

N° d'ordre: 301/2025-C /PH

*République Algérienne Démocratique et Populaire*  
*Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique*  
*Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene*  
*Faculté de Physique*



## **THESE DE DOCTORAT**

Présentée pour l'obtention du grade de **DOCTEUR**

**EN : Physique**

**Spécialité : Physique des rayonnements**

Par : **MANSOUR Aicha**

Sujet

**Contribution à l'étude des mécanismes d'interaction ion-surface solide:  
Détermination des spectres de diffusion d'ions H<sup>+</sup> (2keV) par des  
surfaces métalliques**

Soutenue publiquement le, 27/02/2025 devant le jury composé de :

Mlle ALLAL Nassima Hosni	Professeur	à l'USTHB	Présidente de jury
Mme KHALAL KOUACHE Karima	Professeur	à l' USTHB	Directrice de thèse
M. TAHRAOUI Abdelatif	Professeur	à l' USTHB	Examineur
M. IZERROUKEN Mahmoud	Directeur de recherche	au CRND	Examineur
M. HAZEM Rafik	Professeur	à l'Université M'hamed Bougara Boumerdes	Examineur
M. MEKHTICHE Abdelhalim	Maitre de conférence/ B	à l'Université Yahya Fares Médéa	Invité

**« A mes chers parents, à mes sœurs adorées,  
A mon mari et à ma précieuse fille Rasha,  
A la mémoire de ma chère grand-mère Djamila,  
A tous ceux que j'aime profondément et que j'estime sincèrement »**

Il est essentiel pour moi d'exprimer ma profonde gratitude envers toutes les personnes qui ont contribué à la réalisation de ce travail et qui ont, chacune à leur manière, joué un rôle crucial dans ce parcours.

Ce travail a été dirigé par Mme KHALAL KOUACHE Karima Professeur à l'USTH que je tiens à lui exprimer ma très vive reconnaissance pour sa disponibilité et ses précieux conseils, qui m'ont été d'un grand soutien tout au long de ce travail.

Je tiens à adresser mes plus sincères remerciements à mes membres du jury.

- Mlle. ALLAL Nassima Hosni professeur à l'USTHB, de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ma soutenance et l'avoir géré avec rigueur et bienveillance, et pour vos remarques constructives qui ont enrichi mon travail et amélioré mon manuscrit.
- M. IZEROUKEN Mahmoud Directeur de recherche au CRND, pour votre expertise, vos précieux conseils et vos questions qui m'ont permis de pousser ma réflexion plus loin. Votre évaluation approfondie a été un véritable enrichissement pour ce travail et m'a offert une perspective nouvelle sur mes recherches.
- Abdelatif M. TAHRAOUI Professeur à l'USTHB, pour son expertise, ses précieux conseils et ses questions toujours stimulantes et ses suggestions pertinentes m'ont permis d'enrichir considérablement la qualité de ce travail.
- M. HAZEM Rafik Professeur à l'UMBB, pour l'attention profonde et rigoureuse portée à ce travail. Ses questions de fond ont constitué des jalons essentiels dans la maturation de ma réflexion. Elles m'ont amenée à interroger plus en profondeur les hypothèses de départ, à clarifier mes positions, et à prendre pleinement conscience des enjeux liés à mon sujet.
- M. MEKHTICHE Abdelhalim Maître de conférences classe B à l'université de Médéa, pour l'aide précieuse apportée lors de la rédaction de l'article issu de cette recherche. Ses suggestions constructives. Son réel intérêt pour le sujet, manifesté à travers des échanges riches et stimulants, a été pour moi une source d'encouragement et de motivation

Ce travail a été réalisé au sein du laboratoire de Physique Nucléaire et Interactions Rayonnements-Matière qui représente un lieu de travail stimulant où l'échange d'idées et le partage d'expériences m'ont permis de grandir tant sur le plan académique que personnel.

Je remercie chaleureusement mes enseignants les professeurs : CHAMI, BOUDJEMA, BOUDOUMA, KESSAL pour leur enseignement de qualité, leur patience et leur disponibilité tout au long de ces années. Je remercie également : M. HAMHAMI, N. ADIMI, MAHDI maîtres de conférences à l'USTHB, pour leur aide et leur sympathie.

Je souhaite adresser un remerciement particulier à mes amis et à toutes les personnes qui ont cru en moi, pour leur soutien moral constant et leur capacité à me redonner de la confiance dans les moments plus difficiles. Je n'oublie pas de remercier ma famille, qui m'a soutenue tout au long de ce parcours. Leur patience, leur confiance et leur amour inconditionnel m'ont permis de rester concentrée et motivée malgré les défis.

Mes plus grands remerciements pour ma famille: mes parents, mes sœurs et mon mari.

## Table des matières :

Introduction générale	1
Chapitre 1 : Généralités sur la diffusion d'ions par une surface solide	4
1. Introduction	5
2. Diffusion ion surface à basse énergie	5
3. Cinématique de la collision	5
4. Potentiel d'interaction	7
4.1. Potentiel Thomas-Fermi-Molière (TFM)	8
4.2. Potentiel de Ziegler-Biersack-Liettmarch (ZBL)	8
4.3. Potentiel de Lenz-Jensen (L-J)	9
5. Perte d'énergie	10
5.1. Perte d'énergie électronique	11
5.2. Perte d'énergie nucléaire	12
5.3. Perte d'énergie totale	14
6. Collisions multiples	14
6.1. Les distributions angulaires	16
6.2. Les distributions énergétiques	18
7. Processus d'échange de charges	19
7.1. Les principaux processus d'échange de charge	20
7.2. Potentiel image	22
8. Simulation numérique	22
8.1. Simulation Monte Carlo	23
8.1. Théorie de transport	23
8.2. Dynamique moléculaire	23
9. Conclusion	24
Références	25
Chapitre 2 : Modèle et méthode de calcul	29
1. Introduction	30

2.Calcul de la probabilité de diffusion $\Delta P$	30
2.1. Théorie de diffusion	30
2.2. Calcul de la probabilité de diffusion sans tenir compte de la perte d'énergie $\Delta P_1$	32
2.3. Introduction de la perte d'énergie dans le calcul de la probabilité de diffusion	34
2.4. Calcul de la probabilité de diffusion avec perte d'énergie $\Delta P_2$	34
3.Procédure numérique	36
4.L'approximation de l'énergie moyenne	36
5.Conclusion	37
Références	38
Chapitre 3 : Résultats et discussions	40
1.Introduction	41
2. La probabilité de diffusion sans tenir compte de la perte d'énergie $\Delta P_1$	41
3.La probabilité de diffusion avec perte d'énergie $\Delta P_2$	44
4.Calcul du rapport R : $(\Delta P_1 - \Delta P_2 / \Delta P_2)$	48
5.Spectres énergétiques	49
6.L'approximation de l'énergie moyenne $E_m$	52
7.Conclusion	57
Références	58
Conclusion générale	59

## المساهمة في دراسة آليات التفاعل بين الأيونات والسطح الصلب: تحديد أطيف تشتت

### أيونات $H^+(2keV)$ من الأسطح المعدنية

توفر دراسة التفاعلات بين الأيونات والسطح الصلب عند الطاقات المنخفضة (من 0.5 كيلو فولت إلى 10 كيلو فولت) معلومات مهمة عن الأسطح. ومن خلال التقنيات التجريبية مثل التشتت الأيوني منخفض الطاقة والمحاكاة العددية، تُجرى العديد من الدراسات لفهم آليات التفاعل هذه بشكل أفضل.

يركز هذا العمل على دراسة تشتت بروتونات 2 كيلو فولت بواسطة الأسطح الصلبة المعدنية. والهدف هو دراسة احتمالية تشتت البروتونات لمختلف العوامل مثل إمكانات التفاعل وفقدان الطاقة، مع الأخذ في الاعتبار المسارات القصيرة (أقل من  $100 \text{ \AA}$ ).

ويعتمد النموذج النظري المستخدم على حل معادلة بولتزمان في نظرية النقل، مع مراعاة تقريب التصادم الثنائي. تُستخدم طريقة مونت كارلو لحساب التكامل متعدد الأبعاد عدديًا لاحتمالية التشتت، مع أخذ فقدان الطاقة في الاعتبار. ولتقليل وقت الحساب، استخدمنا تقريب الطاقة المتوسطة.

تُظهر النتائج التي تم الحصول عليها، ولا سيما بالنسبة للنظام المكون من البروتونات 2 كيلوفولت على النيكل، تأثير أخذ فقدان الطاقة في الاعتبار عند حساب احتمالات التشتت للمسارات الطويلة (أكبر من  $100 \text{ \AA}$ ). تُظهر الحسابات أيضًا تأثير عوامل مثل طبيعة الهدف والهندسة وإمكانات التفاعل على تشتت البروتون. وأخيرًا، يفتح هذا العمل آفاقًا لتحسين دقة النماذج العددية في دراسات تشتت الأيونات منخفضة الطاقة في السطح.

**الكلمات الرئيسية:** التفاعل بين الأيونات والسطح؛ تشتت البروتونات بواسطة سطح صلب؛ تصادمات متعددة؛ نظرية النقل؛ احتمال التشتت؛ أطيف الطاقة؛ تقريب متوسط الطاقة

# **Contribution to the study of ion - solid surface interaction mechanisms: Determination of H<sup>+</sup>( 2keV) ion scattering spectra from metal surfaces**

## **Abstract :**

The study of ion-solid surface interactions at low energies (from 0.5 keV to 10 keV) provides crucial information about surfaces. Through experimental techniques such as low-energy ion scattering (LEIS) and numerical simulation, several studies are being carried out to better understand these interaction mechanisms.

