

Université des Sciences et de la Technologie Houari-Boumediene  
Faculté de Physique



**MEMOIRE**

Présenté en vue de l'obtention du grade de

**MAGISTER EN PHYSIQUE**

Spécialité : **Sciences Nucléaires**

Par

**AISSOUS BASMA**

SUJET

**CALCUL DES DISTRIBUTIONS EN LONGUEURS  
PARCOURUES ET DES SPECTRES EN ENERGIE DES IONS  
DIFFUSES PAR UNE SURFACE SOLIDE A BASSE ENERGIE**

Soutenu le : 05/12/2008

, devant la commission d'examen composée de:

M.A.C. CHAMI	Professeur USTHB	Président
M.S.OUICHAOUI	Professeur USTHB	Examineur
M.M.BENGUERBA	Maître de Conférences USTHB	Examineur
M.A.TAHRAOUI	Maître de Conférences USTHB	Examineur
Mme K.KHALAL-KOUACHE	Maître de Conférences USTHB	Directrice de thèse



*A mes parents*

*A ma tante Malika*

*A mon frère Oualid, mes sœurs Fatima et Balkis*

*A mes meilleures amies Samia et Sandra*

*A tous ceux qui me sont proches*

## **Remerciements**

*Je souhaiterais avant tout, exprimer ma plus sincère reconnaissance et toute ma sympathie à Madame Khalal-Kouache Karima, professeur à L'USTHB, qui a dirigé mes recherches. Je tiens à la remercier pour sa disponibilité et son extrême gentillesse.*

*J'exprime ma reconnaissance à Monsieur le Professeur A. C. Chami, d'avoir bien voulu me faire l'honneur de présider le jury de ce mémoire. Qu'il trouve ici l'expression de mon profond respect.*

*Je remercie l'ensemble des membres du jury qui ont étudié avec intérêt ce travail, Mr. M. Benguerba et Mr. A. Tahraoui, Maîtres de conférences à l'USTHB. Je suis très particulièrement honorée de la présence dans ce jury, de Monsieur le Professeur S. Ouichaoui.*

*Je tiens à remercier le Professeur M. Boudjema, directeur du Laboratoire Sciences Nucléaires et Interaction Rayonnements-Matière qui m'a accueillie au sein de son équipe.*

*Je tiens également à remercier les membres du laboratoire M. Y. Boudouma et M. S. Kessal, Professeurs à l'USTHB pour leur gentillesse, ce qui m'a permis de mener à bien ce travail et dans les meilleures conditions.*

*J'aimerais adresser une mention très spéciale à mes professeurs de première année de post graduation: Mme. Z. Meliani, Mme. A. Frahi-Amroun, Mr. M. Abdesselam, Mr. A. Amokrane et Mr. M. Belgaid.*

*Je n'oublie pas mes anciens enseignants de physique de l'université Mentouri de Constantine, les professeurs F. Benrachi et M. Ramdane.*

*Ils m'ont fait découvrir le domaine de la physique nucléaire et m'ont donné envie de poursuivre mes études dans ce domaine.*

*Je remercie tous mes collègues du laboratoire: N. Djouhri, A. Hidouche, M. Hamhami, K. Mehdi pour leur sympathie et leur soutien permanent.*

*Je tiens à saluer mes camarades, car un magister est une tranche de la vie qui permet de souder des liens d'amitiés solides.*

*Je remercie mes parents sans qui, je n'en serais pas là, Pour la confiance qu'ils m'ont accordé, le soutien qu'ils ont su me donner, Pour leur patience souvent mise à rude épreuve et pour tous les sacrifices qu'ils ont su faire. Qu'ils trouvent dans ce travail, le témoignage de ma gratitude et de tout mon amour.*

*Enfin, j'adresse mes remerciements à toute ma famille et mes amis de Constantine et de Annaba.*

# Table des matières

<b>INTRODUCTION GENERALE</b> .....	4
------------------------------------	---

## **CHAPITRE 1 : GENERALITES SUR L'INTERACTION ION-SURFACE SOLIDE A BASSE ENERGIE**

1.1. Introduction.....	7
1.2. Collisions simples.....	7
1.3. Perte d'énergie des ions dans la cible.....	11
1.3.1. Perte d'énergie élastique.....	11
1.3.2. Perte d'énergie inélastique.....	13
1.4. Le modèle des collisions multiples.....	14
1.5. Mécanismes de transfert de charge.....	15
1.5.1. Processus de transition au voisinage de la surface.....	15
1.5.2. Processus d'échange de charge dans le volume.....	17
1.6. Le potentiel image.....	17

## **CHAPITRE 2 : CALCUL DE LA PROBABILITE DE DIFFUSION PAR UNE SURFACE SOLIDE A PARTIR DE L'EQUATION DE BOLTZMANN**

2.1. Introduction.....	20
2.2. Théorie de transport pour l'étude des particules transmises par une cible solide.....	21
2.3. Théorie de transport pour l'étude des particules diffusées par une cible solide.....	24
2.4. Procédure numérique.....	25
2.5. Simulation Monte Carlo.....	26

2.6. Comparaison théorie de transport- simulation Monte Carlo.....	28
2.7. Introduction de la perte d'énergie dans le calcul de $\Delta P$ .....	30
2.8. Spectres de diffusion.....	34

### **CHAPITRE 3 : RESULTATS ET DISCUSSION**

3.1. Introduction.....	37
3.2. Théorie de transport pour le calcul des distributions en longueurs des particules diffusées.....	37
3.3. Comparaison théorie de transport - simulation Monte Carlo.....	43
3.4. Spectres en énergie de diffusion.....	46
3.5. Conclusion.....	49

<b>CONCLUSION GENERALE</b> .....	<b>51</b>
----------------------------------	-----------

<b>REFERENCES</b> .....	<b>53</b>
-------------------------	-----------

# **INTRODUCTION GENERALE**

De nombreux phénomènes physiques peuvent se produire lorsque des ions interagissent avec une surface solide. La nature des processus d'interaction impliqués dépend directement de l'énergie et de la nature du projectile et de la cible.

L'utilisation des faisceaux d'ions est devenue une méthode performante destinée à l'analyse élémentaire et structurale des surfaces solides. Plusieurs techniques d'analyse ont été et sont encore développées en ce sens, utilisant des projectiles divers [NIE93a, ECK78] (photons, électrons plus ou moins rapides, particules plus ou moins lourdes, agrégats, etc ..... ) selon le type d'analyse recherchée (élémentaire ou structurale) ou la profondeur étudiée (couches superficielles ou couches profondes) [DBI99, HID01].

D'abord à haute (1 MeV) et moyenne (100 keV) énergie (RBS : Rutherford Back-Scattering Spectrometry et MEIS : Medium Energy Ion Scattering) [HER94, MAR94, BOE01], l'utilisation de faisceaux d'ions a permis l'identification des constituants d'une cible ainsi que la détermination des densités atomiques de surface. Cependant, la RBS a pour inconvénient majeur une résolution en profondeur limitée à quelques dizaines de nanomètres.

Pour pallier à ce problème, des ions de plus faible énergie (quelque keV) sont considérés, comme c'est le cas de la technique LEIS (Low Energy Ion Scattering) dans laquelle on envoie des ions sur une surface solide pour analyser ensuite les particules diffusées en angle, en énergie et en état de charge [YAR04]. L'intérêt de cette technique (LEIS) réside dans sa sensibilité aux premières couches des surfaces et dans son caractère non destructif dû aux faibles courants d'ions utilisés.

Le couplage entre l'expérience et les techniques de simulation numérique (simulation Monte Carlo, dynamique moléculaire, équation de transport) [MOZ00, TEO01, BEN06, ZEM97] permet alors d'accéder aux grandeurs fondamentales (potentiels d'interaction, pouvoir d'arrêt, probabilités d'échange de charge) qui conditionnent l'utilisation de la LEIS en tant que technique d'analyse des surfaces [DOA93, SMI97, FAM00].

Le travail de cette thèse s'inscrit dans ce cadre : Il a pour objectif de calculer les distributions en longueurs parcourues et les spectres en énergie des ions diffusés par une cible solide à basse énergie. Une méthode basée sur la solution de l'équation de Boltzmann a été

utilisée. Pour améliorer l'accord théorie de transport-simulation Monte Carlo, nous avons tenu compte de la perte d'énergie totale des projectiles dans la cible.

Le manuscrit de la présente thèse est conçu de la manière suivante :

Le chapitre 1 est consacré à l'étude des mécanismes physiques qui accompagnent l'interaction d'une particule avec une surface solide : la cinématique de la collision ion-atome cible, la perte d'énergie, les collisions multiples et les différents mécanismes d'échange de charge sont présentés.

Dans le chapitre 2, nous décrivons les méthodes de simulation qui sont utilisées dans notre étude. Dans une première étape, nous présentons la simulation, basée sur la résolution de l'équation de Boltzmann. Nous présentons également la deuxième méthode de simulation qui est de type Monte Carlo.

Dans le chapitre 3, nous présentons les distributions en longueurs et les spectres en énergie obtenus par la théorie de transport, en tenant compte de la perte d'énergie. Ces résultats sont comparés à ceux obtenus par le calcul Monte Carlo. Nous avons considéré les systèmes suivants  $He^+ / Ni$ ,  $Li^+ / Ni$ ,  $H^+ / Ni$ ,  $He^+ / Si$  pour une énergie incidente  $E_0 = 4$  keV.

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

**CHAPITRE 1**  
**GENERALITES SUR L'INTERACTION ION-**  
**SURFACE SOLIDE A BASSE ENERGIE**

## **1.1. Introduction**

Lorsque la surface solide est irradiée par un faisceau d'ions, divers phénomènes physiques peuvent se produire. Les particules diffusées peuvent être caractérisées par une énergie, une direction de diffusion ainsi qu'un état de charge. L'étude de ces grandeurs nous permet de mieux comprendre les processus d'interaction présents dans ce cas.

L'interaction d'un faisceau de particules chargées avec une surface solide peut être considérée comme le résultat d'un ensemble de "chocs" individuels avec les atomes du milieu corrélé aux différents mécanismes de transfert de charge [WIN02]. Une simulation correcte de l'interaction ion-solide doit tenir compte de tous les processus d'interaction présents. Les paramètres physiques qui gouvernent cette simulation (la perte d'énergie [NAR03] et les paramètres liés aux phénomènes d'échange de charge [SNO86]) sont généralement obtenus par ajustement simulation-expérience.

Dans la gamme des basses énergies, l'étude de la diffusion de particules par des surfaces solides peut se faire dans le cadre d'une description classique. Ceci est justifié par le fait que la longueur d'onde associée aux ions incidents, donnée par la relation de de Broglie  $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 M_1 E_0}}$ , est

toujours très petite devant les distances interatomiques qui sont de l'ordre de quelques  $\text{Å}$ .  $M_1$  et  $E_0$  sont respectivement, la masse et l'énergie de l'ion incident.  $h$  est la constante de Planck.

Dans ce qui suit nous allons examiner, les différents processus d'interaction ion-surface à basse énergie.

## **1.2. Collisions simples**

Considérons la diffusion élastique d'un projectile de masse  $M_1$  et de vitesse  $\vec{v}$  sur une cible au repos de masse  $M_2$  (voir figure 1.1). Par application des lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement, l'énergie de la particule diffusée  $E_1$  est donnée par :

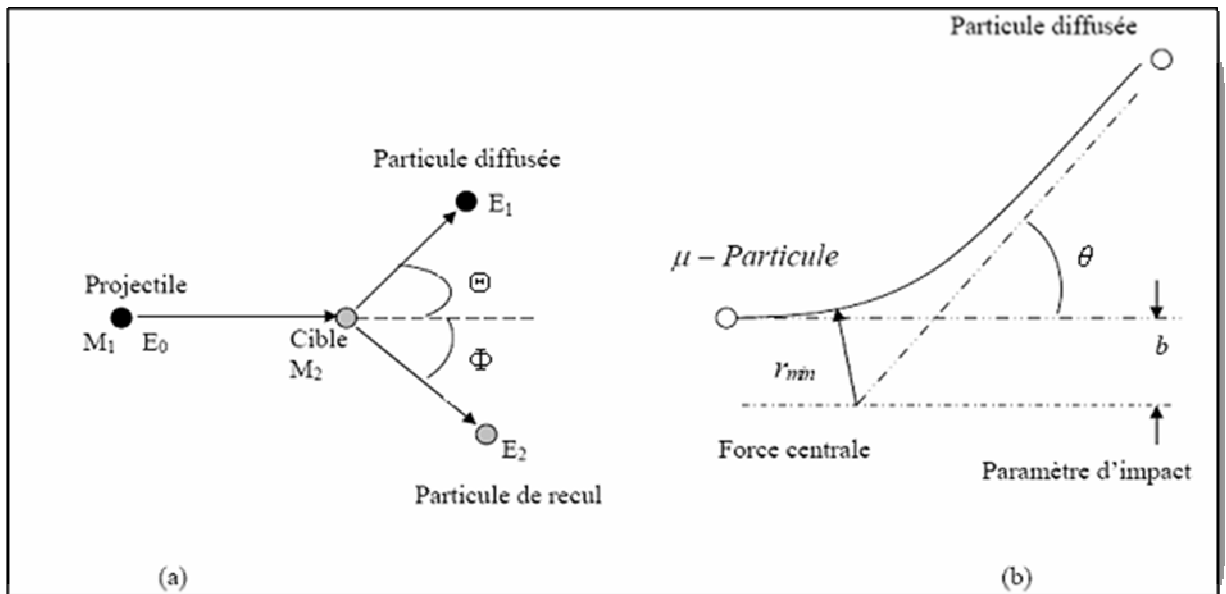
$$E_1 = \left[ \frac{\cos \Theta \pm \sqrt{A^2 - \sin^2 \Theta}}{(1 + A)} \right]^2 E_0, \quad (1.1)$$

où :

$\Theta$  : angle de diffusion dans le système du laboratoire (voir figure 1.1.a).

$$A = \frac{M_2}{M_1}$$

Pour  $A \geq 1$ , seule la solution + est possible dans l'équation (1.1) et pour  $A < 1$ , les deux solutions sont possibles.



**Figure 1.1** : Schéma représentant une collision entre deux particules de masses  $M_1$  et  $M_2$  : Paramètres de la diffusion dans le système du laboratoire (a) et dans le système du centre de masse (b).

$r_{\min}$  est la distance minimale d'approche.

