f_1(\tau, \tilde{\alpha}) = \int_0^{\infty} z dz J_0(z\tilde{\alpha}) \exp(-\tau\Delta(z)) \quad (2.12)$$

Pour des cibles très minces ($x \rightarrow 0$) :

$$\lim_{x \rightarrow 0} F(x, \alpha) = N x d\sigma(\alpha) \quad (2.13)$$

On définit la fonction $f(\tau, \tilde{\alpha})$ par :

$$f(\tau, \tilde{\alpha}) = \frac{\hat{\alpha}^3}{\tau} f_1(\tau, \tilde{\alpha}) \quad (2.14)$$

L'équation (2.12) devient :

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} f(\tau, \tilde{\alpha}) = f(\tilde{\alpha}) \quad (2.15)$$

$f(\tilde{\alpha})$ est la fonction de diffusion définie par le potentiel inter-atomique (paragraphe 1.4).

La variation de la fonction $f(\tau, \tilde{\alpha})$ (qui décrit la diffusion multiple) avec l'angle réduit $\hat{\alpha}$ est représentée sur la figure 2.3 dans le cas du potentiel ZBL et pour plusieurs valeurs de l'épaisseur réduite τ (de 1 jusqu'à 20). On présente également sur la même figure la variation de la fonction universelle de diffusion $f(\tilde{\alpha})$ (qui décrit la diffusion simple).

Cette figure montre l'importance des collisions multiples pour les valeurs de τ considérées. Dans le domaine de basse énergie, les épaisseurs réduites sont comprises entre 0.1 et 10. Cependant, pour des larges valeurs de $\tilde{\alpha}$ et les faibles valeurs de τ , les fonctions $f(\tau, \tilde{\alpha})$ et $f(\tilde{\alpha})$ sont proches. Ceci montre que dans ces conditions, les ions ont subi essentiellement des collisions simples.

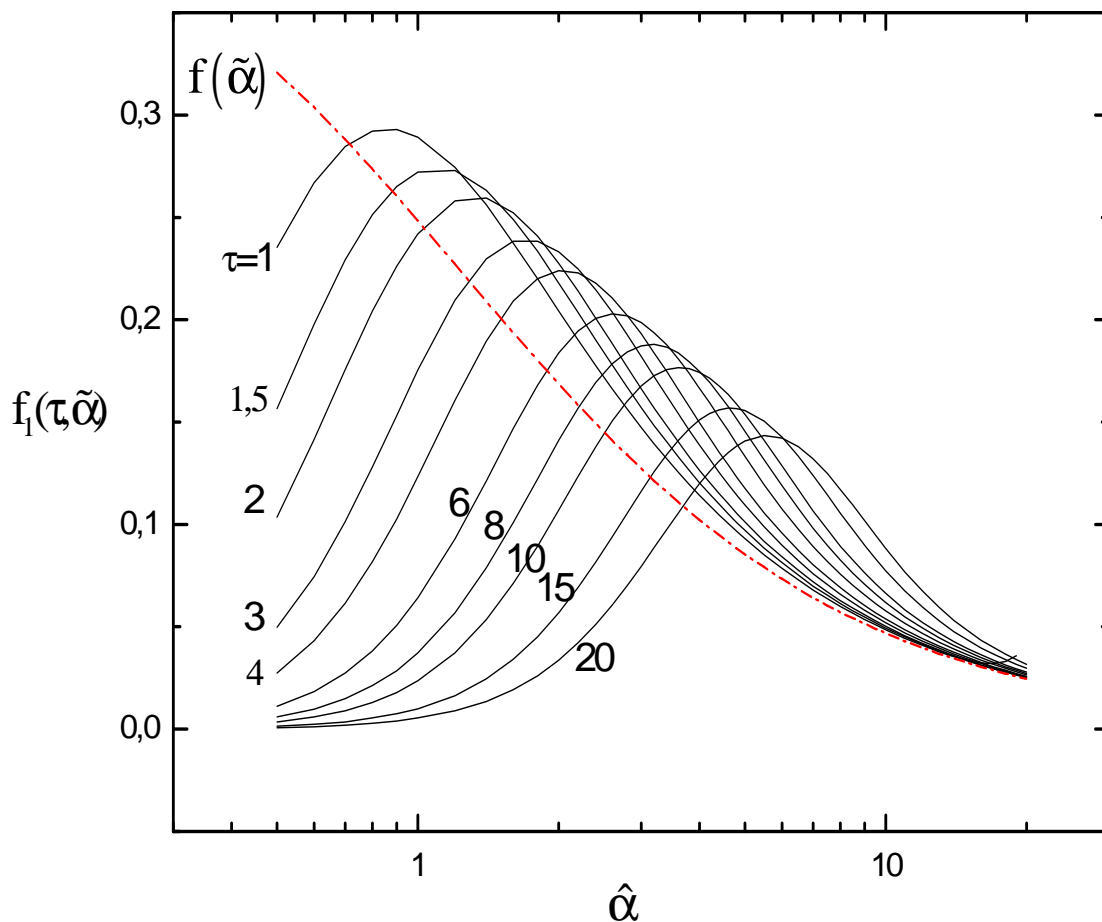


Figure 2.3. Variation de la fonction $f(\tau, \tilde{\alpha})$ avec $\tilde{\alpha}$ pour différentes valeurs de τ dans le cas du potentiel ZBL.

Pour chaque distribution angulaire de $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$, on peut déterminer l'angle réduit à mi-hauteur

$\tilde{\alpha}_{1/2}$ qui correspond à l'angle réduit pour lequel $f_1(\tau, \tilde{\alpha}_{1/2}) = \frac{1}{2} f_1(\tau, 0)$.

L'angle réduit $\tilde{\alpha}_{1/2}$ est relié à l'épaisseur réduite τ par l'expression suivante [SIG74] :

$$\tilde{\alpha}_{1/2} = C\tau^{1/2m} \tag{2.16}$$

Les constantes C et m sont légèrement dépendantes de τ .

L'équation 2.16 qui représente une simple corrélation entre $\tilde{\alpha}_{1/2}$ et τ est une loi universelle valable pour tous les systèmes ion-atome cible considérés. Elle représente un moyen simple pour tester la validité des modèles théoriques de la diffusion multiple et en particulier le modèle SW. Pour plusieurs combinaisons projectile-atome cible, les résultats expérimentaux d'Andersen [AND71, AND74] confirment cette loi.

Pour les valeurs $\tau \leq 20$ (qui correspondent au domaine de moyenne et faible énergie), Spahn et al [SPA75] et indépendamment Hooton et al [HOO75] ont trouvé au moyen de l'expérience un accord acceptable avec la théorie de Sigmund et Winterbon. Anne et ses collaborateurs [ANN88] ont déterminé les angles $\tilde{\alpha}_{1/2}$ expérimentalement et ils ont confirmé la consistance de l'équation (2.16) sur un large intervalle de τ .

Il faut signaler ici que, généralement, la distribution angulaire de la fonction de la diffusion multiple n'est pas gaussienne. Elle peut être approximée par une fonction gaussienne seulement si le paramètre m est proche de 1 [MAR75, SCH82].

La théorie de Meyer [MEY71] donne aussi une relation entre $\tilde{\alpha}_{1/2}$ et τ , exprimée par l'expression :

$$\tilde{\alpha}_{1/2} = g_1(\tau) + \frac{a^2}{r_0^2} g_2(\tau) \quad (2.17)$$

g_1 et g_2 sont des fonctions tabulées [MEY71] et r_0 est la demi-distance entre deux atomes voisins.

2.3. Modèle de Valdés et Arista (VA) :

Dans le modèle SW, l'énergie est considérée comme constante. Dans le cas où cette condition n'est pas satisfaite, on doit tenir compte de la variation de la section efficace $d\sigma$ en fonction de l'énergie de l'ion à l'intérieur de la cible [KHA08].

Pour tenir compte du fait que l'énergie de l'ion incident varie le long de son parcours (soit $E(x')$), nous effectuons le changement suivant dans l'équation (2.2) [SIG74] :

$$\exp[-N \times \sigma_0(k)] \rightarrow \exp\left[-N \int_0^x \sigma_0(k, E(x')) dx'\right] \quad (2.18)$$

avec :

$$\sigma_0(k, E(x')) = \pi a^2 \Delta(z') \quad (2.19)$$

$$\Delta(z') = \int_0^\infty \frac{ds}{s^2} f(s) [1 - J_0(z's)] \quad (2.20)$$

$$z' = \frac{E}{E(x')} z \quad (2.21)$$

On définit l'énergie κ dans les unités appropriées par :

$$\kappa = \frac{E a}{2Z_1 Z_2 e^2} \quad (2.22)$$

Cette énergie correspond à l'énergie réduite ε (équation 1.22) lorsque la masse de l'ion incident est très petite devant la masse de l'atome cible.

L'équation (2.21) s'écrit :

$$z' = \frac{\kappa}{\kappa(\tau')} z \quad (2.23)$$

La fonction de diffusion multiple s'écrit alors:

$$f_1(\tau, \tilde{\alpha}) = \int_0^\infty z dz J_0(z \tilde{\alpha}) \exp[-P(z, \tau)] \quad (2.24)$$

et

$$P(z, \tau) = \int_0^\tau \Delta\left(\frac{\kappa}{\kappa(\tau')} z\right) d\tau' \quad (2.25)$$

Pour calculer la fonction $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$, Valdès et al [VAL94] ont supposé que la dépendance du pouvoir d'arrêt total avec l'énergie E de l'ion, peut s'exprimer par une simple relation:

$$\frac{dE}{dx}(E) = -\lambda E^s \quad (2.26)$$

Où λ et s sont des constantes. Cette dépendance s'exprime aussi par :

$$\frac{d\kappa}{d\tau}(\kappa) = -\lambda \kappa^s \quad (2.27)$$

L'équation (2.25) devient:

$$P(z, \tau) = \int_0^\tau \Delta\left(\frac{\kappa}{\kappa(\tau')} z\right) \frac{d\kappa}{\left(\frac{d\kappa}{d\tau'}\right)} = -\frac{1}{\lambda} \int_{\kappa}^{\kappa_{out}} \Delta\left(\frac{\kappa}{\kappa(\tau')} z\right) \frac{d\kappa}{\kappa^s} \quad (2.28)$$

Avec :

$$\kappa_{out} = \frac{E_{out} a}{2Z_1 Z_2 e^2} \quad (2.29)$$

E_{out} est l'énergie de l'ion à la sortie de la cible.

D'autre part, l'intégration de la perte d'énergie exprimée par l'équation 2.26, donne :

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\tau(1-s)}{\kappa^{1-s} - \kappa_{out}^{1-s}} \quad (2.30)$$

En injectant l'expression de λ déduite de l'équation (2.30) dans l'équation (2.28), et en introduisant une fonction G définie par [VAL94] :

$$G(z) = \int_0^z \frac{d\gamma}{\gamma^{2-s}} \Delta(\gamma) \quad (2.31)$$

L'équation 2.28 devient:

$$P(z, \tau) = \tau(1-s)z^{1-s} \frac{G(z/\mu) - G(z)}{1-\mu^{1-s}} \quad (2.32)$$

Le paramètre $\mu = \frac{\kappa_{out}}{\kappa} = \frac{E_{out}}{E}$ représente le rapport entre l'énergie de l'ion à la sortie de la cible et son énergie initiale E ($\mu < 1$). Par conséquent $(1 - \mu)$ représente la perte d'énergie relative.

Dans la limite $\mu \rightarrow 1$, on peut montrer que $P(z, \tau) \rightarrow \tau\Delta(z)$ qui correspond à la diffusion multiple lorsque la perte d'énergie n'est pas considérée (modèle SW).

Sur la figure 2.4 on représente dans le cas du potentiel ZBL, la variation de la fonction $P(z, \tau)$ (équation 2.32) en fonction de z pour $s=0.5$ et $\tau=1$. Cette fonction a été calculée pour trois valeurs de μ (0.5, 0.7, 0.9) qui correspondent à des pertes d'énergie relative de 50%, 30% et 10% respectivement. On représente également pour $\tau=1$, la variation de la fonction $\tau\Delta(z)$ qui représente la fonction $P(z, \tau)$ lorsque $\mu=1$.

Cette figure montre une différence significative entre les valeurs de la fonction P calculée pour $\mu = 0.5$ (une perte d'énergie de 50%) et lorsque $\mu = 1$ (une perte d'énergie nulle). Ce résultat est la première indication sur l'influence de la perte d'énergie sur les distributions angulaires.

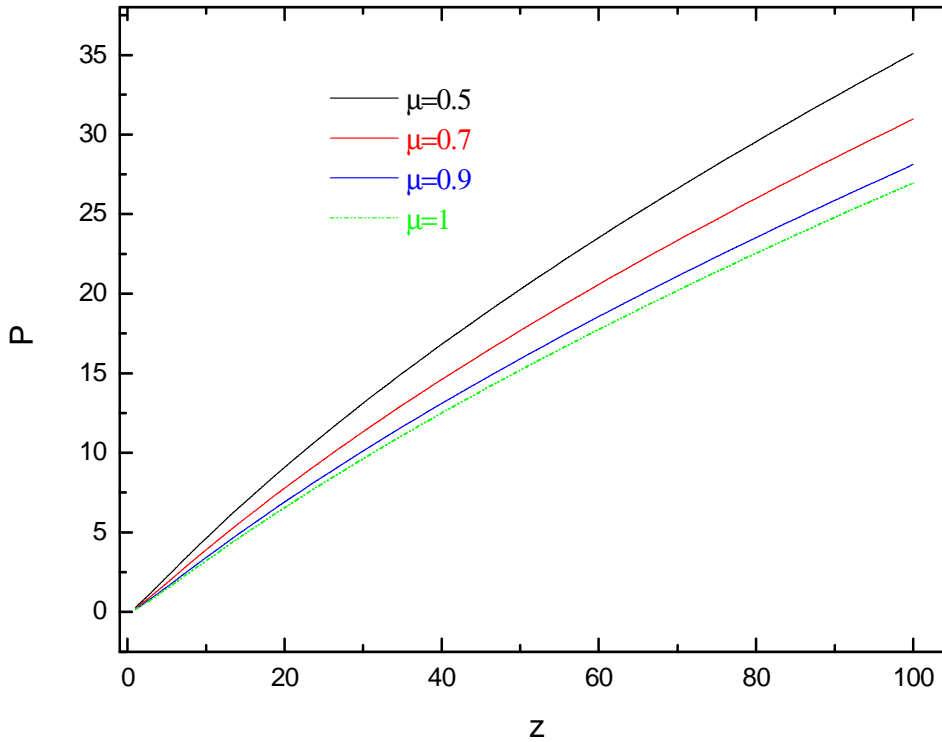


Figure 2.4. Variation de la fonction $P(z, 1)$ (équation 2.32 avec $s=0.5$) pour le potentiel ZBL.

Afin de tenir compte de la variation de l'énergie de l'ion à l'intérieur de la cible d'une manière plus précise dans les prochains chapitres, nous allons calculer l'énergie $E(x')$ définie par l'équation 1.40 du chapitre 1. Le calcul des distributions angulaires se fait donc directement à partir des équations 2.24 et 2.25. Nous donnerons plus de détails sur le calcul des distributions angulaires dans le prochain chapitre.

2.4. Le modèle de Marwick et Sigmund :

La distribution latérale d'ions transmis à travers une cible d'épaisseur x peut être exprimée par la fonction de distribution $G(x, \rho)$, où $\rho = \sqrt{y^2 + z^2}$ est le déplacement latéral (voir figure 2.5). Cette quantité, qui est obtenue également à partir de la résolution de l'équation de transport, est donnée par [MAR75]:

$$G(x, \rho) d^2\rho = \frac{\rho}{x} d\left(\frac{\rho}{x}\right) \int_0^\infty k dk J_0\left(k \frac{\rho}{x}\right) \exp\left[-N x \frac{1}{k} \int_0^k dk' \sigma_0(k')\right] \quad (2.33)$$

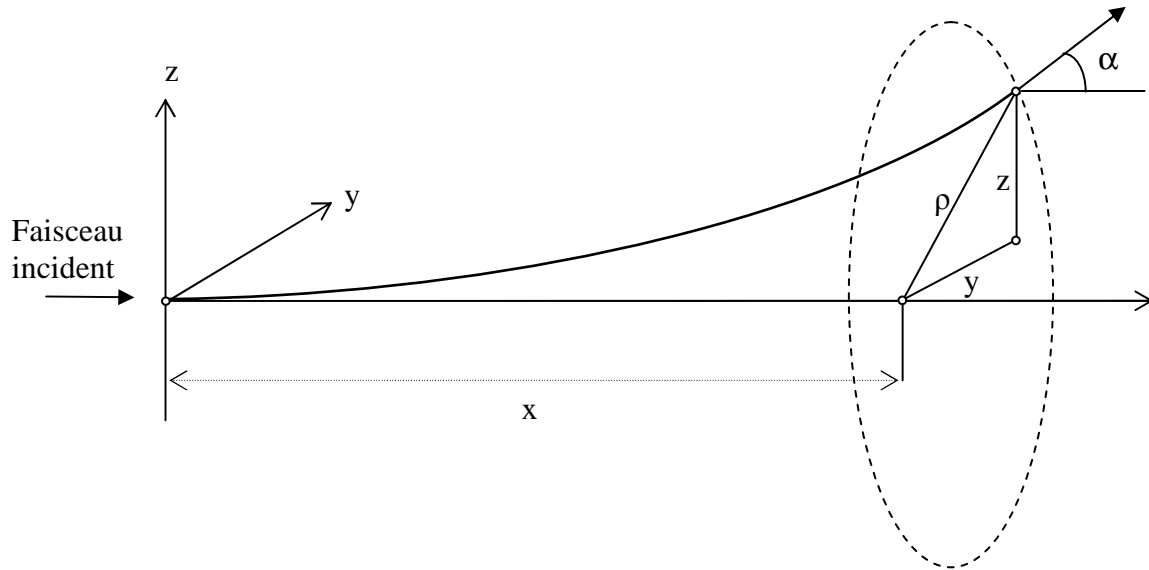


Figure 2.5. Schéma représentant un déplacement latéral ρ des ions transmis à travers une cible d'épaisseur x . α est la déviation angulaire.

En effectuant les changements suivants :

$$\frac{\rho}{x} \rightarrow \alpha \quad \text{et} \quad \frac{1}{k} \int_0^k dk' \sigma_0(k') \rightarrow \sigma_0(k) \quad (2.34)$$

La fonction $G(x, \rho)$ devient identique à la fonction de la diffusion multiple $F(x, \alpha)$.

En utilisant l'épaisseur réduite τ et la variable réduite $\tilde{\rho}$ définie par :

$$\tilde{\rho} = \pi a^2 N \frac{E a}{2 Z_1 Z_2 e^2} \rho \quad (2.35)$$

L'équation 2.33 s'écrit :

$$G(x, \rho) d^2\rho = \frac{\tilde{\rho}}{\tau} d\left(\frac{\tilde{\rho}}{\tau}\right) \int_0^\infty z dz J_0\left(z \frac{\tilde{\rho}}{\tau}\right) \exp\left[-\frac{\tau}{z} \int_0^z d\gamma \Delta(\gamma)\right] \quad (2.36)$$

La fonction $\Delta(\gamma)$ est analogue à la fonction $\Delta(z)$ définie par l'équation (2.9).

En introduisant la fonction $g_1(\tau, \tilde{\rho})$ (fonction réduite de la dispersion latérale) définie par :

$$g_1(\tau, \tilde{\rho}) = \frac{1}{\tau^2} \int_0^\infty z dz J_0\left(z \frac{\tilde{\rho}}{\tau}\right) \exp\left[-\frac{\tau}{z} \int_0^z d\gamma \Delta(\gamma)\right] \quad (2.37)$$

La fonction de la dispersion latérale s'écrit alors :

$$G(x, \rho) d^2\rho = g_1(\tau, \tilde{\rho}) \tilde{\rho} d\tilde{\rho} \quad (2.38)$$

Marwick et Sigmund [MAR75] ont dérivé une loi d'échelle, reliant la distribution angulaire d'ions à la distribution latérale correspondante, donnée par :

$$g_1(\tau, \tilde{\rho}) \approx \left(\frac{\Gamma}{\tau}\right)^2 f_1\left(\tau, \Gamma \frac{\tilde{\rho}}{\tau}\right) \quad (2.39)$$

Γ est une fonction qui dépend légèrement de τ .

Pour un potentiel exprimé en puissance ($\sim r^{-1/m}$), la loi donnée par l'équation (2.39) est exacte lorsque la fonction Γ prend l'expression suivante [MAR75]:

$$\Gamma = (1 + 2m)^{1/2m} \quad (2.40)$$

Cette définition de la fonction Γ reste valable pour un potentiel écrané si le paramètre m est bien ajusté selon la valeur de l'épaisseur τ [MAR75].

La fonction Γ correspondant aux potentiels TF et LJ a été calculée numériquement par Marwick et Sigmund. Sa variation est représentée dans la figure 2.6.

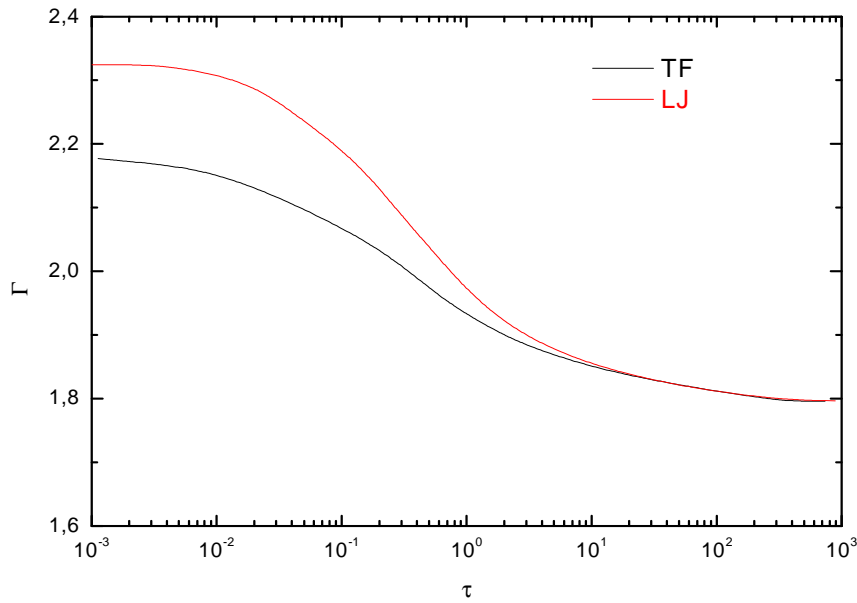


Figure 2.6. Variation de la fonction Γ avec τ pour les potentiels TF et LJ [MAR75].

En utilisant l'équation (2.38), une distribution latérale $g_1(\tau, \tilde{\rho})$ peut être obtenue à partir de la distribution angulaire $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ en effectuant le changement :

$$\tilde{\rho} = \frac{\tau}{\Gamma} \tilde{\alpha} \quad (2.41)$$

Notons que le temps de calcul de la fonction $g_1(\tau, \tilde{\rho})$ est beaucoup plus important que le temps de calcul de la fonction $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$. La loi d'échelle permet d'avoir un gain dans le temps de calcul de $g_1(\tau, \tilde{\rho})$. D'autre part, la mesure expérimentale de la dispersion latérale d'ions dans des cibles gazeuses est relativement simple [SID75-a, SID75-b], ce qui permet d'étudier la diffusion multiple pour des épaisseurs très minces, lorsque la sensibilité du potentiel d'interaction aux distances r relativement grandes est prononcée [KNU76-a].

2.4. Conclusion :

Le modèle de Sigmund de la diffusion multiple pour des ions transmis à travers une cible solide est basé sur la théorie de transport. Ce modèle est valable pour de faibles angles de diffusion et considère une énergie constante de l'ion le long de son parcours dans la cible. La fonction de la diffusion multiple $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ qui dépend des paramètres réduits $\tilde{\alpha}$ et τ décrit bien le processus de la diffusion multiple. Cette fonction qui est universelle (valable pour n'importe quelle combinaison ion-atome cible) dépend cependant du potentiel d'interaction.