This work focuses on the study of the scattering of 2 keV protons by metallic solid surfaces. The aim is to study the probability of proton scattering for various parameters such as interaction potential and energy loss, taking into account short paths (less than 100 Å). The theoretical model used is based on the solution of the Boltzmann equation in transport theory, taking into account the binary collision approximation (BCA). The Monte Carlo method is used to numerically calculate the multidimensional integral of the diffusion probability, taking energy loss into account. In order to reduce computation time, we have used the mean-energy approximation.

The results obtained, in particular for the H<sup>+</sup> (2 keV) / Ni system, show the effect of taking energy loss into account when calculating scattering probabilities for long paths in the target (paths greater than 100 Å). The calculations also show the impact of factors such as target nature, geometry and interaction potential on proton scattering. Finally, the work opens up prospects for improving the accuracy of numerical models in low-energy ion-surface scattering studies.

**Key words:** Ion-surface interaction; Proton scattering by a solid surface; Multiple collisions; Transport theory; Scattering probability; Energy spectra; Mean energy approximation.



# **Introduction générale**

## Introduction générale

L'interaction des particules chargées avec la matière donne lieu à plusieurs processus comme la transmission et la diffusion. Chaque processus dépend de l'énergie incidente ainsi que de la nature du projectile et de la cible.

L'étude des collisions des ions lents (de 0.5 à 10keV) avec une surface solide a une grande importance pour ce qu'elle nous informe sur la structure atomique des surfaces. Afin de déterminer la composition élémentaire et structurale des cibles solides [1-2], des techniques d'analyse expérimentales telles que LEIS (Low Energy Ion Scattering) [2] sont utilisées d'un côté. D'un autre côté, il y a les modèles théoriques qui sont implémentés dans des codes de calcul comme SRIM2008 [3] et TRBS [4].

Notre travail se concentre sur l'étude de la diffusion des protons de basse énergie. De nombreuses applications, allant de la microélectronique à la fusion nucléaire, reposent sur une compréhension approfondie des processus d'interaction.

Dans le cadre de cette thèse, nous nous focalisons sur la diffusion des protons de 2 keV par des cibles métalliques, en nous appuyant sur des calculs précis de la probabilité de diffusion et montrant l'effet de la perte d'énergie et du potentiel d'interaction.

Dans une continuité des travaux précédents [5-6-7], ce projet vise à réduire le temps de calcul, particulièrement pour les faibles parcours, où ce dernier devient très coûteux en temps et nécessite l'utilisation des machines à haute performance comme le cluster. L'objectif est également d'atteindre des faibles épaisseurs ( $x < 100 \text{Å}$ ) et d'améliorer la précision des résultats simulés afin de garantir une fiabilité accrue.

Cette thèse est organisée en trois chapitres :

Le premier chapitre présente les principes fondamentaux nécessaires à la compréhension du phénomène de la diffusion ion-surface à basse énergie. Tout d'abord, le chapitre aborde le rôle du potentiel d'interaction dans la description des forces agissant entre les protons et les cibles solides. Par la suite, on donne une analyse approfondie de la perte d'énergie au cours des collisions, qui influence significativement le transfert d'énergie entre le projectile et la matière [8]. Par la suite, la théorie des collisions multiples [9] est traitée afin de comprendre comment ces interactions successives impactent la trajectoire et la diffusion des protons. Enfin, une attention particulière est portée au processus d'échange de charges, qui joue un rôle déterminant dans les changements d'état des ions lors de leur passage à travers la matière.

Dans le deuxième chapitre, nous abordons le calcul de la probabilité de diffusion  $\Delta P$  en décrivant la théorie de diffusion et en détaillant la méthode utilisée pour calculer cette probabilité. Dans un premier temps, nous effectuons le calcul de la probabilité de diffusion sans tenir compte de la perte d'énergie  $\Delta P_1$  en suivant un modèle théorique précis. Ensuite, nous introduisons l'effet de la perte d'énergie, avant de réaliser le calcul de la probabilité de diffusion avec perte d'énergie  $\Delta P_2$ . La procédure numérique employée repose sur la méthode de Monte

## Introduction générale

Carlo [10], tandis que les hypothèses sont basées sur le modèle de Sigmund [11]. Enfin, on traite l'approximation de l'énergie moyenne [12], qui joue un rôle clé dans nos simulations et nos calculs.

Le dernier chapitre est consacré aux résultats de notre étude, portant sur le système  $H^+(2 \text{ keV})/Ni$ . Nous y présentons des distributions de probabilité de diffusion en longueurs. Par la suite, nous introduisons la perte d'énergie dans nos calculs, ce qui permet d'obtenir de nouvelles valeurs de probabilité de diffusion, tenant compte de cet effet. Nous analysons l'impact de la perte d'énergie sur les spectres énergétiques et évaluons l'influence de différents facteurs ; tels que la nature de la cible (Au, Ag, Cu et Al), la géométrie, ainsi que le potentiel d'interaction (ZBL [13], TFM [14], L-J [15]) sur l'approximation de l'énergie moyenne [16].

Nous terminons par une conclusion générale, résumant les points essentiels de notre thèse et en discutant les résultats obtenus.

## Références

- [1] W. Eckstein, V. A. Molchanov, and H. Verbeek, "The charge states of He and Ne backscattered from Ni in the energy range of 1.5-15 keV," *Nuclear Instruments and Methods*, vol. 149, no. 1–3, pp. 599–604, 1978, doi: 10.1016/0029-554X(78)90935-7.
- [2] H. Niehus, W. Heiland, and E. Taglauer, "Low-energy ion scattering at surfaces," *Surf Sci Rep*, vol. 17, no. 4–5, pp. 213–303, 1993, doi: 10.1016/0167-5729(93)90024-J.
- [3] J.F.Ziegler, *The Stopping and Ranges of Ions in Matter ("SRIM-2000")*, Computer software package. Can be downloaded via internet <http://www.SRIM.org>
- [4] P. Brüner et al., "Thin film analysis by low-energy ion scattering by use of TRBS simulations," *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, vol. 33, no. 1, p. 01A122, Jan. 2015, doi: 10.1116/1.4901451.
- [5] A. Mekhtiche, "Diffusion d'ions de faible énergie par une surface solide : Simulation basée sur la théorie de transport pour le calcul du coefficient de réflexion," Thèse de Magister, Université Des Sciences Et De La Technologie Houari Boumediene, 2005.
- [6] K. Khalal-Kouache, B. Aissous, A. Mekhtiche, and A. C. Chami, "Effect of energy loss in the simulation of slow ion scattering by a solid surface," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 266, no. 5, pp. 714–718, 2008. doi: 10.1016/j.nimb.2007.11.043
- [7] A. Mekhtiche and K. Khalal-Kouache, "Multiple scattering of low energy ions in matter: Influence of energy loss and interaction potential," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 354, pp. 151–154, 2015, doi: 10.1016/j.nimb.2014.11.086.
- [8] E. D. Cantero, G. H. Lantschner, and N. R. Arista, "Interaction of low energy protons, deuterons, H +2 and D +2 with carbon foils: Energy-angle distributions and velocity dependence of the energy loss," *European Physical Journal D*, vol. 65, no. 3, pp. 397–404, 2011, doi: 10.1140/epjd/e2011-20397-3.
- [9] S. Ikegami, "A new screening length for small angle multiple scattering," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 311, pp. 14–19, 2013, doi: 10.1016/j.nimb.2013.06.006.
- [10] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics: Chapters 1-4," *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, pp. 1–130, 1999.
- [11] P. Sigmund and B. Winterbon, "Small-angle multiple scattering of ions in the screened Coulomb region : I. Angular distributions," no. October 2017, 1974, doi: 10.1016/0029-554X(74)90805-2.
- [12] J. E. Valdés and N. R. Arista, "Energy-loss effects in multiple-scattering angular distributions of ions in matter," 1994. doi: 10.1103/PhysRevA.49.2690.
- [13] J. F. Ziegler and J. P. Biersack, "The Stopping and Range of Ions in Matter BT - Treatise on Heavy-Ion Science: Volume 6: Astrophysics, Chemistry, and Condensed Matter," D. A. Bromley, Ed., Boston, MA: Springer US, 1985, pp. 93–129. doi: 10.1007/978-1-4615-8103-1\_3.
- [14] Moliere Gert, "Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld," 1947. doi: 10.1515/zna-1947-0302.
- [15] W. Lenz, "Über die Anwendbarkeit der statistischen Methode auf Ionengitter," *Zeitschrift für Physik*, vol. 77, no. 11–12, pp. 713–721, 1932.
- [16] A. Mansour, A. Mekhtiche, and K. Khalal-Kouache, "Reflection of H+(2 keV) Ions from Metallic Surfaces: Transport Theory Calculation of the Reflection Probability with the Mean Energy Approximation," *Journal of Surface Investigation*, vol. 16, no. 6, pp. 1231–1236, 2022, doi: 10.1134/S1027451022060416.

## **Chapitre 1 :**

# **Généralités sur la diffusion d'ions par une surface solide**

## 1. Introduction

L'interaction des particules chargées avec la matière constitue un vaste domaine de recherche, englobant une multitude de processus tels que la transmission et la diffusion. Ces interactions ont été le sujet d'étude de plusieurs travaux théoriques et expérimentaux.

Notre étude requiert une compréhension approfondie du phénomène de la diffusion à basse énergie, afin de pouvoir décrire et exploiter avec précision les données théoriques nécessaires aux calculs visés dans cette thèse.

## 2. Diffusion ion-surface à basse énergie

L'interaction projectile-cible peut prendre différentes formes comme : la diffusion et la transmission. Ces dernières dépendent de l'énergie initiale et la masse du projectile et la masse et la nature de la cible ainsi que du transfert d'énergie entre les particules et la matière. On distingue deux types de collision : élastique et inélastique.