L'énergie de recul de la cible  $E_2$  est donnée par :

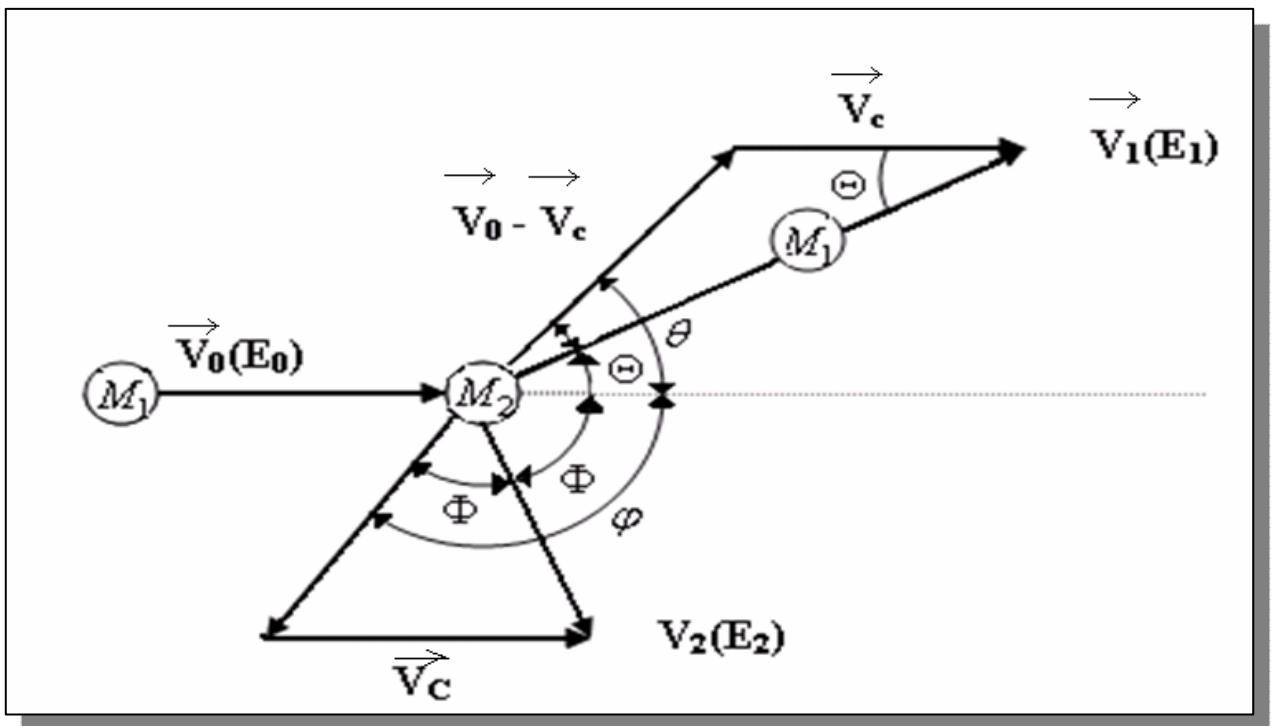
$$E_2 = \cos^2 \Phi \left[ \frac{4A}{(1+A)^2} \right] E_0 \quad (1.2)$$

$\Phi$  est l'angle de recul défini dans le système du laboratoire (voir figure 1.1.a).

La diffusion est traitée dans le cadre du problème de Kepler de la particule relative. Dans le système du centre de masse (CM), ce problème se ramène à l'étude de la diffusion (particule fictive de masse égale à la masse réduite  $\mu = \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)}$  arrivant sur la cible avec un paramètre d'impact  $b$ ) par le potentiel d'interaction  $V(r)$ .  $r$  est la distance séparant les deux particules (voir figure 1.1.b).

Les équations décrivant cette interaction sont beaucoup plus simples dans le système CM. De ce fait nous sommes souvent amenés à les utiliser. Les résultats doivent être ensuite rapportés au système du laboratoire (L) pour la comparaison théorie- expérience.

Pour trouver les équations qui permettent ce passage, nous utiliserons le diagramme vectoriel reliant les vitesses et les angles de diffusion (voir figure 1.2).



**Figure 1.2 :** Diagramme vectoriel liant les vitesses et les angles de diffusion dans les systèmes du laboratoire (L) et du centre de masse (CM).

L'énergie dans le (CM) est donnée par la relation suivante :

$$E_{cdm} = \frac{E_0 M_2}{(M_1 + M_2)} \quad (1.3)$$

Les angles de diffusion  $\Theta$  et de recul  $\Phi$ , définis dans le système du laboratoire, sont exprimés en fonction de l'angle de diffusion  $\theta$  dans le (CM) par les relations suivantes :

$$\tan \Theta = \frac{\sin \theta}{\left( \frac{M_1}{M_2} + \cos \theta \right)} \quad (1.4)$$

$$\Theta = 0.5 (\pi - \theta) \quad (1.5)$$

Par ailleurs, la résolution du système d'équations exprimant les lois de conservation de l'énergie et du moment cinétique nous permet d'obtenir l'angle de diffusion dans le centre de masse en fonction du paramètre d'impact  $b$  :

$$\theta = \pi - 2b \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\left( 1 - \frac{V(r)}{E_{cdm}} - \frac{b^2}{r^2} \right)^{1/2}} \quad (1.6)$$

$r_{\min}$  est obtenue à partir de la résolution de l'équation suivante :

$$\frac{V(r_{\min})}{E_{cdm}} = \left( 1 - \frac{b^2}{r_{\min}^2} \right) \quad (1.7)$$

L'évaluation de l'expression (1.6) permet d'aboutir à la fonction appelée fonction de déflexion  $\theta = \theta(b)$  qui donne l'angle de diffusion de la particule incidente pour un paramètre d'impact  $b$ .

### **1.3. Perte d'énergie des ions dans la cible**

Le long de son parcours dans la cible, le projectile subit de nombreux chocs atomiques. Ces collisions conduisent à des pertes d'énergie responsables du ralentissement de l'ion dans la matière, jusqu'à sa diffusion, sa transmission ou son arrêt dans la cible. Dans tout le domaine

énergétique, deux types de perte d'énergie existent : la perte d'énergie électronique (ou inélastique) et la perte d'énergie nucléaire (ou élastique).

Ces deux pertes d'énergie, bien que corrélées [GRA91, ROB94], sont considérées comme indépendantes avec une bonne approximation [ZIE85].

### **1.3.1. Perte d'énergie élastique**

La perte d'énergie élastique correspond à la quantité d'énergie cédée aux atomes par répulsion coulombienne. Cette répulsion est plus ou moins écrantée par le cortège électronique. Cette perte d'énergie entraîne la déviation de la particule incidente ainsi que la mise en mouvement des atomes heurtés qui vont contribuer à la formation de lacunes.

La section efficace d'arrêt nucléaire, notée  $S_{el}(E)$ , est définie en fonction de la perte d'énergie élastique par unité de longueur,  $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{el}$  (appelé également pouvoir d'arrêt nucléaire) et de la densité atomique du matériau  $N$  par la relation suivante:

$$S_{el}(E) = -\frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dx}\right)_{el}. \quad (1.8)$$

L'interaction projectile-atome cible est décrite en utilisant un potentiel coulombien écranté  $V(r)$  donné par:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (1.9)$$

où:

$Z_1$  : nombre atomique de l'ion incident.

$Z_2$  : nombre atomique de l'atome cible.

$r$  : distance ion-atome cible.

$e$  : charge de l'électron.

$\Phi\left(\frac{r}{a}\right)$  : fonction d'écran.

Plusieurs formes de la fonction d'écran ont été proposées. Parmi les plus utilisées, nous citons celle proposée par Ziegler, Biersack et Littmark [ZIE85], qui s'écrit :

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^4 a_i e^{\left(\frac{-\beta_i r}{a}\right)} \quad (1.10)$$

La distance d'écran universelle  $a$  s'écrit :

$$a = \frac{0.88534}{\left(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}\right)} a_0, \quad (1.11)$$

où  $a_0$  est le rayon de Bohr ( $a_0 = 0.5292 \text{ \AA}$ ). Les valeurs de  $\alpha_i$  et  $\beta_i$  sont données dans le tableau 1.1 [ZIE85] :

i	1	2	3	4
$\alpha_i$	0.028171	0.28022	0.50986	0.18175
$\beta_i$	0.20162	0.40290	0.94229	3.1998

**Tableau 1.1** : Valeurs des constantes d'ajustement pour le potentiel ZBL [ZIE85].

La section efficace de diffusion s'exprime comme suit :

$$d\sigma = 2\pi b db \quad (1.12)$$

Où  $b$  est le paramètre d'impact défini précédemment.

En utilisant les paramètres réduits, la section efficace différentielle de diffusion prend la forme :

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

où  $f$  est la fonction universelle de diffusion qui dépend de la forme de la fonction d'écran choisie.

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

$\varepsilon$  est l'énergie réduite donnée par :

$$\varepsilon = \frac{a M_2}{Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2)} E_0 \quad (1.15)$$

$E_0$  : énergie de l'ion incident.

$M_1$  et  $M_2$  sont les masses respectivement de l'ion incident et de l'atome cible.

$\theta$  : angle de diffusion dans le système du centre de masse.

En utilisant l'énergie réduite  $\varepsilon$  et le parcours réduit  $\rho$  (voir ci dessus), Lindhard et al [LIN61] ont introduit une expression plus commode du pouvoir d'arrêt dû au ralentissement nucléaire :

$$S_{el}(\varepsilon) = - \left( \frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_{el} = \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\varepsilon} \frac{1}{t^{3/2}} f(t^{1/2}) dt^{1/2} \quad (1.16)$$

où:

$$\rho = R N M_2 4\pi a^2 \frac{M_1}{(M_1 + M_2)^2} \quad (1.17)$$

$R$  : parcours total de la particule incidente.

$N$  : nombre d'atomes par unité de volume.

### **1.3.2. Perte d'énergie inélastique**

La perte d'énergie inélastique correspond à la quantité d'énergie cédée aux électrons des atomes qui composent le matériau. Ce phénomène entraîne soit l'ionisation des atomes de la cible au voisinage de la trajectoire de l'ion incident, soit l'excitation de leurs niveaux électroniques.

La section efficace d'arrêt inélastique  $S_{in}(E)$  est définie par :

$$S_{in}(E) = - \frac{1}{N} \left( \frac{dE}{dx} \right)_{in} \quad (1.18)$$

Lindhard et *al.* ont montré que le pouvoir d'arrêt électronique est proportionnel à la vitesse de l'ion incident  $v$  dans le domaine des basses énergies [LIN63] (théorie LSS), soit :

$$\left( - \frac{dE}{dx} \right)_{in} = k \sqrt{E} \quad (1.19)$$

En utilisant les unités réduites [LIN61] de l'énergie (eq. 1.15) et du parcours (eq. 1.17), l'équation (1.18) devient:

$$S_{in}(\varepsilon) = - \left( \frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_{in} = k \sqrt{\varepsilon} \quad (1.20)$$

avec :

$$k = 0.0793 \frac{Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} (M_1 + M_2)^{3/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} M_1^{3/2} M_2^{1/2}}. \quad (1.21)$$

Les pouvoir d'arrêt élastique et inélastique étant supposés indépendants [ZIE85], le pouvoir d'arrêt global s'écrit comme la somme de ces deux contributions, soit :

$$\left( \frac{dE}{dx} \right)_T = \left( \frac{dE}{dx} \right)_{el} + \left( \frac{dE}{dx} \right)_{in} = -N [S_{in}(E) + S_{el}(E)]. \quad (1.22)$$

#### **1.4. Le modèle des collisions multiples**

L'échec de l'approche en collision simple dans l'analyse de la diffusion d'ions lents (quelques keV d'énergie) par une surface solide [ARE97] a conduit à développer un modèle tenant compte des collisions multiples pour interpréter les spectres en énergie de la diffusion. D'autre part, il a été montré [JAC81, OVE87, NIE82] que la fraction de particules ayant subi un seul choc dans la cible est très faible.

Les collisions multiples deviennent importantes lorsque le libre parcours moyen du projectile est de l'ordre de la distance inter-atomique dans la cible.

Dans l'approximation des collisions binaires ou BCA (Binary Collision Approximation) [ECK78], l'énergie perdue par une particule par chocs nucléaires après  $n$  collisions est donnée par :

$$E_0 - E_n = \left( 1 - \prod_{i=1}^n K(\Theta_i, A) \right) E_0 \quad (1.23)$$

$K(\Theta_i, A)$  est le facteur cinématique correspondant à l'angle de diffusion  $\Theta_i$ , donnée par :

$$K(\Theta_i, A) = \left[ \frac{\cos \Theta_i \pm \sqrt{A^2 - \sin^2 \Theta_i}}{(1 + A)} \right]^2.$$

(1.24)

Cette approximation est valable si l'énergie de la particule incidente est supérieure à quelques dizaines d'eV [RAB93].

## **1.5. Mécanismes de transfert de charge**

Lorsque des ions sont diffusés par une surface solide, ils peuvent échanger des électrons avec les atomes de cette surface [YAR04]. Cet échange peut se produire dans les phases d'approche et d'éloignement et en volume (à l'intérieur du solide).

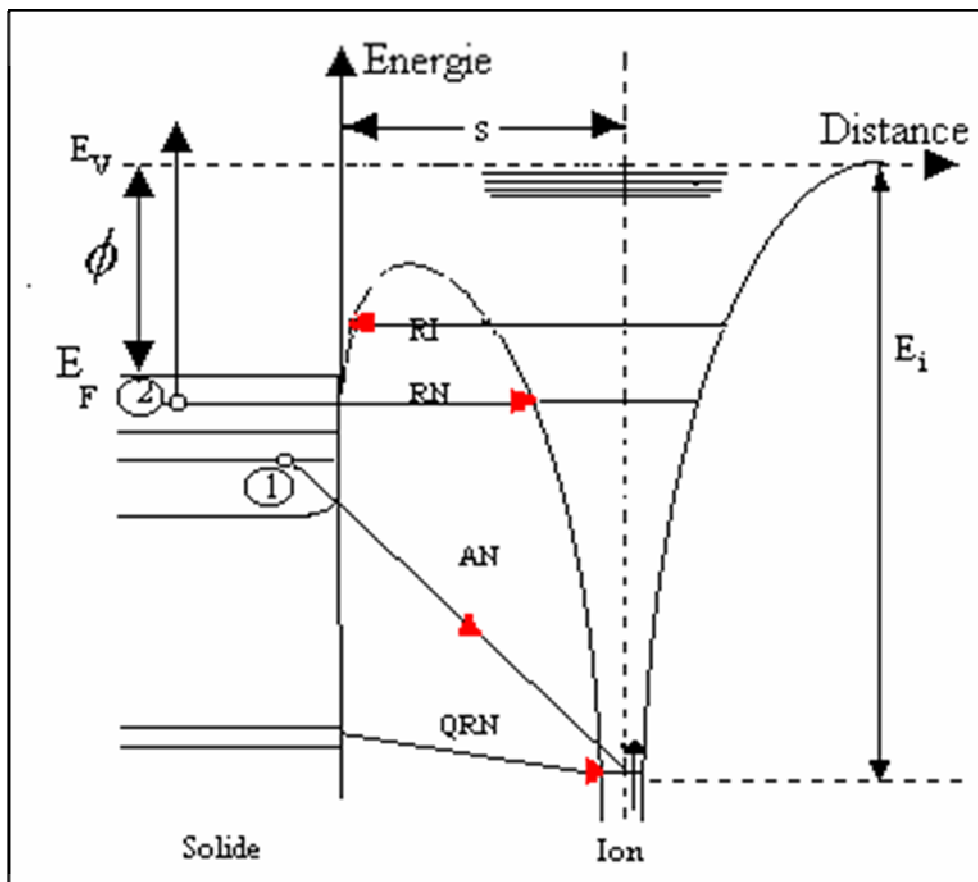
### **1.5.1. Processus de transition au voisinage de la surface**

Une importante facette de l'interaction ion-surface est le processus de transition électronique qui se produit lors de l'approche et l'éloignement de l'ion de la surface.

L'ion incident peut se neutraliser suivant trois possibilités :

- neutralisation radiative.
- neutralisation résonnante.
- neutralisation Auger.

La différence en énergie correspondant à cette transition est émise sous forme de photons pour le processus radiatif. Les autres processus d'échange de charge peuvent être décrits par le diagramme d'énergie suivant (voir figure 1.3).



**Figure1.3** : Schéma énergétique représentant les différents processus d'échange de charge au voisinage de la surface.

- La neutralisation résonnante (RN) correspond à la transition d'un électron par effet tunnel, vers un état atomique de l'ion incident à travers la barrière de potentiel entre l'atome et le solide. Le processus est dit résonnant car l'électron transféré entre le projectile et la cible conserve son énergie.
- L'ionisation résonnante (RI) est le processus inverse, en compétition avec la neutralisation résonnante, qui correspond au transfert d'un électron se trouvant sur un niveau excité de la particule incidente à un niveau non rempli du solide.
- La neutralisation quasi-résonnante (QRN) : c'est une neutralisation résonnante qui concerne des niveaux plus profonds de la bande du solide.