La perte d'énergie des ions dans le solide a été considérée par la suite suivant le traitement de Valdés. La fonction de la diffusion multiple $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ dépend dans ce cas du rapport μ entre l'énergie de l'ion à la sortie de la cible et son énergie initiale. Ce rapport peut s'exprimer en fonction du pouvoir d'arrêt des ions dans le solide. Les résultats obtenus de $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ montrent d'une manière générale que la distribution angulaire de la diffusion multiple varie sous l'effet de la perte d'énergie. Dans le prochain chapitre, une étude détaillée dans ce sens sera présentée. Le modèle de Marwick et Sigmund qui est basé également sur la théorie de transport, permet d'étudier la dispersion latérale d'ions. Ce modèle relie les distributions angulaires avec les distributions latérales au moyen de la loi d'échelle.

CHAPITRE 3

**Influence de la perte d'énergie et du potentiel
d'interaction sur les distributions angulaires
d'ions à travers une cible solide**

3.1. Introduction:

Les diffusions multiples des ions dans une cible solide sont étroitement liées à la section efficace de diffusion. Cette dernière dépend du potentiel interatomique ainsi que de l'énergie de l'ion qui varie le long de son parcours. Cette variation est déterminée par les pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire. Ce dernier dépend également du potentiel d'interaction entre le projectile et l'atome cible. Toutes ces corrélations entre ces grandeurs entraînent que la perte d'énergie influence sur la distribution angulaire d'ions transmis.

Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats relatifs au calcul des distributions angulaires de la diffusion multiple obtenues dans le cadre de la théorie de transport. En premier lieu, nous avons calculé les distributions angulaires en utilisant le modèle SW. Nous avons considéré que la perte d'énergie des ions est négligeable dans la cible.

Par la suite, cette perte d'énergie a été introduite dans le calcul des distributions angulaires et nous avons étudié l'influence de cette grandeur sur les distributions angulaires ainsi calculées. Nous avons également étudié l'effet du potentiel d'interaction sur les distributions angulaires. Une comparaison des distributions angulaires obtenues par le présent calcul à celles déterminées expérimentalement pour différentes cibles est effectuée et une discussion de tous ces résultats est présentée.

3.2. Validité de l'approximation $x \approx L$:

Dans le but de calculer les distributions angulaires d'ions transmis, nous avons utilisé l'approximation suivante: $x \approx L$, où x est l'épaisseur de la cible et L est le parcours total de l'ion dans la cible.

Pour justifier cette approximation, des simulations Monte Carlo [KHA07-b] basées sur le code TRIM-85 (TRansport of Ions in Matter) [ZIE85] ont été effectuées pour des ions He^+ d'énergie de 2 et 10 keV transmis à travers une cible d'argent. Pour chaque énergie, deux épaisseurs ont été considérées (50 et 200 Å pour 2 keV, 200 et 800 Å pour 10 keV). Seuls les ions transmis avec un angle inférieur à 20° ont été considérés. Les variations des distributions de parcours $1/N \, dN/dL$ avec L/x sont présentées dans la figure 3.1. Il est clair que dans les cas $\text{He}^+(2 \text{ keV})/\text{Ag}(50 \text{ Å})$ et $\text{He}^+(10 \text{ keV})/\text{Ag}(200 \text{ Å})$, la majorité des ions transmis ont un parcours L proche de l'épaisseur x . Les valeurs calculées du parcours moyen sont $\langle L \rangle = 1.12 x$

pour $\text{He}^+(2 \text{ keV})/\text{Ag}(50 \text{ \AA})$ et $\langle L \rangle = 1.11 x$ pour $\text{He}^+(10 \text{ keV})/\text{Ag}(200 \text{ \AA})$. Les distributions angulaires peuvent être calculées dans ces deux cas en utilisant le modèle SW.

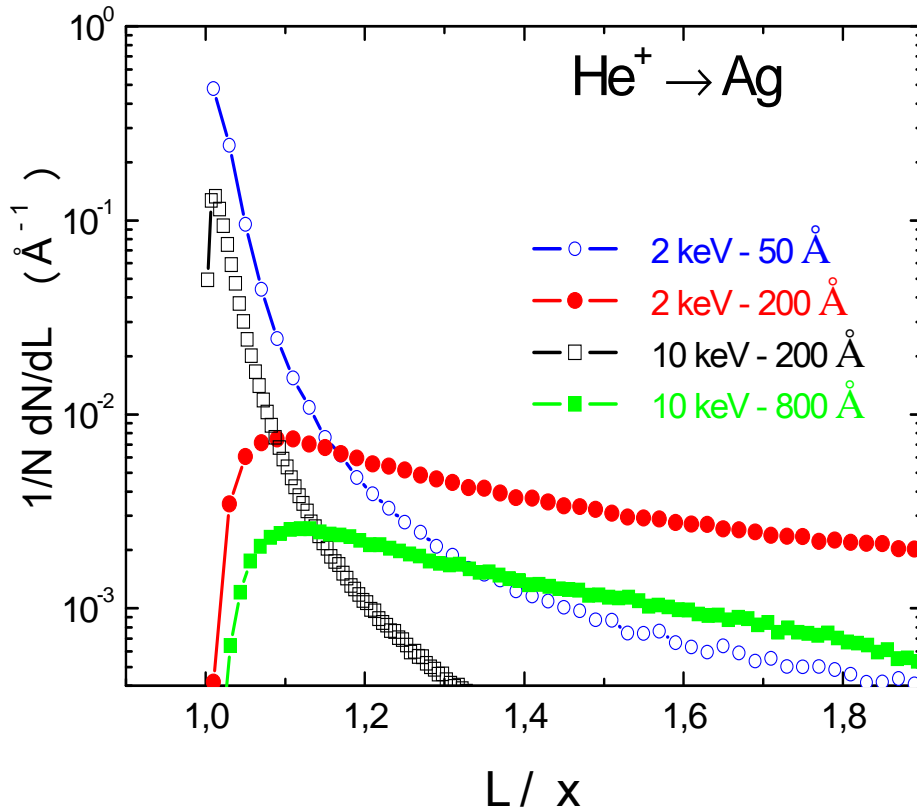


Figure 3.1. Variation des distributions de parcours $\frac{1}{N} \frac{dN}{dL}$ en fonction de $\frac{L}{x}$ pour 2keV-50Å (—○—), 2keV-200Å (—●—), 10keV-200Å (—□—) et 10keV-800Å (—■—).

Cependant pour les systèmes $\text{He}^+(2 \text{ keV})/\text{Ag}(200 \text{ \AA})$ et $\text{He}^+(10 \text{ keV})/\text{Ag}(800 \text{ \AA})$, une forte contribution d'ions qui ont un parcours plus grand que l'épaisseur a été observée. Pour d'ions qui subissent de pareilles situations, les distributions angulaires calculées par le modèle SW ne sont pas précises.

3.3. Calcul de la fonction de diffusion multiple en utilisant le modèle de Sigmund et Winterbon:

Nous avons montré dans le chapitre 2 que la distribution angulaire de la diffusion multiple calculée en utilisant le modèle SW peut s'exprimer à l'aide de la fonction de la diffusion multiple $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$.

Pour le calcul de cette fonction, nous avons utilisé l'expression de l'équation 2.12 (chapitre 2). Les valeurs de $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ obtenues, pour de larges intervalles de τ et $\tilde{\alpha}$ considérés dans le cadre de notre travail, coïncident parfaitement avec les résultats tabulés de Sigmund et Winterbon [SIG74, SIG75] pour les potentiels d'interaction de TF et LJ. Un exemple correspondant à la transmission d'ions H^+ de 10 keV à travers deux cibles d'argent d'épaisseurs égales à 80 et 160 Å est donné dans la figure 3.2. Ces épaisseurs correspondent aux épaisseurs réduites respectives $\tau=0.2$ et $\tau=0.4$. Dans les deux cas, le potentiel de TF a été utilisé.

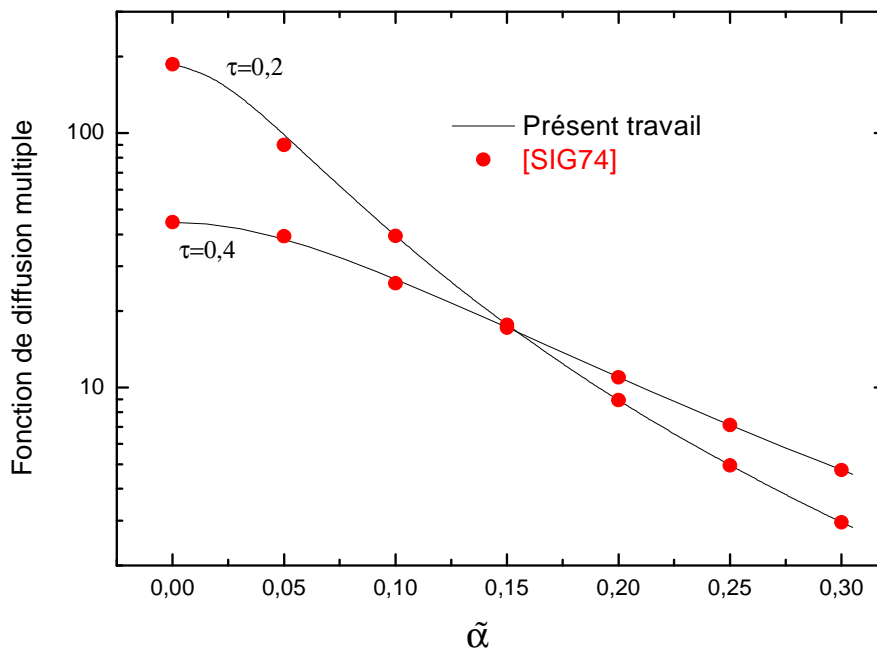


Figure 3.2. Distributions angulaires de la fonction de distribution multiple $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ pour $\tau=0.2$ et $\tau=0.4$.

Le calcul des distributions angulaires pour différentes valeurs de τ nous a permis de déterminer l'angle réduit à mi-hauteur $\tilde{\alpha}_{1/2}$ en fonction de τ pour le potentiel ZBL. Le fit des résultats obtenus de $\tilde{\alpha}_{1/2}(\tau)$ par la loi universelle donnée par l'équation 2.16 du chapitre 2, donne les valeurs de C et m qui varient en fonction de l'intervalle du fit sur τ . Le paramètre m qui sera largement utilisé dans cette étude varie entre 0.3 et 1. Un exemple est donné dans la figure 3.3 qui représente la variation de $\tilde{\alpha}_{1/2}(\tau)$ pour τ compris entre 2 et 10. Les valeurs obtenues dans ce cas sont C=0.304 et m=0.633.

Les valeurs de C et m obtenues dans le cadre de notre étude et pour des épaisseurs réduites allant de 0.01 jusqu'à 10^6 , partagées sur 8 intervalles sont présentées dans le tableau 3.1. Lors du fit, une attention particulière a été portée à la région de τ entre 0.1 et 10 qui correspond au domaine de basse énergie. On présente également dans ce tableau les valeurs de C et m déduites par [TIR96] à partir des résultats expérimentaux de [AND71, AND74, SPA75, ANN88]. Cette comparaison montre que nos valeurs de C et m sont comparables à celle obtenues par la mesure expérimentale de la diffusion multiple.

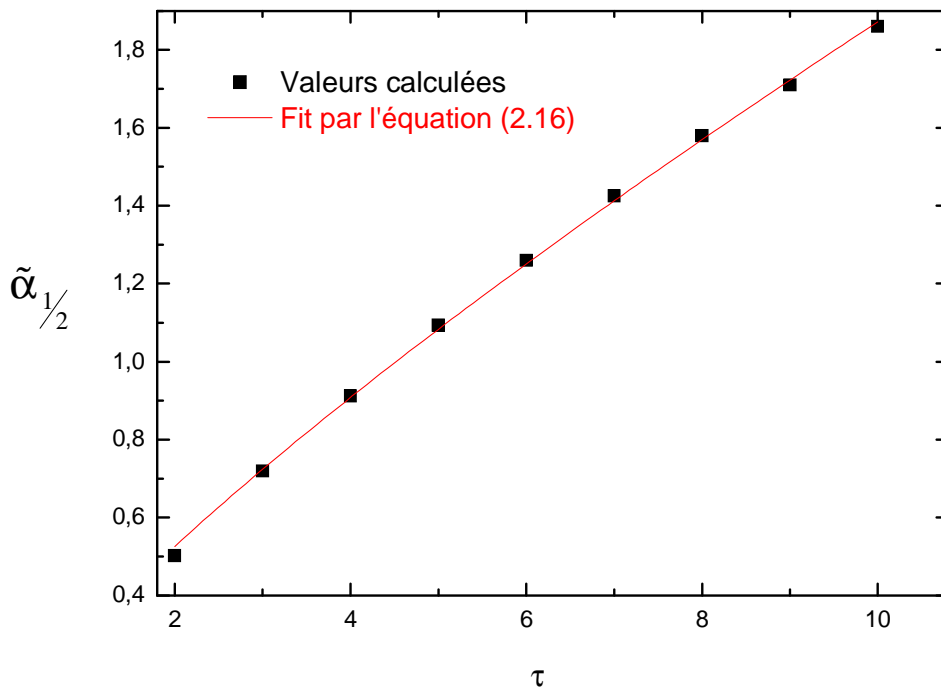


Figure 3.3. Variation de l'angle réduit à mi-hauteur $\tilde{\alpha}_{1/2}$ en fonction de l'épaisseur réduite τ .

	τ	[0.01,0.1]	[0.1,0.5]	[0.5,2]	[2,10]	[10,30]	[30,300]	[300,2.10 ³]	[2.10 ³ ,10 ⁶]
Notre étude (ZBL)	C	0.688	0.296	0.260	0.304	0.379	0.500	0.633	0.901
	m	0.306	0.410	0.513	0.633	0.718	0.804	0.860	0.923
Expérience	C			0.330	0.362			0.920	1
	m			0.585	0.691			0.893	0.909
	Référence			[AND71, AND74]	[ANN88, SPA75]			[ANN88, SPA75]	[ANN88]

Tableau 3.1. Valeurs de m et C obtenues dans le cas du potentiel de ZBL.

3.4. Effet de la perte d'énergie sur les distributions angulaires d'ions transmis à travers une cible solide:

3.4.1 Détermination de la perte d'énergie :

Pour la gamme d'énergie considérée, les valeurs des pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire obtenues à partir de SRIM 2008 [SRI08] ont été utilisées pour déterminer la variation de l'énergie E en fonction du parcours x' à l'intérieur de la cible (équations 1.40 et 1.41 du chapitre 1). Un exemple de cette fonction est illustré dans la figure 3.4, pour le cas d'ions H^+ de 10 keV dans une cible d'aluminium.

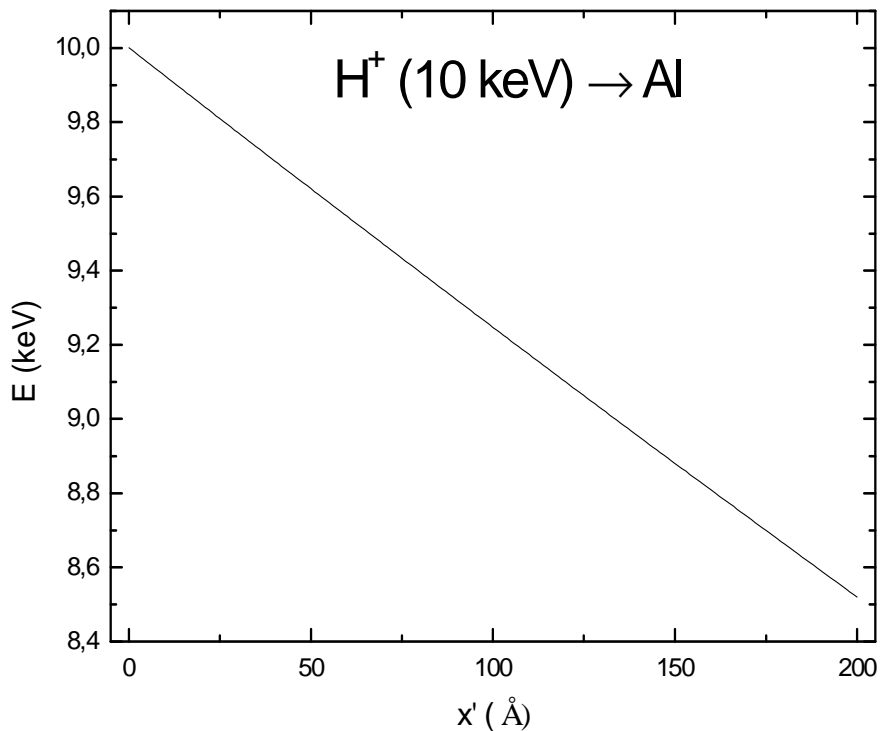


Figure 3.4. Variation de l'énergie E des ions H^+ (10 keV) en fonction du parcours traversé x' dans une cible d'aluminium.

3.4.2. Calcul des distributions angulaires en tenant compte de la perte d'énergie :

Pour chaque système considéré dans cette étude, un ajustement polynomial d'ordre 2 de la fonction $E(x')$ a été utilisé pour calculer la fonction $P(z, \tau)$ définie par l'équation (2.25). La fonction $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ est calculée par la suite en utilisant l'équation 2.23 [MEK07].

Notons que le code de calcul que nous avons développé pour tenir compte de la perte d'énergie dans la détermination des distributions angulaires, est valable pour tous les systèmes ion incident-atome cible et ce quelque soit l'énergie initiale du projectile. Ce code de calcul permet aussi d'étudier séparément l'effet de la perte d'énergie électronique et nucléaire sur les distributions angulaires. Par contre, les calculs de Valdés sont valables

uniquement dans le cas où le pouvoir d'arrêt s'exprime en fonction de l'énergie de l'ion E par une expression de la forme: E^n .

Le calcul de $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ pour des ions d'hydrogène et d'hélium, transmis à travers différentes cibles (C, Al, Cu, et Ag) et pour un intervalle angulaire $[0, 20^\circ]$ nous a permis de déterminer les distributions angulaires correspondantes. Nous avons considéré des cibles minces: l'épaisseur maximale choisie était de 50 \AA à 2 keV et 200 \AA à 10 keV . Les calculs dans ce cas ont été effectués en tenant compte de la perte d'énergie totale.

Sur les figures respectives 3.5 et 3.6, nous présentons les distributions angulaires d'ions He^+ de 4 keV et 10 keV d'énergie transmis à travers une cible d'argent de 200 \AA d'épaisseur. Nous avons utilisé le potentiel écranté de ZBL. Les distributions correspondantes lorsque la perte d'énergie n'est pas considérée sont présentées également.

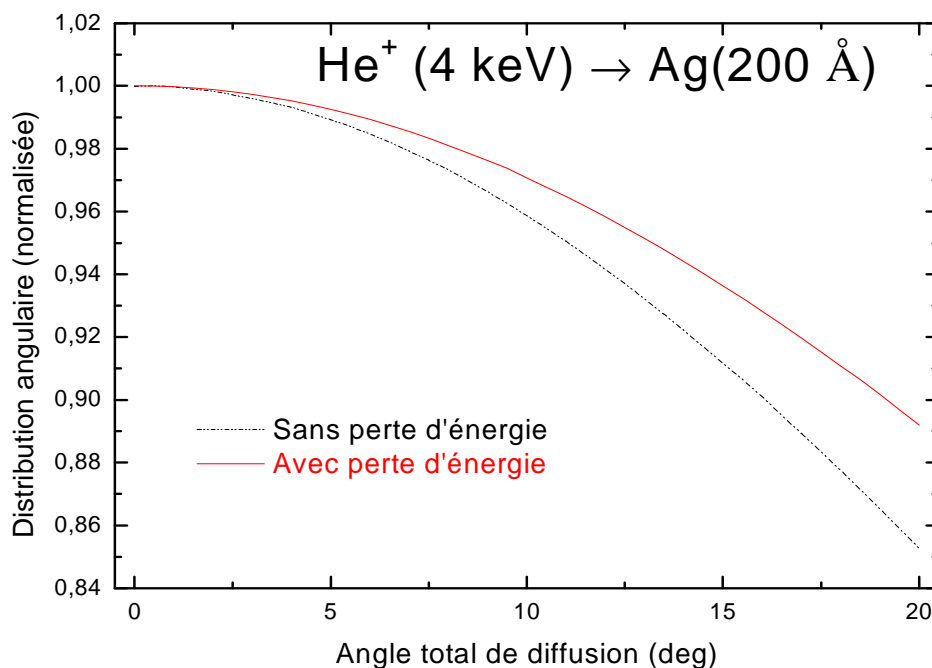


Figure 3.5. Distributions angulaires d'ions He^+ de 4 keV transmis à travers une cible d'argent de 200 \AA d'épaisseur (avec et sans perte d'énergie). Le potentiel de ZBL est utilisé.

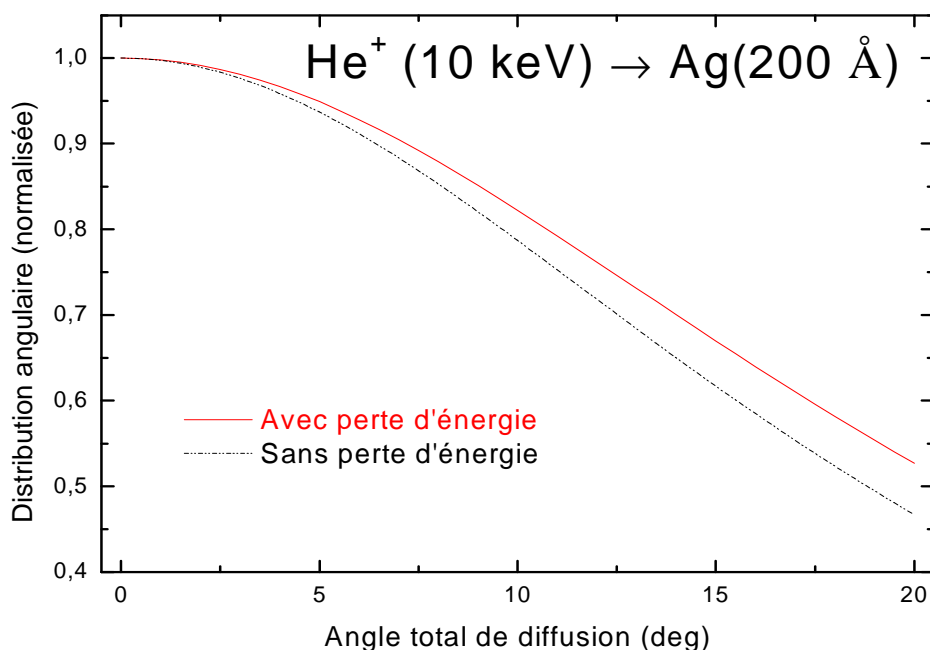


Figure 3.6. Distributions angulaires d'ions He⁺ de 10 keV transmis à travers une cible d'argent de 200Å d'épaisseur (avec et sans perte d'énergie). Le potentiel de ZBL est utilisé.

Nous pouvons observer que la perte d'énergie modifie l'allure de la distribution angulaire. La distribution angulaire devient plus large lorsque la perte d'énergie est considérée. L'angle à mi-hauteur correspondant devient plus grand. Ce résultat est en accord avec les calculs de [VAL94]. Ceci peut s'expliquer par le fait que lorsqu'on tient compte l'effet de la perte d'énergie, l'énergie de l'ion devient inférieure à son énergie initiale. Comme l'angle à mi-hauteur de diffusion est inversement proportionnel à l'énergie de l'ion incident [GOE13], les distributions angulaires s'élargissent.

La perte d'énergie a un effet également sur les distributions angulaires d'ions sur des cibles très minces (voir figure 3.7).