Dans le cas des collisions élastiques, le projectile n'interagit pas avec le cortège électronique de la cible. Il passe à travers la région où règne un champ coulombien répulsif. L'énergie cinétique est conservée [1] et le couple projectile-cible ne change pas de structure après la collision[2]. Dans le cas des collisions inélastiques, le projectile interagit avec les électrons de la cible et l'énergie cinétique est convertie en énergie potentielle par trois voies et donne naissance à trois processus importants : l'émission des électrons secondaires, l'excitation et l'ionisation au niveau de la cible [3]. Dans notre étude, on se focalise sur la diffusion des ions légers de basse énergie (de 1-5 keV).

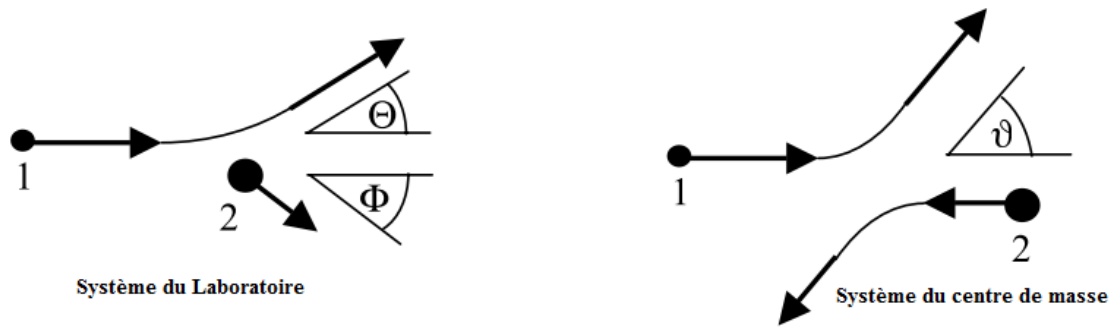
La gamme des faibles énergies nous permet d'utiliser un modèle théorique simple tant que la longueur d'onde associée aux ions incidents est inférieure au : paramètre d'impact, à la distance minimale d'approche et à l'espace interatomique qui décrivent l'interaction [4].

On traite la collision ion-surface dans le cadre des collisions binaires. Lors de son parcours dans la cible, l'ion traverse une épaisseur donnée et perd de l'énergie. Ce passage est schématisé dans la figure **fig1.1**[5].

## 3. Cinématique de la collision

On décrit cette collision par un modèle théorique simple. L'interaction entre l'ion incident et l'atome cible, qui se traduit par la diffusion de l'ion par le champ électrique induit par l'atome, peut être modélisée en mécanique classique comme un problème à deux corps isolés. On considère que les collisions sont binaires [5].

Dans le système du centre de masse, la collision entre le projectile et la cible peut être modélisée comme la diffusion d'une seule particule de masse réduite  $\mu$  qui est donnée par la relation (1.1).



$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} \quad (1.1)$$

$m_1$  et  $m_2$  sont respectivement la masse du projectile et la masse de la cible.

L'énergie disponible dans le système du centre de masse  $E_{CM}$  s'écrit comme :

$$E_{CM} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} E_0 \quad (1.2)$$

$E_0$  est l'énergie initiale du projectile dans le système du laboratoire.

Dans le cas d'une collision élastique, on utilise les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement pour déterminer les expressions des différents termes qui interviennent dans l'interaction.

L'angle de diffusion dans le système du laboratoire est  $\theta$  et l'angle de diffusion dans le système centre de masse est  $\vartheta$ . Ils sont définis par :

$$\tan \theta = \frac{\sin \vartheta}{\frac{m_1}{m_2} + \cos \vartheta} \quad (1.3)$$

$$\vartheta = \theta - \arcsin\left(\frac{m_1}{m_2} \sin \theta\right) \quad (1.4)$$

L'angle  $\phi$  s'écrit comme : 
$$\phi = \frac{\pi - \vartheta}{2} \quad (1.5)$$

L'énergie de recul  $T$  (l'énergie transférée à la cible) dans le système du laboratoire s'écrit :

$$T = \gamma E_0 \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \quad (1.6)$$

Avec le facteur de transfert d'énergie  $\gamma$  : 
$$\gamma = \frac{4 m_1 \cdot m_2}{(m_1 + m_2)^2} \quad (1.7)$$

De là, on peut déduire l'expression de l'énergie  $E'$  du projectile après la collision

$$E' = E_0 - T = E_0 \left(1 - \gamma \cdot \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\right) \quad (1.8a)$$

Elle s'écrit aussi en fonction de  $\theta$  comme suit :

$$E' = E_0 \left( \frac{m_1}{m_1+m_2} \right)^2 \left( \cos \theta \pm \sqrt{\left( \frac{m_2}{m_1} \right)^2 - \sin^2 \theta} \right)^2 \quad (1.8b)$$

On tire l'expression du facteur cinématique K qui est le rapport entre l'énergie du projectile après la collision et son énergie initiale.

$$K = \frac{E'}{E_0} \quad (1.9a)$$

$$K = \left( \frac{m_1}{m_1+m_2} \right)^2 \left( \cos \theta \pm \sqrt{\left( \frac{m_2}{m_1} \right)^2 - \sin^2 \theta} \right)^2 \quad (1.9b)$$

Le choix du signe dépend du rapport des masses : le signe (+) est utilisé lorsque la cible est plus lourde que le projectile ( $m_2 > m_1$ ), ce qui donne une seule valeur d'énergie pour chaque angle de diffusion  $\theta$ , tandis que le signe (-) s'applique lorsque la cible est plus légère que le projectile ( $m_2 < m_1$ ), entraînant deux valeurs d'énergie possibles à la sortie pour un même angle  $\theta$ .

#### 4. Potentiel d'interaction

Lorsqu'un atome entre en collision avec un autre, il se produit une interaction entre les noyaux et les cortèges électroniques des deux atomes en présence. On décrit ces interactions par le potentiel interatomique. Ce dernier résulte de la force coulombienne créée entre les deux noyaux. Le potentiel joue un rôle très important dans le phénomène d'interaction. Il est le facteur dominant dans le processus de diffusion. A partir de son expression, on peut déterminer les trajectoires des particules en collision [6]. Ainsi, cela permet de calculer la distance minimale d'approche. La valeur du potentiel dépend à la fois de la charge du projectile et de celle de la cible. Il s'exprime en fonction de la distance qui sépare les deux (eq (1.10)).

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \quad (1.10)$$

$Z_1$  et  $Z_2$  sont respectivement les numéros atomiques du projectile et de la cible.

$e$  est la charge de l'électron et  $r$  est la distance qui sépare les deux particules.

La nature du potentiel d'interaction entre deux particules est intimement liée à la distance  $r$  qui les sépare.

Le potentiel interatomique est influencé par la présence des électrons (le nuage électronique) [5]. On fait appel au potentiel écranté qui reflète la diminution de la répulsion coulombienne entre les deux noyaux due à l'écrantage des charges positives par les nuages électroniques [7].

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi \left( \frac{r}{a} \right) \quad (1.11)$$

Le potentiel Coulombien écranté a une fonction d'écran constituée d'une somme de fonctions exponentielles, le rayon d'écran est pris comme référence à l'échelle des longueurs [6].

$a$  est le rayon d'écran et  $\phi(r/a)$  est la fonction d'écran qui s'écrit sous la forme:

$$\phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^n \alpha_i e^{-(\beta_i \frac{r}{a})} \quad (1.12)$$

$n$ ,  $\alpha_i$  et  $\beta_i$  sont des constantes d'ajustement. Ces constantes diffèrent d'un potentiel à l'autre.

De nombreux travaux ont été réalisés afin de trouver un potentiel adéquat pour décrire les interactions atomiques de plusieurs types d'atomes. Les potentiels souvent utilisés dans les interactions à basse énergie sont :

#### 4.1. Potentiel Thomas-Fermi-Molière (TFM)

En se basant sur le modèle statistique de Thomas-Fermi qui décrit le potentiel atomique dans le cas d'un atome singulier de charge  $Z$  comme [7]:

$$V(r) = \frac{Ze}{r} \phi\left(\frac{r}{a_{TF}}\right) \quad (1.13)$$

le rayon de Thomas-Fermi  $a_{TF}$  s'écrit comme suit :

$$a_{TF} = \frac{0.88534 a_0}{Z^{1/3}} \quad (1.14)$$

$a_0$  est le rayon de Bohr. Il est égal à  $0.53 \text{ \AA}$

Firsov a apporté une modification sur le rayon de TF pour l'adapter à une interaction de deux atomes[8] . L'expression qui a été proposée est :

$$a_{TFMolière} = \frac{0.885 a_0}{(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}} \quad (1.15)$$

Dans notre calcul, on utilise l'expression (1.15) pour exprimer le potentiel TFM. Molière a proposé les paramètres suivants pour exprimer l'expression de la fonction d'écran [9] :

$$\phi\left(\frac{r}{a_{TFM}}\right) = \sum_{i=1}^3 c_i e^{-\left(\frac{d_i r}{a_{TFM}}\right)} \quad (1.16)$$

Les valeurs des coefficients  $c_i$  et  $d_i$  sont donnés dans le tableau tab1.1

$c_i$	0.35	0.55	0.1
$d_i$	0.3	1.2	6

**Tableau 1.1** : Les valeurs des coefficients  $c_i$  et  $d_i$  du potentiel TFM

#### 4.2. Potentiel de Ziegler-Biersack-Liettmarch (ZBL)

Ziegler, Biersack et Littmark ont travaillé sur 522 paires d'atomes et ont calculé le potentiel atomique pour chacune d'entre elles. Ils ont pu déterminer une expression approximative pour le potentiel ZBL, communément appelé potentiel universel. Ainsi, la fonction d'écran de ce potentiel s'exprime comme suit :

$$\Phi\left(\frac{r}{a_{ZBL}}\right) = \sum_{i=1}^4 c_i e^{-\left(\frac{d_i r}{a_{ZBL}}\right)} \quad (1.17)$$

Les valeurs des coefficients  $c_i$  et  $d_i$  sont donnés dans le tableau tab1.2 [10].