- La neutralisation Auger (AN) fait intervenir 2 électrons de valence du métal. Le premier électron est capturé sur un état lié de l'ion. L'énergie libérée est récupérée par le second électron qui va être éjecté dans le vide.
- La désexcitation Auger fait intervenir un électron de la bande de valence du solide et un électron du projectile situé à un niveau excité.
- Autoionisation : les deux électrons proviennent du projectile.

### **1.5.2. Processus d'échange de charge dans le volume**

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

Au cours de la collision, la distance inter-nucléaire diminue et les couches atomiques se recouvrent partiellement formant une quasi-molécule. Les transitions électroniques dans un tel système sont décrites par le modèle de promotion électronique [FAN65, LIC67, BAR72]. Ainsi, un ion incident peut se neutraliser et un atome neutre peut se ré-ioniser au cours de cette collision.

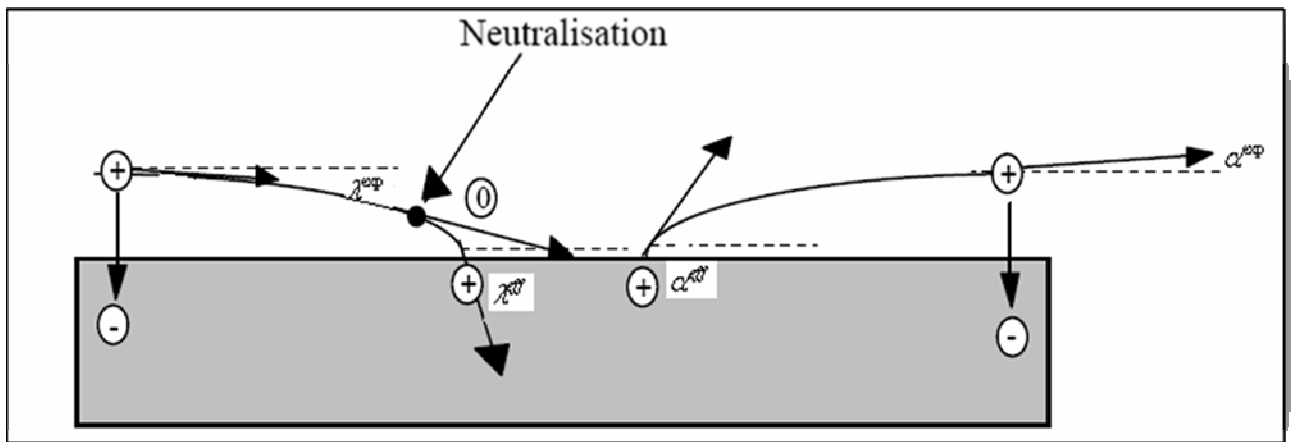
### **1.6. Le potentiel image**

Lorsqu'une particule chargée s'approche (ou s'éloigne) d'une surface solide, elle est soumise à un potentiel de nature attractive dû à la charge image qu'elle a créée dans le solide : c'est le potentiel image.

L'effet de ce potentiel se manifeste par une courbure de la trajectoire des ions à l'approche et à l'éloignement de la surface. De ce fait, les angles d'incidence et de sortie effectifs ( $\lambda^{eff}, \alpha^{eff}$  respectivement) sont différents de ceux mesurés expérimentalement ( $\lambda^{exp}, \alpha^{exp}$  respectivement) (figure 1.4). Ils sont reliés par la relation suivante [KAT88] :

$$tg(\lambda^{eff}, \alpha^{eff}) = tg(\lambda^{exp}, \alpha^{exp}) \left( 1 + \frac{V_{im}}{E \sin^2(\lambda^{exp}, \alpha^{exp})} \right)^{0.5} \quad (1.25)$$

où  $V_{im}$  est la valeur caractéristique du potentiel image (c'est la variation de l'énergie potentielle de la particule incidente entre l'infini et l'intérieur du solide).



**Figure 1.4** : Effet de la force image sur la trajectoire des ions au voisinage d'une surface solide dans les voies d'entrée et de sortie.

**CHAPITRE 2**  
**CALCUL DE LA PROBABILITE DE DIFFUSION**  
**PAR UNE SURFACE SOLIDE A PARTIR DE**  
**L'EQUATION DE BOLTZMANN**

## **2.1. Introduction**

Un grand intérêt est accordé à l'étude de l'interaction ion-surface à basse énergie [NIE93a, NIE93b]. Des techniques expérimentales basées sur la diffusion d'ions sont souvent utilisées pour l'analyse chimique et structurale des surfaces [RAB94]. Dans ce domaine; de nombreux processus physiques sont présents tels que les diffusions multiples, la perte d'énergie inélastique, l'échange de charge et l'effet du potentiel image [VAL93, WIN96]. Une bonne compréhension de ces phénomènes devient alors nécessaire. Pour cela, la simulation numérique des spectres énergétiques peut apporter une contribution importante. En effet, ces processus d'interaction peuvent être inclus dans les codes tels que le Code MARLOW [ROB94] et TRIM [ZIE85]. Ceci permet la détermination des valeurs des grandeurs physiques [KHA98, ARE98, DBI99] qui interviennent dans ces processus.

Les méthodes Monte Carlo sont souvent utilisées dans ce domaine. Néanmoins, les temps de calcul importants requis par la simulation constituent l'inconvénient majeur de ces méthodes, en particulier lorsqu'il y a plusieurs paramètres à déterminer.

Une autre méthode [KHA02] a été proposée pour simuler les spectres de diffusion. Cette dernière est basée sur la solution de l'équation de Boltzmann [SIG74], qui a été initialement effectuée pour l'étude des particules transmises à travers une cible solide amorphe. Elle a été appliquée dans cette étude aux particules diffusées par une surface solide, pour calculer dans une première étape les distributions en longueurs parcourues. Ces dernières ont été utilisées ensuite pour le calcul des spectres en énergie. La comparaison de ces spectres à ceux calculés en utilisant un code Monte Carlo (TRIM) [KHA98, MEK05], a montré un bon accord pour les faibles parcours ( $L \leq 10 \text{ nm}$ ). Le désaccord observé pour les grands parcours ( $L > 10 \text{ nm}$ ) a été attribué essentiellement à la perte d'énergie des projectiles dans la cible car ce modèle ne tient pas compte de cette perte d'énergie.

Nous nous proposons dans ce travail, de calculer les distributions en longueurs parcourues et les spectres en énergie en incluant la perte d'énergie totale (électronique et nucléaire) dans ces calculs. Les résultats ainsi trouvés sont comparés à ceux obtenus précédemment [MEK05] ainsi qu'aux résultats de la simulation Monte Carlo.

## 2.2. Théorie de transport pour l'étude des particules transmises par une cible solide

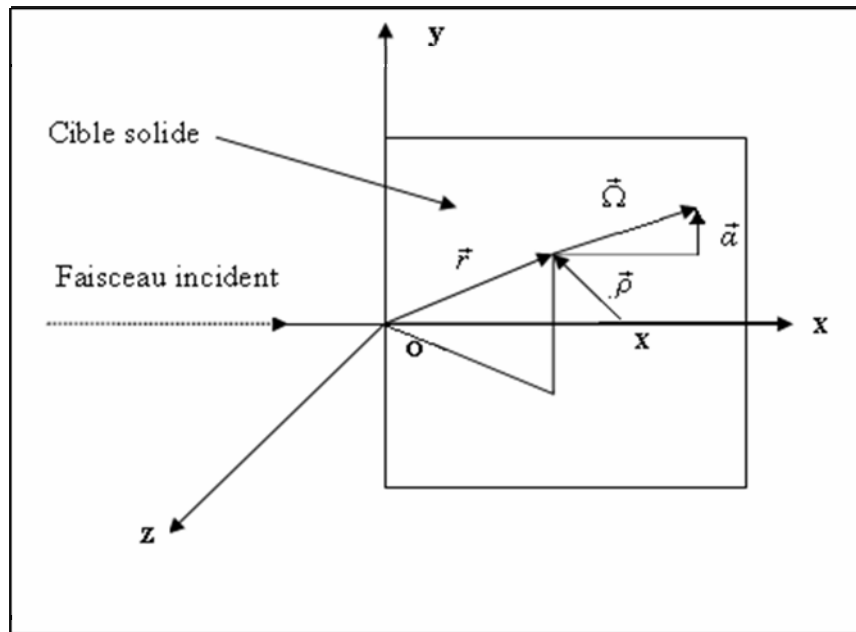
Dans le cas stationnaire et lorsque la perte d'énergie est négligée, l'équation de transport s'écrit [MAR75] :

$$-\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} F = N_0 \int d\vec{\Omega}' \{ F \tilde{K}(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') - F' \tilde{K}(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) \} \quad (2.1)$$

Où  $F = F(\vec{r}, \vec{\Omega})$  est la fonction de distribution des atomes cibles dans l'espace réel  $\vec{r}$  et dans la direction  $\vec{\Omega}$ , d'un faisceau collimaté initialement dans la direction  $Ox$  (voir figure 2.1) :

Dans l'approximation des faibles angles de diffusion, les vecteurs  $\vec{r}$  et  $\vec{\Omega}$  peuvent s'écrire respectivement :  $\vec{r}(x, \vec{\rho})$  et  $\vec{\Omega}(1, \vec{\alpha})$ .

$\vec{\rho}$  et  $\vec{\alpha}$  son deux vecteurs du plan (y O z).



**Figure 2.1** : Direction d'une particule diffusée après la traversée d'une distance  $x$  dans une cible amorphe. La direction initiale est suivant  $Ox$ .

$\tilde{K}(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}$  : section efficace différentielle de diffusion de la direction  $\vec{\Omega}$  à la direction  $\vec{\Omega}'$  et dans l'angle solide  $d\vec{\Omega}$ .

$N_0$  : nombre de centres diffuseurs par unité de volume.

La solution de l'équation (2.1) est [SIG74, MAR75]:

$$F(\vec{r}, \vec{\Omega}) = F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{x^2} \int \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp(-N_0 x \int_0^1 \sigma_0(|\vec{k} - \beta \vec{K}|) d\beta) d\vec{k} d\vec{K} \quad (2.2)$$

où:

$\vec{k}$  et  $\vec{K}$  sont deux vecteurs du plan  $yOz$ .

$$\vec{\psi} = \frac{\vec{\rho}}{x} - \vec{\alpha}$$

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

Où :

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

$d\sigma(\varphi)$  : section efficace différentielle de diffusion qui s'écrit sous la forme suivante :

$$d\sigma(\varphi) = \pi a^2 \frac{d\tilde{\varphi}}{\tilde{\varphi}^2} f(\tilde{\varphi}) \quad (2.4)$$

$\varphi$  : angle de diffusion simple défini dans le système du laboratoire.

$a$  : rayon d'écran.

$f$  : fonction universelle de diffusion qui est déterminée par le potentiel d'interaction ZBL [ZIG85].

L'angle de diffusion réduit est défini par la relation suivante :

$$\tilde{\varphi} = \frac{E_0 a}{2Z_1 Z_2 e^2} \varphi. \quad (2.5)$$

$E_0$  : énergie de la particule incidente.

$Z_1, Z_2$  : numéros atomiques de l'ion incident et de l'atome cible respectivement.

$e$  : charge de l'électron.

Les hypothèses sur les quelles est basée cette théorie sont les suivantes :

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

En exprimant les vecteurs  $\vec{k}$  et  $\vec{K}$  dans le système des coordonnées polaires, l'expression (2.2) devient :

$$F(\vec{r}, \vec{\Omega}) = F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{x^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp(-N_0 x \int_0^1 \sigma_0(|\vec{k} - \beta \vec{K}|) d\beta) dk K d\theta_1 d\theta_2 \quad (2.6)$$

On considère les variables  $z$  et  $\tau$  définies respectivement par:

$$z = \frac{E_0 a}{2 Z_1 Z_2 e^2} |\vec{k} - \beta \vec{K}| \quad (2.7)$$

$$\tau = \pi a^2 N_0 x \quad (2.8)$$

La fonction de distribution peut s'écrire alors :

$$F(\vec{r}, \vec{\Omega}) = F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{x^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} k K \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp(-\tau \int_0^1 \Delta(z) d\beta) dk dK d\theta_1 d\theta_2 \quad (2.9)$$

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

$$\Delta(z) = \int_0^{\infty} d\tilde{\phi} \frac{f(\tilde{\phi})}{\tilde{\phi}^2} [1 - J_0(z \tilde{\phi})] \quad (2.10)$$



La probabilité pour qu'une particule soit diffusée d'un angle  $\alpha$  (correspondant à la direction  $\vec{\Omega}$ ) et dans l'angle solide  $\Delta\Omega$  et entre  $x$  et  $x + \Delta x$  est [KHA99] :

$$\Delta P = \int_{\rho_z = -\infty}^{+\infty} F(x, \rho_y = \lambda x, \rho_z, \alpha_y, \alpha_z = 0) d\rho_z(\alpha - \lambda) \Delta x \Delta\Omega \quad (2.11)$$

Dans l'équation (2.11) nous considérons seulement les particules diffusées dans le plan  $xOy$  i.e. nous prenons  $\vec{\alpha} = (\alpha_y = \alpha, \alpha_z = 0)$ , car expérimentalement la détection des particules diffusées se fait dans le plan d'incidence. Par ailleurs, nous avons remarqué que la fonction  $F$  était pratiquement constante autour de la valeur  $\alpha_z = 0$ .

[MEK05] a été montré que  $\Delta P$  peut se mettre sous la forme :

$$\Delta P = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{2}{x^2} \int_0^{x/2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} k K \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp(-\tau \int_0^1 \Delta(z) dz) d\beta \quad (2.12)$$

$$dk dK d\theta_1 d\theta_2 d\rho_z \Delta x \Delta\Omega$$

Pour la limite  $x = 0$ , nous utilisons l'approximation de la diffusion simple [KHA01], soit :

$$\Delta P(x = 0) = \frac{d\sigma}{d\Omega} N_0 \Delta x \Delta\Omega \quad (2.13)$$

Où  $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)$  est la section efficace différentielle de diffusion.

## **2.4. Procédure numérique**

Pour le calcul de la probabilité  $\Delta P$  donnée par l'équation (2.12), nous avons utilisé la méthode d'intégration Monte Carlo qui est une méthode très efficace pour le calcul des intégrales multidimensionnelles. Cette méthode consiste à calculer la valeur moyenne de la fonction  $f$  à intégrer dans un domaine  $V$  donné :

$$\int_V f dV \approx V \langle f \rangle \pm V \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{m}} \quad (2.14)$$

Avec :

$$\langle f \rangle = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i) \quad (2.15)$$

$$\langle f^2 \rangle = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f^2(x_i) \quad (2.16)$$

$m$  est le nombre de tirs aléatoires effectués pour calculer les valeurs de  $\langle f \rangle$  et  $\langle f^2 \rangle$ .

Les distributions en longueurs parcourues des particules diffusées sont obtenues en calculant  $\Delta P$  pour les différentes valeurs du parcours  $L$ .

Nous rappelons que l'approximation  $L \approx x$  est valable pour les faibles angles de diffusion [KHA02]. Les distributions en longueurs obtenues dans la théorie de transport peuvent être comparées à celles calculées en utilisant un code Monte Carlo (TRIM). Dans ce qui suit, nous allons donner une description de ce code.