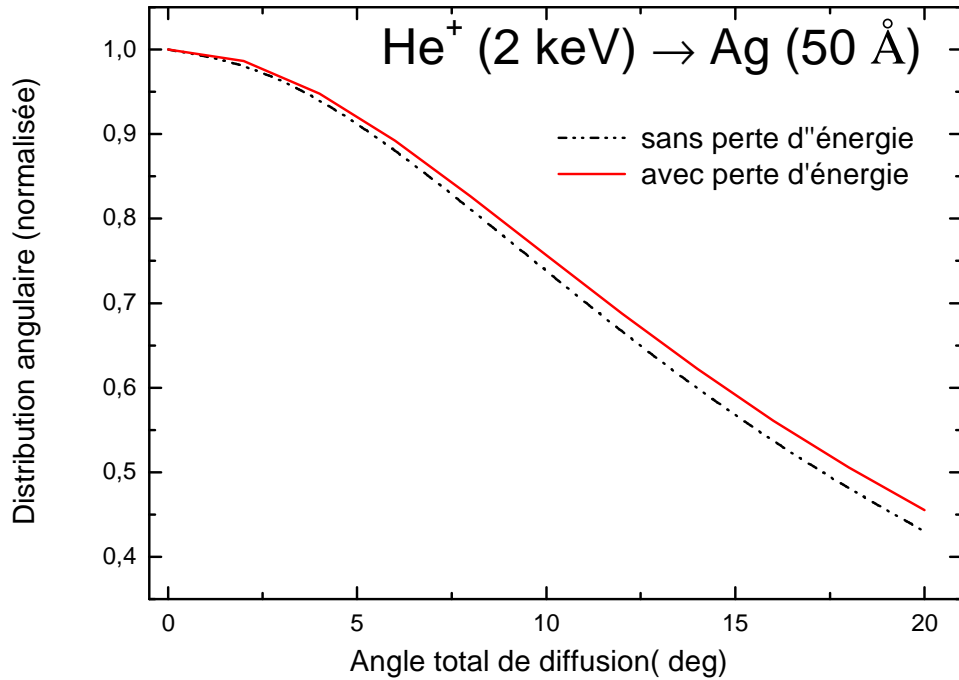


Figure 3.7. Distributions angulaires calculées pour des ions He^+ de 2 keV transmis à travers une cible d'Ag d'épaisseur 50 Å.

Dans le but de comparer les effets de la perte d'énergie nucléaire et électronique sur les distributions angulaires, nous avons effectué les calculs en incluant la perte d'énergie totale (électronique et nucléaire). Par la suite, nous avons considéré uniquement la perte d'énergie électronique. On désigne par $\Delta E_T/E$ et $\Delta E_e/E$ les pertes d'énergies relatives totale et électronique respectivement. Les distributions angulaires pour deux cibles d'Ag, d'épaisseur de 150 Å et 200 Å, sont présentées sur la figure 3.8. Les distributions correspondantes lorsque la perte d'énergie est négligée sont également présentées.

Cette figure montre que l'apport de la perte d'énergie élastique sur les distributions angulaires est très faible. En fait, la perte d'énergie nucléaire est très petite devant la perte d'énergie électronique dans tous les cas considérés de cette étude. Si on considère l'exemple de la cible d'Ag de 200 Å, les valeurs de $\Delta E_T/E$ et $\Delta E_e/E$ sont 0.168 et 0.139. Les distributions angulaires peuvent se calculer en tenant compte uniquement de la perte d'énergie électronique.

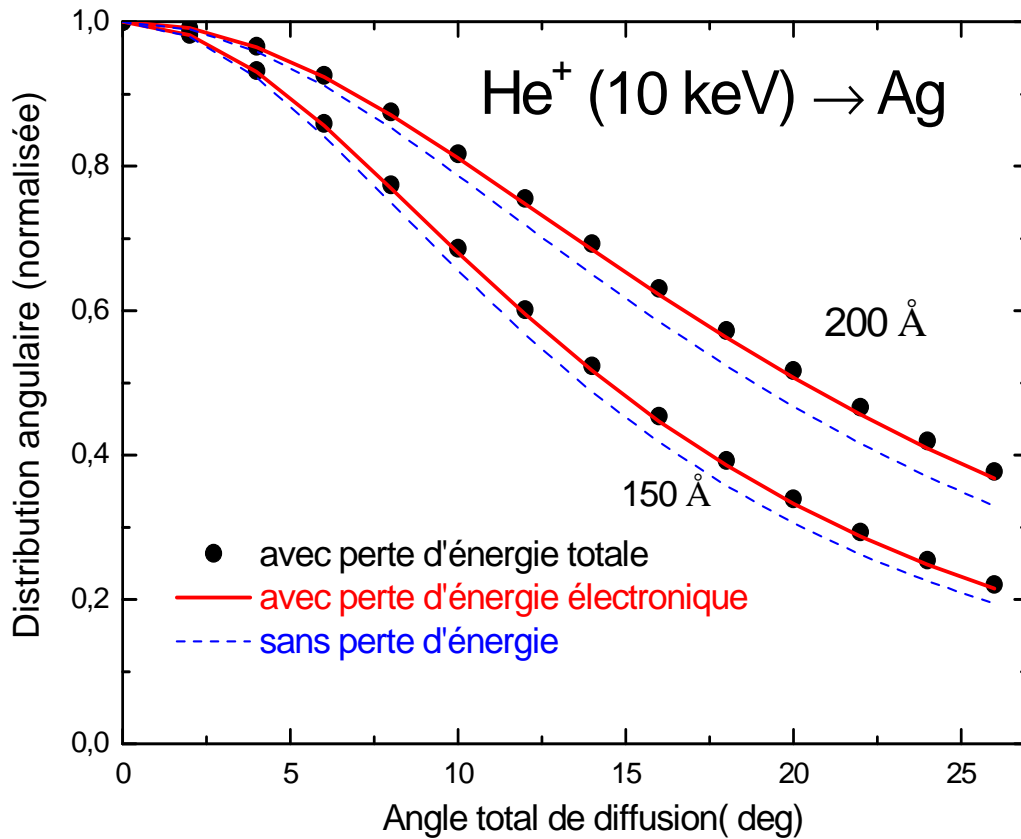


Figure 3.8. Distributions angulaires calculées pour des ions He^+ 10 keV transmis à travers une cible d'Ag d'épaisseur 150 Å et 200 Å. La perte d'énergie totale est considérée (-•-), la perte d'énergie électronique uniquement est considérés (—) et la perte d'énergie est négligée (- - -).

3.4.3 Effet de la perte d'énergie sur l'angle à mi-hauteur de la distribution :

Pour chaque distribution angulaire, on peut déduire l'angle $\beta_{1/2}$ qui correspond à la mi-hauteur de la distribution lorsque la perte d'énergie est considérée.

Sur la figure 3.9, on présente la variation la variation du rapport $\frac{\beta_{1/2}}{\alpha_{1/2}}$ pour des ions He^+ de 2 et 10 keV transmis à travers plusieurs épaisseurs x d'une cible Ag en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$. Les résultats obtenus montrent clairement l'augmentation du rapport

$\beta_{1/2}/\alpha_{1/2}$ avec la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ dans les différents cas considérés dans cette

étude. Dans les deux cas étudiés, il existe la même variation de $\beta_{1/2}/\alpha_{1/2}$ avec $\Delta E/E$.

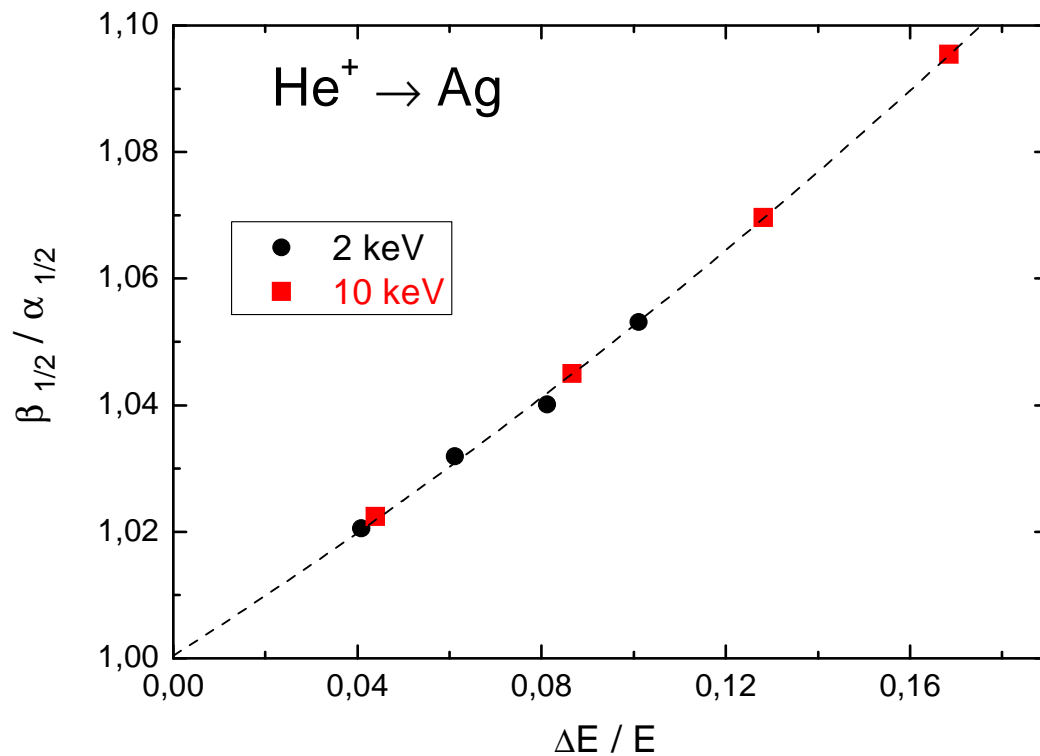


Figure 3.9. Variation du rapport $\beta_{1/2}/\alpha_{1/2}$ en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ pour des ions He^+ de 2 et 10 keV.

Notons que le rapport $\beta_{1/2}/\alpha_{1/2}$ est plus grand dans le cas de $\text{He}^+(10 \text{ keV})/\text{Ag}$ (200 Å) qui correspond à la valeur la plus grande de $\Delta E/E$.

3.5. Influence du potentiel d'interaction sur les distributions angulaires:

Un moyen simple pour corriger le potentiel d'interaction consiste à multiplier son rayon d'écran par un facteur correctif C_a .

$$a = C_a a_{\text{ZBL}} \quad (3.1)$$

Les calculs des distributions angulaires pour les systèmes cités précédemment ont été effectués pour différentes valeurs de C_a . La perte d'énergie totale des ions dans le solide a été considérée.

La figure 3.10 présente des distributions angulaires dans le cas des ions He^+ (10 keV) transmis à travers une cible d'Ag (de 150 Å) et pour deux facteurs correctifs : $C_a=1$ et $C_a=0.9$. Cette figure montre que les distributions deviennent plus étroites en prenant un facteur $C_a < 1$. Ceci peut s'expliquer par le fait qu'un facteur $C_a < 1$ diminue la fonction d'écran, ce qui rend le potentiel plus faible. En effet, si on compare pour un paramètre d'impact donné l'angle de diffusion (équation 1.9 du chapitre 1) dans le cas de $C_a < 1$ à celui obtenu dans le cas où $C_a=1$ (un potentiel non modifié) on trouve que l'angle correspond à $C_a < 1$ est plus faible.

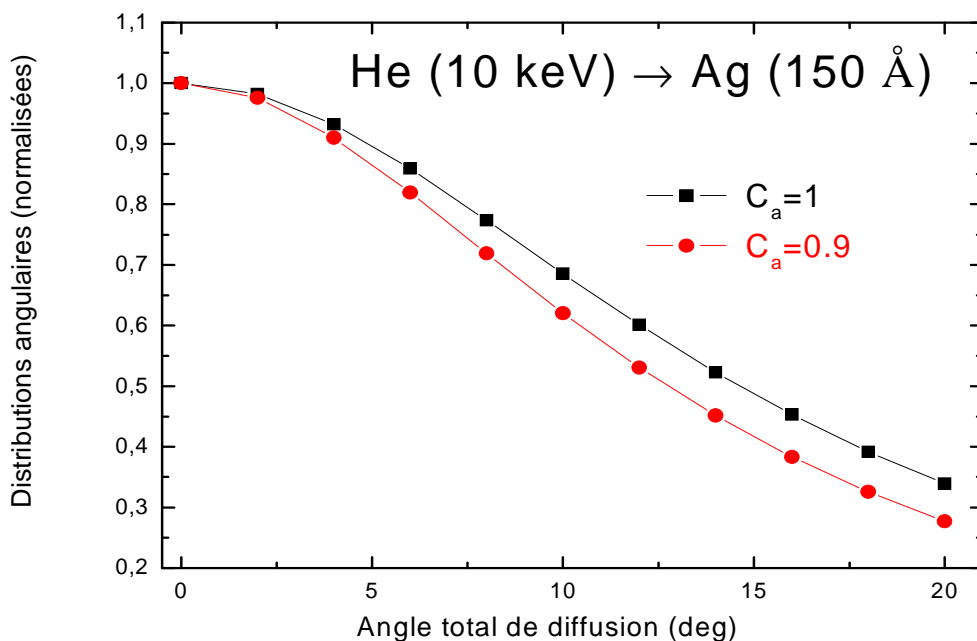


Figure 3.10. Distributions angulaires d'ions He^+ (10 keV) transmis à travers une cible d'Ag d'épaisseur 150 Å. Le potentiel ZBL est considéré dans le cas $C_a=1$ (—•—) et $C_a=0.9$ (—■—).

3.6. Influence simultanée du potentiel d'interaction et de la perte d'énergie sur les distributions angulaires :

Nous avons montré dans les sections précédentes qu'un facteur correctif $C_a < 1$ entraîne une distribution plus étroite. Par contre, l'effet de la perte d'énergie (caractérisée par le pouvoir d'arrêt électronique S_e) entraîne une distribution plus large. Dans la partie qui suit, nous étudions l'effet simultané des deux processus sur les distributions angulaires.

Dans le présent modèle, le pouvoir d'arrêt S_e est modifié en utilisant un facteur correctif C_e ($C_e > 1$) :

$$S_e = C_e S_e(\text{TRIM}) \quad (3.2)$$

$S_e(\text{TRIM})$ est le pouvoir d'arrêt électronique calculé à partir du code TRIM [BIE91].

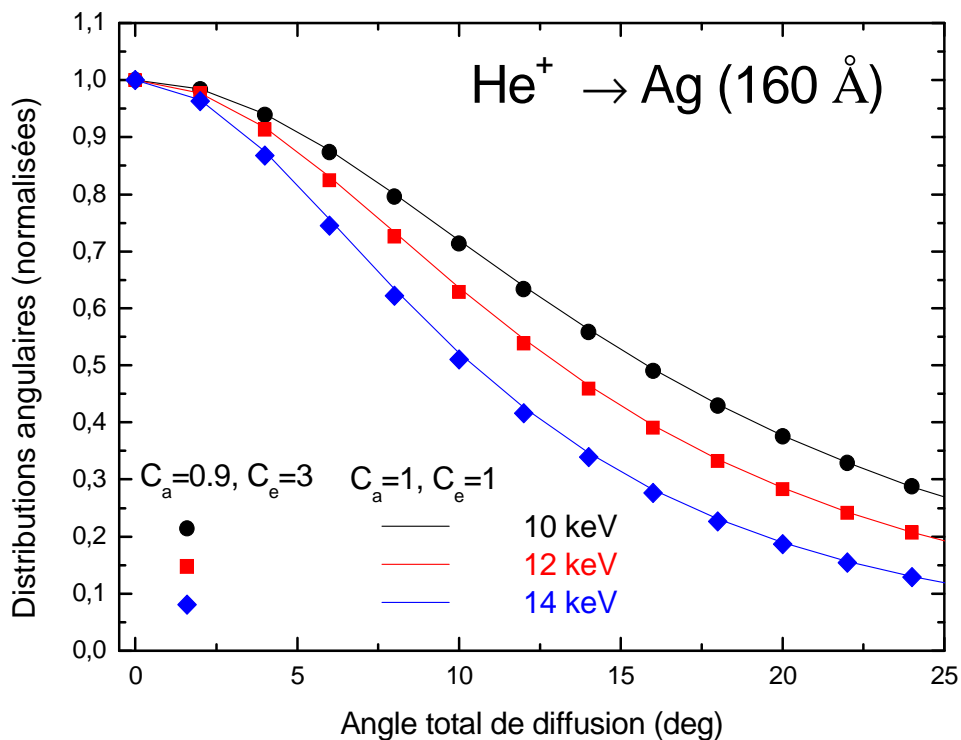


Figure 3.11. Distributions angulaires d'ions He^+ transmis à travers une cible Ag d'épaisseur 160 Å avec ($C_a=1, C_e=1$) et ($C_a=0.9, C_e=3$) pour plusieurs énergies de l'ion incident.

En conséquence, on s'attend à avoir plusieurs combinaisons (C_a, C_e) qui donnent la même distribution angulaire. Un exemple est présenté dans la figure 3.11, dans lequel la même distribution des ions He^+ de 10 keV à travers une cible Ag de 160 Å est obtenue en utilisant deux combinaisons ($C_a=1, C_e=1$) et ($C_a=0.9, C_e=3$).

La figure 3.12 contient aussi les distributions angulaires calculées dans les mêmes conditions mais pour différentes valeurs de l'énergie de l'ion incident (12 et 14 keV). Comme il a été observé à 10 keV, les distributions angulaires avec les deux combinaisons (C_a, C_e) sont parfaitement identiques pour les autres énergies.

Cependant, si on considère différentes valeurs de l'épaisseur, les distributions angulaires calculées avec les précédentes combinaisons (C_a, C_e) ne sont pas identiques. La figure 3.12 présente les résultats obtenus pour deux épaisseurs (100 et 160 Å). On observe clairement que les distributions angulaires, calculées pour ($C_a=1, C_e=1$) et ($C_a=0.9, C_e=3$) sont identiques pour 160 Å mais elles sont différentes pour 100 Å.

On peut conclure que la détermination du pouvoir d'arrêt électronique et du potentiel d'interaction à partir des distributions angulaires expérimentales est possible par la considération de plusieurs valeurs de l'épaisseur. La bonne combinaison (C_a, C_e) doit reproduire les distributions angulaires expérimentales obtenues à plusieurs épaisseurs.

Les résultats obtenus montrent également que les distributions possèdent une faible dépendance aux valeurs du pouvoir d'arrêt par rapport à leur dépendance à la variation du potentiel d'interaction. La méthode présentée dans cette étude est particulièrement intéressante dans la détermination du potentiel d'interaction [MEK15].

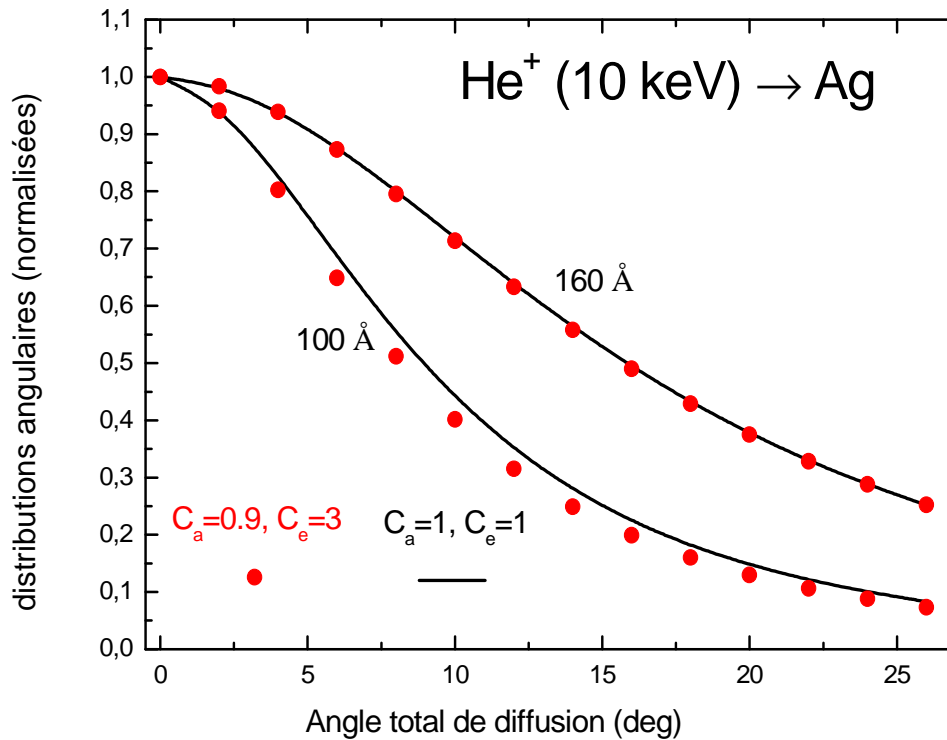


Figure 3.12. Distributions angulaires d'ions He⁺ (10 keV) transmis à travers une cible Ag.

3.7. Comparaison à des résultats expérimentaux:

La diffusion multiple a été étudiée expérimentalement pour différentes combinaisons de projectiles et atomes-cibles par plusieurs auteurs. A haute énergie, il existe une variété d'études expérimentales de la diffusion multiple. Par contre, à basse énergie on ne trouve dans la littérature qu'un nombre limité de résultats expérimentaux. Ces études ont été effectuées dans les années 60-80 et les valeurs de la diffusion multiple sont peu précises. Dans les deux dernières décennies, plusieurs résultats des distributions angulaires d'ions légers (H et He) de faible énergie transmis par des cibles solides (C, Al, Cu, Au, Ag et Pd) ont été publiés [FAM00, FAM02, ARC04, ARC05, ARC06, CAN10, CAN11, CEL13].

3.7.1 Comparaison des distributions angulaires calculées avec l'expérience :

Pour la comparaison de nos résultats à ceux obtenus expérimentalement, nous avons calculé la fonction de diffusion multiple par le modèle SW. Nous avons introduit ensuite la perte d'énergie dans les calculs. Nous avons utilisé le potentiel écranté ZBL. La normalisation entre les courbes est effectuée à $\alpha = 0$.

a) Cas d'une cible d'aluminium :

Nous présentons la distribution angulaire d'ions d'hydrogène transmis à travers une cible d'aluminium d'épaisseur 159 Å (figure 3.13). Nous avons comparé nos résultats à ceux obtenus expérimentalement [ARC05].

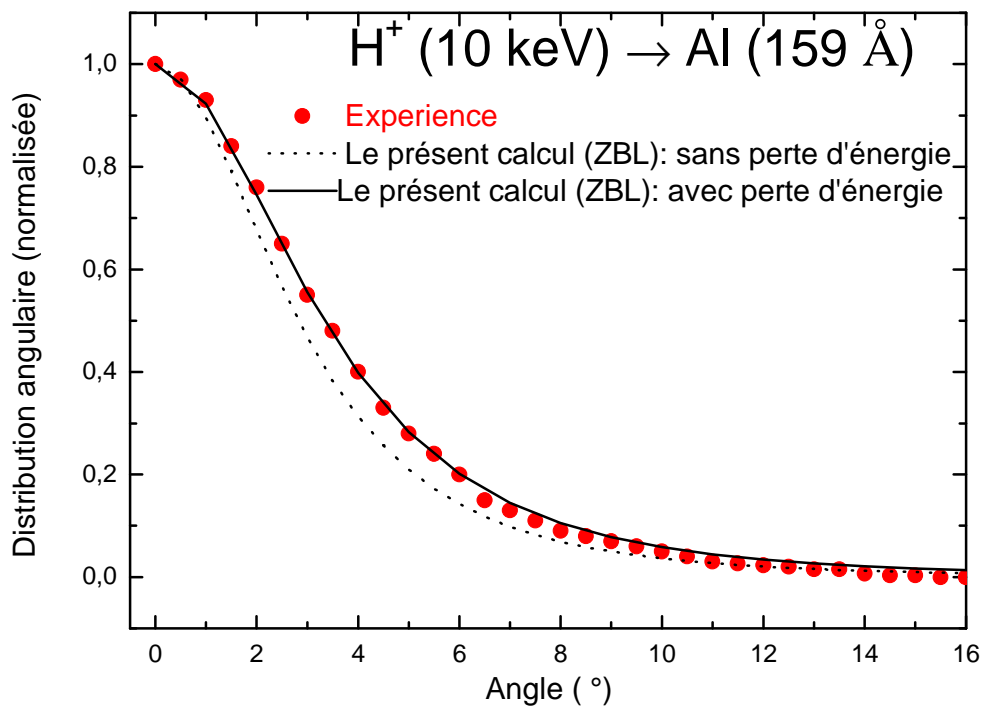


Figure 3.13. Distributions angulaires calculées d'ions H^+ de 10 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 159 Å comparées aux résultats expérimentaux [ARC05].