$c_i$	0.028171	0.28022	0.50986	0.18175
$d_i$	0.20162	0.4029	0.94229	3.1998

Tableau 3.2 : Les valeurs des coefficients  $c_i$  et  $d_i$  du potentiel ZBL

Le rayon d'écran ZBL est donné dans l'équation (1.18).

$$a_{ZBL} = \frac{0.885 a_0}{(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} \quad (1.18)$$

#### 4.3. Potentiel de Lenz-Jensen (L-J)

Parmi les premières fonctions d'écran développées pour le potentiel de Coulomb figure celle proposée par Lenz et Jensen [11], dont la forme se distingue de celle de la plupart des autres fonctions d'écran.

$$\phi(x) = (1 + y + 0.3344y^2 + 0.485 y^3 + 0.002647y^4)e^{-y} \quad (1.19)$$

$$\begin{cases} x = r/a_{Lindhared} \\ y = \sqrt{9.67x} \end{cases} \quad (1.20)$$

$$a_{Lindhared} = \frac{0.885 a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad (1.21)$$

Par la suite, Nakagawa et Yamamura ont donné une nouvelle expression au potentiel de Lenz-Jensen qu'on appelle le potentiel moyen modifié (AMLJ). Cette équation a été tirée après des calculs semblables à ceux du potentiel ZBL et avec des corrections relativistes [12]-[13]. Ils expriment la fonction d'écran comme suit :

$$\phi(x) = e^{-\alpha_1 x + \alpha_2 x^{3/2} - \alpha_3 x^2} \quad (1.22)$$

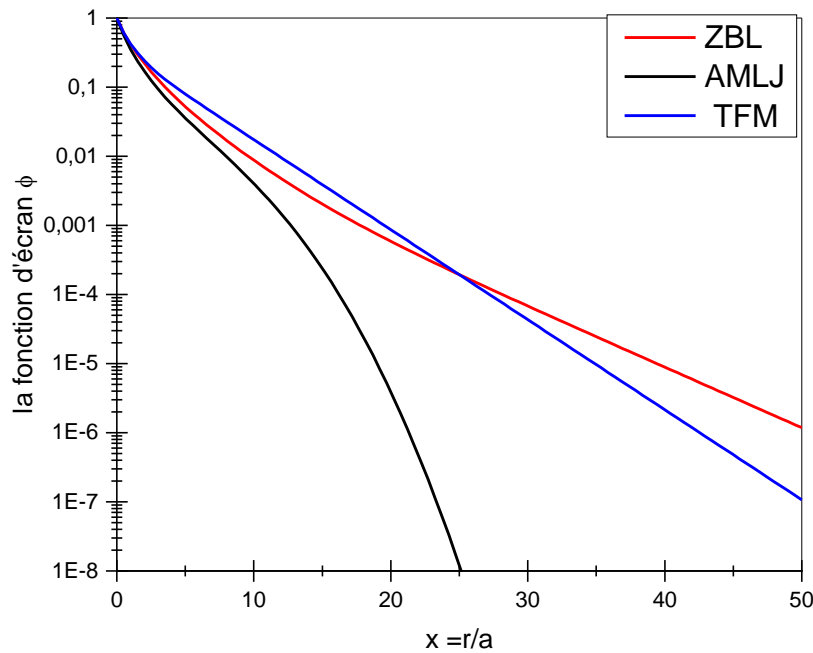
Les paramètres  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  et  $\alpha_3$  sont exprimés en fonction des numéros atomiques  $Z_1$  et  $Z_2$  dans l'équation (1.23).

$$\begin{cases} \alpha_1 = 1.51 \\ \alpha_2 = 0.763 \frac{Z_1^{0.169} + Z_2^{0.169}}{Z_1^{0.307} + Z_2^{0.307}} \\ \alpha_3 = 0.191 \left( \frac{Z_1^{0.0418} + Z_2^{0.0418}}{Z_1^{0.307} + Z_2^{0.307}} \right)^{4/3} \end{cases} \quad (1.23)$$

$$x = r/a_{AMLJ}$$

$a_{AMLJ}$  est le rayon d'écran qui s'écrit de la forme suivante :

$$a_{AMLJ} = \frac{0.885}{(Z_1^{0.307} + Z_2^{0.307})^{2/3}} a_0 \quad (1.24)$$



**Figure 1.2.** Le tracé de la fonction d'écran en fonction du rapport  $r/a$

La fonction d'écran avec ses différentes formes pour les trois potentiels est représentée dans la figure 1.2. Nous avons tracé dans cette dernière la variation des équations (1.17), (1.19) et (1.22) en fonction du rapport  $x$ . Nous voyons clairement sur cette figure une ressemblance entre les fonctions de ZBL et TFM et qu'elles se croisent en  $x=25$ . La fonction de AMLJ est voisine des deux autres pour les  $x$  inférieur à 15 [14].

## 5. Perte d'énergie

En traversant la cible, l'ion cède de l'énergie à la surface. La diminution de l'énergie initiale du projectile s'exprime par la perte d'énergie  $\Delta E$ . Cette perte le long du parcours traversé par le projectile dans la cible, est appelée le pouvoir d'arrêt qui est une propriété du matériau. Il représente la capacité du matériau à absorber et à détourner l'énergie cinétique de l'ion incident. L'expression du pouvoir d'arrêt  $S(E)$  est exprimée par la perte d'énergie moyenne par unité de longueur parcourue.

$$S(E) = -\frac{dE}{dx} \quad (1.25)$$

Lorsque le pouvoir d'arrêt est rapporté à la densité atomique, il est appelé la section efficace d'arrêt  $\varepsilon$  (eq (1.26)).

$$\varepsilon = \frac{1}{N} \left( -\frac{dE}{dx} \right) \quad (1.26)$$

Tout ce qui est perdu par le projectile est récupéré par les atomes cibles. La perte dans l'atome se manifeste au niveau de ses électrons et son noyau. La perte d'énergie dans le domaine des collisions atomiques comprend deux aspects fondamentaux : électronique avec les électrons et nucléaire avec le noyau. Ces deux processus jouent un rôle crucial dans la compréhension des phénomènes de transfert d'énergie à l'échelle atomique. Ce transfert induit des interactions élastiques et inélastiques.

Le processus responsable de la perte d'énergie sont gérés par l'approximation de l'énergie critique qui est donnée en keV [14]. comme suit :

$$E_{cr} = 22 \left( \frac{M_1}{\mu} \right) Z_1 Z_2^{0,4} \quad (1.27)$$

-Lorsque  $E > E_{cr}$ , l'ionisation et l'excitation sont favorisées. Ces dernières sont causées par les ions en mouvement.

-Lorsque  $E < E_{cr}$ , la probabilité de l'ionisation et l'excitation diminue rapidement. Mais le temps d'interaction permet aux électrons de l'ion incident d'échanger avec les atomes de la cible.

### 5.1. Perte d'énergie électronique

Ce processus se produit lorsque l'ion incident transfère de l'énergie aux électrons de la cible. Ce mécanisme inélastique, connu sous le nom de pouvoir d'arrêt électronique  $(dE/dx)_e$ , dépend principalement de la vitesse et de la charge du projectile. Ainsi, trois gammes d'énergie sont distinguées ; pour chacune d'elles le pouvoir d'arrêt est exprimé de manière différente. La distinction entre les trois domaines s'opère par le biais d'une comparaison entre la vitesse du projectile et le paramètre spécifié dans l'équation (1.28).

$$Z_1^{2/3} \frac{e^2}{\hbar} = Z_1^{2/3} v_B \quad (1.28)$$

$\hbar$  est la constante de Planck et  $v_B$  est la vitesse de Bohr.

Lorsque la vitesse du projectile est très petite devant ce paramètre, on utilise le modèle de (LSS) proposé en 1963 par Lindhard et al. [15]. Dans ce modèle, on considère le milieu d'interaction comme un gaz d'électrons libres et l'échange d'électrons entre le projectile et la cible permet le transfert d'énergie entre les deux. Ce transfert d'énergie engendre des phénomènes tels que l'excitation et l'ionisation. Il est formalisé sous le concept de pouvoir d'arrêt électronique, représenté par l'expression suivante [16]:

$$-\left.\frac{dE}{dx}\right|_e = 8\pi \chi e^2 a_0 \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \frac{v}{v_B} \quad (1.29)$$

$a_0$  est le rayon de Bohr.