## **2.5. Simulation Monte Carlo**

Le code TRIM (TRansport of Ions in Matter) est basé sur la méthode Monte Carlo [ZIE85]. Il a été développé essentiellement pour simuler l'interaction ion-solide à haute énergie, puis il a été étendu avec succès aux faibles vitesses [HOU94]. La version originale de TRIM était destinée à l'étude de l'implantation ionique et du sputtering. Nous utilisons pour notre part, une version modifiée de TRIM [KHA98] adaptée à l'étude du phénomène de la diffusion d'ions lents par une surface solide.

La simulation de la trajectoire d'une particule incidente d'énergie  $E_0$  et qui arrive sur une surface solide avec un angle d'incidence  $\lambda$  s'effectue comme suit :

- Le premier choc se produit après un parcours  $L$  où  $L = R_1 \text{ MIN}(L_s, C_W)$ .

$R_1$  : nombre aléatoire compris entre 0 et 1.

$L_s$  : libre parcours moyen entre deux chocs successifs, il est défini à partir du paramètre d'impact maximum  $P_{\max}$  et de la densité  $N$  du milieu par :  $\pi P_{\max}^2 L_s = \frac{1}{N}$ .

$C_w$  : distance entre les plus proches voisins des atomes cibles.

- Le paramètre d'impact est choisi en fonction du paramètre d'impact maximum à partir de la relation suivante:  $P = P_{\max} \sqrt{R_2}$ .

Où  $R_2$  est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1.

- La nouvelle direction du mouvement est déterminée à partir des angles de diffusion  $\psi$  et  $\varphi$ . L'angle de diffusion  $\psi$  est calculé à partir de l'équation :

$$\psi = \pi - 2 \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{P dr}{r^2} \left( 1 - \frac{P^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E_{cdm}} \right)^{-1/2}$$

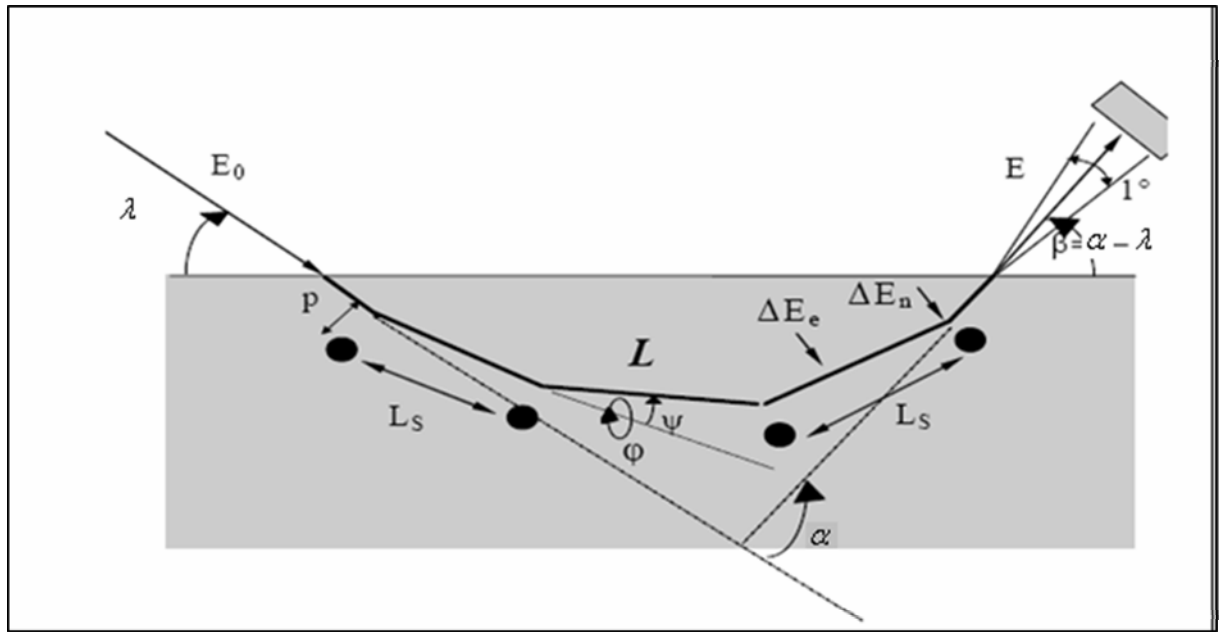
L'angle azimutal  $\varphi$  étant choisi aléatoirement entre 0 et  $2\pi$  par le tirage d'un troisième nombre aléatoire:  $R_3$  :  $\varphi = 2 \pi R_3$ .

Les pertes d'énergie électronique  $\Delta E_e$  et nucléaire  $\Delta E_n$  sont également calculées.

Ce code permet d'obtenir un fichier contenant pour chaque particule diffusée dans le plan d'incidence (qui est le plan dans le quel se trouve également le détecteur) les informations suivantes :

1. l'angle de diffusion  $\alpha$ .
2. Son énergie.
3. Sa longueur totale parcourue dans le solide.
4. La séquence des angles intermédiaires  $\psi$ .
5. le nombre total  $n_c$  des collisions effectuées dans la cible.

Le scénario décrivant la trajectoire d'une particule au voisinage d'une surface solide tel que simulé par le code TRIM est illustré sur la figure 2.3.



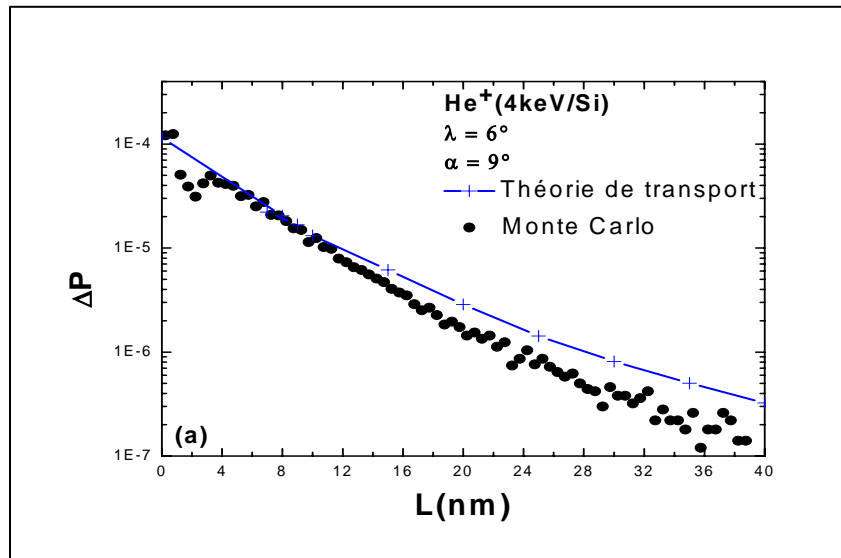
**Figure 2.3** : Schéma décrivant la trajectoire d'un ion dans une cible solide.

A partir de ces informations, nous pouvons déterminer les distributions en longueurs parcourues des particules diffusées qui seront comparées à celles calculées dans la théorie de transport.

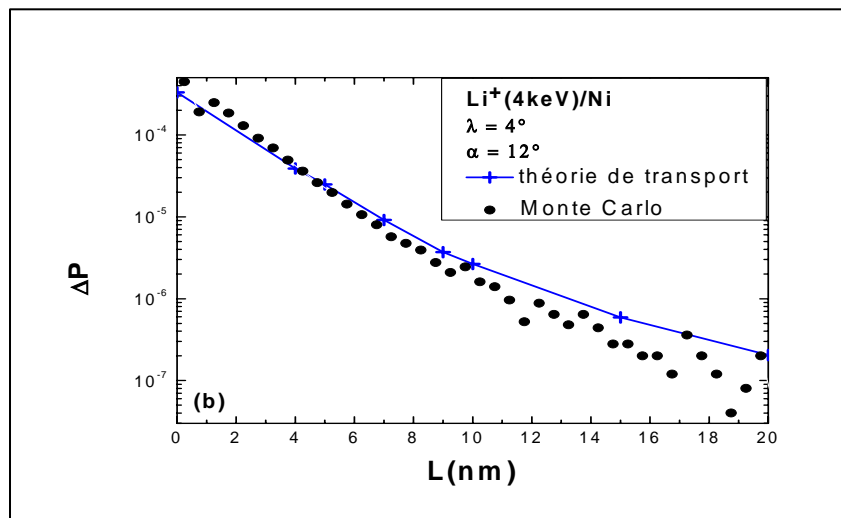
## **2.6. Comparaison théorie de transport- simulation Monte Carlo**

Les courbes des figures 2.4 et 2.5 représentent les distributions en longueurs d'ions  $He^+$  et  $Li^+$ , d'énergie incidente  $E_0=4keV$ , diffusés par des surfaces de silicium et de nickel respectivement.

Ces distributions sont calculées par la méthode de Monte Carlo (la version modifiée du code TRIM) et dans le cadre de la théorie de transport. Ces courbes n'ont pas été normalisées, la comparaison est effectuée en valeur absolue.



**Figure 2.4** : Distributions en longueurs parcourues des particules diffusées : (---+---) : théorie de transport et (●) : simulation Monte Carlo pour le système  $He^+ / Si$ .



**Figure 2.5** : Distributions en longueurs parcourues des particules diffusées : (---+---) : théorie de transport et (●) : simulation Monte Carlo pour le système  $Li^+ / Ni$ .

Pour les faibles valeurs du parcours ( $L \leq 10 \text{ nm}$ ), un bon accord est obtenu entre notre modèle et la simulation Monte Carlo. Pour les grandes valeurs de  $L$ , un désaccord est observé. Ce dernier devient plus important pour les grands angles d'incidence et de diffusion. Ceci est attribué au fait que dans notre modèle, la perte d'énergie est négligée. Cette dernière devient importante et donc non négligeable, pour les grands parcours ainsi que pour les grands angles d'incidence et de diffusion. Par exemple, la perte d'énergie des ions  $He^+$  de 4 keV dans une cible de silicium pour un parcours  $L \approx 30 \text{ nm}$  est de l'ordre de 1.45 keV.

## **2.7. Introduction de la perte d'énergie dans le calcul de $\Delta P$**

L'énergie de la particule incidente n'est plus constante mais elle varie avec le parcours de l'ion dans la cible. Pour tenir compte de la perte d'énergie du projectile dans la cible, l'expression (2.2) est modifiée avec la substitution suivante [SIG74] :

$$\exp[-N_0 x \int_0^1 (\sigma_0 |\vec{k} - \beta \vec{K}| d\beta)] \rightarrow \exp[-N_0 \int_0^x \int_0^1 (\sigma_0 (|\vec{k} - \beta \vec{K}|, E(x')) d\beta dx')] \quad (2.17)$$

Ainsi, nous tenons compte de la variation de la section efficace différentielle en fonction de l'énergie du projectile. Cette dernière étant fonction du parcours  $x$  soit :  $E = E(x)$ .

L'énergie  $E(x)$  est calculée comme suit :

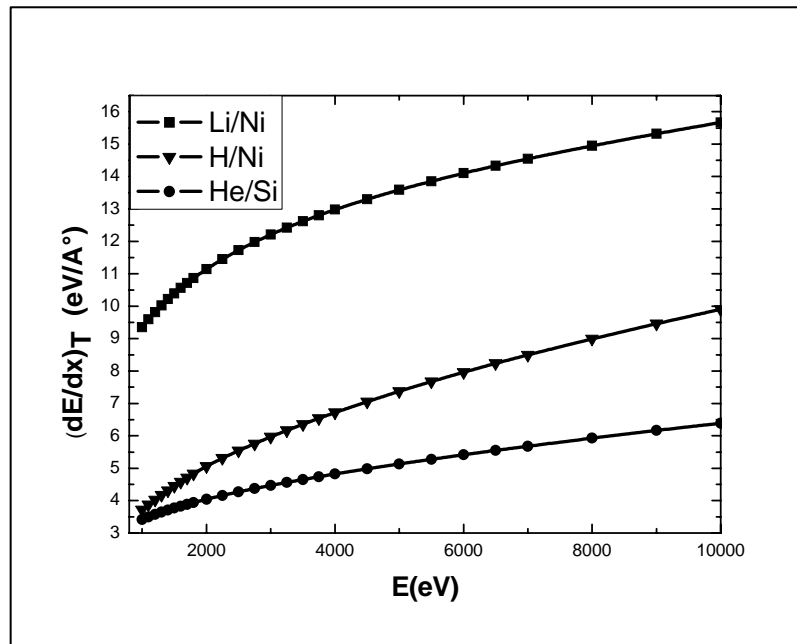
$$E(x) = E_0 - \int_0^x \left( \frac{dE}{dx} \right)_T dx' \quad (2.18)$$

$\left( \frac{dE}{dx} \right)_T$  est la perte d'énergie totale (électronique et nucléaire).

Les valeurs de  $\left( \frac{dE}{dx} \right)_T$  utilisées dans ce travail sont celles obtenues en utilisant le code

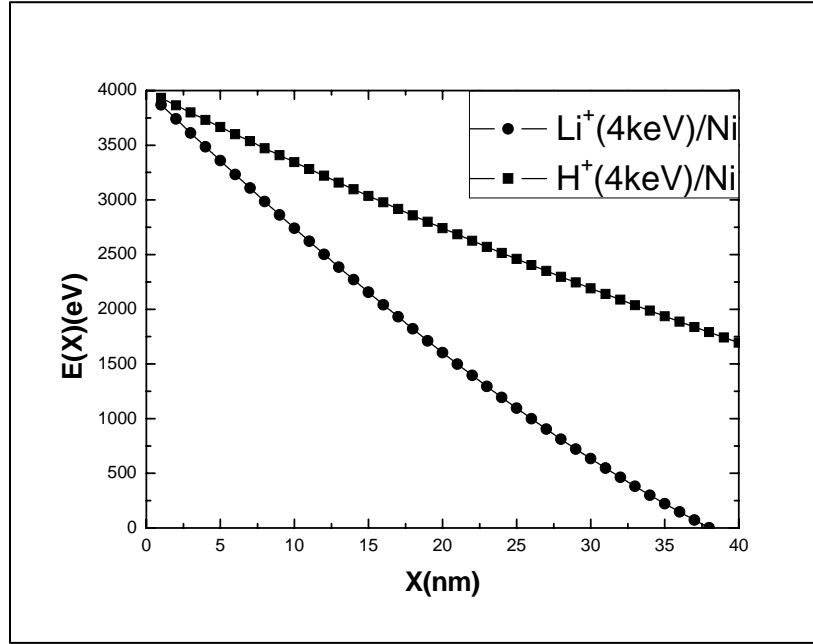
SRIM (2006).

Sur la figure 2.6, nous avons tracé à titre d'exemple, la variation de  $\left(\frac{dE}{dx}\right)_T$  en fonction de l'énergie pour les systèmes  $He^+ / Si$ ,  $Li^+ / Ni$  et  $H^+ / Ni$ .



**Figure 2.6** : Variation de  $\left(\frac{dE}{dx}\right)_T$  en fonction de l'énergie incidente.

La variation de l'énergie du projectile en fonction du parcours dans la cible (telle que donnée dans l'équation 2.18) est donnée (figure 2.7) pour les systèmes  $H^+ / Ni$  et  $Li / Ni$  pour une énergie incidente  $E_0 = 4$  keV.