L'accord entre nos résultats (dans le cas du potentiel ZBL et avec l'effet de la perte d'énergie) est excellent avec les résultats expérimentaux [ARC05].

Sur la figure 3.14, on présente nos distributions angulaires calculées dans le cas d'ions H^+ de 9 keV transmis à travers une cible d'aluminium d'épaisseur 200 Å. Ces résultats ont été comparés aux distributions expérimentales [FAM00]. On peut remarquer que l'effet de la perte d'énergie améliore l'accord avec l'expérience seulement dans le cas de faibles angles de diffusion (α inférieur à 4°).

Nous pouvons également remarquer sur les deux figures précédentes que l'effet de la perte d'énergie contribue légèrement sur les distributions angulaires. En effet le pouvoir d'arrêt électronique pour $H(10\text{keV})/Al$ est $S_e=7.556 \text{ eV/\AA}$ et pour $H(9\text{keV})/Al$ $S_e=7.188 \text{ eV/\AA}$ [SRI08]. Ces deux valeurs correspondent à des pertes d'énergie relatives de 12% et 16% respectivement. Nous allons voir dans le chapitre 4 que la condition pour voir un effet significatif de la perte d'énergie sur les distributions est $\Delta E/E > 30\%$.

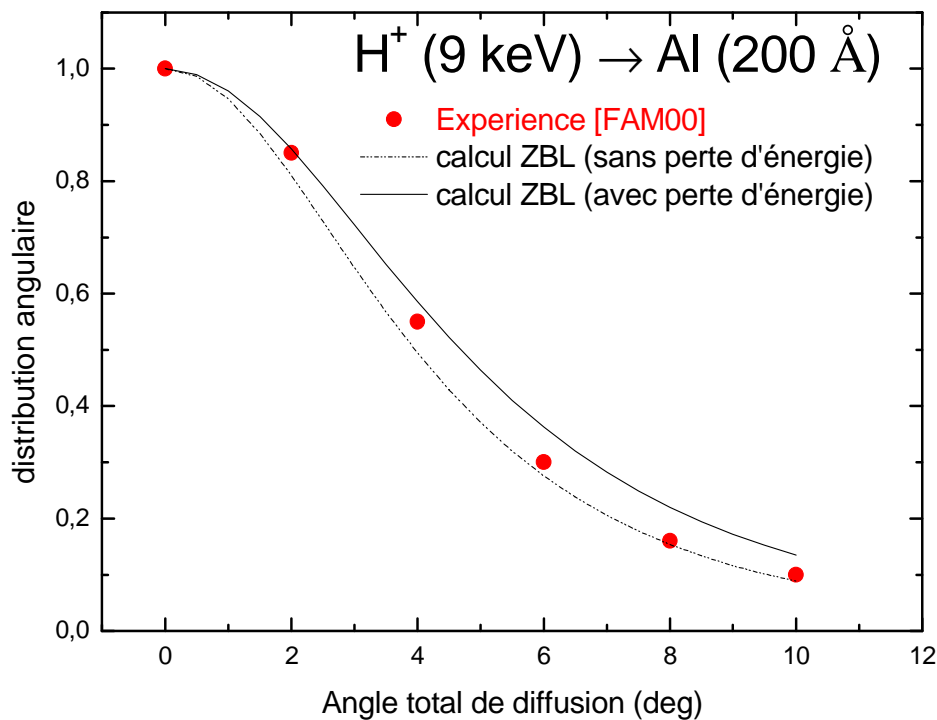


Figure 3.14. Distributions angulaires calculées d'ions H^+ de 9 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 200 Å comparées aux résultats expérimentaux [FAM00].

b) Cas d'une cible de carbone :

Sur la figure 3.15, nous présentons la distribution angulaire d'ions d'hydrogène transmis à travers une cible de carbone d'épaisseur 130 Å. Nous avons comparé nos résultats à ceux obtenus expérimentalement [CAN11].

Nous pouvons observer sur cette figure que nos résultats (sans perte d'énergie ou avec perte d'énergie) concordent avec les résultats de [CAN11]. L'effet de la perte d'énergie sur la fonction de la diffusion multiple est également très faible pour ce système.

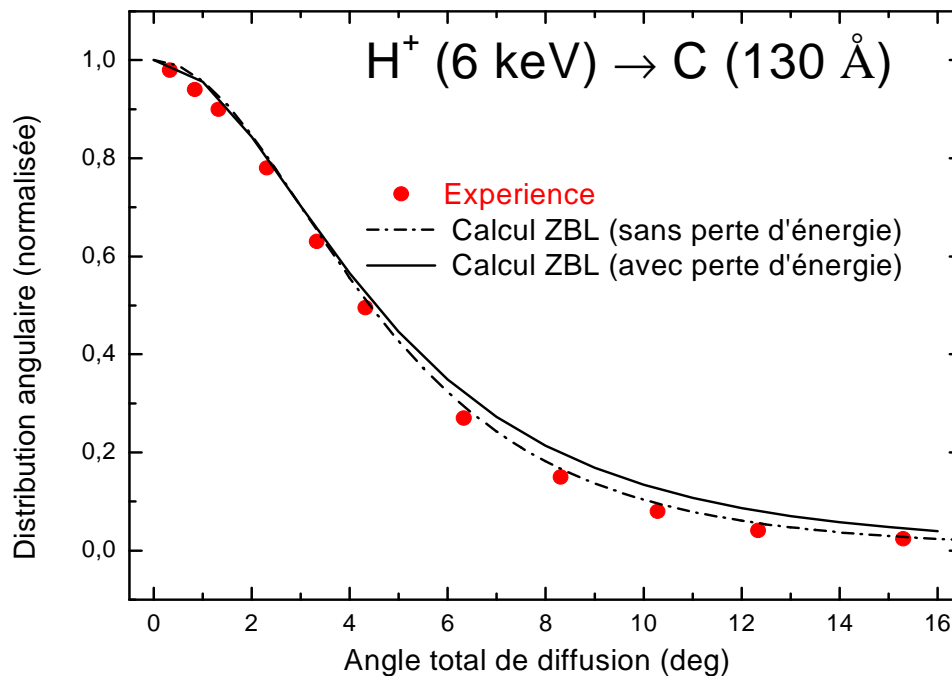


Figure 3.15. Distributions angulaires d'ions H^+ (6keV) transmis à travers une cible de carbone d'épaisseur 130 Å comparée aux résultats de [CAN11].

c) Cas des cibles d'argent et de cuivre:

Nous présentons maintenant les distributions angulaires d'ions d'hydrogène de 9 keV transmis à travers une cible d'argent d'épaisseur 250 Å (figures 3.16) et à travers une cible de cuivre de 157 Å (figure 3.17). Nous avons comparé nos résultats avec les résultats expérimentaux de [CAN10].

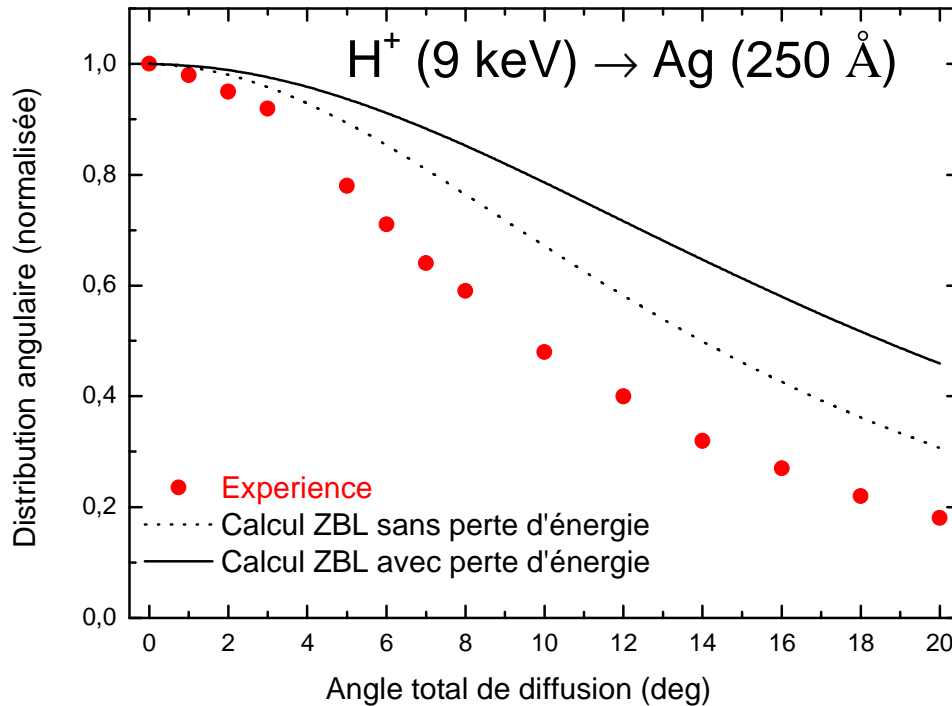


Figure 3.16. Distributions angulaires d'ions H^+ (9 keV) transmis à travers une cible Ag d'épaisseur 250 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CAN10].

Dans les deux cas, nous n'avons pas obtenu un bon accord. Les distributions calculées sont trop larges. Les auteurs de la référence [CAN10] ont utilisé un potentiel en puissance ($\sim r^{-n}$) qui correspond à $n=2.8$ pour reproduire ces résultats expérimentaux. Cette valeur de n implique un potentiel qui décroît trop vite par rapport aux autres potentiels usuels et est en accord avec le critère de Lindhard [LIN68] concernant le comportement des potentiels interatomiques à basse énergie, et pour des distances ion-atome cible très faibles ($r \approx a$, où a est le rayon d'écran). Dans cette gamme d'énergie et pour ces distances, le rôle de couches électroniques extérieures devient important. Le potentiel électrique sera largement modifié. Ce comportement a été observé dans les métaux de transitions (Cu, Ag, Au) [CAN10, CEL13]. D'autre part, ce désaccord peut être attribué à l'état de la cible qui n'est pas complètement amorphe. Les effets de canalisation influencent les distributions angulaires qui deviennent étroites. Le même désaccord a été observé dans le cas des atomes-cibles lourds par [AND74].

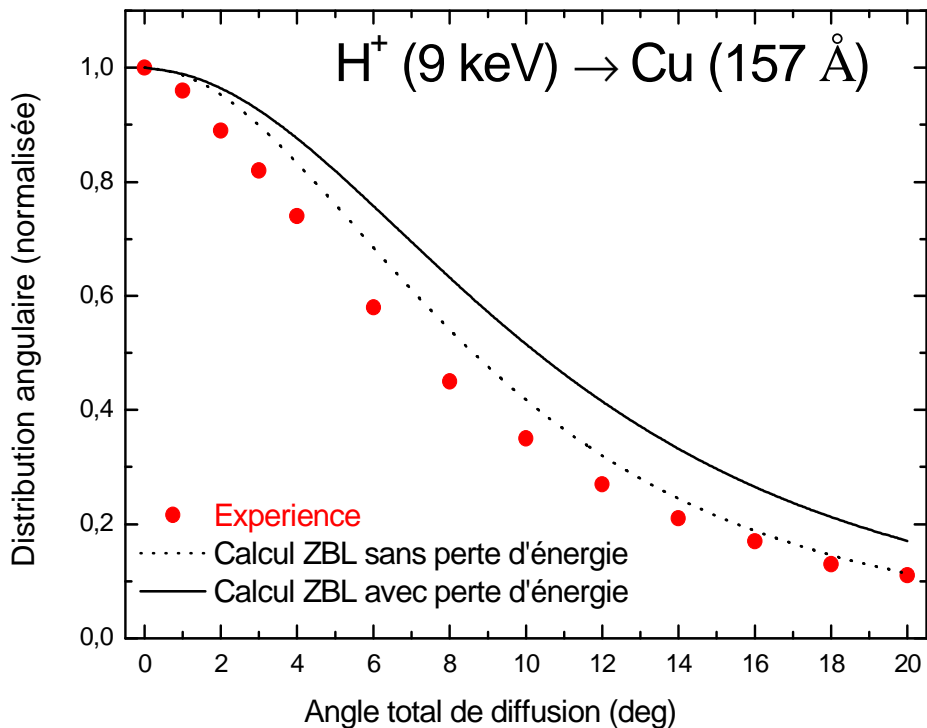


Figure 3.17. Distributions angulaires d'ions H^+ (9 keV) transmis à travers une cible de Cu d'épaisseur 157 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CAN10].

d) Cas d'une cible de palladium :

Une autre comparaison dans le cas d'ions H^+ transmis à travers une cible de palladium d'épaisseur 170 Å (figure 3.18) est présentée. Les valeurs expérimentales sont celles de [CEL13]. Dans ce cas, un grand désaccord a été observé entre nos calculs et l'expérience. En fait, par l'ajustement empirique des potentiels d'interaction avec les résultats expérimentaux, les auteurs de la référence [CEL13] ont utilisé le potentiel en puissance avec $n=2$, le potentiel de LJ et de TFM. Le rayon d'écran pour ces trois potentiels a été modifié par $0.45 a_F$, $0.74 a_F$ et $0,68 a_F$ respectivement (a_F est le rayon d'écran de Firsov [NAS96]). Le désaccord obtenu dans ce cas est attribué également aux raisons discutées dans le cas des cibles de Cu et d'Ag.

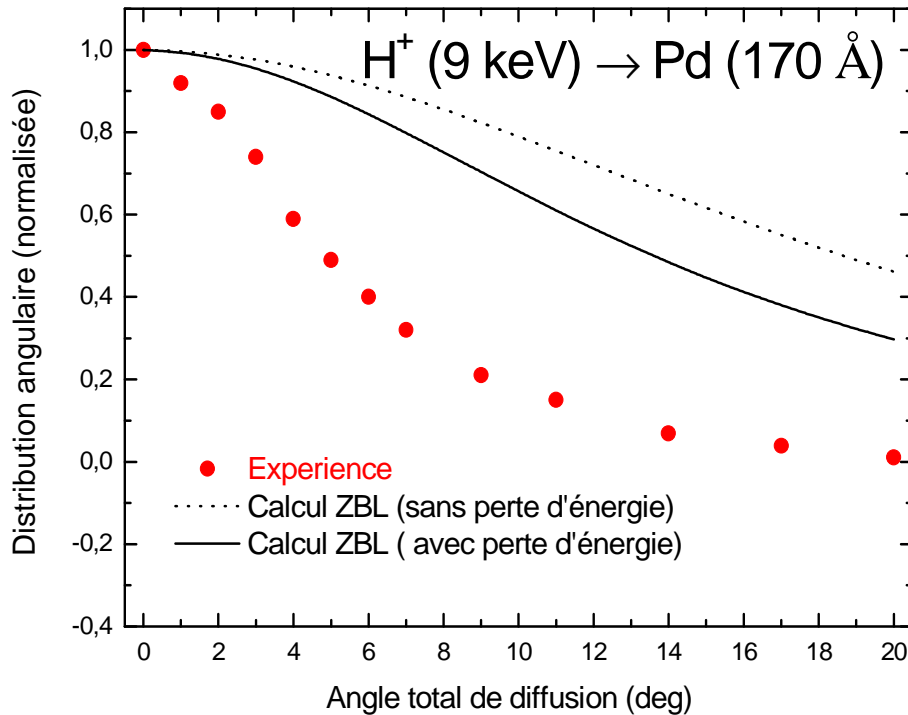


Figure 3.18. Distributions angulaires d'ions H^+ (9 keV) transmis à travers une cible de Pd d'épaisseur 170 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CEL13].

3.7.2. Comparaison des angles à mi-hauteur avec l'expérience :

On représente dans la figure 3.19 la variation de $\tilde{\alpha}_{1/2}$ obtenue dans cette étude en fonction de τ avec une comparaison aux résultats expérimentaux de plusieurs groupes [AND71, AND74, ANN88]. Les données de $\tilde{\alpha}_{1/2}$ pour $30 < \tau < 10^6$ sont celles de [ANN88], mesurées dans le cas d'ions de O^+ , K^+ , Ar^+ et Mo^+ transmis à travers des cibles solides et gazeuses, et sur une gamme d'énergie de 20 à 90 MeV/u. Pour $\tau < 20$, les valeurs de $\tilde{\alpha}_{1/2}$ sont celles de [AND71], en utilisant différents ions ($3 < Z_1 < 30$) d'énergie de 200 à 1000 keV transmis à travers des cibles de carbone. Pour $\tau < 15$, [AND74] ont mesuré $\tilde{\alpha}_{1/2}$ à partir des distributions angulaires d'ions ($1 < Z_1 < 18$) de 500 keV à travers des cibles de Se, Pd, Ag, Te, Ta_2O_5 . Ces résultats expérimentaux nous ont permis d'avoir une variation de τ sur six ordres de grandeur.

La figure 3.19 montre que les résultats obtenus avec le potentiel ZBL sont en très bon accord avec les divers résultats expérimentaux. Cet accord confirme la validité du choix du potentiel ZBL dans le traitement de la diffusion multiple. Cependant, les calculs présentés ici négligent les effets relativistes qui deviennent importants pour des énergies élevées d'ions ce qui correspond aux larges valeurs de τ . Des corrections doivent être apportées au modèle SW pour incorporer ces effets pour des larges valeurs de τ .

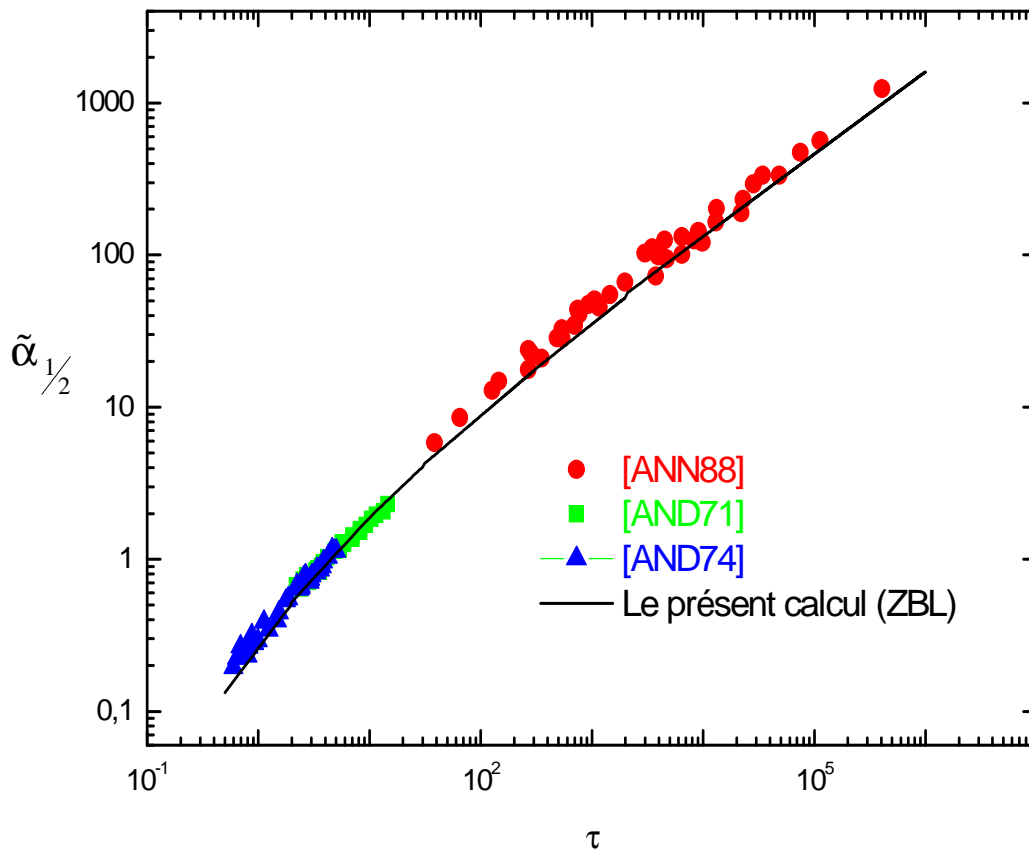


Figure 3.19. Variation de l'angle réduit à mi-hauteur $\tilde{\alpha}_{1/2}$ en fonction de l'épaisseur réduite.

3.8. Conclusion:

Dans ce chapitre, un modèle basé sur la théorie de transport a été utilisé pour calculer les distributions angulaires d'ions d'hydrogène et d'hélium transmis à travers différentes cibles solides. Des cibles minces ont été considérées pour assurer que la valeur du parcours des ions soit égale approximativement à l'épaisseur de la cible. Les résultats obtenus lors du calcul des distributions angulaires par le modèle SW et en utilisant le potentiel ZBL, permettent d'avoir un fit unique de l'angle réduit à mi-hauteur sur un large intervalle de l'épaisseur réduite. Ceci est en accord avec d'autres modèles théoriques qui donnent une forme unique de l'angle réduit à mi-hauteur en fonction de l'épaisseur réduite valable pour n'importe quelle combinaison ion-atome cible.

L'étude de l'effet de la perte d'énergie sur les distributions angulaires, montre que ces dernières deviennent plus larges. La perte d'énergie doit être considérée dans les calculs même pour des cibles très minces. La perte d'énergie inélastique des ions dans la cible constitue un terme dominant de la perte d'énergie totale pour les systèmes considérés et dans la gamme d'énergie utilisée dans cette étude.

La forme des distributions angulaires dépend aussi du potentiel utilisé pour décrire l'interaction projectile-atome cible. En effet, plus d'une seule combinaison (potentiel, perte d'énergie inélastique) peut mener à la même distribution angulaire pour une épaisseur donnée de la cible et pour différentes énergies. Mais si on considère d'autres valeurs de l'épaisseur, les distributions calculées ne sont plus identiques. Ce critère est important pour le choix de la bonne combinaison (potentiel, perte d'énergie) à partir des distributions expérimentales des ions transmis.

La comparaison de nos résultats à ceux obtenus expérimentalement montre un accord obtenu dans le cas des cibles de C et d'Al qui valide le choix du potentiel ZBL. L'effet de la perte d'énergie améliore relativement cet accord. Pour des cibles de Cu, Ag et de Pd, le modèle utilisé ne reproduit pas les résultats expérimentaux. Le désaccord est lié probablement à la structure de ces cibles qui n'est pas purement amorphe (la présence des micro-cristaux dans cette structure).

La comparaison sur un large intervalle d'épaisseurs réduites de nos valeurs de l'angle réduit à mi-hauteur à ceux obtenus expérimentalement confirme la validité du potentiel ZBL dans le traitement de la transmission d'ions.

CHAPITRE 4

**Approximation de l'énergie moyenne dans le
calcul des distributions angulaires d'ions
transmis à travers une cible solide**

4.1. Introduction:

L'effet de la perte d'énergie sur les distributions angulaires d'ions transmis à travers une cible solide décrit dans le chapitre 3, peut être introduit d'une manière plus simple dans le modèle de Sigmund et Winterbon (SW) [VAL94]. Cette approximation consiste à remplacer l'énergie initiale de l'ion par une valeur moyenne comprise entre son énergie initiale E_0 et son énergie finale E_{out} à la sortie du solide. C'est une méthode qui nous permet d'avoir un gain dans le temps de calcul exigé par le modèle de Valdès et Arista (VA) [VAL94]. Elle a été utilisée d'une part par plusieurs auteurs pour reproduire les résultats expérimentaux de la diffusion multiple [AND71, AND74, SID75-a]. D'autre part, la détermination de l'énergie moyenne est d'un intérêt pratique dans la détermination expérimentale du pouvoir d'arrêt pour des cibles épaisses [L'HO84, BLU80].

Dans ce chapitre nous présentons une étude systématique de cette méthode. Nous utilisons le modèle VA pour tester la validité de cette approximation.