$v$  est la vitesse du projectile et  $\chi$  est un paramètre qui dépend de la charge du projectile et il varie entre 1 et 2. Il est approximativement égal à :

$$\chi \simeq Z_1^{1/6} \quad (1.30)$$

Pour les plages d'énergie restantes, le pouvoir d'arrêt est décrit en prenant en considération d'autres modèles tels que ceux énoncés par Bethe [17] et Bloch [18], notamment dans le régime des grandes vitesses. Dans la zone intermédiaire, la vitesse est approximativement de l'ordre du paramètre défini dans l'équation (1.30), il est difficile d'exprimer la théorie derrière la perte et la capture électronique entre la cible et le projectile. Mais, on trouve des modèles comme celui de Varelas et Biersack [19] qui expriment la section efficace d'arrêt par une sommation des deux sections efficaces d'arrêt obtenues du modèle Bethe-Bloch de et celle du modèle (LSS) comme suit [20] :

$$\frac{1}{S} = \frac{1}{S_{BB}} + \frac{1}{S_{LSS}} \quad (1.31)$$

## 5.2. Perte d'énergie nucléaire

C'est la perte d'énergie élastique. Elle se produit lorsque le projectile se met en collision avec les noyaux cibles. Elle correspond au transfert partiel de l'énergie cinétique du projectile vers les noyaux des atomes de la cible. Cette collision est influencée par la présence du cortège électronique, qui induit un effet d'écrantage. En diminuant la répulsion coulombienne entre les charges positives du projectile et du noyau cible, ce qui affecte la trajectoire et l'énergie transférée. Dans ce mécanisme, le projectile transfère de l'énergie au noyau et il sera diffusé dans une direction donnée et en même temps, la cible se met en mouvement. Le pouvoir d'arrêt nucléaire  $(dE/dx)_n$  est donné en fonction de l'énergie transférée au cours de la collision  $T$ .

$$\left.\frac{dE}{dx}\right|_n = -N \int_{\sigma(T_{min})}^{\sigma(T_{max})} T d\sigma(E) \quad (1.32)$$

$N$  est le nombre d'atomes cible par unité de volume.  $T_{max}$  est l'énergie maximale de transfert.  $T_{min}$  est l'énergie minimale de transfert.

$$T_{max} = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E_0 \quad (1.33)$$

$d\sigma$  est la section efficace de diffusion élastique.

En 1963, Lindhard et al.[16] ont donné la nouvelle formule du pouvoir d'arrêt nucléaire en fonction des paramètre réduits. Elle est exprimée dans l'équation (1.35). Cette dernière est calculée en utilisant la fonction d'écran universelle  $f(t^{1/2})$  (eq1.34) [10].

$$f(t^{1/2}) = \lambda t^{\frac{1}{2}-m} [1 + (2\lambda t^{1-m})^q]^{-1/q} \quad (1.34)$$

$m$ ,  $\lambda$  et  $q$  sont des valeurs tabulées pour chaque modèle atomique.

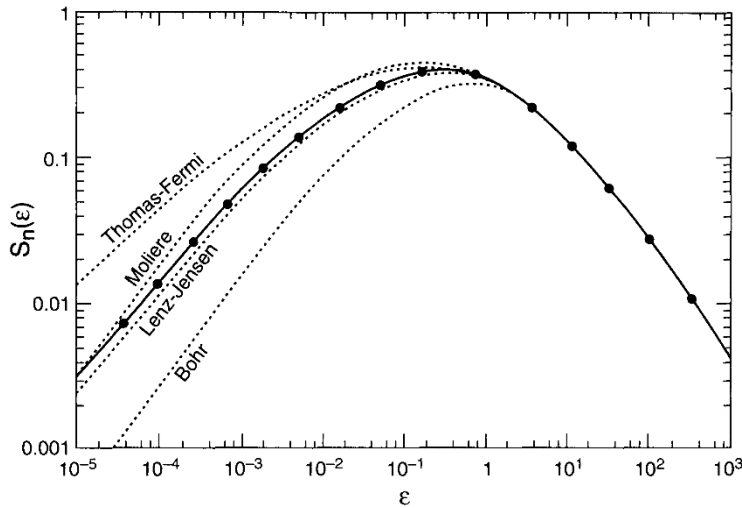
$$S_n(\varepsilon) = \left( \frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_n = \int_0^\varepsilon \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}} f\left(t^{\frac{1}{2}}\right) dt \quad (1.35)$$

$\rho$  est le parcours réduit qui est donné en fonction du parcours total du projectile dans la cible  $R$ . Il s'écrit comme suit :

$$\rho = \frac{4\pi R a^2 N m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \quad (1.36)$$

$$\varepsilon = E \frac{a M_2}{Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2)} \quad (1.37)$$

La figure 1.3 montre que le pouvoir d'arrêt nucléaire réduit est identique pour toutes les fonctions d'écran à un  $\varepsilon > 10$ . Cependant, des différences considérables existent pour des valeurs inférieures de  $\varepsilon$  [20].



**Figure 1.3.** Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire  $S_n$  de l'équation (1.35) en fonction du paramètre réduit  $\varepsilon$  pour les quatre modèles atomiques.

### 5.3. Perte d'énergie totale

En complément des discussions sur la perte d'énergie électronique et nucléaire précédemment abordées, il est impératif d'explorer la notion de perte d'énergie totale. Comprendre et quantifier cette perte d'énergie totale revêt une importance capitale pour une analyse exhaustive des phénomènes de transfert d'énergie à l'échelle atomique. La perte d'énergie totale dans le système considéré est égale à la somme des deux pertes précédentes. On l'écrit sous la forme :

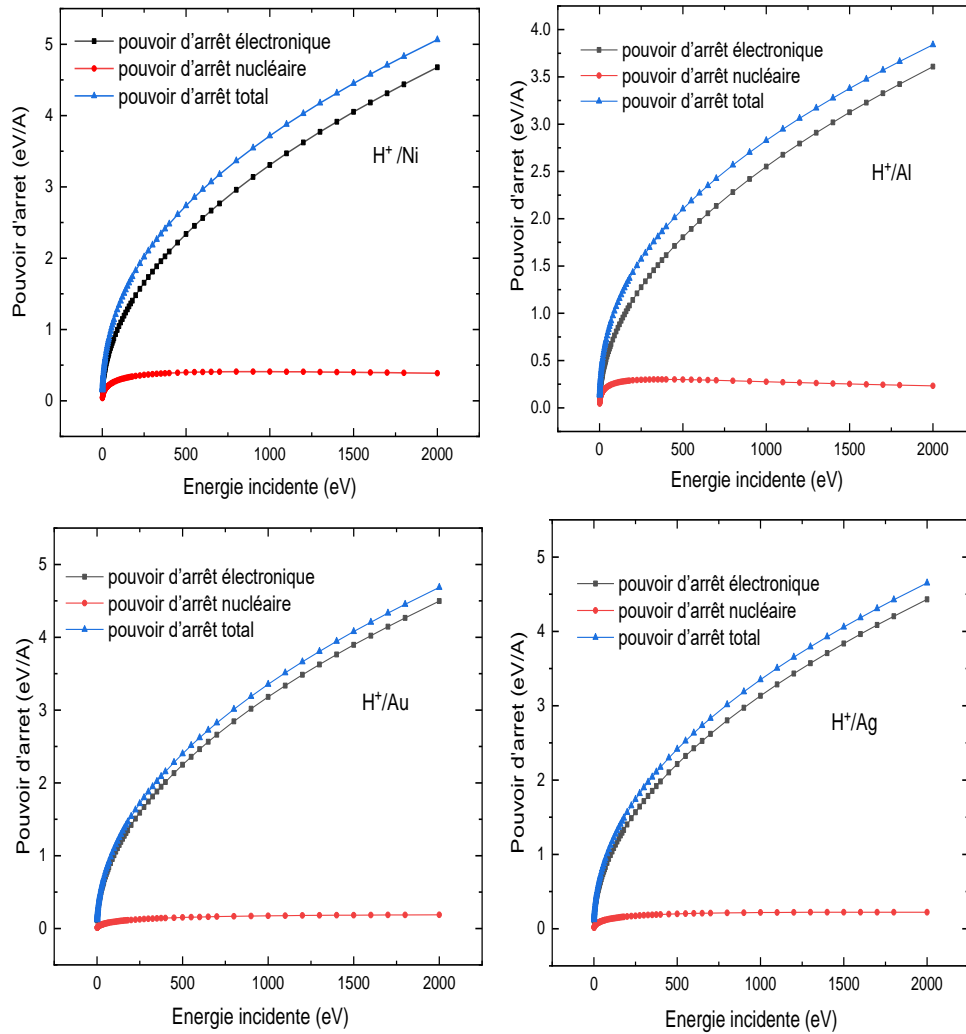
$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{totale} = \left. \frac{dE}{dx} \right|_e + \left. \frac{dE}{dx} \right|_n \quad (1.38)$$

Lors de l'interaction, les deux types de perte d'énergie sont en compétition. Chaque type dépend des caractéristiques de la cible, telles que son énergie de liaison et sa charge, ainsi que des propriétés du projectile, telles que son énergie, sa masse et sa charge. De plus, étant donné que la plupart des matériaux solides, en particulier les métaux, contiennent un grand nombre d'électrons par rapport au nombre d'atomes, le transfert d'énergie vers les électrons est favorisé par rapport à celui en direction des noyaux [7].

La compréhension des mécanismes de perte d'énergie, qu'elle soit électronique ou nucléaire, revêt une importance capitale dans de nombreux domaines scientifiques et technologiques. En physique des matériaux, elle est essentielle pour l'étude des propriétés des matériaux [21] et des procédés de fabrication, notamment dans le cadre de l'irradiation ionique utilisée pour la modification des surfaces [22]. Elle est également au cœur des recherches en métallurgie et en nanotechnologie [23], où elle permet de caractériser et d'optimiser les structures à l'échelle microscopique. Dans le domaine biomédical, ces mécanismes jouent un rôle déterminant en radiothérapie, où les faisceaux ionisants sont utilisés pour traiter les tumeurs de manière ciblée, en délivrant une dose de rayonnement précise aux cellules cancéreuses tout en minimisant les dommages aux tissus sains [24]. En physique nucléaire, la compréhension des pertes d'énergie des ions est cruciale tant pour la conception de réacteurs nucléaires que pour la recherche sur la fusion thermonucléaire contrôlée, dans le but de développer des sources d'énergie propres et durables. Elle contribue également au développement de capteurs et de dispositifs électroniques de haute précision, tels que les détecteurs de rayonnement et les composants de semi-conducteurs [25].

La perte d'énergie totale est cruciale pour une analyse complète des phénomènes de transfert d'énergie à l'échelle atomique. Dans cette optique, cette thèse se propose d'étudier de manière approfondie les mécanismes et les conséquences de la perte d'énergie totale.