**Figure 2.7 :** Variation de l'énergie du projectile en fonction du parcours dans la cible.

Nous obtenons l'expression suivante de la fonction de distribution :

$$F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{x^2} \int \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp[-N_0 \pi a^2 \int_0^x \Delta(z') d\beta dx'] d\vec{k} d\vec{K} \quad (2.19)$$

La variable  $z'$  est définie comme suit (voir expression 2.7) :

$$z' = \frac{E(x) a}{2 Z_1 Z_2 e^2} |\vec{k} - \beta \vec{K}| \quad (2.20)$$

La section efficace réduite de transport s'écrit :

$$\Delta(z') = \int_0^\infty d\tilde{\phi} \frac{f(\tilde{\phi})}{\tilde{\phi}^2} [1 - J_0(z' \tilde{\phi})] \quad (2.21)$$

L'expression (2.9) peut se mettre alors sous la forme :

$$F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{x^2} \int \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp[-N_0 \pi a^2 \int_0^x \Delta(z') d\beta dx'] d\vec{k} d\vec{K} \quad (2.22)$$

Pour effectuer ce calcul, nous avons discrétisé la cible en  $n$  tranches élémentaires d'épaisseurs  $e_0$  où  $x = n e_0$ , et nous avons ensuite effectué une sommation le long du chemin parcouru (voir figure 2.7).

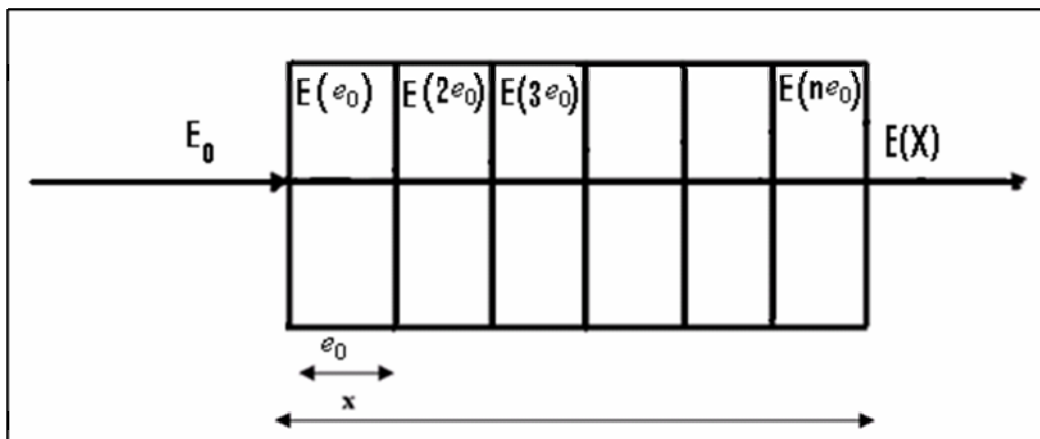
L'expression finale de la fonction de distribution est :

$$F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{x^2} \int \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp[-\tau' \sum_1^n \int_0^1 \Delta(z_n) d\beta] d\vec{k} d\vec{K} \quad (2.23)$$

Où :

$$\tau' = \pi a^2 N_0 e_0 \quad (2.24)$$

$$\text{Et } z_n = \frac{E(n e_0) a}{2 Z_1 Z_2 e^2} |\vec{k} - \beta \vec{K}| \quad (2.25)$$



**Figure 2.8** : Variation de l'énergie de la particule incidente avec le parcours dans la cible.

Ainsi, la probabilité de diffusion  $\Delta P$  s'écrit :

$$\Delta P = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{2}{x^2} \int_0^{x/2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} k K \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp\left(-\tau \sum_{n=1}^n \Delta(z_n)\right) d\beta \quad (2.26)$$

$$dk dK d\theta_1 d\theta_2 d\rho_z \Delta x \Delta \Omega$$

Pour effectuer le calcul de  $\Delta P$ , nous avons utilisé la même procédure d'intégration de Monte Carlo telle que décrite dans le paragraphe 2.2.4.

## **2.8. Spectres de diffusion**

A partir des distributions en longueurs parcourues  $\frac{dN}{dL}(\lambda, \alpha)$  calculées dans la théorie de transport, pour un angle d'incidence  $\lambda$  et un angle de diffusion  $\alpha$ , il est possible de déterminer les spectres en énergie des particules diffusées comme suit :

$$\frac{dN}{dE}(\lambda, \alpha) = \frac{\frac{dN}{dL}(\lambda, \alpha)}{\left(\frac{dE}{dL}\right)_T} \quad (2.27)$$

$\left(\frac{dE}{dL}\right)_T = \left(\frac{dE}{dx}\right)_T$  est le pouvoir d'arrêt total (électronique et nucléaire) de la particule incidente

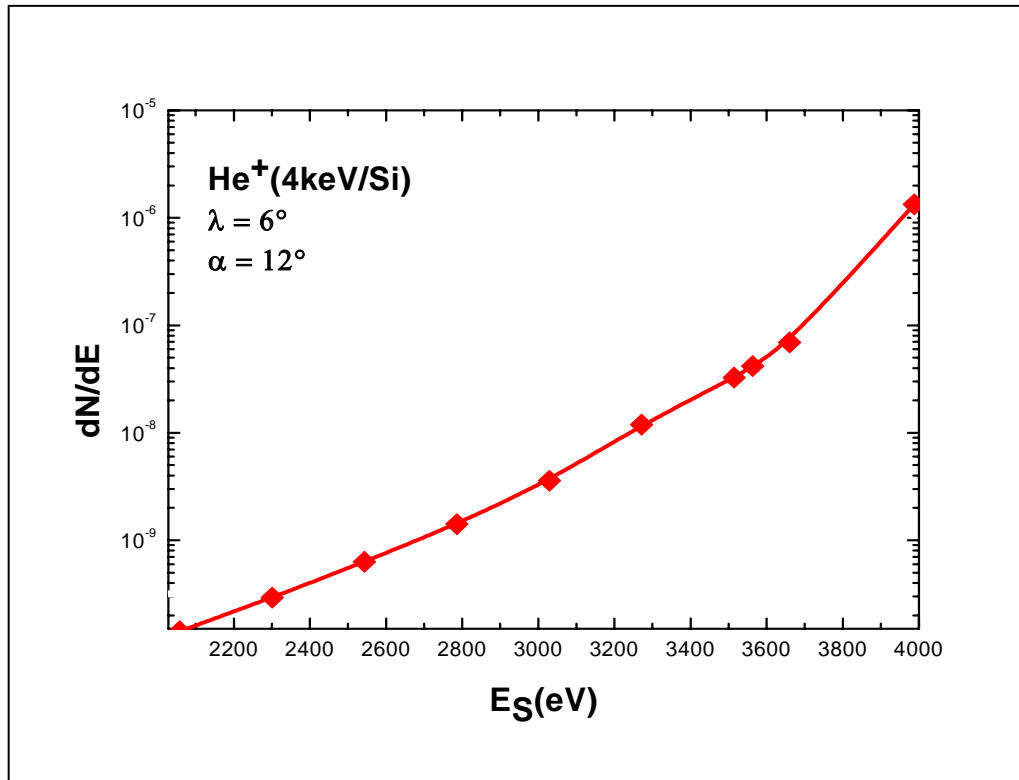
dans le solide,  $N$  est le nombre des particules diffusées.

A chaque parcours  $L$ , correspond une énergie de sortie  $E_s$  donnée par :

$$E_s = E_0 - \int_0^L \left(\frac{dE}{dx}\right)_T dx \quad (2.28)$$

$E_0$  est l'énergie initiale de la particule incidente.

Un exemple de spectre en énergie est donné sur la figure 2.9 pour le système  $He^+ / Si$ . L'angle d'incidence est  $\lambda = 6^\circ$  et l'angle de diffusion est  $\alpha = 12^\circ$ .



**Figure 2.9** : Spectre en énergie obtenu par notre méthode de simulation en tenant compte de la perte d'énergie pour le système  $He^+ (4keV) / Si$   $\lambda = 6^\circ$ ,  $\alpha = 12^\circ$ .

## **CHAPITRE 3**

### **RESULTATS ET DISCUSSION**

### **3.1. Introduction**

Dans ce chapitre, nous allons présenter les distributions en longueurs parcourues et les spectres en énergie des ions  $H^+$ ,  $He^+$ , et  $Li^+$  diffusés par des surfaces de silicium et de nickel pour différentes valeurs des angles d'incidence et de diffusion et pour une énergie incidente  $E_0 = 4keV$ .

La probabilité de diffusion notée  $\Delta P_2$  est calculée en introduisant la perte d'énergie (électronique et nucléaire) dans le modèle basé sur la solution de l'équation de transport présenté dans le chapitre précédent. Dans ce cas, l'énergie du projectile  $E$  varie en fonction de son parcours dans la cible :  $E = E(x)$ .

Dans une première étape, nos résultats sont comparés à ceux obtenus en utilisant le même modèle mais en négligeant la perte d'énergie. Dans ce cas, l'énergie du projectile est considérée comme constante durant tout son parcours, soit :  $E = E_0$  : la probabilité de diffusion correspondante est notée  $\Delta P_1$ .

Nos résultats sont comparés ensuite à ceux obtenus par simulation Monte Carlo.

### **3.2. Théorie de transport pour le calcul des distributions en longueurs des particules diffusées**

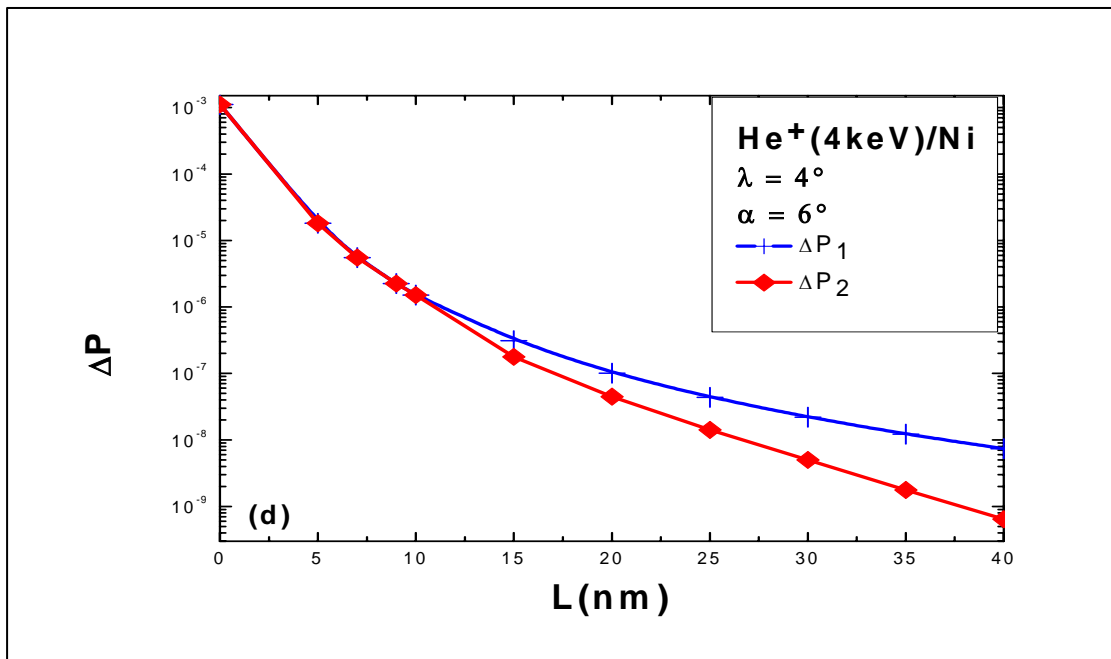
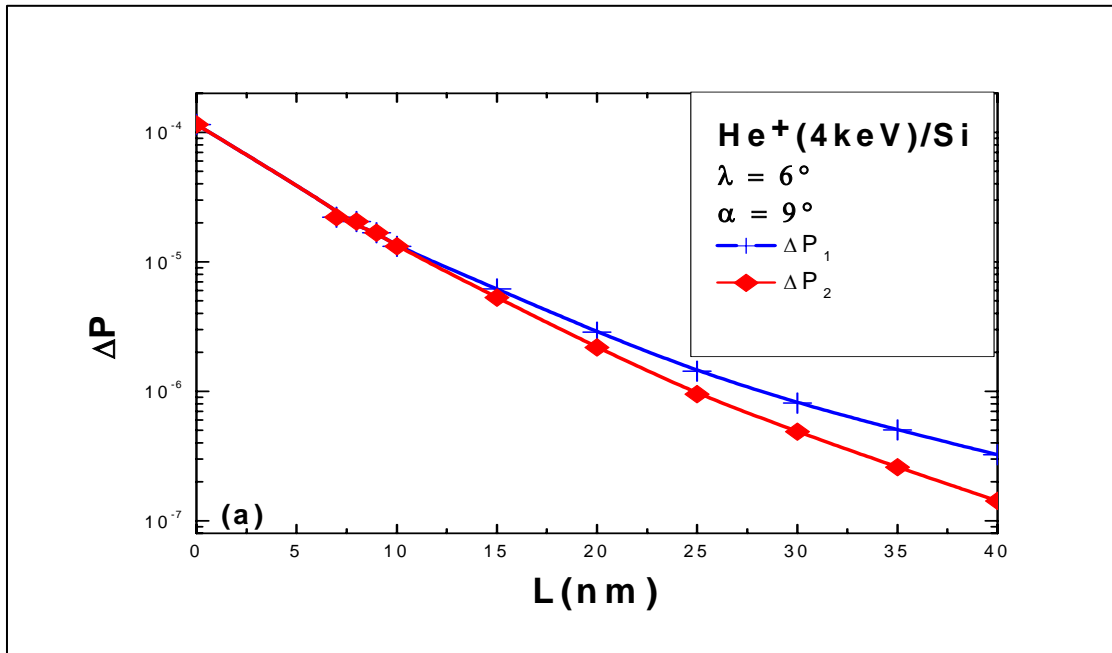
La probabilité de diffusion est calculée pour différentes valeurs du parcours  $L$  dans la cible.

Nous rappelons que nous avons utilisé l'approximation suivante [KHA02] :  $x \approx L$ .  $x$  est l'abscisse du point de sortie de la particule diffusée et  $L$  est son parcours total dans la cible. Ceci nous permet d'obtenir les distributions en longueurs parcourues des ions diffusés.