4.2. Approximation de l'énergie moyenne dans le modèle de Sigmund:

Lorsqu'un ion d'énergie E_0 traverse une cible, il perd de l'énergie le long de son parcours. Son énergie à la sortie de cible E_{out} dépend du parcours ainsi que du pouvoir d'arrêt dans le milieu traversé. A partir de ces deux énergies E_0 et E_{out} , on peut définir une énergie moyenne \bar{E} entre E_0 et E_{out} . Si la perte d'énergie relative dans la cible est très faible, cette valeur moyenne de l'énergie peut être assimilée à la moyenne arithmétique [SCH84], donnée par :

$$\bar{E}_{ar} = \frac{E_0 + E_{out}}{2} \quad (4.1)$$

Plusieurs expressions de l'énergie moyenne \bar{E} ont été proposées [LIN68, HOG70, BLU80] :

$$\bar{E} = \frac{1}{3} E_0 [1 + \mu + \mu^{1/2}] \quad (4.2)$$

$$\bar{E} = \frac{1}{4} E_0 [1 - \mu^{1/2}]^2 \quad (4.3)$$

$$\bar{E} = \frac{3}{5} E_0 [1 - \mu^{2.5}] / [1 - \mu^{1.5}] \quad (4.4)$$

Avec $\mu = \frac{E_{out}}{E_0}$.

Schmaus et ses collaborateurs [SCH84] ont développé une procédure qui permet de calculer l'expression de l'énergie moyenne pour un potentiel en puissance ($\sim r^{1/m}$). Ils ont introduit un facteur d'échelle $\Lambda(x)$ pour que le changement effectué pour tenir compte de la perte d'énergie (équation 2.18 du chapitre 2) puisse s'écrire :

$$\exp\left[-N \int_0^x \sigma_0(k, E(x')) dx'\right] \rightarrow \exp\left[-Nx\sigma_0(k, E_0)[\Lambda(x)]^{2m}\right] \quad (4.5)$$

Tel que :

$$\Lambda(x) = \left\{ \frac{1}{x} \int_0^x dx' \left[\frac{E(x')}{E_0} \right]^{-2m} \right\}^{1/2m} = \frac{E_0}{E} \quad (4.6)$$

L'énergie moyenne est obtenue donc par :

$$\bar{E} = \frac{E_0}{\Lambda(x)} \quad (4.7)$$

Dans le cas où le pouvoir d'arrêt dépend de l'énergie suivant la loi $S(E) \sim E^s$, le facteur Λ s'écrit :

$$\Lambda(x) = \left[\frac{1 - \mu^{s+1-2m}}{(1 - \mu^{s+1})(1 - 2m/(s+1))} \right]^{1/2m} \quad \text{pour } \frac{2m}{s+1} \neq 1 \quad (4.8)$$

et

$$\Lambda(x) = \left[\frac{\ln(\mu^{-s-1})}{1 - \mu^{s+1}} \right]^{1/2m} \quad \text{pour } \frac{2m}{s+1} = 1 \quad (4.9)$$

Dans ce cas particulier et lorsque $m=0.5$ et $s=1$, on trouve :

$$\Lambda(x) = \frac{2}{1 + \mu} \quad (4.10)$$

Ce facteur correspond à la moyenne arithmétique de l'énergie donnée par l'équation 4.1. Dans plusieurs cas pratiques et pour reproduire les résultats expérimentaux [AND74, KNU76b], cette valeur moyenne a été utilisée avec succès pour tenir compte de l'effet de la perte d'énergie des ions.

L'utilisation de l'approximation de l'énergie moyenne dans la diffusion multiple a été étudiée également par Valdès et Arista [VAL94]. Il a montré que l'effet de la perte d'énergie peut être introduit d'une manière précise si on considère l'énergie moyenne :

$$\bar{E}_1 = \frac{1}{4} E_0 [1 + \mu^{1/2}]^2 \quad (4.11)$$

La détermination de l'énergie moyenne est un problème d'intérêt pratique puisqu'elle nous permet d'étudier l'effet de la perte d'énergie en utilisant le modèle de Sigmund. Cette grandeur permet également de convertir les angles réels de diffusion en angles réduits lors de l'étude des potentiels interatomiques à partir de résultats expérimentaux de la transmission d'ions.

4.3. Résultats et discussion:

Les distributions angulaires d'ions H^+ transmis à travers des cibles d'Al, Au et Ag ont été calculées dans le domaine des basses énergies (10 et 50 keV). En premier lieu, les calculs ont été effectués en considérant la perte d'énergie suivant le modèle VA cité dans le chapitre 3. Dans la deuxième étape, la perte d'énergie a été considérée dans les calculs en

utilisant le modèle SW avec l'énergie moyenne \bar{E}_1 (équation 4.11). Dans les deux cas, l'énergie de l'ion transmis à été calculée par l'équation 1.38 du chapitre 1. Les valeurs du pouvoir d'arrêt électronique ont été extraites à partir de SRIM 2008. La fonction de diffusion $f(t^{1/2})$ du potentiel de ZBL est utilisée.

Les distributions angulaires calculées dans le cas d'ions H^+ de 10 keV transmis à travers une cible d'aluminium et une autre d'argent d'épaisseurs 200\AA sont présentées sur la figure 4.1. Les résultats obtenus par l'approximation de l'énergie moyenne \bar{E}_1 sont présentées sur la même figure.

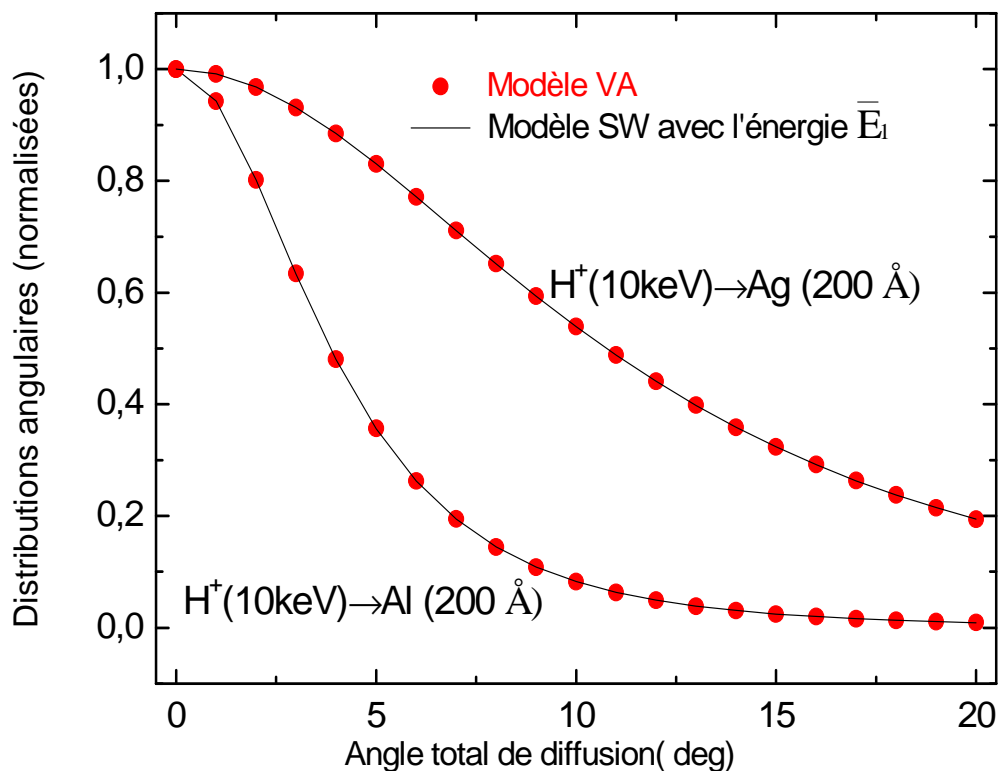


Figure 4.1. Distributions angulaires d'ions H^+ (10 keV) transmis à travers les cibles $\text{Ag}(200\text{\AA})$ et $\text{Al}(200\text{\AA})$, calculées par le modèle VA et par l'approximation de l'énergie moyenne (le modèle SW avec l'énergie moyenne \bar{E}_1).

Comme il a été montré précédemment [VAL94], les deux modèles donnent des distributions identiques pour les deux systèmes à cette énergie. La perte d'énergie relative dans ces cas est

$$\frac{\Delta E}{E_0} \approx 15\% .$$

Sur la figure 4.2, on présente les distributions angulaires de la diffusion multiple pour H^+ (50 keV)/Al (3000 Å) et H^+ (50 keV)/Ag (2000 Å). La perte d'énergie est considérée comme dans le cas précédent par le calcul exact d'une part, et par l'approximation de l'énergie moyenne \bar{E}_1 d'autre part. On peut clairement voir que l'énergie moyenne \bar{E}_1 ne donne pas la bonne représentation de la perte d'énergie pour des valeurs élevées de la perte d'énergie. La perte d'énergie relative considérée dans ces deux cas est :

$$\frac{\Delta E}{E} \approx 63\% \text{ pour H/Ag} \quad \text{et} \quad \frac{\Delta E}{E} \approx 70\% \text{ pour H/Al} .$$

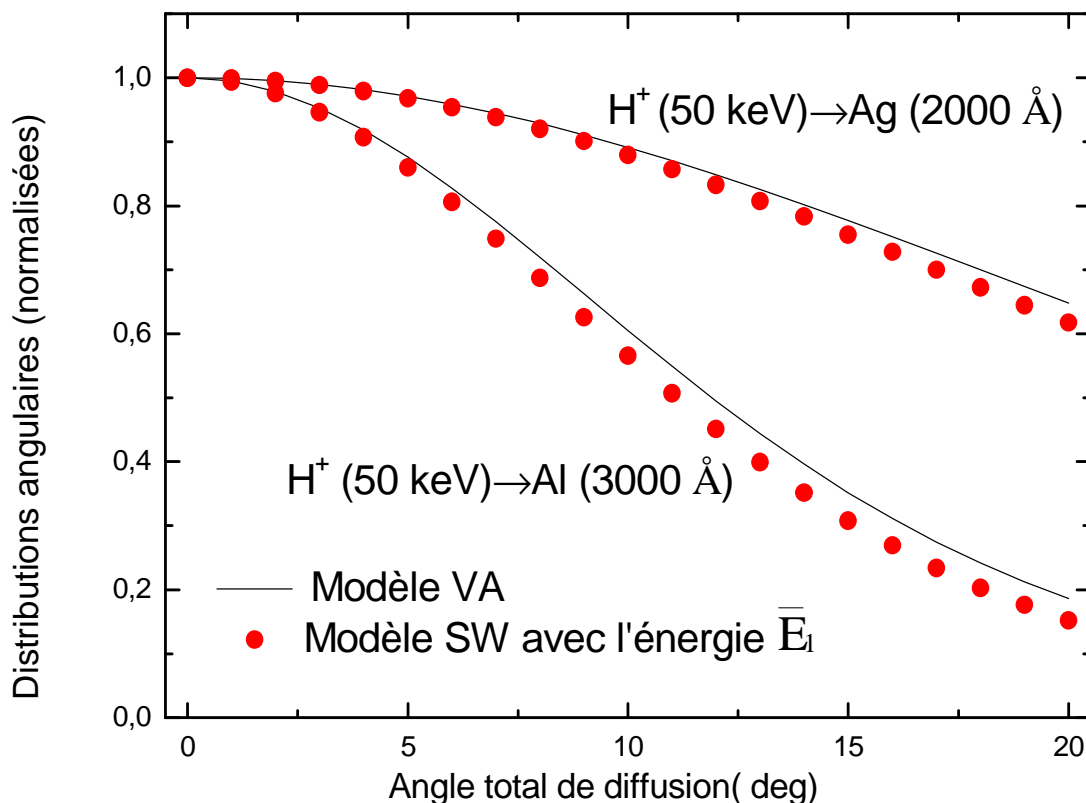


Figure 4.2. Distributions angulaires d'ions H^+ (10 keV et 50 keV) transmis à travers des cibles d'Al (3000 Å) et d'Ag (2000 Å), calculées par le modèle VA et par l'approximation de l'énergie moyenne (modèle SW avec l'énergie moyenne \bar{E}_1).

L'énergie moyenne \bar{E}_1 a été testée également par [VAL94]. Leurs résultats montrent qu'une différence significative entre les deux modèles commence à paraître lorsque $\frac{\Delta E}{E}$ est supérieure à 40%.

Afin de proposer une autre expression de l'énergie moyenne \bar{E}_{ex} qui donne un meilleur accord avec les résultats du modèle VA pour les différentes valeurs de $\frac{\Delta E}{E}$, nous avons calculé les distributions angulaires d'ions H^+ à travers des cibles Al, Ag et Au. Des protons d'énergie de 10 et de 50 keV ont été utilisées et plusieurs épaisseurs de cibles ont été considérées. Les calculs exacts des distributions ont été effectués d'abord par le modèle VA. Par la suite, la valeur de \bar{E}_{ex} est obtenue de manière à ce que la distribution angulaire correspondante, obtenue par le modèle SW soit similaire à celle obtenue par le modèle VA.

On présente dans la figure 4.3, la variation du rapport $\frac{\bar{E}_{ex}}{E_0}$ avec l'énergie relative $\frac{\Delta E}{E}$ obtenue dans les différents cas considérés dans cette étude. Le rapport de $\frac{\bar{E}_1}{E_0}$ est également présenté dans la même figure. On peut remarquer que la variation de $\frac{\bar{E}_{ex}}{E_0}$ est indépendante de la cible. Pour de faibles valeurs de la perte d'énergie relative ($\frac{\Delta E}{E} < 30\%$), un bon accord est obtenu entre \bar{E}_{ex} and \bar{E}_1 . Cependant, des déviations systématiques sont obtenues pour les larges valeurs de $\frac{\Delta E}{E}$.

A partir du fit des valeurs obtenues de \bar{E}_{ex} , nous proposons une nouvelle expression de la fonction de l'énergie moyenne [MEK16] (figure 4.3):

$$\bar{E}_{fit} = \frac{1}{15} E_0 (1 + 223\mu + \mu^2)^{1/2} \quad (4.12)$$

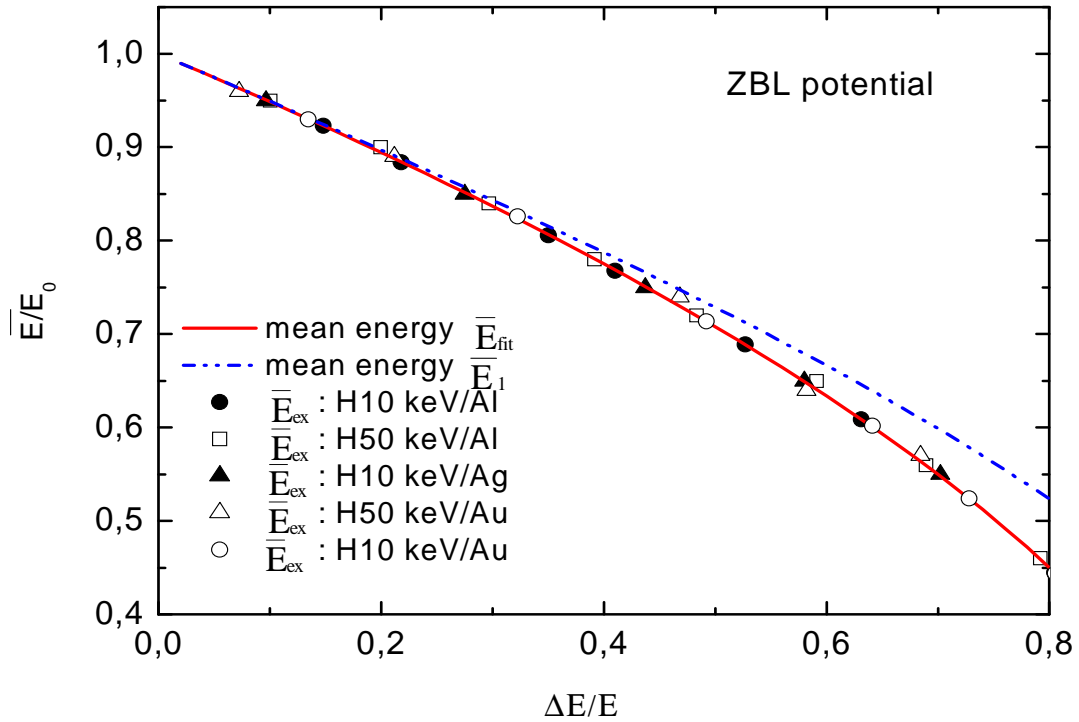


Figure 4.3. Variation du rapport entre l'énergie moyenne et l'énergie initiale E_0 en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ pour le potentiel ZBL.

La figure 4.4 représente des distributions angulaires calculées, en utilisant le modèle de Sigmund avec l'approximation de l'énergie moyenne \bar{E}_{fit} et le modèle de VA pour $H^+(50\text{keV})/\text{Ag}$ (2000 \AA) et $H^+(50\text{keV})/\text{Al}$ (3000 \AA). Il est clair que dans les deux cas, la fonction \bar{E}_{fit} donne la bonne représentation de la perte d'énergie.

Sur la figure 4.5, on présente la variation de l'angle à mi-hauteur $\beta_{1/2}$ (défini dans le chapitre 3) en fonction des valeurs de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$. Les angles $\beta_{1/2}(\bar{E}_{ex})$, $\beta_{1/2}(\bar{E}_{fit})$ et $\beta_{1/2}(\bar{E}_1)$ correspondent à la mi-hauteur de la distribution angulaire obtenue en utilisant les énergies moyennes \bar{E}_{ex} , \bar{E}_{fit} et \bar{E}_1 respectivement. Les résultats obtenus confirment que l'expression proposée de \bar{E}_{fit} est la fonction la plus appropriée si on veut utiliser l'approximation de l'énergie moyenne.

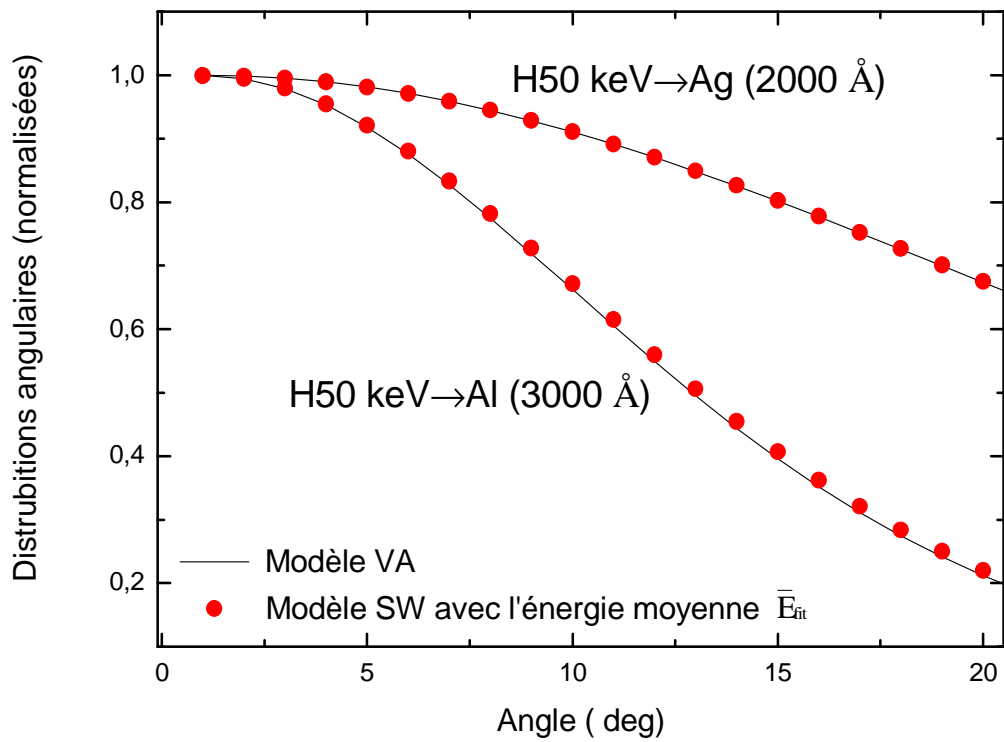


Figure 4.4. Distributions angulaires d'ions H^+ (10 keV et 50 keV) transmis à travers des cibles d'Al (3000 Å) et d'Ag (2000 Å), calculées par le modèle VA et par l'approximation de l'énergie moyenne (modèle SW avec l'énergie moyenne \bar{E}_{fit}).

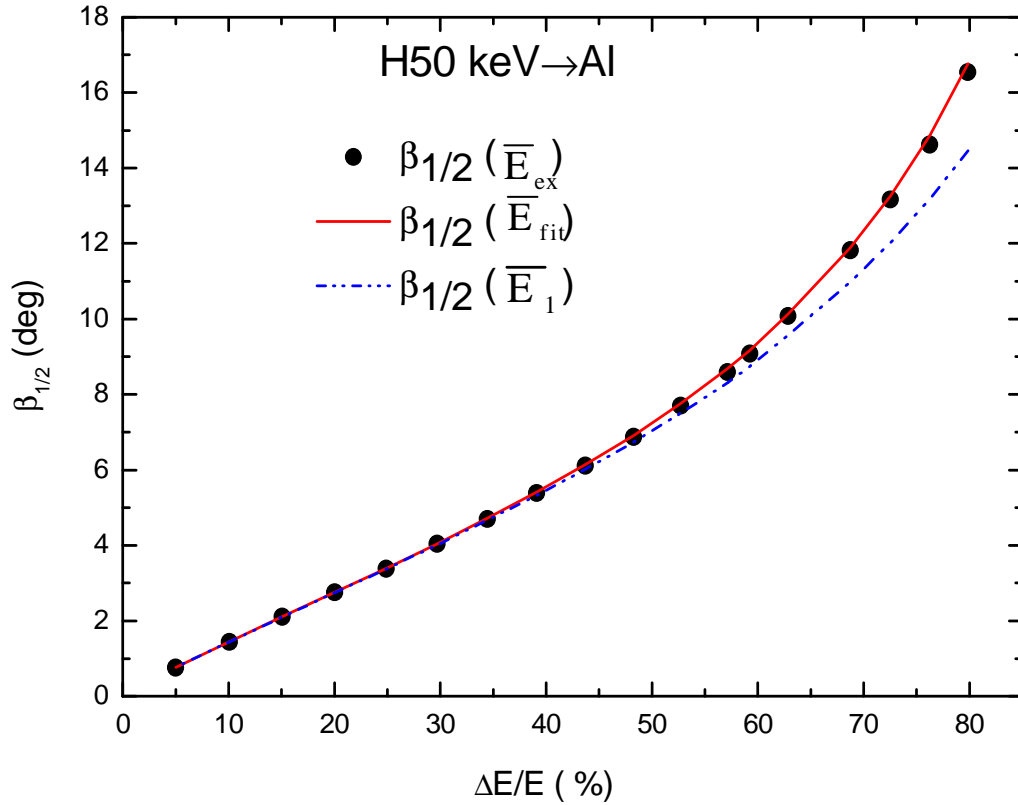


Figure 4.5. Variation des angles à mi-hauteur $\beta_{1/2}(\bar{E}_{ex})$ (modèle VA), $\beta_{1/2}(\bar{E}_{fit})$ (modèle SW avec l'énergie \bar{E}_{fit}) et $\beta_{1/2}(\bar{E}_1)$ (modèle SW avec l'énergie \bar{E}_1) en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$.

Pour tester la fonction de l'énergie moyenne \bar{E}_{fit} dans le modèle proposé par [SCH84], nous avons utilisé le système $H^+(50 \text{ keV})/Au$ avec une épaisseur de la cible variant entre 100 Å et 3000 Å. Pour chaque épaisseur x , la valeur correspondante de l'épaisseur réduite τ permet d'avoir le paramètre m à partir du tableau 3.1 (chapitre 3). La fonction $E(x')$ (énergie de l'ion E en fonction du parcours traversé dans la cible x') est déterminée par l'équation 1.40 (chapitre 1). La fonction d'échelle $\Lambda(x)$ est calculée par la suite en utilisant l'intégrale donnée par l'équation 4.6. La fonction de l'énergie moyenne (noté \bar{E}_s) est obtenue alors par l'équation 4.7.

La variation du rapport \bar{E}_s/E_0 en fonction de l'énergie relative $\Delta E/E$ obtenue dans ce cas est comparée au rapport de \bar{E}_{fit}/E_0 dans la figure 4.6. On peut voir clairement sur cette figure que l'accord est parfait entre ces deux fonctions. Ceci valide d'une part la fonction moyenne de l'énergie que nous venons de proposer et indique, d'autre part, l'importance des valeurs de m obtenues par le fit de la loi universelle $\tilde{\alpha}_{1/2} = f(\tau)$.