La figure 1.4 montre la variation du pouvoir d'arrêt électronique, nucléaire et totale. Le tracé de ces trois dans la même courbe nous informe sur le paramètre dominant entre eux. Nous avons choisi de considérer le cas des protons envoyés sur des cibles de Nickel, Aluminium, Or et argent qu'on utilise par la suite dans le calcul de la probabilité de diffusion.



**Figure 1.4.** La variation du pouvoir d'arrêt électronique, nucléaire et total calculée avec SRIM ; dans le cas des protons ( $H^+$ ) envoyés sur le Nickel, l'Aluminium, l'or

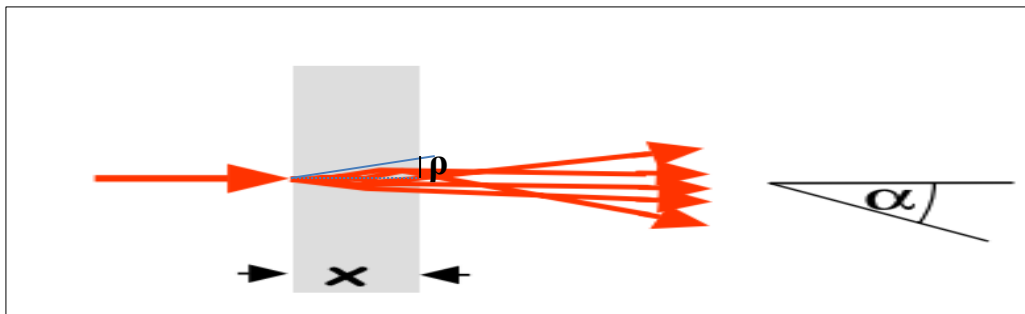
## 6. Collisions multiples

Les collisions multiples est un processus physique impliquant une multitude d'interactions entre une particule incidente et les atomes d'une cible, ayant des conséquences importantes sur la trajectoire, l'énergie et l'état de la particule et de la cible. Lorsque l'ion pénètre dans la cible, il interagit avec ses atomes, subissant ainsi plusieurs collisions simples et élastiques. Les collisions multiples deviennent prédominantes dans des conditions spécifiques, notamment pour des angles faibles et à basse énergie ( $E \leq 50$  keV). Ce phénomène devient particulièrement significatif lorsque le libre parcours moyen de l'ion, représentant la distance moyenne entre deux diffusions, est de l'ordre de grandeur de la distance interatomique dans la cible. Les collisions multiples revêtent alors une importance capitale dans la modélisation des spectres énergétiques des particules diffusées [26].

La théorie des collisions multiples a beaucoup d'applications dans différents domaines comme la biologie [27] , l'analyse de structure des matériaux et la radiothérapie [28]. Le traitement de ce phénomène s'est fait dans autant de théories réalisées par Bothe[29], Wentzel[30],Goudsmit et Saunderson [31] , Lewis [32] sans invoquer l'approximation des faibles angles. De même, en tenant compte de cette approximation, Sigmund et Winterbon (SW) [33] et Meyer [34] ont développé des modèles théoriques qui décrivent profondément le phénomène des collisions multiples. Valdès et Arista [35] ont introduit l'effet de la perte d'énergie dans leur modèle basé sur celui de Sigmund et Winterbon. Il y a encore d'autres travaux qui sont basés sur d'autres théories de collisions multiples tels que ceux de Scott [36] et Sigmund [37]

En parallèle, des études expérimentales ont été effectuées sur les collisions multiples pour différents ensembles projectile-cible comme celle de Andersen et al. [10]. Schwave et Stolle [11] ont comparé d'une manière détaillée les distributions angulaires expérimentales avec les distributions théoriques. Ils ont trouvé un désaccord avec ce que donne la théorie. Walker et al. [38]ont apporté un facteur de correction au rayon d'écran de Firsov[13] pour s'approcher des résultats obtenus. Par la suite, Primetzhofer et al. [39] ont discuté la section efficace de diffusion pour les grands et les faibles rayons d'écran de Firsov.

Dans la théorie des collisions multiples, la diffusion est décrite par deux paramètres essentiels : l'angle de déviation  $\alpha$  et le déplacement latéral  $\rho$  comme les représente le schéma de la figure 1.5.



**Figure1.5** : Schéma représentant la géométrie des collisions multiples. La direction initiale est suivant Ox

$\alpha$  représente l'angle d'inclinaison (la déviation) de la direction de l'ion diffusé par rapport à la direction de l'ion incident.  $\rho$  est l'écart perpendiculaire entre la direction du faisceau incident et celle du faisceau transmis. La distribution angulaire des ions dépend de l'épaisseur  $x$  et elle est décrite par une fonction de distribution  $f(x, \alpha)$  [5]

$$I = \int f_{\Omega}(x, \alpha) d\Omega = 2\pi \int_0^{\pi} f_{\Omega}(x, \alpha) \sin \alpha d\alpha \quad (1.39)$$

Dans le cas des faibles angles l'équation précédente devient :

$$I = 2\pi \int_0^{\pi} f_{\Omega}(x, \alpha) \alpha d\alpha \quad (1.40)$$

En utilisant cette théorie, nous arriverons à produire les distributions angulaires et latérales de diffusion.

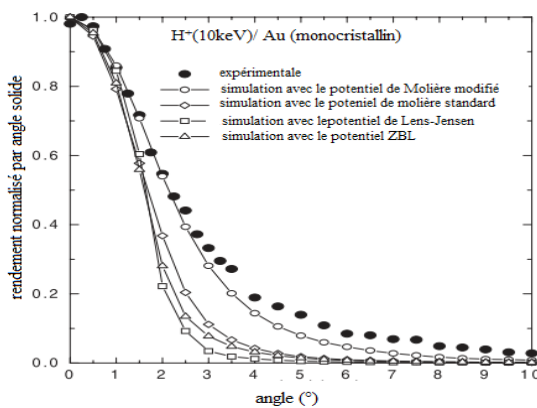
### 6.1. Les distributions angulaires

La distribution angulaire se réfère à la quantification du nombre de particules qui traversent une surface élémentaire  $dS$  pendant un intervalle de temps  $dt$ , dans un angle solide  $d\Omega$  défini autour de la direction  $\Omega$ . Cette mesure fournit une représentation précise de la répartition spatiale des particules émises ou traversant un système donné. Elle est essentielle dans de nombreux domaines scientifiques et professionnels, tels que la physique des particules, la radiothérapie et l'imagerie médicale, la précision de la distribution angulaire est cruciale pour comprendre et contrôler le flux de particules dans diverses applications. On trouve dans la littérature énormément d'études qui ont calculé des distributions angulaires pour différents systèmes. On voit qu'ils ont suivi des modèles qui existaient déjà et ils ont apporté des modifications. En raison de la nature probabiliste des collisions nucléaires, les interactions entre un faisceau d'ions et les noyaux de la cible ne peuvent être décrites de manière déterministe. Chaque collision individuelle dépend de paramètres microscopiques aléatoires, tels que le paramètre d'impact et l'énergie transférée. Cette variabilité conduit à une dispersion des trajectoires des particules après interaction, se traduisant macroscopiquement par un élargissement de la distribution angulaire du faisceau incident. En traversant une plaque de matière d'épaisseur  $x$ . La distribution angulaire des ions dépend du parcours et peut être décrite par une fonction de distribution  $f_{\Omega}(x, \alpha)$ .

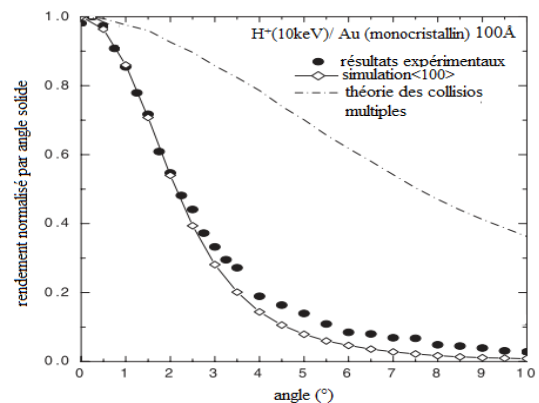
Certaines corrections ont été effectuées sur le rayon d'écran et la perte d'énergie (échange de charge) afin d'accorder les résultats théoriques avec les courbes expérimentales. Les expériences ont été réalisées avec des techniques comme : ISS (Ion Scattering Spectrometry) [40] et LEIS (Low Energy Ion Scattering) [41].

En 1969, la première expérience à basse énergie (0.5keV, 1keV, 2keV) a vu le jour grâce à Smith et al. [42] qui ont étudié les couches externes de la surface d'une cible de Cuivre par un faisceau d'ion d'Hélium avec la technique LEIS et Smith a détaillé dans son article l'appareillage utilisé pour réussir la détection des ions transmis [43] Par la suite, une série d'études expérimentales ont été élaborées [44]- [45]-[46] - [47] et elles ont vérifié un bon accord avec les résultats théoriques. On trouve aussi les travaux de [48], [49],[50], [51], [52] et [53] qui ont été réalisés dans le but d'étudier l'effet de certains paramètres comme le potentiel écranté [6] et la perte d'énergie [54].

A travers ces distributions angulaires, une épaisseur donnée de la cible peut être exploitée pour différentes valeurs de l'angle de diffusion comme le montre la figure 1.6[55]. Dans la figure 1.7 [55], on présente une comparaison entre les distributions angulaires ainsi issues de la simulation et de l'expérience avec celles de la théorie des collisions multiples dans le cas d'une cible d'or de 100 Å.



**Figure 1.6.** Distributions angulaires expérimentales et de simulation pour des protons de 10keV envoyés sur une cible de 100 Å d'or monocristallin pour les trois potentiels standards.