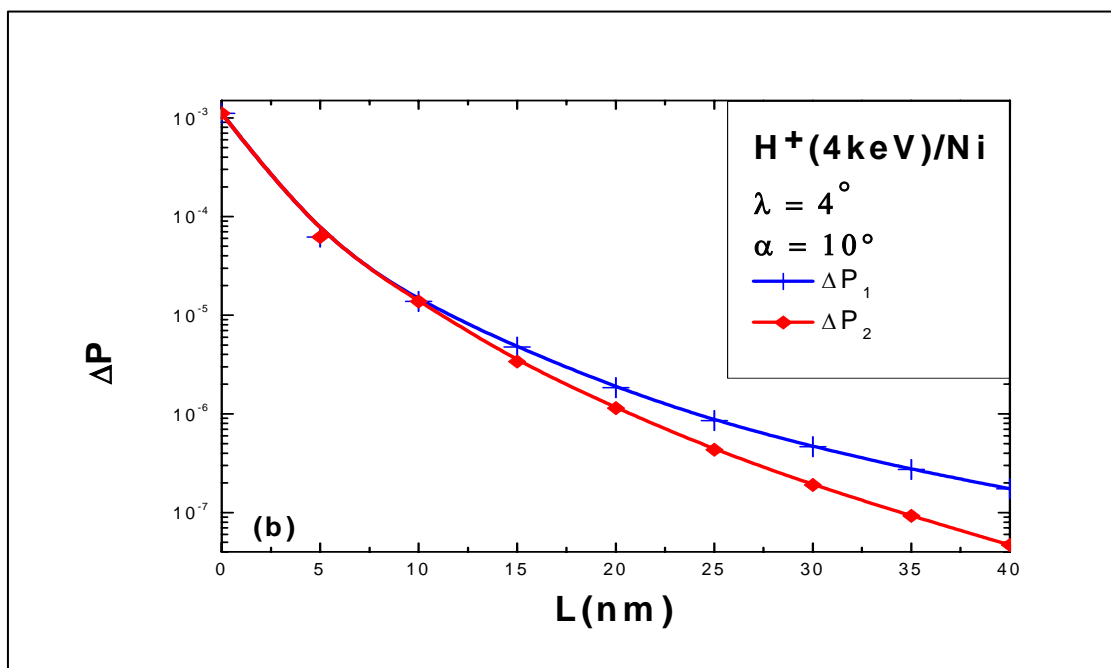
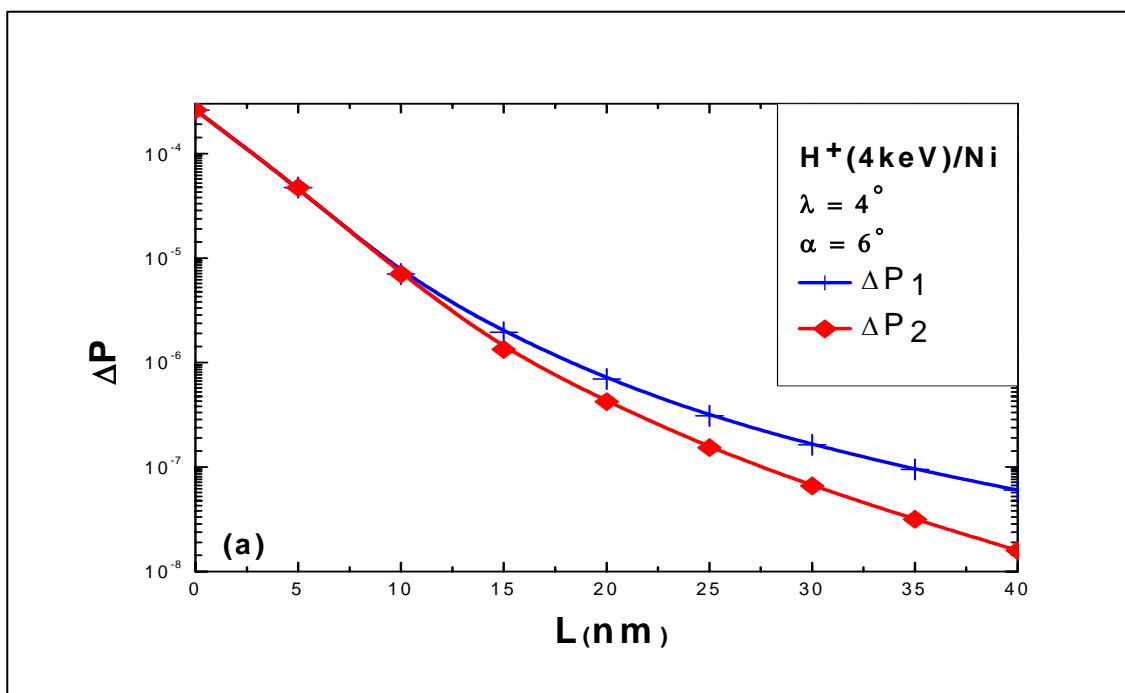
Nous avons calculé les distributions en longueurs pour les systèmes suivants :

$He^+ / Si$ ,  $He^+ / Ni$ ,  $Li^+ / Ni$ ,  $H^+ / Ni$  et ce pour différentes valeurs des angles d'incidence  $\lambda$  et de diffusion  $\alpha$ .

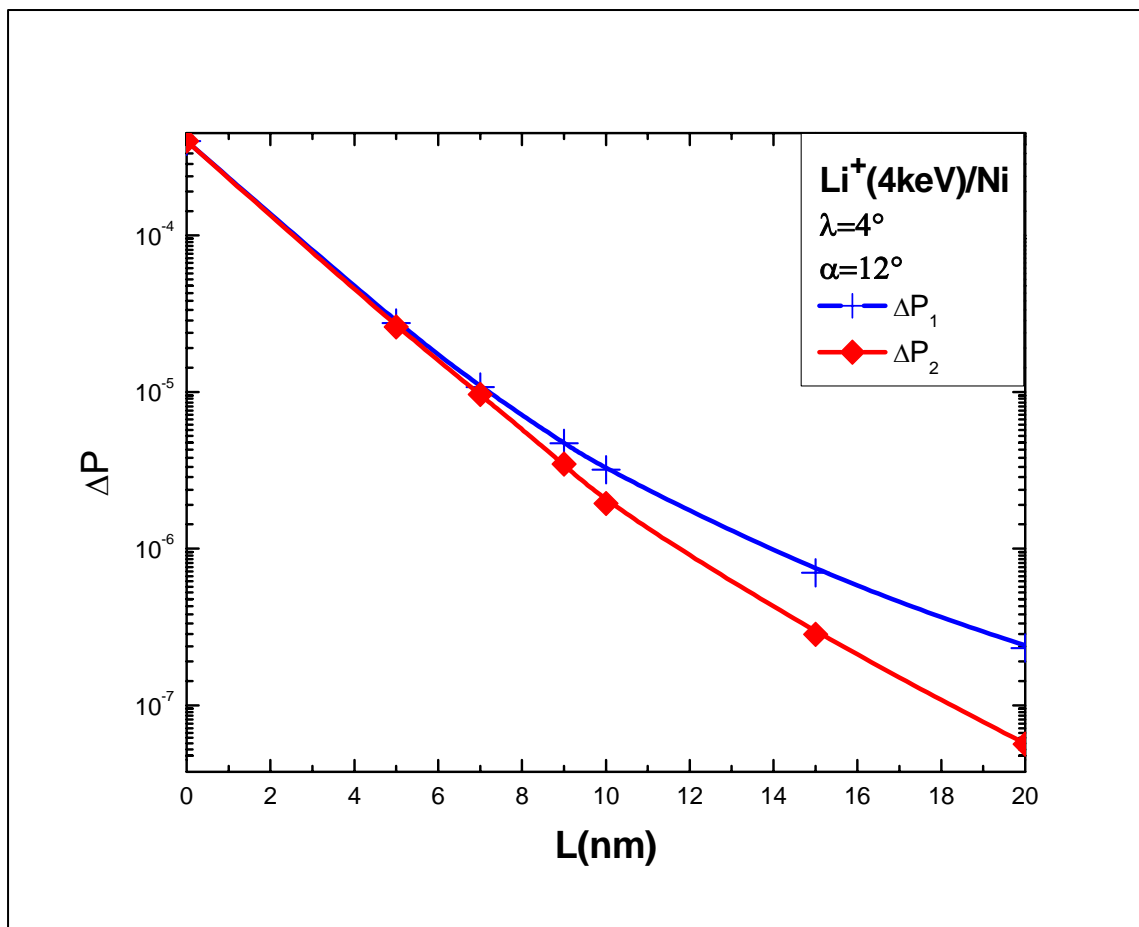
Dans tous les cas étudiés, nous avons pris une énergie incidente  $E_0 = 4keV$ . Sur les figures 3.1, 3.2, et 3.3 nous présentons quelques exemples de la variation de  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  en fonction du parcours.



**Figure 3.1 :** Variation des probabilités  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  en fonction de la distance totale parcourue pour les systèmes : **(a)**  $He^+ / Si$   $\lambda = 6^\circ$ ,  $\alpha = 9^\circ$  et **(b)**  $He^+ / Ni$   $\lambda = 4^\circ$ ,  $\alpha = 6^\circ$ .



**Figure 3.2 :** Variation des probabilités  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  en fonction de la distance totale parcourue pour les systèmes : **(a)**  $H^+ / Ni$   $\lambda = 4^\circ$ ,  $\alpha = 6^\circ$  et **(b)**  $H^+ / Ni$   $\lambda = 4^\circ$ ,  $\alpha = 10^\circ$ .



**Figure 3.3 :** Variation des probabilités  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  en fonction de la distance totale parcourue pour le système :  $Li^+ / Ni$   $\lambda = 4^\circ$ ,  $\alpha = 12^\circ$ .

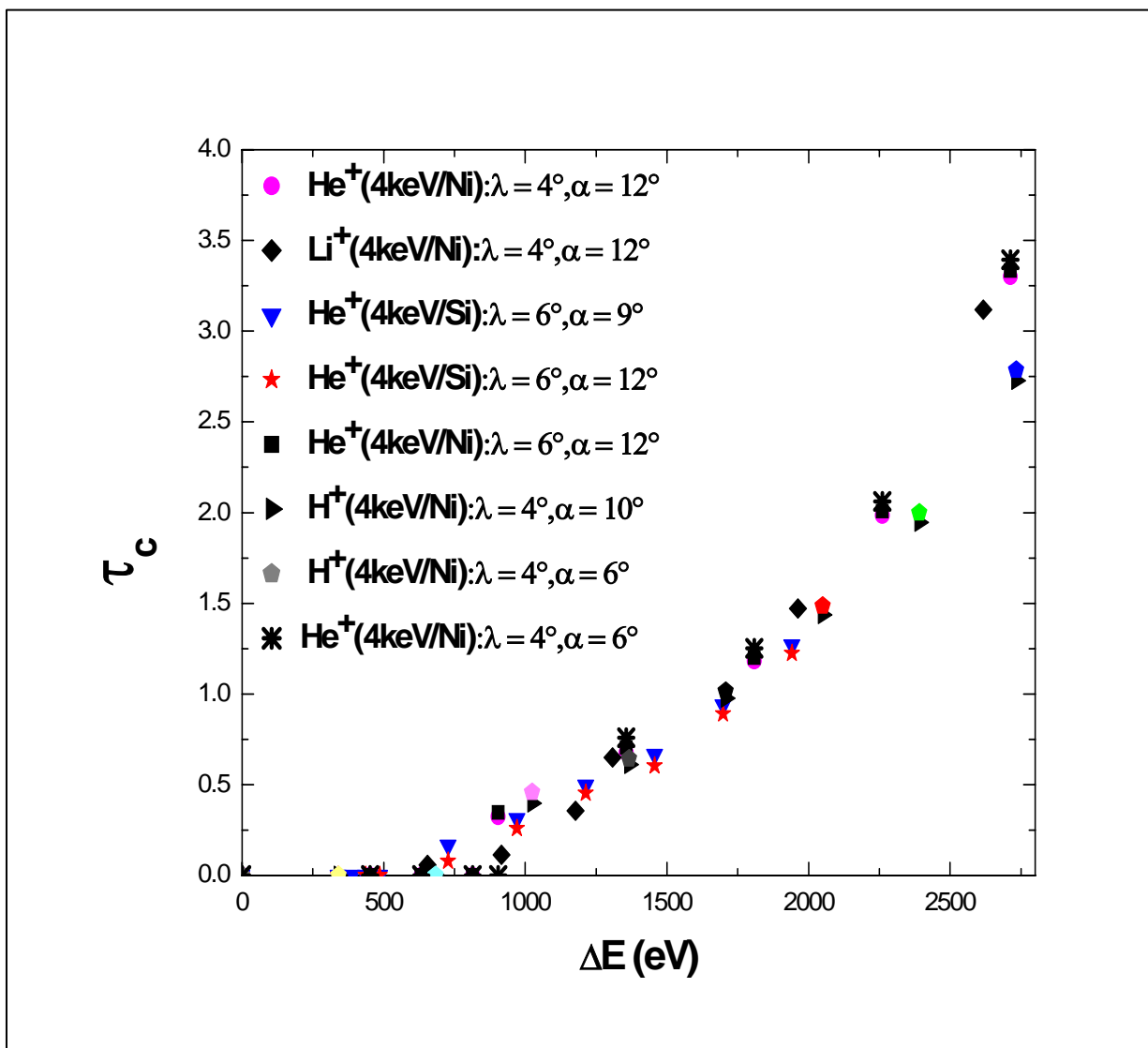
Nous remarquons que :  $\Delta P_1 \approx \Delta P_2$  pour des parcours allant jusqu'à  $L \approx 10nm$ . Au delà,  $\Delta P_2$  prend des valeurs plus faibles que celles de  $\Delta P_1$ . Ceci reste valable pour tous les cas étudiés (i.e. différentes valeurs des angles d'incidence et de diffusion et différents systèmes).

Nous introduisons la correction relative notée  $\tau_c$  comme suit :

$$\tau_c = \frac{\Delta P_1 - \Delta P_2}{\Delta P_2} \quad (3.1)$$

La figure 3.4 représente la variation de la correction relative  $\tau_c$  en fonction de la perte d'énergie totale  $\Delta E$  des ions dans la cible est ce pour différents systèmes et pour différentes valeurs des angles d'incidence et de diffusion. La perte d'énergie totale  $\Delta E$  correspondant à un parcours  $L$  dans la cible, est calculée comme suit :

$$\Delta E = E_0 - E(L) = \int_0^L \left( \frac{dE}{dx} \right)_T dx \quad (3.2)$$



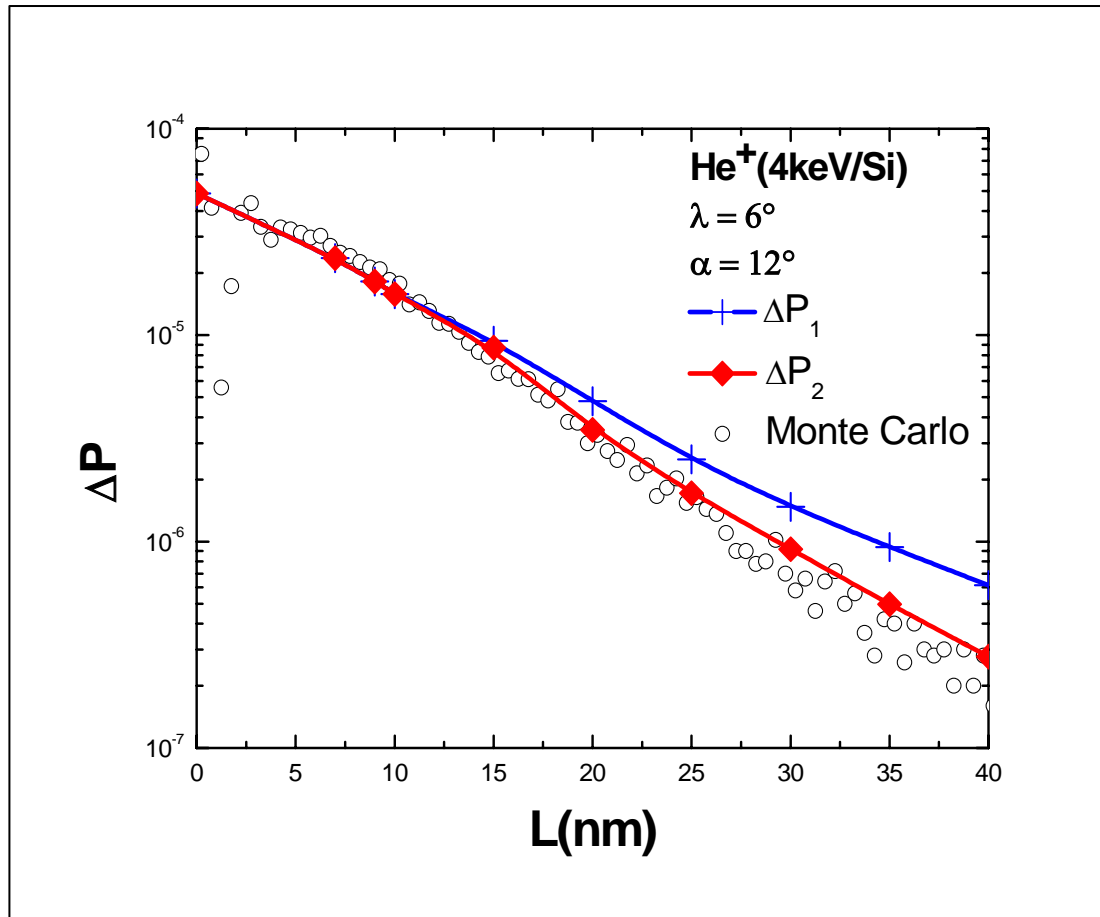
**Figure 3.4** : Variation de la correction relative  $\tau_c$  en fonction de la perte d'énergie  $\Delta E$  des ions dans la cible pour les différents systèmes étudiés.