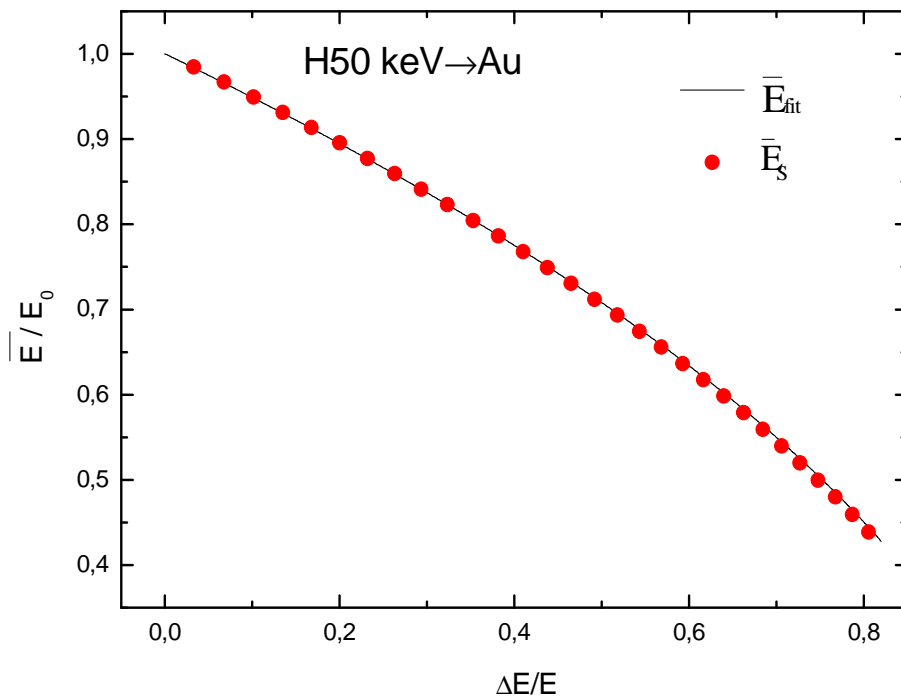


Figure 4.6. Variation du rapport entre l'énergie moyenne et l'énergie initiale E_0 en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ pour le potentiel ZBL. \bar{E}_{fit} est la fonction préposée dans cette étude et \bar{E}_s est la fonction calculée en utilisant le traitement de Schmaus [SCH84].

Les distributions angulaires calculées par \bar{E}_{fit} sont en bon accord avec le modèle VA si l'interaction entre l'ion incident et l'atome cible est décrite par le potentiel de ZBL. Dans le but de vérifier si l'expression de \bar{E}_{fit} est encore valide pour d'autres potentiels, nous avons calculé les distributions angulaires d'ions transmis en utilisant les potentiels TFM et LJ. Nous

présentons dans les figures 4.7 et 4.8, la variation du rapport \bar{E}_{ex}/E_0 avec la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ obtenue dans le cas des potentiels TFM et LJ respectivement. Les rapports \bar{E}_{fit}/E_0 et \bar{E}_1/E_0 sont également présentés sur la même figure.

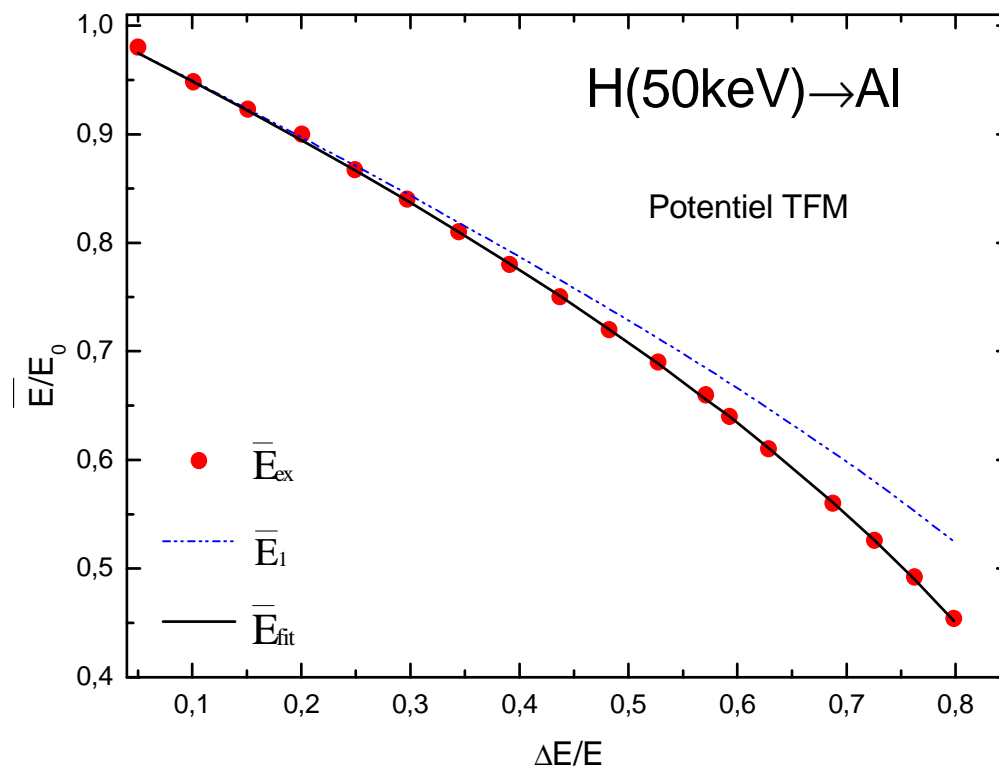


Figure 4.7. Variation du rapport entre l'énergie moyenne et l'énergie initiale E_0 en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ pour le potentiel TFM.

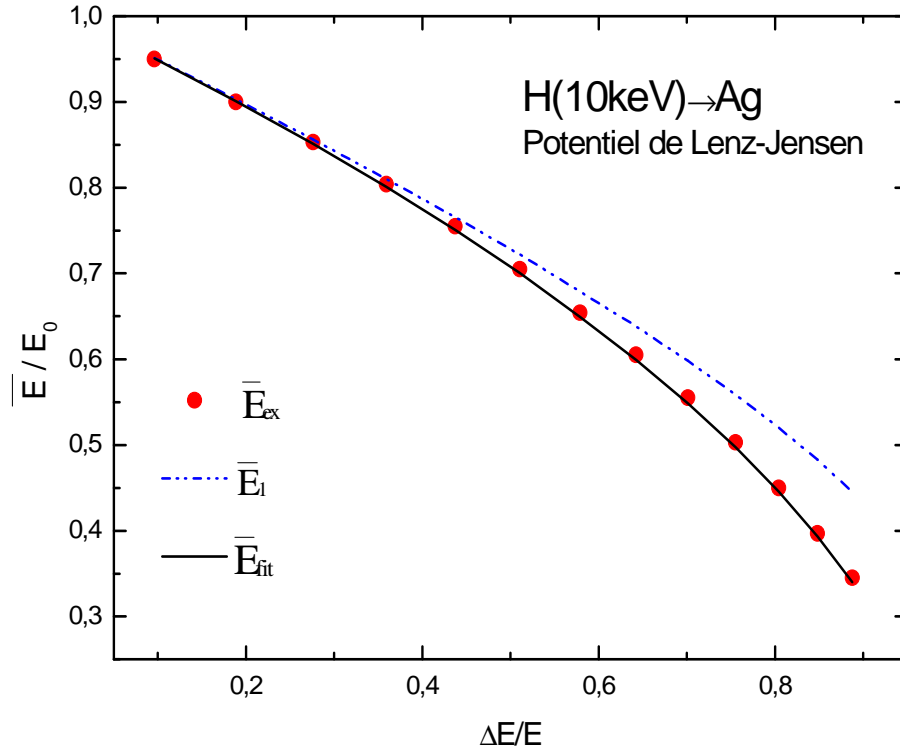


Figure 4.8. Variation du rapport entre l'énergie moyenne et l'énergie initiale E_0 en fonction de la perte d'énergie relative $\Delta E/E$ pour le potentiel LJ.

Ces figures montrent que l'expression de \bar{E}_{fit} proposée dans cette étude pour le potentiel ZBL décrit bien le comportement des valeurs exactes de l'énergie moyenne \bar{E}_{ex} pour les potentiels TFM et LJ, et pour une large gamme de la perte d'énergie relative. Cependant, l'énergie moyenne \bar{E}_1 peut être utilisée dans le cas des faibles valeurs de la perte d'énergie relative ($\Delta E/E < 30\%$).

L'approximation de l'énergie moyenne avec l'expression de \bar{E}_{fit} proposée dans cette étude est en excellent accord avec le modèle VA dans le domaine de basse énergie. Pour vérifier la validité de cette approximation sur une large gamme d'énergie, nous avons calculé les angles $\beta_{1/2}(\bar{E}_{ex})$, $\beta_{1/2}(\bar{E}_{fit})$ et $\beta_{1/2}(\bar{E}_1)$ pour des ions H^+ transmis à travers une cible d'Al, en fonction de l'énergie initiale des ions E_0 (E_0 variant de 10 keV à 2 MeV). Deux valeurs de

la perte d'énergie relative ($\Delta E/E=50\%$, $\Delta E/E=75\%$) ont été considérées. Les résultats obtenus sont présentés sur la figure 4.9.

Sur cette figure on peut remarquer que pour une perte d'énergie $\Delta E/E$ de 50%, les fonctions \bar{E}_{fit} et \bar{E}_1 peuvent être utilisées dans l'approximation de l'énergie moyenne sur toute la gamme d'énergie (de quelques keV à quelques MeV). Pour de larges valeurs de la perte d'énergie relative, la fonction \bar{E}_{fit} donne la bonne représentation de l'énergie moyenne pour $E_0 \leq 100 \text{ keV}$. Si l'énergie de l'ion est supérieure à 100 keV, l'énergie moyenne \bar{E}_1 est la plus appropriée.

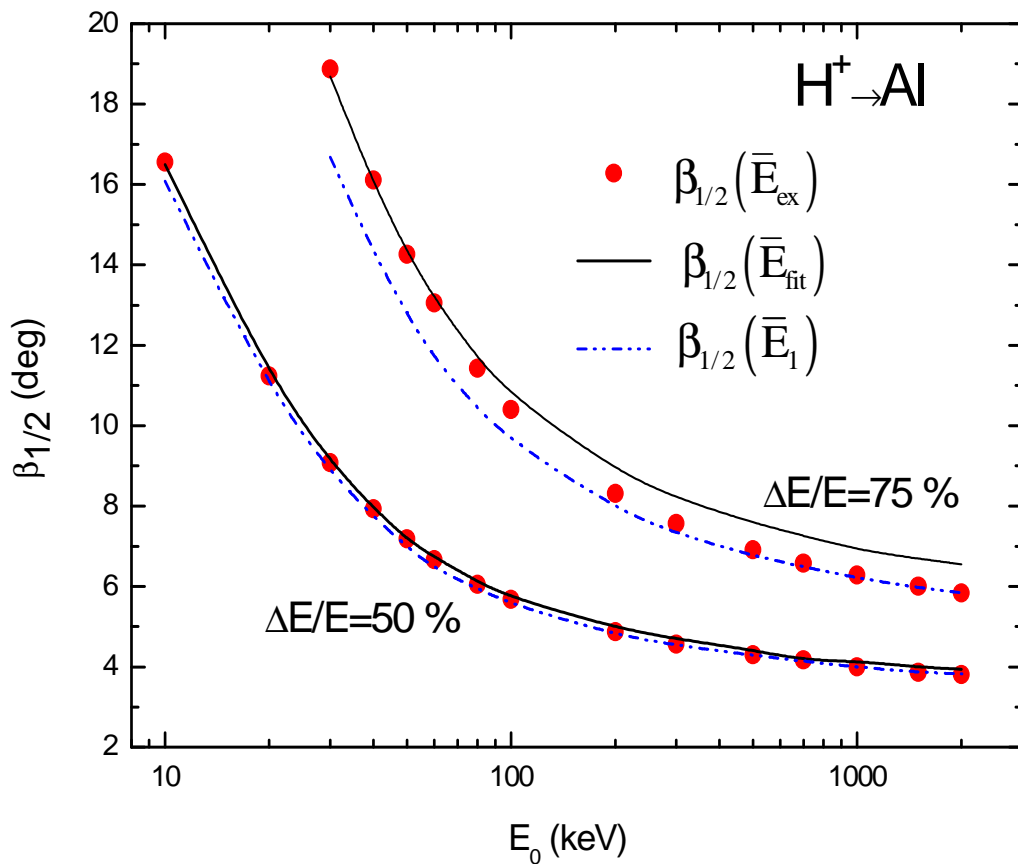


Figure 4. 9. Variation des angles à mi-hauteur $\beta_{1/2}(\bar{E}_{\text{ex}})$ (modèle VA), $\beta_{1/2}(\bar{E}_{\text{fit}})$ (modèle SW avec l'énergie \bar{E}_{fit}) et $\beta_{1/2}(\bar{E}_1)$ (modèle SW avec l'énergie \bar{E}_1) en fonction de l'énergie initiale de l'ion E_0 .

4.4. Conclusion:

Dans ce chapitre, deux modèles ont été utilisés pour calculer les distributions angulaires d'ions H^+ transmis à travers des cibles d'Al, Ag et Au. L'effet de la perte d'énergie a été pris en compte dans les calculs en utilisant deux approches différentes. Une nouvelle fonction de l'énergie moyenne a été proposée dans le domaine de basse énergie. Cette fonction est valable même pour de larges valeurs de la perte d'énergie relative. Elle est valable également pour tous les potentiels considérés dans cette étude (ZBL,TFM et LJ) et pour une énergie incidente des ions inférieure à 100 keV, ce qui permet d'estimer les effets de la perte d'énergie sur les distributions angulaires de la diffusion multiple par le modèle SW. Cette fonction est aussi en excellent accord avec la fonction théorique proposée par Schmaus [SCH84].

CHAPITRE 5

Dispersion latérale d'ions transmis à travers une cible solide

5.1. Introduction:

Les diffusions multiples entraînent la dispersion angulaire des ions mais elles tendent aussi à les dévier de leurs directions initiales en produisant un déplacement latéral. Or, l'étude de la dispersion latérale d'ions est une complémentarité nécessaire pour la compréhension des divers processus de la transmission d'ions à travers des solides. D'un point de vue théorique, la distribution angulaire est liée à la distribution latérale et l'une peut être déduite à partir de l'autre. Expérimentalement, la détermination d'une distribution angulaire d'ions transmis à travers une cible solide très mince est une tâche difficile. En revanche, la mesure expérimentale d'une distribution latérale à travers des cibles gazeuses est relativement simple. Pour ces cibles, les épaisseurs sont très minces ce qui représente une alternative pour étudier la diffusion multiple et indirectement le potentiel interatomique dans un milieu où la perte d'énergie des ions est quasi nulle.

Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats de la dispersion latérale d'ions transmis à travers une cible solide pour le potentiel ZBL. Nous allons tester la validité de la loi donnant la relation entre la distribution angulaire et la dispersion latérale. Une comparaison entre les résultats relatifs aux calculs de la dispersion latérale obtenus au cours de notre étude avec les résultats déduits expérimentalement est présentée. Nous allons étudier également l'effet de la perte d'énergie sur la dispersion latérale.

5.2. Calcul de la fonction de la dispersion latérale :

La fonction réduite de la dispersion latérale $g_1(\tau, \tilde{\rho})$ a été calculée en utilisant l'équation 2.36 du chapitre 2. Le potentiel de ZBL a été considéré. Sur les figures 5.1 et 5.2, on représente la variation de cette fonction avec le déplacement latéral réduit $\tilde{\rho}$ pour deux épaisseurs réduites : $\tau = 2$ et $\tau = 20$. Les fonctions correspondantes calculées pour le potentiel de TF par Marwick et al [MAR75] sont également présentées. On peut remarquer que les distributions pour les deux potentiels sont quasi-identiques pour $\tau = 20$. Une variation entre les distributions qui peut atteindre 20% est observée au voisinage de $\tilde{\rho} = 0$ pour $\tau = 2$.

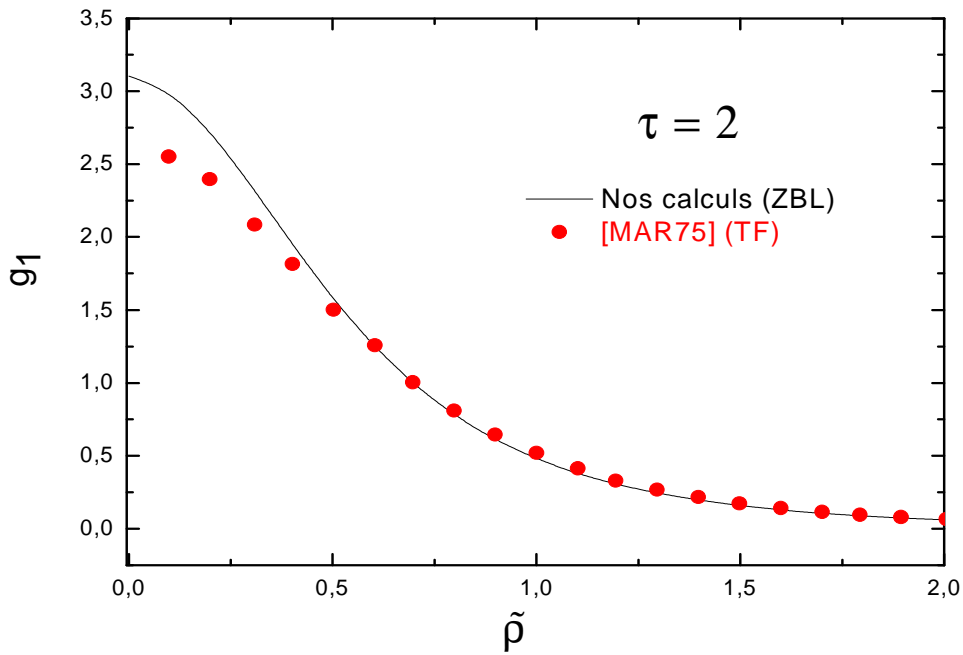


Figure 5.1. Variation de la fonction g_1 avec le déplacement réduit de $\tilde{\rho}$ pour $\tau = 2$ dans le cas du potentiel de ZBL. Les valeurs calculées de g_1 pour le potentiel de TF [MAR75] sont également présentées.

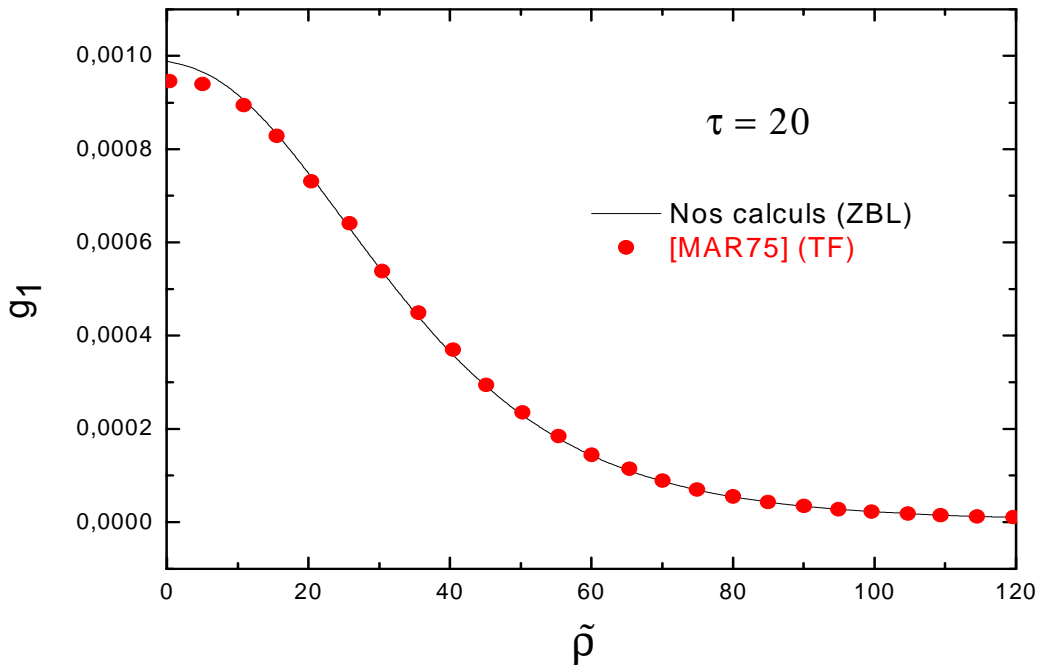


Figure 5.2. Variation de la fonction g_1 avec le déplacement réduit de $\tilde{\rho}$ pour $\tau = 20$ dans le cas du potentiel de ZBL. Les valeurs calculées de g_1 pour le potentiel de TF [MAR75] sont également présentées.

Les résultats obtenus lors du calcul de $g_1(\tau, \tilde{\rho})$, pour les potentiels de ZBL et de TF et pour différentes valeurs de τ (de 0.1 jusqu'à 1000), montrent que les distributions latérales sont identiques lorsque $\tilde{\rho} > \tilde{\rho}_{1/2}$ (où $\tilde{\rho}_{1/2}$ est le déplacement latéral à mi-hauteur). L'écart entre les valeurs de $g_1(\tau, \tilde{\rho})$ pour ces deux potentiels et pour $\tau < 1$ devient important au voisinage de $\tilde{\rho} = 0$. C'est le même comportement observé lors du calcul de la fonction de diffusion multiple $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ pour $\tau < 1$.

Comme nous l'avons signalé au chapitre 2, la loi d'échelle (équation 2.39) sert à établir une relation entre les fonctions $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ et $g_1(\tau, \tilde{\rho})$. Cette loi a été vérifiée numériquement par [MAR75] pour les potentiels TF et LJ. La fonction Γ correspondante a été calculée en utilisant l'équation 2.40, et en choisissant la valeur appropriée de m pour chaque valeur de l'épaisseur réduite τ .

Le paramètre m est obtenu selon [MAR75] par :

$$m = \left[-\tau \frac{d}{d\tau} \ln f_1(\tau, 0) \right]^{-1} \quad (5.1)$$

Cependant, les valeurs de m déduites à partir de la loi universelle ($\tilde{\alpha}_{1/2} = f(\tau)$) peuvent être utilisées.

Dans le but de vérifier la loi d'échelle pour le potentiel ZBL, les valeurs de $m(\tau)$ du tableau 3.1 ont été utilisées pour le calcul de la fonction Γ . Par la suite, la fonction $g_1(\tau, \tilde{\rho})$ est déduite à partir de la fonction $f_1(\tau, \tilde{\alpha})$ en utilisant l'équation 2.39.

Dans la figure 5.3, on présente la variation de la fonction Γ dans le cas du potentiel ZBL, et ce pour différentes valeurs de τ . Les résultats obtenus montrent que cette fonction varie lentement avec l'épaisseur réduite (τ de 1.8 à 2.2). Elle peut être approximée par $\Gamma = 2$ dans notre domaine d'énergie (τ entre 0.1 à 1).

Dans le tableau 4.1, la fonction $g_1^*(\tau, 0)$ calculée par loi d'échelle est comparée à la fonction $g_1(\tau, \tilde{\rho})$ calculée par l'expression exacte (équation 2.37). Nous pouvons ainsi remarquer que

les valeurs de $g_1(\tau, \tilde{\rho})$ et $g_1^*(\tau, 0)$ sont très proches pour $\tau \geq 1$. Une petite variation ($\Delta g_1 / g_1 \sim 5\%$) entre ces valeurs est observée lorsque τ est compris entre 0.1 et 1.

τ	0.1	1	10	100	1000
Γ	2.080	1.990	1.908	1.815	1.789
$g_1(\tau, \tilde{\rho})$	$6.850 \cdot 10^5$	42.114	$1.034 \cdot 10^{-2}$	$4.963 \cdot 10^{-6}$	$3.196 \cdot 10^{-9}$
$g_1^*(\tau, 0)$	$6.496 \cdot 10^5$	42.113	$1.068 \cdot 10^{-2}$	$4.949 \cdot 10^{-6}$	$3.199 \cdot 10^{-9}$

Tableau 5.1. Comparaison entre les valeurs de $g_1(\tau, 0)$ et $g_1^*(\tau, 0)$ pour différentes valeurs de τ .