**Figure 1.7.** Comparaison entre les résultats expérimentaux et la simulation d'une cible amorphe et le calcul des collision multiples de Sigmund et Winterbon pour des protons de 10keV envoyés sur une cible de 100 Å d'or

## 6.2. Les distributions énergétiques

La distribution angulaire détermine la direction dans laquelle les particules sont émises ou traversent un matériau, tandis que la distribution énergétique décrit l'éventail des énergies associées à ces particules.

La distribution énergétique est impactée par trois facteurs, notamment : -L'énergie initiale des ions incidents. -La nature de la cible comme sa masse atomique et sa structure cristalline **fig (1.8)** [56]. -L'angle d'incidence des ions peut influencer la profondeur de pénétration des ions dans le matériau.

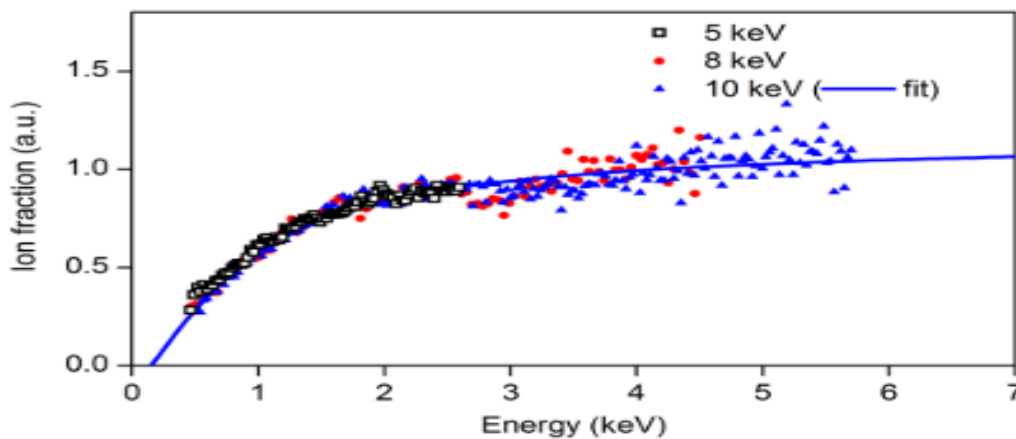
## 7. Processus d'échange de charges

A basse énergie et d'après l'étude de Närmann et al. [57] la perte d'énergie est fortement liée à l'échange de charge entre le projectile et la cible. Au cours de la collision, le

projectile chargé cède de l'énergie à la cible. Ce transfert est accompagné par un échange de charge entre les deux quand leurs orbitales se croisent [58]. Dans le cas des très faibles distances interatomiques inférieures à 1 Å, le contact de l'ion projectile avec les électrons de l'atome cible donne naissance à une quasi-molécule de durée de vie très courte de l'ordre de  $10^{-15}$  s. Cette dernière se dissocie par deux voies possibles : la neutralisation ou la ré-ionisation du projectile [59].

On voit l'effet de l'échange de charge [61] sur la détermination des distributions angulaires de diffusion et la détermination des fractions ioniques [62]

La figure 1.9 [63] nous montre la variation de la fraction ionique en fonction de l'énergie pour différentes valeurs d'énergie incidente.



**Figure 1.9.** : Fraction ionique pour la poudre d'Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, déterminée avec trois différentes énergies incidentes [63].

### 7.1. Les principaux processus d'échange de charge

L'échange de charge entre les ions incidents et la surface se manifeste par le passage d'un ou deux électrons entre deux états électroniques.

A basse énergie, On constate plusieurs processus tels que[4] :

1-La neutralisation résonante qui est un phénomène où un ion chargé capture un électron de la cible qui va occuper un niveau d'affinité, devenant ainsi neutre.

2-L'ionisation résonante qui est un mécanisme où un ion incident transfère un électron à une couche électronique supérieure de la cible, conduisant à son ionisation. Ce phénomène se produit lorsque l'énergie de l'ion correspond à celle nécessaire pour exciter les électrons de la cible à des niveaux d'énergie spécifiques d'où vient le terme résonnant.

3-L'ionisation quasi résonante qui est un processus où un électron de l'ion incident est capturé par une couche électronique profonde de la surface cible. Ce processus, bien que similaire à l'ionisation résonante, se produit lorsque l'énergie de l'ion n'est pas exactement égale à l'énergie requise pour exciter les électrons de la cible à des niveaux d'énergie spécifiques.

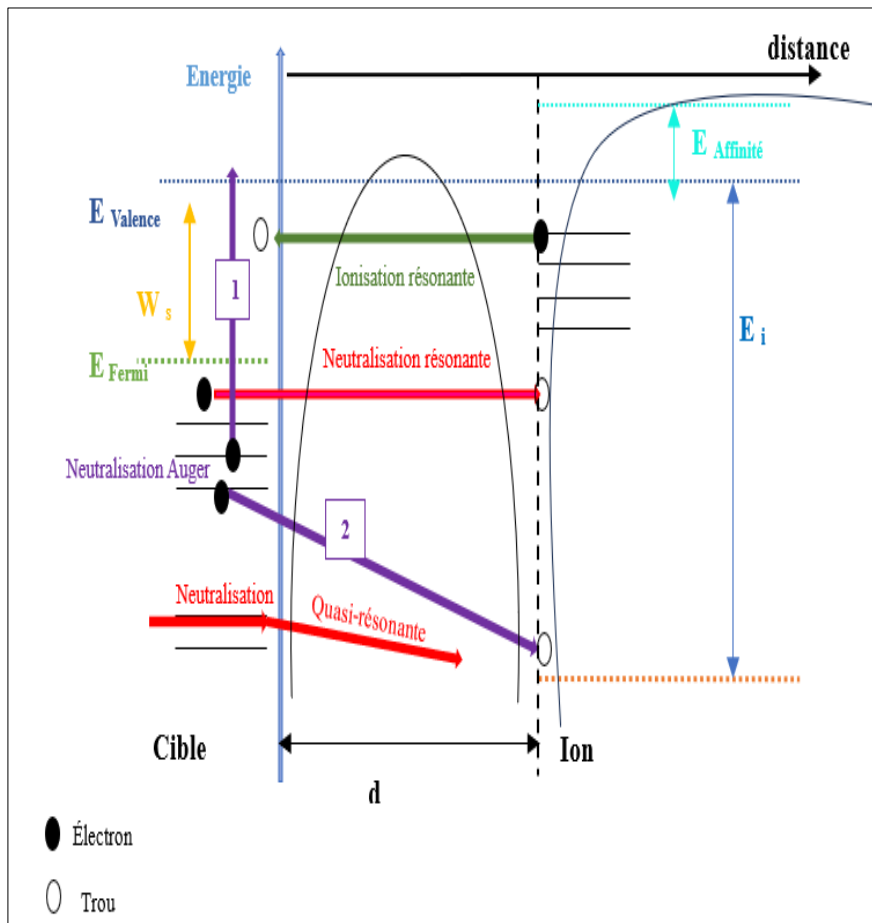
4-L'auto ionisation qui est un phénomène quantique où un électron excité passe à un état continu (sans être limité à des niveaux d'énergie discrets), formant un ion. Ce processus se produit avec une faible énergie d'excitation, proche du seuil d'ionisation. En résumé, il s'agit de la transition d'un électron vers un état ionique sans nécessiter une énergie externe importante.

Lorsque l'énergie perdue dans la cible est supérieure à la valeur du travail de sortie de la cible, on s'attend à un passage de deux électrons au lieu d'un seul. Par conséquent, les processus observés sont les suivants [4]:

1-La neutralisation Auger où un électron du solide sera capturé par un état lié de l'ion incident et un deuxième électron du même solide sera expulsé dans le vide en récupérant l'énergie libérée.

2-La désexcitation Auger : c'est un processus quantique durant lequel un atome excité éjecte un électron de sa couche électronique interne, créant ainsi un trou électronique. Ce trou est comblé par un électron d'une couche électronique externe, libérant de l'énergie sous forme de photon ou en éjectant un autre électron.

On représente ces processus dans le schéma suivant **fig(1.10)**



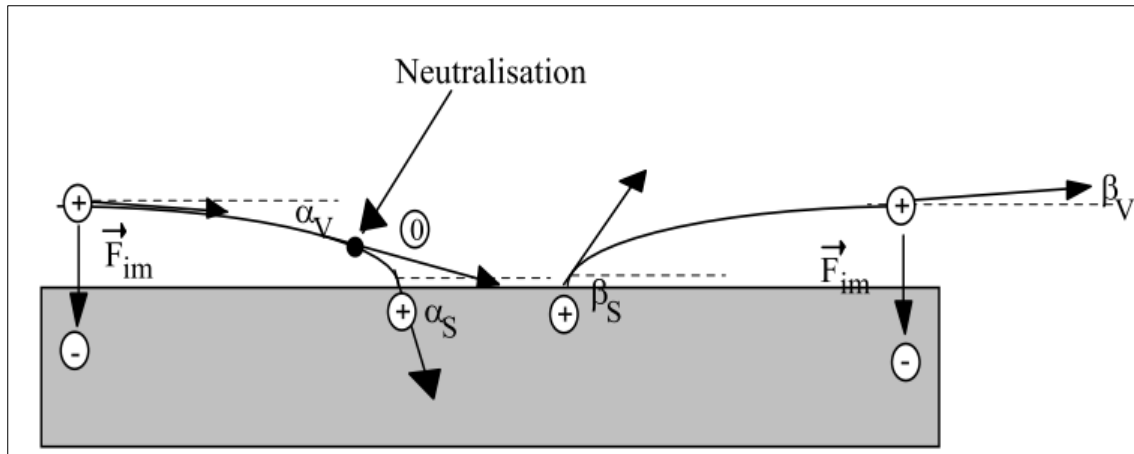
**Figure 1.10:** Diagrammes illustrant les mécanismes de base de l'échange de charge impliqués dans la neutralisation et l'ionisation d'un ion en face d'une surface [4].