Pour les faibles pertes d'énergie qui correspondent à des faibles parcours, la correction  $\tau_c$  est pratiquement nulle, mais cette dernière devient de plus en plus importante lorsque la perte d'énergie augmente. Ce comportement est le même pour tous les cas étudiés. Ceci nous confirme que pour les faibles parcours, nous pouvons négliger la perte d'énergie et que cette dernière devient non négligeable pour les grands parcours et ce pour les différents systèmes étudiés.

### 3.3. Comparaison théorie de transport-simulation Monte Carlo

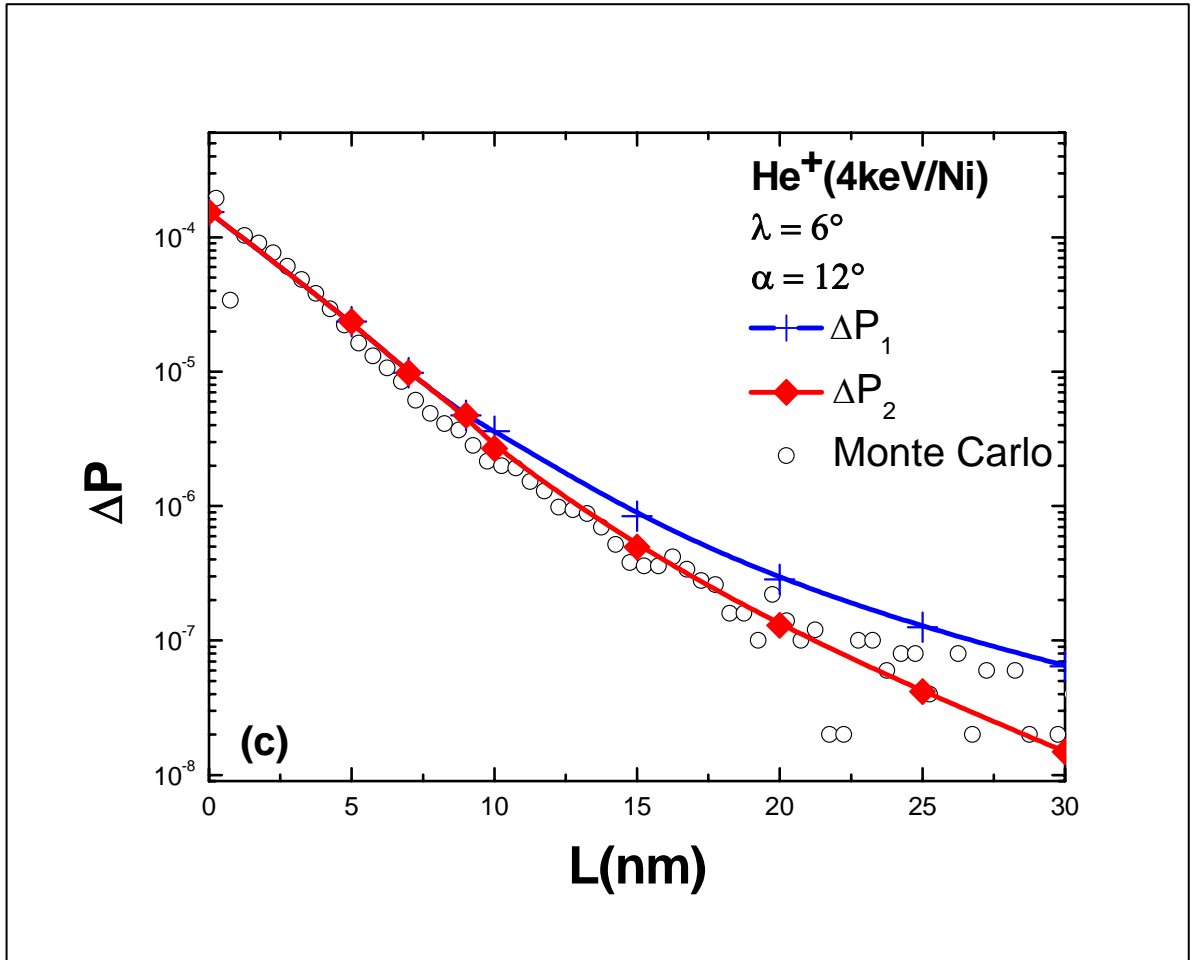
Les distributions en longueurs parcourues des particules diffusées calculées dans la théorie de transport sont comparées à celles obtenues par la simulation Monte Carlo. La comparaison est faite en valeur absolue.

Nous présentons quelques exemples sur les figures : 3.5, 3.6 et 3.7.

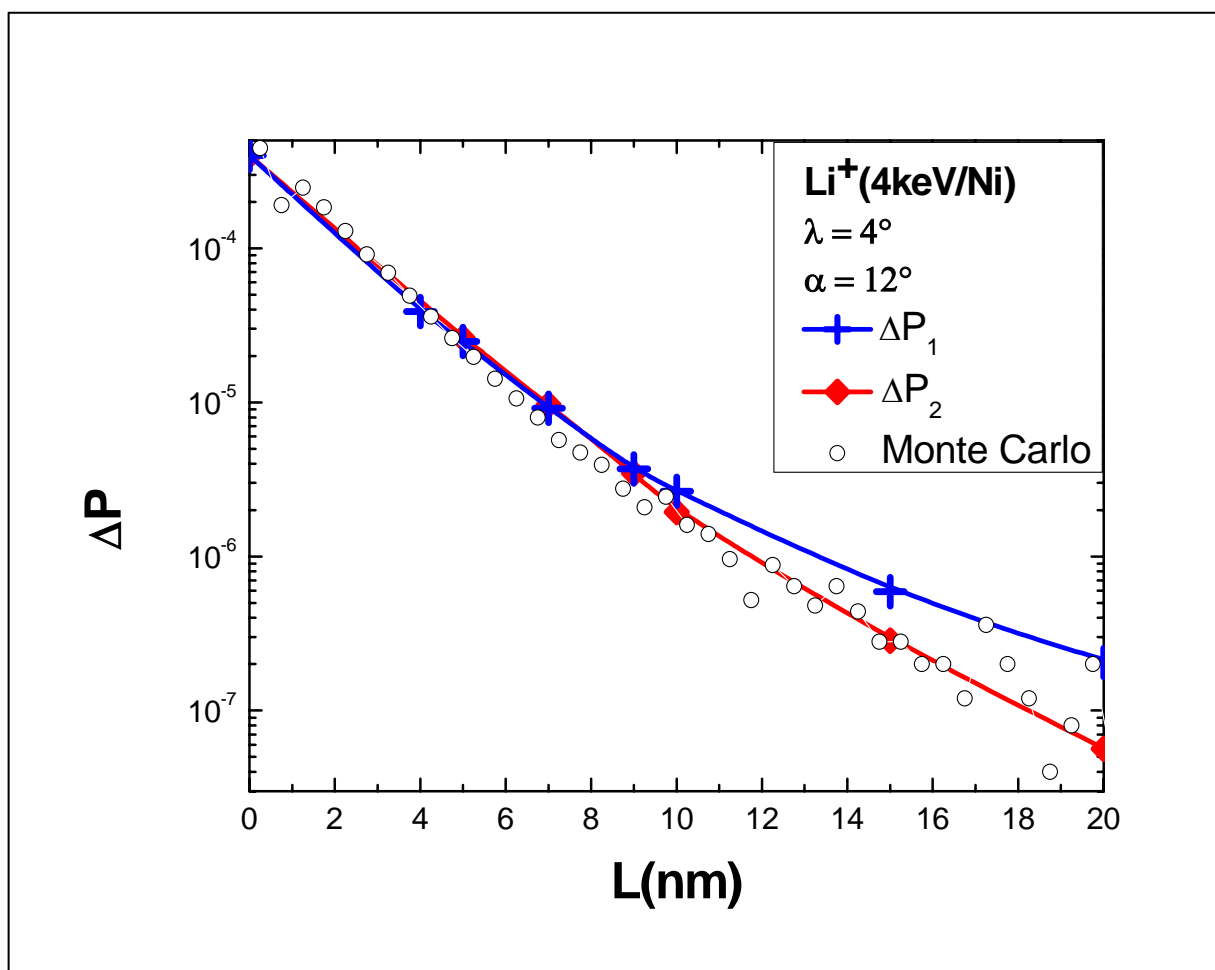


**Figure 3.5 :** Distributions en longueurs des particules diffusées : —+— :  $\Delta P_1$ , —◆— :  $\Delta P_2$ ,

○ : Simulation Monte Carlo, pour :  $He^+(4keV)/Si$  ;  $\lambda = 6^\circ$ ,  $\alpha = 12^\circ$  .



**Figure 3.6 :** Distributions en longueurs des particules diffusées : —+— :  $\Delta P_1$ , —◆— :  $\Delta P_2$ ,  
 ○ : Simulation Monte Carlo, pour :  $He^+(4keV)/Ni$  ;  $\lambda = 6^\circ$ ,  $\alpha = 12^\circ$ .



**Figure 3.7 :** Distributions en longueurs des particules diffusées : —+— :  $\Delta P_1$ , —◆— :  $\Delta P_2$ ,

○ : Simulation Monte Carlo, pour :  $\text{Li}^+(4\text{keV})/\text{Ni}$  ;  $\lambda = 4^\circ$ ,  $\alpha = 12^\circ$

Pour les faibles valeurs du parcours  $L$ , un bon accord est observé entre la théorie de transport et la simulation Monte Carlo ( $\Delta P_1 \approx \Delta P_2 \approx \Delta P(\text{Monte Carlo})$ ).

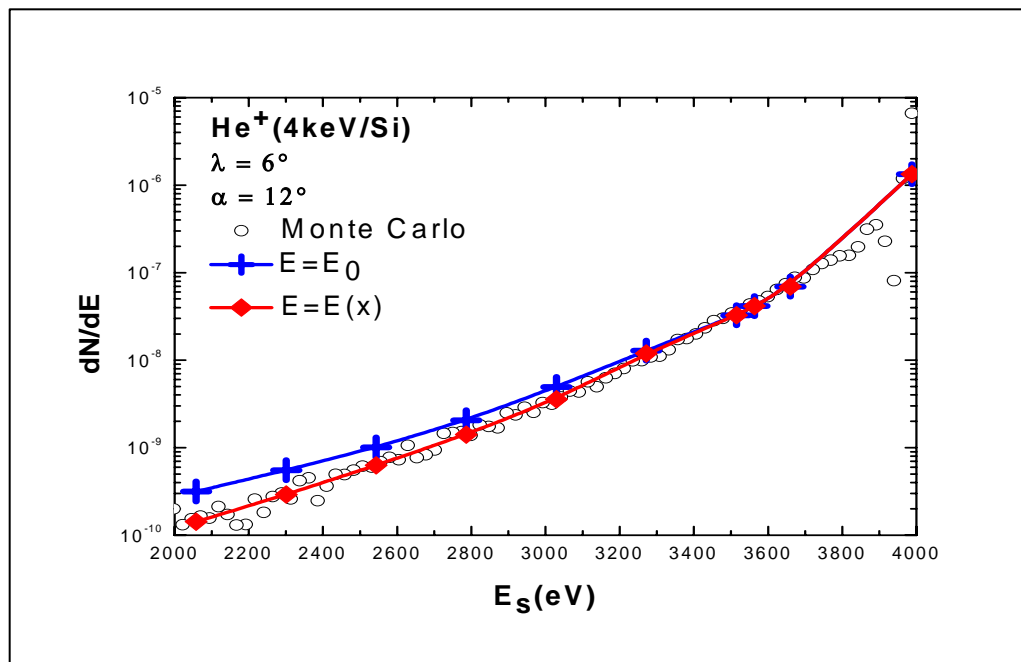
Pour les grands parcours, nous remarquons que l'accord théorie de transport- simulation Monte Carlo est nettement amélioré lorsque la perte d'énergie est prise en compte dans les calculs. Ceci est valable pour tous les cas étudiés.

Ces résultats nous confirment aussi que la perte d'énergie devient importante et donc non négligeable pour les grands parcours.

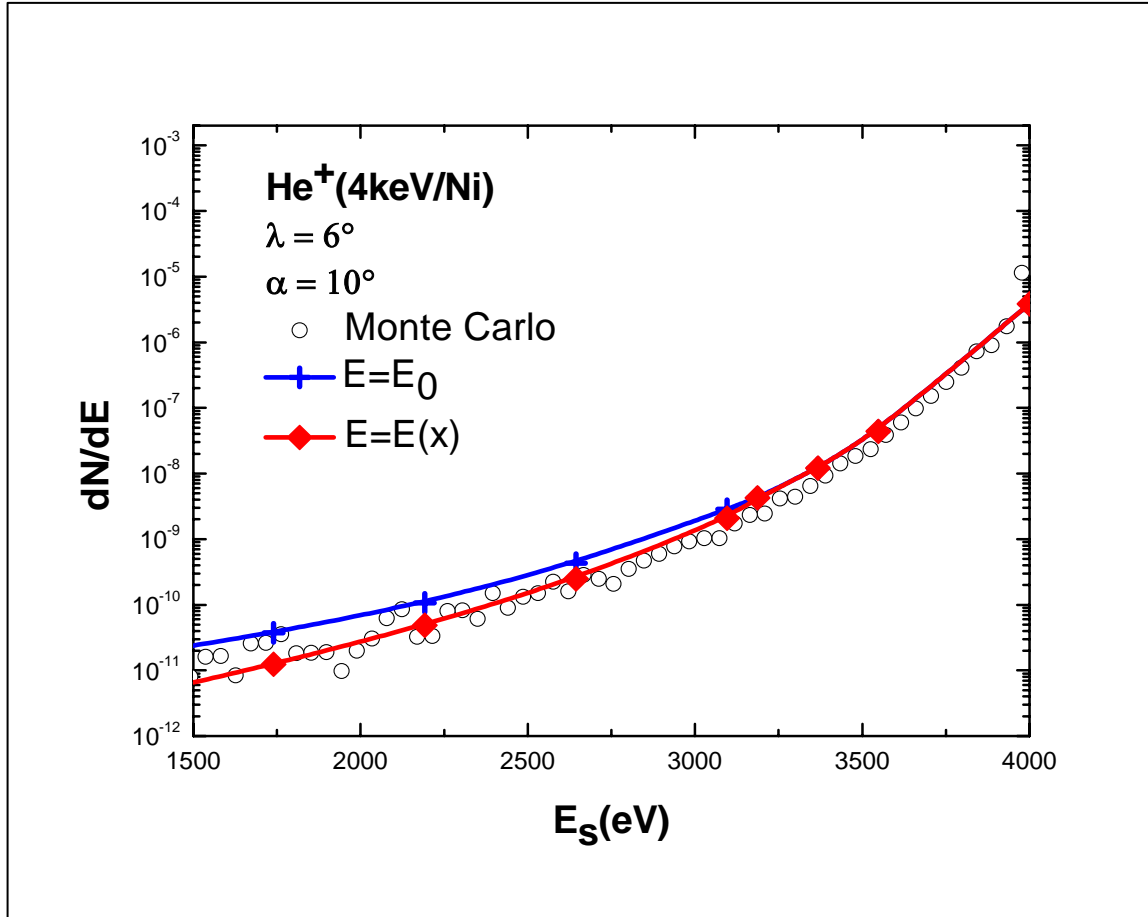
### 3.4. Spectres en énergie de diffusion

A partir des distributions en longueurs calculées, il est possible de construire les spectres énergétiques des particules diffusées en fonction de l'énergie de sortie correspondante à chaque parcours  $L$  (expression 2.26).