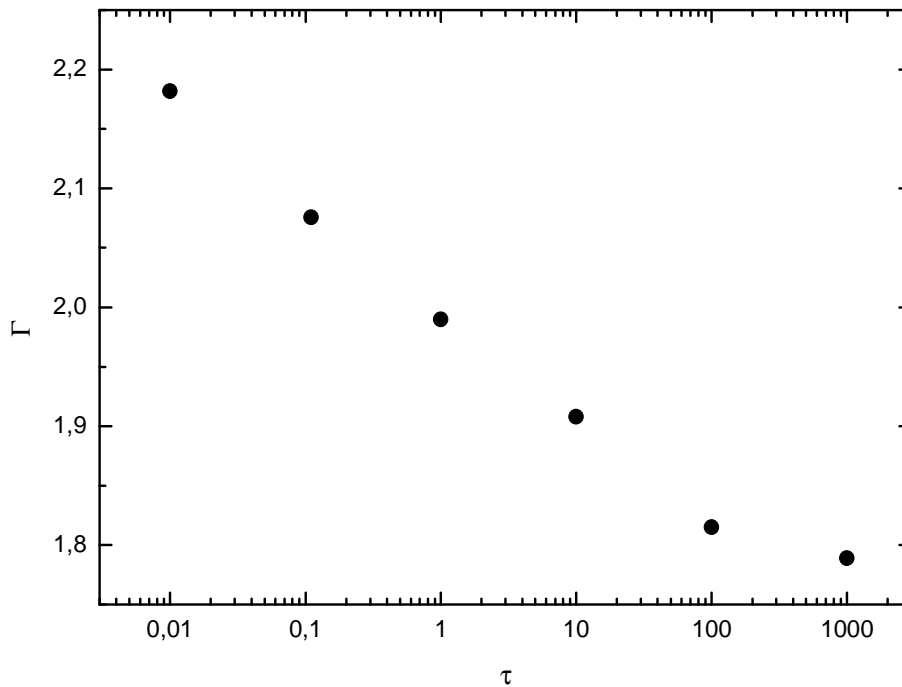


Figure 5.3. Variation de la fonction Γ en fonction de l'épaisseur réduite τ dans le cas du potentiel ZBL.

Sur les figures 5.4 et 5.5, on présente une comparaison des distributions latérales $g_1(\tau, \tilde{\rho})$ calculées à partir de l'expression exacte puis en utilisant la loi d'échelle pour $\tau=0.1$ et $\tau=1$. Nous pouvons voir à partir de ces deux figures que les distributions calculées par les deux méthodes sont quasi-identiques. Ceci confirme la validité de la loi d'échelle pour le potentiel ZBL. Une différence entre les distributions est observée au voisinage de $\tilde{\rho}=0$ dans le cas où τ

=0.1. Cette différence est probablement attribuée aux erreurs liées au fit des valeurs de $\tilde{\alpha}_{1/2}$ par la loi universelle dans l'intervalle des faibles valeurs de τ .

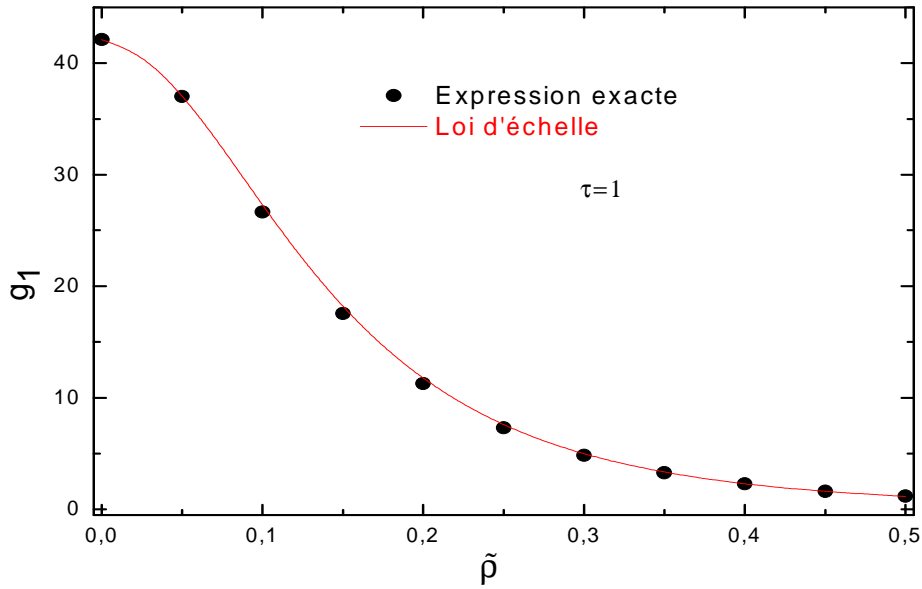


Figure 5.4. Variation de la fonction de dispersion latérale en fonction du déplacement latéral $\tilde{\rho}$ pour $\tau = 1$. Les calculs ont été effectués par l'expression exacte (équation 2.37) et par la loi d'échelle (équation 2.39).

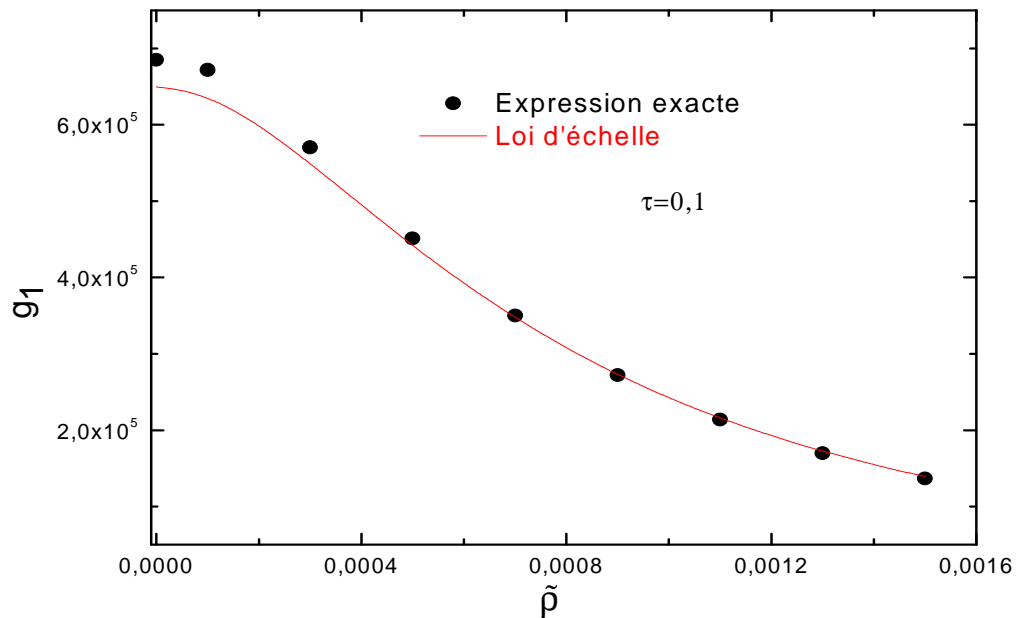


Figure.5.5. Variation de la fonction de dispersion latérale en fonction du déplacement latéral $\tilde{\rho}$ pour $\tau = 0.1$. Les calculs ont été effectués par l'expression exacte (équation 2.37) et par la loi d'échelle (équation 2.39).

5. 3. Comparaison à des résultats expérimentaux:

Notre traitement théorique de la dispersion latérale a été consacré à des cibles solides, mais il reste valable dans le cas des cibles gazeuses. Comme nous l'avons mentionné précédemment, l'étude expérimentale de la dispersion latérale d'ions à travers ce genre de cible est relativement simple. On ne trouve dans la littérature que les résultats expérimentaux de la dispersion latérale d'ions dans les gaz.

Sur la figure 5.6, on présente une comparaison entre la distribution latérale calculée dans le cas du potentiel de ZBL et à celle obtenue expérimentalement [SID75-b] dans le cas de la transmission d'ions He^+ (50keV) à travers une cible d'azote, d'épaisseur 0.8 cm et de densité $4.3 \cdot 10^{17}$ atomes/cm³. Cette figure montre un excellent accord entre les deux distributions. Le calcul dans ce cas a été effectué par l'expression exacte.

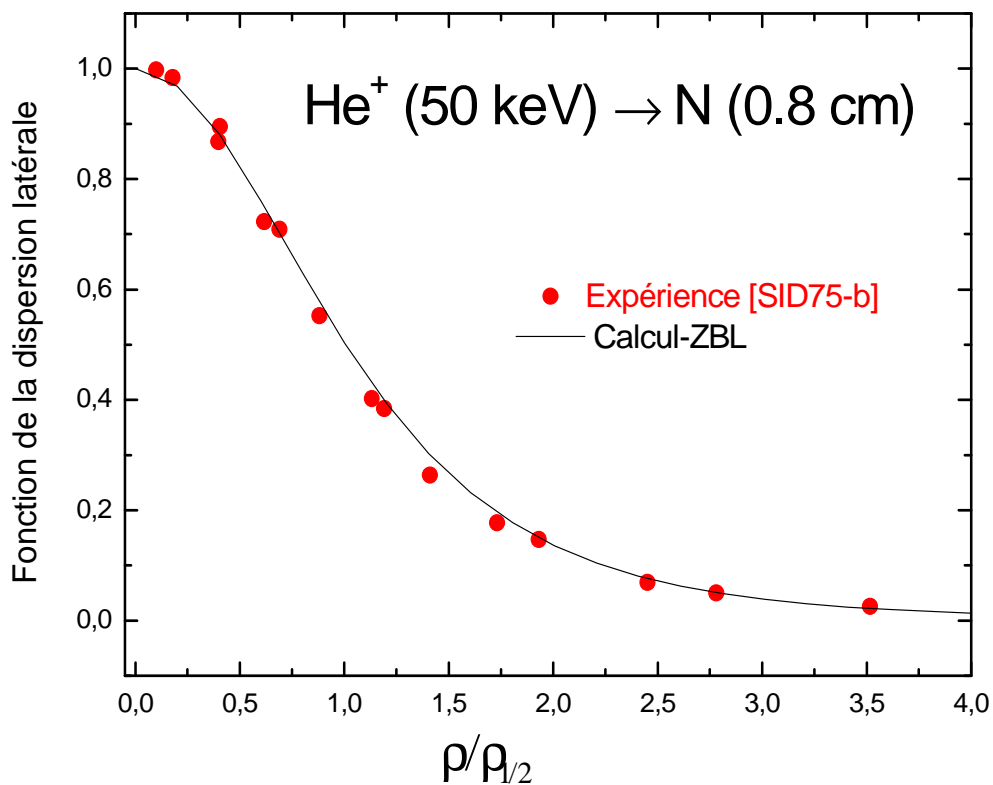


Figure 5.6. Distribution latérale d'ions He^+ transmis à travers une cible de N calculée pour le potentiel de ZBL et comparée aux résultats expérimentaux [SID75-b].

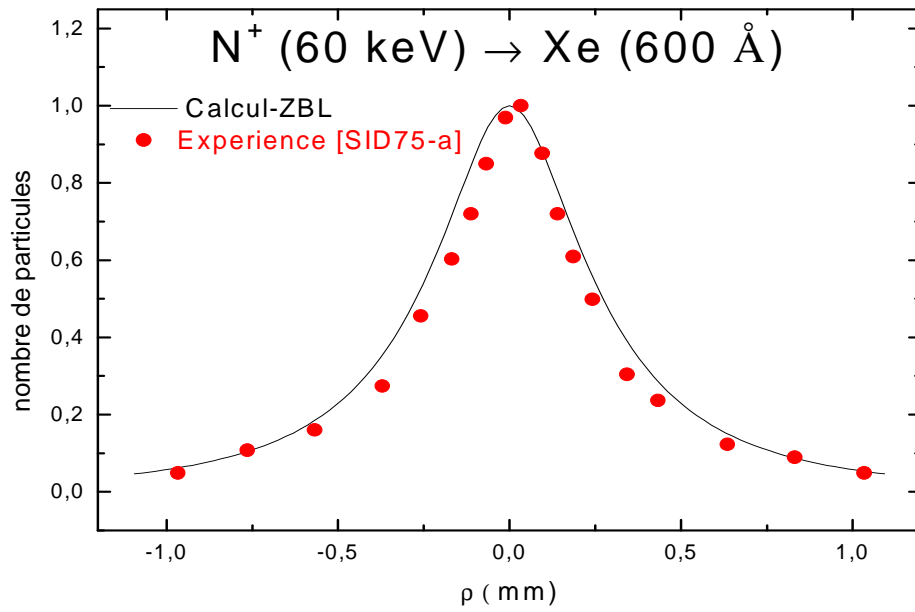


Figure 5.7. Distribution latérale d'ions N^+ transmis à travers une cible de Xe calculée pour le potentiel de ZBL et comparée aux résultats expérimentaux [SID75-a].

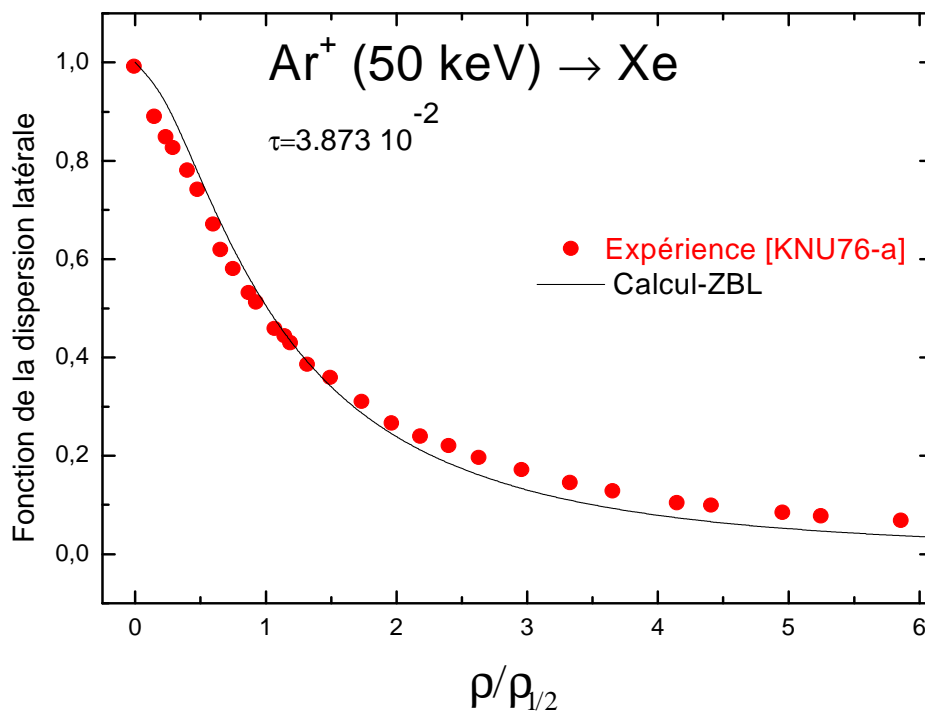


Figure 5.8. Distribution latérale d'ions Ar^+ transmis à travers une cible de Xe calculée pour le potentiel de ZBL et comparée aux résultats expérimentaux [KNU76-a].

Sur les figures 5.7 et 5.8, on montre deux distributions latérales d'ions à travers une cible gazeuse de Xe obtenues par le potentiel ZBL. Dans les deux cas, les calculs ont été effectués en utilisant la loi d'échelle.

Ces distributions ont été comparées avec les résultats expérimentaux de [SID75-a] pour le système N^+ sur le Xe d'épaisseur 1 cm et de densité $4.304 \cdot 10^{16}$ atomes/cm³ (figure 5.7), et de [KNU76-a] pour le système Ar^+ sur le Xe d'épaisseur réduite $\tau = 3.87 \cdot 10^{-2}$ (figure 5.8).

Ces deux figures montrent également un très bon accord.

Nous signalons ici que la perte d'énergie relative d'ions dans les trois cas cités précédemment ne dépasse pas 5%. La contribution de cet effet sur les distributions calculées est très faible.

En utilisant l'équation 2.41, le déplacement latéral réduit à mi-hauteur de la dispersion latérale $\tilde{\rho}_{1/2}$ peut être relié à l'angle réduit $\tilde{\alpha}_{1/2}$ par la relation :

$$\tilde{\rho}_{1/2} = \frac{\tau}{\Gamma} \tilde{\alpha}_{1/2} \quad (5.2)$$

En injectant l'expression de la loi universelle $\tilde{\alpha}_{1/2} = f(\tau)$ (équation 2.16) dans l'équation 5.2, nous avons déduit la relation suivante entre $\tilde{\rho}_{1/2}$ et τ :

$$\tilde{\rho}_{1/2} = \frac{C}{\Gamma} \tau^{1+1/2m} \quad (5.3)$$

Nous avons utilisé les valeurs de C et m extraites à partir du tableau 3.1 pour étudier la variation de $\tilde{\rho}_{1/2}$ en fonction de τ (équation 5.3). Cette variation pour $0.04 < \tau < 0.4$ est représentée dans la figure 5.9 et pour $0.3 < \tau < 10$ dans la figure 5.10. Ces valeurs sont comparées aux valeurs de $\tilde{\rho}_{1/2}$ déduites à partir de l'expression exacte. Les résultats expérimentaux des valeurs du déplacement latéral réduit à mi-hauteur en fonction de τ de divers ions ($1 < Z_1 < 19$) sur des cibles de Xe [SID75-a], et d'ions H^+ , He^+ , N^+ , Ne^+ et Ar^+ sur des cibles d'Ar, N_2 et Xe [SID75-b] sont respectivement présentés sur ces deux figures. La comparaison présentée dans ces deux cas montre un très bon accord entre les valeurs de $\tilde{\rho}_{1/2}$ obtenues par le calcul exact, par loi d'échelle et par l'expérience. Ceci confirme d'une part la validité du potentiel ZBL et l'importance de loi d'échelle d'autre part.

Les valeurs de la fonction de la diffusion multiple peuvent être utilisées avec une bonne précision pour déduire les distributions latérales.

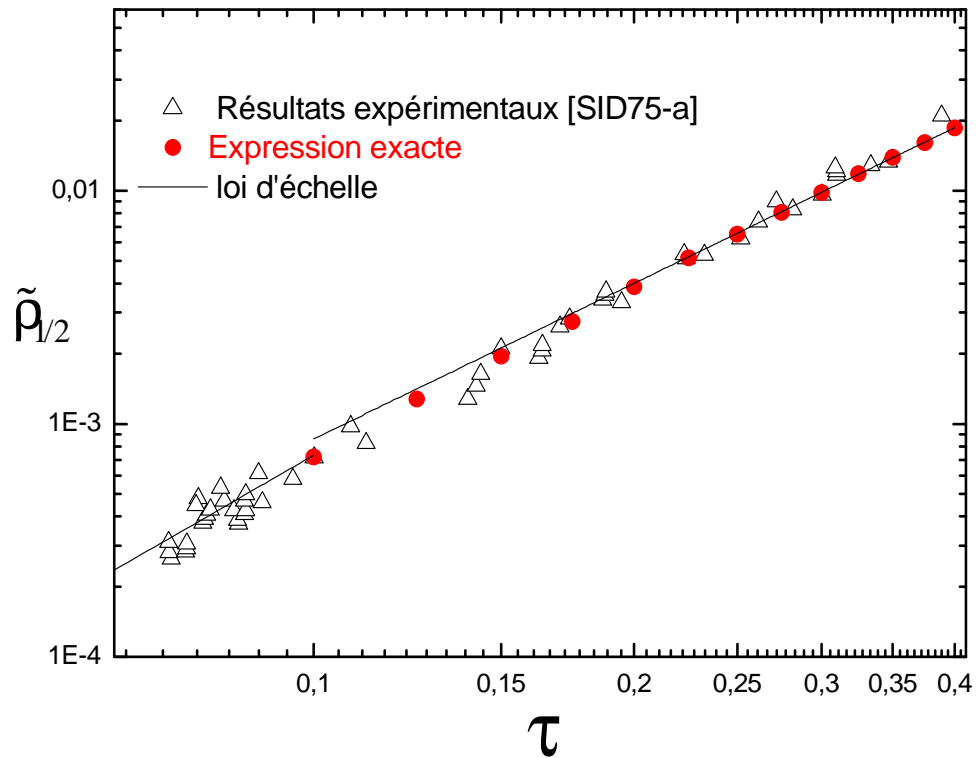


Figure 5.9. Variation de $\tilde{\rho}_{1/2}$ en fonction de τ : (•) : expression exacte, (—) : loi d'échelle et (Δ) : valeurs expérimentales [SID75-a].

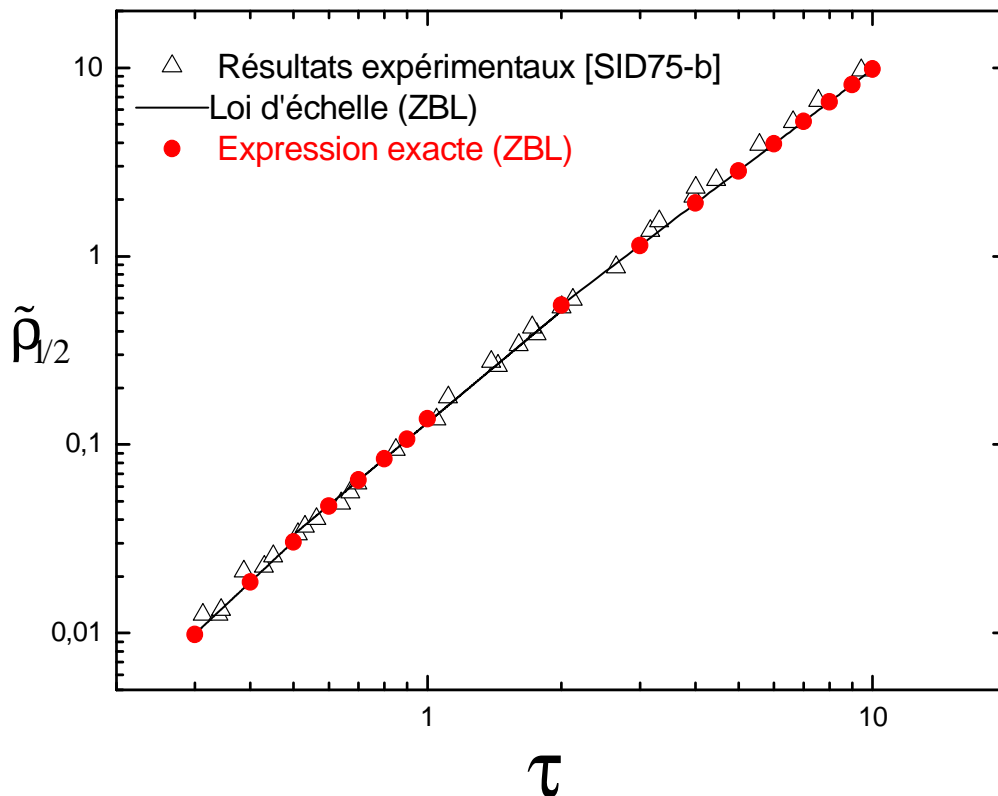


Figure 5.10. Variation de $\tilde{\rho}_{1/2}$ en fonction de τ : (•) : expression exacte, (—) : loi d'échelle et (Δ) : valeurs expérimentales [SID75-b].

5. 4. Influence de la perte d'énergie sur le calcul de la dispersion latérale :

Nous avons vu que la perte d'énergie a un effet sur les distributions angulaires même pour des cibles très minces. Pour étudier l'effet de la perte d'énergie sur les dispersions latérales d'ions transmis à travers une cible solide, on introduit d'abord la perte d'énergie dans le calcul de la distribution angulaire. Par la suite, la distribution latérale $g(x,\rho)$ est déduite à partir de l'expression de $F(x,\alpha)$ en effectuant le changement :

$$\rho \rightarrow \frac{x}{\Gamma} \alpha \quad (5.4)$$

Sur les figures 5.11 et 5.12, on présente la variation de la dispersion latérale $g(x,\rho)$ calculée avec et sans perte d'énergie dans le cas d'ions H^+ de 10 keV transmis à travers une cible d'aluminium de 300 Å et celui d'ions He^+ de 50 keV transmis à travers une cible d'argent de 600 Å respectivement.

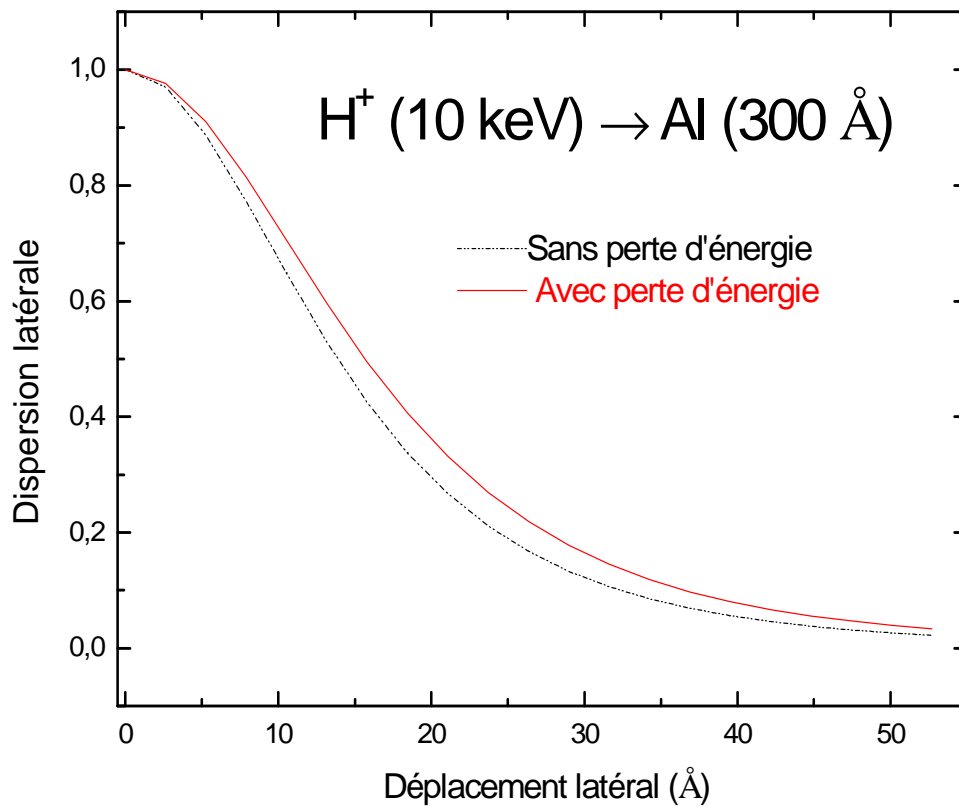


Figure 5.11. Distribution latérale d'ions H^+ (10 keV) transmis à travers une cible d'Al (300 Å) calculée avec et sans perte d'énergie.

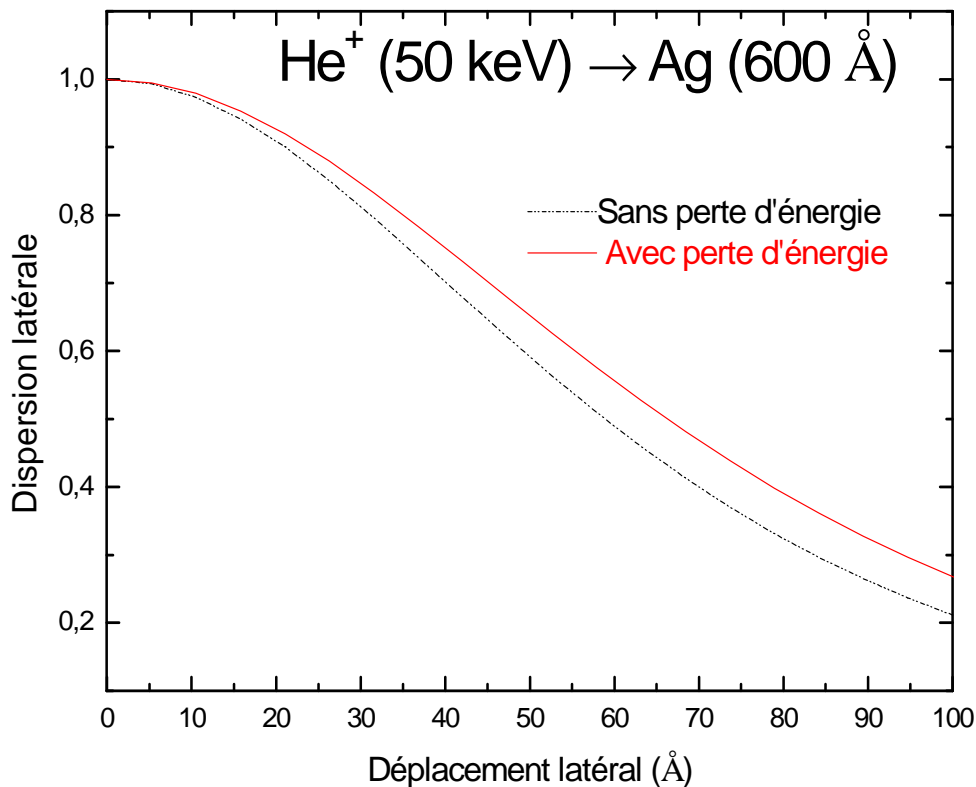


Figure 5.12. Distribution latérale d'ions He⁺ (50 keV) transmis à travers une cible d'Ag (600 Å) calculée avec et sans perte d'énergie.

Nous pouvons observer sur ces deux figures que la perte d'énergie a un effet sur les distributions latérales de la même façon que sur les distributions angulaires. Ces distributions deviennent plus larges.

On mentionne ici que nous avons négligé la variation du parcours L de l'ion suite à sa dispersion latérale ρ . Nous avons toujours gardé l'approximation $x \simeq L$.

L'effet de la perte d'énergie sur les distributions latérales peut être introduit également en utilisant l'approximation de l'énergie moyenne citée dans le chapitre 4. En fait, le calcul des distributions latérales en tenant compte la perte d'énergie nécessite un temps de calcul très important. On recommande par cette étude d'utiliser la loi d'échelle et l'approximation de l'énergie moyenne.

5.5. Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons calculé la dispersion latérale d'ions transmis à travers un milieu diffusif (un solide ou un gaz) pour le potentiel de ZBL. Nous avons calculé la fonction de la dispersion latérale en utilisant un calcul exact (le modèle de Marwick-Sigmund) et par un calcul approché (la loi d'échelle). Les résultats obtenus montrent qu'une distribution latérale peut être obtenue avec une très bonne précision à partir d'une distribution angulaire pour des épaisseurs réduites supérieures à un. La comparaison de nos résultats obtenus dans le cas du potentiel ZBL avec les résultats obtenus expérimentalement montre un très bon accord. Cet accord confirme la validité du potentiel d'interaction et de la loi d'échelle. Nous avons également étudié l'effet de la perte d'énergie sur les distributions latérales. Les résultats obtenus sont analogues aux résultats relatifs au calcul des distributions angulaires.

Conclusion

Dans ce travail, nous avons effectué une étude de la distribution angulaire des ions H^+ et He^+ de basse énergie transmis à travers des cibles solides. Nous avons utilisé une méthode basée sur la résolution de l'équation de transport, pour déterminer la fonction de diffusion multiple. En premier lieu, nous n'avons pas considéré la perte d'énergie d'ions dans les calculs. Les résultats obtenus pour le potentiel ZB montrent que la variation de l'angle réduit à mi-hauteur $\tilde{\alpha}_{1/2}$ de la diffusion multiple prend une forme universelle comme prévu par les modèles théoriques. Les valeurs ainsi obtenues de $\tilde{\alpha}_{1/2}$ concordent avec les résultats expérimentaux de plusieurs études, sur une large gamme d'énergie et pour différents systèmes ions-atomes cibles. Les paramètres obtenus lors du fit par la loi universelle des valeurs de $\tilde{\alpha}_{1/2}$, sur une large gamme d'épaisseurs réduites, sont d'une grande importance pour l'ajustement du potentiel ZBL par un potentiel en puissance. Cette méthode a montré largement son efficacité au cours de cette étude.

Nous avons montré par simulation Monte Carlo, que pour les systèmes considérés et pour notre gamme d'énergie, le parcours total des ions dans le solide a une valeur proche de celle de l'épaisseur de la cible. Nous avons par la suite apporté des corrections au modèle de Sigmund afin de tenir compte de la perte d'énergie dans le solide. Les distributions angulaires calculées d'ions transmis deviennent plus larges si on considère la perte d'énergie. De ce fait, les angles à mi-hauteur correspondants augmentent. Nous avons remarqué également que la perte d'énergie a un effet sur la fonction de diffusion multiple même pour des cibles très minces.

L'accord observé entre nos résultats et ceux obtenus expérimentalement pour les cibles Al et C, confirme la validité du potentiels utilisé dans notre simulation. Pour les métaux de transition (Ag, Cu, Pd, Au), nous n'avons pas obtenu un bon accord. Ceci est probablement dû à l'interaction projectile-atome cible qui est mal décrite par les potentiels utilisés. La canalisation des projectiles dans la cible peut être également à l'origine de ces distributions étroites. Il sera intéressant de compléter le présent travail par une étude détaillée sur ce problème.

L'effet du potentiel d'interaction sur les distributions angulaires a été étudié. Les calculs effectués montrent que les distributions angulaires des particules transmises sont très sensibles à la variation du potentiel.

Nous avons montré également que plusieurs combinaisons (potentiel, perte d'énergie inélastique) peuvent mener à la même distribution angulaire pour une épaisseur donnée de la cible et pour différentes énergies. Mais si on considère d'autres valeurs de l'épaisseur, les

distributions calculées ne sont plus identiques. Ce critère est important pour le choix de la bonne combinaison (potentiel, perte d'énergie) à partir des distributions expérimentales des ions transmis. Les résultats obtenus montrent également que les distributions possèdent une faible dépendance aux valeurs du pouvoir d'arrêt par rapport à leur dépendance à la variation du potentiel d'interaction. La méthode présentée dans cette étude est particulièrement intéressante dans la détermination du potentiel d'interaction.

Dans ce travail, l'approximation de l'énergie moyenne pour le calcul des distributions angulaires a été étudiée. Deux modèles ont été utilisés pour calculer les distributions angulaires d'ions H^+ transmis à travers des cibles d'Al, Ag et Au. L'effet de la perte d'énergie a été pris en compte dans les calculs en utilisant deux approches différentes. Une nouvelle fonction de l'énergie moyenne a été proposée dans le domaine des basses énergies, qui est valable même pour de larges valeurs de la perte d'énergie relative. Pour une perte d'énergie donnée, l'introduction de la valeur cette fonction à la place de l'énergie de l'ion incident dans le modèle de Sigmund permet de considérer de manière précise l'effet de la perte d'énergie. Cette approche porte l'avantage de diminuer considérablement le temps de calcul des distributions angulaires.

La dernière partie de ce travail a été consacrée à l'étude de la dispersion latérale d'ions. Les résultats obtenus pour le potentiel ZBL, montrent que loi d'échelle permet de réduire largement le temps de calcul des distributions latérales. Ces dernières peuvent donc être déduites à partir des distributions angulaires. Nous avons aussi donné dans cette partie, une expression simple qui permet de calculer les déplacements réduits à mi-hauteur. La comparaison avec les résultats expérimentaux montre un très bon accord. Cet accord confirme le choix du potentiel ZBL. Une méthode a été proposée dans cette étude pour tenir compte l'effet de la perte d'énergie sur les distributions latérales. Comme il a été observé dans les distributions angulaires, les distributions latérales deviennent plus larges sous l'influence de la perte d'énergie.

Références

- [AMS03] G. Amsel, G. Battistig, A. L'Hoir. Nucl. Instr. and Meth. B 201 (2003) 325
- [AND71] H. H. Andersen and J. Bottiger, Phys. Rev. B4 (1971) 2105.
- [AND74] H. H. Andersen, J. Bottiger, H. Knudsen, P. Moller Petersen and T. Wohlenberg, Phys. Rev. A10 (1974) 1568.
- [ANN88] R. Anne, J. Herault, R. Bimbot, H. Gauvin, G. Bastin G, F. Hubert. Nucl. Instr. and Meth. B 34 (1988) 295
- [ARC04] C. D. Archubi, C. Denton, J. C. Eckardt, G. H. Lantschner, F. Lovey, J. Valdés, C. Parra, F. Zappa, and N. R. Arista, Phys. Status Solidi b 241 (2004) 2389.
- [ARC05] C.D. Archubi, C.D. Denton, J.C. Eckardt, G.H. Lantschner, N.R. Arista, J.E. Valdés, J. Ferron. Nucl. Instr. and Meth. B 230 (2005) 53.
- [ARC06] C. D. Archubi, J. C. Eckardt, G. H. Lantschner, and N. R. Arista, Phys. Rev. A 73 (2006) 042901.
- [BAR72] M. Barat and H. Lichten Phys. Rev. A6 (1972) 221.
- [BER05] M.J. Berger, J.S. Coursey, M.A. Zucker, and J. Chang. ESTAR, PSTAR and ASTAR: Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons, and Helium Ions (version 1.2.3), 2005.
- [BET53] H.A. Bethe. Phys. Rev. 89 (1953) 1256.
- [BIE80] J.P. Biersack and L.G. Haggmark, Nucl. Instr. Meth. 174 (1980) 257.
- [BIE91] J.P. Biersack, E. Steinbauer, P. Bauer, Nucl. Instr. Meth. B 61 (1991) 77.
- [BLO33] F. Bloch, Z. Phys., 81(1933)363.
- [BLU80] R.Blume, W.Eckstein, H.Verbeek. Nucl. Instr. and Meth. 168 (1980) 57.
- [BOH48] N. Bohr. Mat Fys Medd Dan Vid Selsk 18 no. 8, 1–144
- [BOT21] W. Bothe, Z. f. Physik 5 (1921) 63.
- [CAN10] E. D. Cantero, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, F. C. Lovey, and N. R. Arista, Phys. Rev. A 81 (2010) 042902.
- [CAN11] E.D. Cantero, G.H. Lantschner and N.R. Arista, Eur. Phys. J. D 65 (2011) 397.
- [CEL13] C. Celedon, E. A. Sanchez, M. S. Moreno, N. R. Arista, J. D. Uribe, M. Mery, J. E. Valdés, and P. Vargas, Phys. Rev. A 88, 012903 (2013)
- [CRU82] S.A. Cruz, E.V. Alonso, R.P. Walker, D.J. Martin and D.G. Armour. Nucl. Instr. and Meth. 194 (1982) 659.

- [DRA06] M. Draxler, M. Walker, and C. F. McConville. Nucl. Instr. and Meth. B 249 (2006) 812.
- [ECK91] W. Eckstein, Computer Simulations of Ion-Solid Interactions, Springer, Heidelberg, 1991.
- [ECK95] V. Eckstein, Computer Modeling of Particle-Surface Interaction, Mir, Moscow, 1995.
- [EFK75] B. Efken, D. Hahn, D. Hilscher, G. Wüstefeld. Nucl. Instr. and Meth. 129 (1975)219
- [FAM00] M. Fama, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, C. D. Denton, and N. R. Arista, Nucl. Instr. and Meth. B 164-165 (2000) 241.
- [FAM02] M. Fama, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, N. R. Arista, J. E. Gayone, E. Sanchez, and F. Lovey. Nucl. Instr. and Meth. B 193 (2002) 91.
- [GOE13] D. Goebel, K. Khalal-Kouache, D. Roth, E. Steinbauer and P. Bauer, Phys. Rev. A 88 (2013) 032901.
- [GOE15] D. Goebel, B. Bruckner, D. Roth, C. Ahamer, P. Bauer. Nucl. Instr. and Meth. B 354 (2015) 3.
- [GOL02] H. Goldstein, C. Pole, and J. Sakfo. Classical Mechanics Addison-Wesley, San francisco, 3rd edition, 2002.
- [GOU40] S. A. Goudsmit, J. L. Saunderson, Phys. Rev.57 (1940) 24 et Phys. Rev. 58 (1940) 36.
- [HEI76] W. Heiland, E. Taglauer, M.T. Robinson. Nucl. Instr. and Meth. B 132 (1976) 655.
- [HUB90] F. Hubert, R. Bimbot, H. Gauvin, Atom. Data Nucl. Data Tables 46 (1990) 1.
- [HOG70] G. Hogberg, H. Norden, H. G. Berry. Nucl. Instr. and Meth. 90 (1970) 283.
- [HOO75] B.W. Hooton, J.M. Freeman, P.P. Kane. Nucl. Instr. and Meth. (1975) 29.
- [JAR89] P. Jaracz and S. Mirowski. Nucl. Instr. and Meth. B 43(1989) 210.
- [KHA07-a] K. Khalal-Kouache, **A. Mekhtiche**, A.C. Chami, M. Boudjema. Surface and Coatings Technology 201 (2007) 8420.
- [KHA07-b] K. Khalal-Kouache, A.C. Chami, M. Boudjema, C. Benazeth. Nucl. Instr. and Meth. B258 (2007) 40.
- [KHA08] K. Khalal-Kouache, B. Aissous, **A. Mekhtiche**, A.C. Chami. Nucl. Instr. and Meth. B266 (2008) 714.
- [KAN83] E.P. Kanter . Phys. Rev. A28(1983)1401.
- [KNU76-a] H. Knudsen, F. Besenbacher, J. Heinemeier, and P. Hvelplund. Phys. Rev. A 13(1976) 2095.
- [KNU76-b] H. Knudsen, H. H. Andersen, Nucl. Instr. and Meth. 136 (1976) 199.

- [LAN60] G. H. Lane, E. Everhart. Phys. Rev. 120 (1960) 2064.
- [LEN32-a] W. Lenz, Z. Phys. 77 (1932) 713.
- [LEN32-b] H. Jensen, Z. Phys. 77 (1932) 722.
- [LEW50] H.W. Lewis, Phys. Rev.78 (1950) 526.
- [L'HO84] A. L'Hoir, D. Schmaus. Nucl. Instr. and Meth. B4 (1984) 1.
- [LIN63] J. Lindhard, M. Scharff and H.E. Schiott, Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd vol 33 n°14 (1963) 1.
- [LIN64] J. Lindhard, A. Winther, Mat.-Fys. Medd. K. Dan. Vidensk. Selsk 34 (4) (1964).
- [LIN68] J. Lindhard, V. Nielsen and M. Scharff, Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd. vol 36, n°10 (1968) 1.
- [MAR75] A. D. Marwick, P. Sigmund. Nucl. Instr. and Meth. 126 (1975) 317.
- [MAS52] H.S.W. Massey, E.H.S. Burhop, Electronic and Ionic Impact Phenomena, Oxford University Press, London, 1952.
- [MAS80] E.S. Mashkova, V.A. Molchanov, Middle Energy Ion-surface Scattering, Atomizdat, Moscow, 1980.
- [MEK07] 'Distribution angulaire d'ions de basse énergie transmis à travers une cible solide', **A. Mekhtiche** et K. Khalal-Kouache. Conférence Internationale sur la Physique et ses Applications CIPA'2007, USTO-MB, 2007, Oran, Algérie.
- [MEK15] **A. Mekhtiche**, K. Khalal-Kouache, Nucl. Instr. and Meth. B 354 (2015) 151.
- [MEK16] **A. Mekhtiche**, K. Khalal-Kouache, Nucl. Instr. and Meth. B 382 (2016) 32.
- [MEY71] L. Meyer, Phys. Stat. Sol. (b) 44 (1971) 253.
- [MOL47] G. Moliere, Z. Naturforsch. 2a (1947) 133.
- [MOL48] G. Molitre, Z. Naturforsch. 3a (1948) 78
- [MOT65] N. F. Mott and H. S. W. Massey, The Theory of Atomic Collisions (Oxford University Press, London, 1965), third edition.
- [NAS96] M. Nastasi, J. W. Mayer, and J. K. Hirvonen, Ion-Solid Interactions: Fundamentals and applications (Cambridge University Press, Cambridge, 1996).
- [NOR70] L.C. Northcliffe, R.F. Schilling, Nucl. Data Tables A 7 (1970) 233.
- [O'CO77] D.J. O'Connor, R.J. MacDonald, Radiat. Eff. 34 (1977) 247.
- [O'CO86] D.J.O'Connor, J.E. Biersack, Nucl. Instrum. Methods B 15 (1986) 14.
- [OEN83] O.S. Oen, Surf. Sci. 131 (1983) L407
- [PAR87] E.S. Parilis, N. Yu. Turaev, F. F. Umarov, and S. L. Nizhnyaya, The Theory of medium energy atoms by solid surface, FAN, Tashkent, 1987.
- [PAU12] H. Paul, Nucl. Instr. Meth. B 273 (2012) 15.

- [PAU13] H. Paul, D. Sánchez-Parcerisa, Nucl. Instr. Meth. B 312 (2013) 110.
- [PAU] H. Paul, MSTAR – Stopping power of matter for ions. Available from: < <https://www-nds.iaea.org/stopping/>
- [ROB74] M.T. Robinson, I.M. Torrens, Phys. Rev. B 9 (1974) 5008.
- [ROS41] B. Rossi and K. Greisen, Rev. Mod. Phys. 13 (1941) 240.
- [SCO49] W. T. Scott. Phys. Rev. 97 (1949)12.
- [SCO52] W.T. Scott. Phys. Rev. 85(1952) 245.
- [SCO63-a] W.T. Scott. Rev. Mod. Phys. 35 (1963) 231.
- [SCO63-b] W.T. Scott, Rev. Mod. Phys. 35 (1963) 335.
- [SCH82] D. Schmaus ,A. L'Hoir, C. Cohen. Nucl. Instr. and Meth. 194 (1982) 81.
- [SCH84] D. Schmaus, A. L'Hoir. Nucl. Instr. and Meth. B 4 (1984) 317.
- [SID75-a] G. Sidenius and N. Andersen. Nucl. Instr. and Meth. 128 (1975) 271.
- [SID75-b] G. Sidenius and N. Andersen. Nucl. Instr. and Meth. 131 (1975) 387.
- [SIG74] P. Sigmund, K.B. Winterbon. Nucl. Instr. and Meth. 119 (1974) 541.
- [SIG75] P. Sigmund, K.B. Winterbon. Nucl. Instr. and Meth. 125 (1975) 491.
- [SIG78] P. Sigmund, Heinemeier, E. Besenbacher, P. Hvelplund, H. Knudsen. Nucl. Instr. and Meth. 150 (1978) 221.
- [SNY49] H. Snyder and W.T. Scott, Phys. Rev.76 (1949) 220.
- [SOU86] R. Souda, M. Aono, Nucl. Instr. Meth. B15 (1986) 114.
- [SPA75] G. Spahn, K. O. Groeneveld. Nucl. Instr. and Meth. 123 (1975) 425.
- [SRI08] www.srim.org
- [SUG79] H. Sugiyama, Nucl. Instr. and Meth. 159 (1979) 543.
- [TAS01] M. Tassotto, P. Watson, Surf Sci, 479 (2001) 141.
- [TIR96] J. Tirira, Y. Serruys, P. Trocellier, Forward recoil spectrometry, 1996. New York: Plenum Press.
- [TOR72] I.M. Torrens, Interatomic Potentials, Academic, New York, 1972.
- [VAL94] J. E. Valdès and N. R. Arista. Phys. Rev. A 49 (1994) 2690.
- [WHI09] H. J. Whitlow, M. Ren, J.A. van Kan, T. Osipowicz, F. Watt. Nucl. Instr. and Meth. B 267 (2009) 2153.
- [WHI13] H.J. Whitlow, M. Ren, X. Chen, T. Osipowicz, J.A. van Kan, F. Watt. Nucl. Instr. and Meth. B 306 (2013) 311.
- [WIL39] E.J. Williams, Proc. Roy. Soc.169 A(1939) 531.
- [WIN70] K. B. Winterbon, P. Sigmund, J. B. Sanders. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid (1970).

[ZIE85] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, *The Stopping and Ranger of Ions in Solids*, Pergamon, New York, 1985.