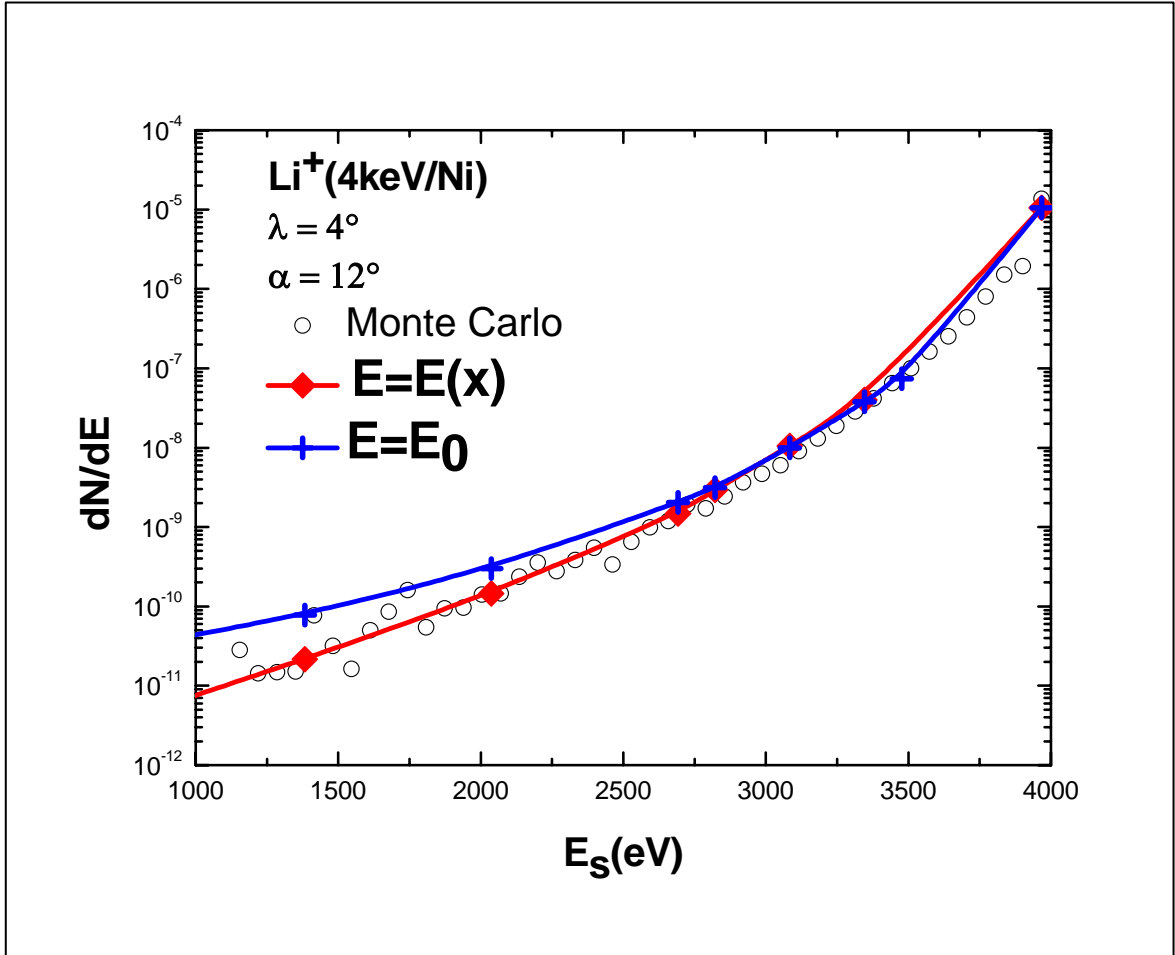
Sur les figures 3.8, 3.9 et 3.10, nous avons représenté quelques spectres calculés dans la théorie de transport (avec et sans la perte d'énergie) et ceux obtenus avec le code Monte Carlo.



**Figure 3.8:** Spectres en énergie obtenus par simulation Monte Carlo et par notre méthode de simulation dans les deux cas :  $E = E_0$  et  $E = E(x)$  et ce pour :  $He^+(4keV)/Si$ ,  $\lambda = 6^\circ$ ,  $\alpha = 12^\circ$ .



**Figure 3.9:** Spectres en énergie obtenus par simulation Monte Carlo et par notre méthode de simulation dans les deux cas :  $E=E_0$  et  $E = E(x)$  et ce pour :  $\text{He}^+(4\text{keV})/\text{Ni}$ ,  $\lambda = 6^\circ$ ,  $\alpha = 10^\circ$ .



**Figure 3.10:** Spectres en énergie obtenus par simulation Monte Carlo et par notre méthode de simulation dans les deux cas  $E=E_0$  et  $E = E(x)$  et ce pour  $Li(4keV)/Ni$   $\lambda = 4^\circ$ ,  $\alpha = 12^\circ$ .

Dans le domaine des grandes énergies de sortie, un bon accord est observé entre les résultats obtenus par la simulation Monte Carlo et ceux obtenus par la théorie de transport (dans les deux cas  $E = E_0$  et  $E=E(x)$ ).

Pour les faibles énergies de sortie, un très bon accord est observé lorsqu'on tient compte de la perte d'énergie totale (électronique et nucléaire) dans les calculs.

Ces résultats nous confirment encore une fois qu'on ne doit pas négliger la perte d'énergie dans le calcul de la probabilité de diffusion pour les grandes distances parcourues.

### **3.5. Conclusion**

Nous avons étudié la diffusion d'ions légers de basse énergie (4keV) par une surface solide.

En utilisant la solution de l'équation de Boltzmann et en tenant compte de la perte d'énergie des projectiles dans la cible, nous avons calculé les distributions en longueurs parcourues des ions  $H^+$ ,  $He^+$ ,  $Li^+$  diffusés par des surfaces de silicium et de nickel. Différentes valeurs des angles d'incidence et de diffusion ont été considérées. A partir de ces distributions en longueurs, nous avons calculé les spectres en énergie des ions diffusés. En comparant nos résultats à ceux obtenus par simulation Monte Carlo, nous remarquons que l'accord théorie de transport-simulation Monte Carlo est nettement amélioré en introduisant la perte d'énergie dans le calcul de la probabilité de diffusion. L'étude de la correction relative apportée à la probabilité de diffusion montre qu'il est nécessaire de tenir compte de la perte d'énergie lorsque celle-ci devient supérieure à 500 eV.

D'autre part, il est important de noter que la probabilité de diffusion devient très faible pour les grands parcours, ainsi les temps requis pour calculer cette probabilité en utilisant les méthodes Monte Carlo deviennent très importants. Pour cette raison, il serait intéressant d'utiliser la théorie de transport dans ce cas.

Enfin, il serait intéressant de comparer les spectres en énergie ainsi calculés à des spectres expérimentaux.

## **CONCLUSION GENERALE**

Ce travail porte sur l'étude de la diffusion d'ions de faible énergie (4 keV) par une surface solide.

Dans le but de mieux comprendre les processus physiques impliqués dans l'interaction d'un faisceau d'ions avec une surface solide, nous avons eu recours à la simulation numérique.

Nous avons utilisé un modèle basé sur la théorie de transport. Il tient compte des collisions multiples qui sont importantes dans notre cas. Nous avons calculé les probabilités de diffusion des ions en fonction de leur parcours ainsi que les spectres énergétiques de diffusion. Ce modèle est basé sur l'approximation des collisions binaires et il est valable pour les faibles angles d'incidence et de diffusion. Il ne tient pas compte de la perte d'énergie des ions dans la cible [MEK05]. Cependant cette dernière devient importante et donc non négligeable pour les grands parcours.

Nous avons donc introduit la perte d'énergie totale dans le calcul des distributions en longueurs des distances parcourues. A partir de ces dernières, nous avons calculé les spectres en énergie des particules diffusées.

Nos résultats ont été comparés en valeur absolue à ceux obtenus en utilisant la simulation Monte Carlo.

Dans les différents cas étudiés et concernant les distributions en longueurs parcourues des particules diffusées, un bon accord est observé entre la théorie de transport et la simulation Monte Carlo ( $\Delta P_1 \approx \Delta P_2 \approx \Delta P (Monte Carlo)$ ) pour les faibles parcours. Mais pour les grands parcours, nous remarquons que l'accord théorie de transport- simulation Monte Carlo est nettement amélioré lorsque la perte d'énergie est prise en compte dans les calculs.

Pour les spectres en énergie des particules diffusées et dans le domaine des grandes énergies de sortie, un bon accord est observé entre les résultats obtenus par la simulation Monte Carlo et ceux obtenus par la théorie de transport (dans les deux cas  $E = E_0$  et  $E=E(x)$ ). Pour les faibles énergies de sortie, un très bon accord est observé lorsqu'on tient en compte des pertes d'énergie totale (électronique et nucléaire) dans les calculs.

Ces résultats nous confirment que nous ne devons pas négliger la perte d'énergie dans le calcul de la probabilité de diffusion.

L'étude de la correction relative apportée à la probabilité de diffusion montre également qu'il est nécessaire de tenir compte de la perte d'énergie au-delà d'un parcours seuil.

Nous signalons finalement qu'il serait intéressant de calculer le coefficient de réflexion en utilisant ce modèle et de comparer les spectres en énergie ainsi calculés à des spectres expérimentaux.

## **REFERENCES**

# REFERENCES

- [ARE97] B. Arezki. Thèse de Magister, I.P, U.S.T.H.B. Alger (1997).
- [ARE98] B. Arezki, Y. Boudoum, P. Benoit-Cattin, A.C. Chami, C. Benazeth, K. Khalal, M. Boudjema, J. Phys.: Condens. Matter 10 (1998) 741.
- [BAR72] M. Barat and H. Lichten, Phy. Res. A 6 (1972) 221.
- [BEL06] K. Belghanem. Thèse de Magister, USTHB, Alger (2006).
- [BOE01] D.O.Boermz, Nucl. Instr. And Meth. Phys. Res. B 183 (2001) 73.
- [DBI99] N.K.T. Dbichi. Thèse de Magister, USTHB, Alger (1999).
- [DOA93] N. V. Doan et F.Rossi, Solid state phenomena 30/31 (1993) 75.
- [ECK78] W. Eckstein, V.A. Molchanov and H. Verbeek. Nuc. Inst. Meth 149 (1978) 599.
- [FAM00] M. Fama, G. H. Lantschner, J.C. Eckardt, C.D. Denton, N.R. Arista, Nucl. Instr. And Meth. B 164-165 (2000) 241.
- [FAN65] U. Fano. and W. Lichen, Phy. Rev Lett. 14 (1965) 627.
- [JAC81] D.P. Jackson, W.Heiland and E.Tglauer, Phys. Rev. B 24 (1981) 4198.
- [HER94] N. Herbots, O.C. Hellman, P. Ye, X. Wang et O. Vancauwenberghe, low energy ion-surface interactions (1994) 387. Ed. J.W. Rabalais.
- [HID01] A. Hidouche. Thèse de Magister, USTHB, Alger (2001).
- [HOU94] Hou.M, J. Phys. III France 4 (1994) 7.
- [KHA98] K. Khalal-Kouache, A.C. Chami, M. Boudjema, Y. Boudouma, B. Arezki, C. Benazeth, P. Benoit-Cattin, Alg. J. Adv. Mater. 2 (1998) 87.
- [KHA99] K. Khalal-Kouache, A.C. Chami, M. Boudjema, Y. Boudouma, P. Benoit-Cattin, C. Benazeth, Alg. J. Adv. Mater. 3 (1999) 3.
- [KHA01] K. Khalal-Kouache, A.C. Chami, M. Boudjema, P. Benoit-Cattin, C. Benazeth, Y.Boudouma, Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. B 183 (2001) 279.
- [KHA02] K. Khalal-Kouache. Thèse de doctorat. Alger 2002.
- [LIC67] W. Lichten, Phys. Rev. B 164 (1967) 131.
- [LIN61] J. Lindhard, M. Scharff, Phys. Rev. 124 (1961) 128.
- [LIN63] J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schiott, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Sels. 33 (1963) 14.
- [MAR75] A. D. Marwick and P. Sigmund, Nucl. Instr. Meth. 128 (1975) 271.
- [MAR94] D. Marton, Low Energy Ion-Surface Interaction (1994) 481. Ed. J.W. Rabalais.
- [MEK05] A. Mekhtiche. Thèse de Magister, USTHB, Alger (2005).
- [MEY71] L. Meyer, Phys. Stat. Sol. 44 (1971) 253.

- [**MOZ00**] I.E. Mozolevski, P.L. Grande, Nucl. Instr. And Meth. Phys. Res B 170 (2000) 45.
- [**NAR03**] A. Narmann and W. Heiland. R. Monreal and F. Flores. P. M. Echenique, Phys. Rev. B44 (1991) 2003.
- [**NIE82**] H. Niehus and E. Preuss, Surf. Sci. 119 (1982) 349.
- [**NIE93a**] H. Niehus, W. Heiland, E. Taglauer, Surf. Sci. Rep. 17 (1993) 213.
- [**NIE93b**] H. Neihus, R. Spitzl, Surf. Interface Anal. 17 (1993) 287.
- [**OVE87**] Overbury. S.H, Nucl.Instr.Meth. B 27 (1987) 65.
- [**RAB93**] J.W.Rabalais. Low Energie Ion-Surface Interactions 1993 (Wiley series Chemistry and Physics).
- [**RAB94**] J. W. Rabalais, Low Energy Ion-Surface Interactions, Wiley, New York 1994.
- [**ROB94**] M.T. Robinson, I.M. Torrens, Phys. Rev. B 9 (1994) 5008.
- [**SIG74**] P. Sigmund, K.B. Winterbon, Nucl. Instr. And Meth. 119 (1974) 541.
- [**SMI97**] R. Smith, M. Jakas, D. Ashworth, B. Oven, M. Bowyer, I.Chakarov et R. Webb, Atomic and ion collisions in solids and at surfaces (1997) Ed. R. Smith.
- [**SNO86**] K. J. Snowdon. R. Hentschke. A. Narmann and W. Heiland, Surf. Sci. 173 (1986) 581.
- [**SOU86**] R. Souda et M. Aono, Nucl. Instr. and Meth. B 15 (1986) 114.
- [**TEO01**] O.M.N.D. Teodoro, A.M.C. Moutinho, Surf. Sci. 482-485 (2001) 1392.
- [**VAL93**] J.E. Valdés, G.Martinez Tamayo, G.H. Lantchner, J.C. Eckardt, N.R. Arista, Nucl. Instr. and Meth. 76 (1993) 313.
- [**WIN96**] H. Winter, J.phys.: Condens. Mater 8 (1996) 10149.
- [**WIN02**] H. Winter, Phys. Rep. 367 (2002) 387.
- [**YAR04**] J.A. Yarmoff, Y. Yang, G.F. Lui, X. Chen, Z. Roubek, Vacuum 73 (2004) 25.
- [**ZIE85**] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, The Stopping and Ranges of Ions in Solids Interaction. Pergamon Press. New York 1985.
- [**ZEM01**] R. Zemih. Thèse de Magister. Alger (2001).