## 7.2. Potentiel image

Dans le cadre des interactions ion-surface à basse énergie, le potentiel image joue un rôle crucial dans la modification des trajectoires des ions près d'une surface chargée. Ce potentiel se manifeste lorsque l'ion incident se rapproche de la surface métallique supposée équipotentielle. Dans cette configuration, une charge identique à celle de l'ion incident, mais de signe opposé (appelée charge image), est supposée présente pour maintenir l'équilibre électrostatique. L'ion incident est ainsi attiré vers la surface, ce qui peut induire des processus de neutralisation, tels que l'effet Auger [65], conduisant à sa diffusion vers l'extérieur avec une trajectoire courbe comme le montre la figure 1.12.

Cette courbure des trajectoires est observée expérimentalement et peut entraîner des variations dans les valeurs des angles d'incidence et de sortie des ions par rapport à leurs valeurs théoriques [66]. Cette influence du potentiel image sur les trajectoires des ions est décrite par des relations mathématiques telles que celle exprimée par la relation (1.41), qui lie les valeurs des angles incidents et de sortie ; effectifs ( $\alpha_s, \beta_s$ ) et ceux mesurés expérimentalement ( $\alpha_v, \beta_v$ ) en fonction du potentiel image  $V_{im}$  et l'énergie incidente  $E_0$ [67].

$$\tan(\alpha_s \text{ ou } \beta_s) = \tan(\alpha_v \text{ ou } \beta_v) \left[ 1 + \frac{V_{im}}{E_0 \sin^2(\alpha_v \text{ ou } \beta_v)} \right] \quad (1.41)$$



**Figure 1.11:** Schéma représentant l'effet de la force image sur les trajectoires des ions au voisinage d'une surface[4]

## 8. Simulation numérique

L'intérêt de la simulation est de disposer d'un appareil expérimental sur une machine de calcul (ordinateur) qu'on appelle le simulateur. Ce dernier simule tout un système avec ses différents paramètres d'une manière peu coûteuse en temps.

L'étude quantitative d'un phénomène physique nécessite un outil mathématique et un modèle théorique pour décrire les processus en jeu au sein du système considéré.

En parallèle avec les études expérimentales sur les collisions à basse énergie, des calculs analytiques ont été effectués dans le but de rapprocher leurs conclusions théoriques des résultats expérimentaux [68] [69].

Les modèles développés ont été implémentés dans des programmes informatiques capables de calculer les divers paramètres de la diffusion, en tenant compte des conditions expérimentales spécifiques (énergie du projectile, angle d'incidence, angle de diffusion (géométrie de détection), nombre de particules incidentes, type de projectile et de cible). Ces programmes sophistiqués permettent de calculer les distributions angulaires et énergétiques des particules diffusées.

### 8.1. Simulation Monte Carlo

Vue leur efficacité, on cite des exemples de codes de calculs qui simulent le phénomène de diffusion comme : TRIM:transport of ions in matter [10] , TRBS: the TRIM for Rutherford backscattering spectroscopy [70].

### 8.2. Théorie de transport

Afin de décrire mathématiquement le phénomène de diffusion des ions par des surfaces solides, il est légitime de considérer une fonction de distribution de ces derniers qui

inclut les différents paramètres intervenant dans l'interaction. Dans le cadre de la théorie de transport, une résolution de l'équation de transport a été proposée par Boltzmann pour exprimer la fonction de distribution en fonction du rayon de déplacement  $\vec{r}$ , de la vitesse  $\vec{v}$  et du temps  $t$ . Elle s'écrit sous une forme générale [71] comme suit :

$$\frac{\partial F(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} F(\vec{r}, \vec{v}, t) = \left. \frac{\partial F(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} \right|_{Collisions} \quad (1.42)$$

Comme on le voit dans son expression différentielle, l'équation comprend un terme collisionnel. Cette partie représente les interactions (tous types d'échange ou de transfert) ayant lieu entre les atomes cibles et les ions projectiles lors de leurs trajectoires.

### 8.3. Dynamique moléculaire

La dynamique moléculaire est une technique de simulation numérique qui permet de modéliser et de suivre l'évolution d'un système de particules (atomes, molécules) au cours du temps. Elle résout les équations de mouvements pour un ensemble d'atomes ou de molécules. Un système de  $N$  atomes est décrit par un Hamiltonien où chaque particule est donnée avec sa coordonnée  $r_i$  et son impulsion  $p_i$  [72]. Dans le cas des atomes, les masses sont considérées ponctuelles et l'hamiltonien s'écrit comme :

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V \quad (1.43)$$

$m_i$  sont les masses atomiques et  $V$  est l'énergie potentielle

Un des codes basés sur la dynamique moléculaire est KALYPSO [73]. Il est utilisé pour simuler les collisions ioniques à la surface des matériaux. Il permet d'étudier avec précision les effets de l'irradiation ionique, tels que la pulvérisation, la modification de surface, la diffusion d'espèces atomiques et l'évolution de la rugosité.

## 9. Conclusion

A travers ce chapitre, nous avons exploré les divers processus impliqués dans l'interaction des particules chargées avec la matière, en se focalisant sur les phénomènes à basse énergie. Nous avons rappelé les notions de la diffusion ion-surface, la cinématique des collisions, et le potentiel d'interaction. Nous avons également détaillé les types de la perte d'énergie, les collisions multiples, et les processus d'échange de charges. Nous avons parlé brièvement du potentiel image et la simulation numérique.

## Références

- [1] S. R. Kasi, H. Kang, C. S. Sass, and J. W. Rabalais, “Inelastic processes in low-energy ion-surface collisions,” *Surf Sci Rep*, vol. 10, no. 1–2, pp. 1–104, 1989. doi.org/10.1016/0167-5729(89)90005-8.
- [2] Pierre Salou. “Interaction ion-surface : simulation de l’interaction plasma-paroi (ITER) “. Thèse de Doctorat. Université de Caen, 2013.
- [3] Julien ROUPIE, “Contribution à l’étude de l’émission électronique sous impact d’électrons de basse énergie ( $\leq 1\text{keV}$ ) : application à l’aluminium”. Thèse de Doctorat. Université de Toulouse, 2013.
- [4] A. Mekhtiche, “Diffusion d’ions de faible énergie par une surface solide : Simulation basée sur la théorie de transport pour le calcul du coefficient de réflexion”. Thèse de Magister, Université Des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, 2005.
- [5] W. Möller, “Fundamentals of ion-surface interaction,” Court résumé. Université technique de Dresde, 2004.
- [6] A. Schüller, S. Wethekam, A. Mertens, K. Maass, H. Winter, and K. Gärtner, “Interatomic potentials from rainbow scattering of keV noble gas atoms under axial surface channeling,” in *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2005, pp. 172–177. doi: 10.1016/j.nimb.2004.12.036.
- [7] A. Djaafri, “Etude des dommages créés dans le tantale (Ta) et les composés TaC et Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> par l’approximation des collisions binaires (BCA)”. Thèse de doctorat, Université De Djillali Liabes, Sidi Bel-Abbes, Faculté Des Sciences Exactes, 2018.
- [8] D. J. O. Connor and J. P. Biersack, “COMPARISON OF THEORETICAL AND EMPIRICAL INTERATOMIC POTENTIALS,” 14 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B15* (1986) 14-19 North-Holland. Amsterdam.
- [9] Moliere Gert, “Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld,” 1947. doi: 10.1515/zna-1947-0302.
- [10] J. F. Ziegler and J. P. Biersack, “The Stopping and Range of Ions in Matter BT - Treatise on Heavy-Ion Science: Volume 6: Astrophysics, Chemistry, and Condensed Matter,” D. A. Bromley, Ed., Boston, MA: Springer US, 1985, pp. 93–129. doi: 10.1007/978-1-4615-8103-1\_3.
- [11] W. Lenz, “Über die Anwendbarkeit der statistischen Methode auf Ionengitter,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 77, no. 11–12, pp. 713–721, 1932.
- [12] S. T. Nakagawa and Y. Yamamura, “Interatomic potential in solids and its applications to range calculations,” *Radiat Eff*, vol. 105, no. 3–4, pp. 239–256, Feb. 1988, doi: 10.1080/00337578808229950.
- [13] S. T. Nakagawa, “A realistic interatomic potential in solids,” *Radiation effects and defects in solids*, vol. 116, no. 1–2, pp. 21–28, 1991. doi.org/10.1080/10420159108221341

- [14] M. Nastasi, J. W. Mayer, and J. K. Hirvonen, *Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1996.
- [15] J. Lindrard, M. Scharff, and H. Schiott, “Range concepts and heavy ion ranges (notes on atomic collisions),” *Mat. Fys Medd Dan. Vid Selsk*, vol. 33, no. 14, pp. 1–42, 1963.
- [16] J. Lindhard and M. Scharff, “Energy Dissipation by Ions in the keV Region,” *Physical Review*, vol. 124, no. 1, pp. 128–130, Oct. 1961, doi: 10.1103/PhysRev.124.128.
- [17] H. A. Bethe, “Coulomb energy of light nuclei,” *Physical Review*, vol. 54, no. 6, p. 436, 1938.
- [18] F. Bloch, “Zur bremsung rasch bewegter teilchen beim durchgang durch materie,” *Ann Phys*, vol. 408, no. 3, pp. 285–320, 1933.
- [19] W. Eckstein, “Sputtering in *Computer Simulation of Ion-Solid Interactions*” Livre, Springer, 1991, pp. 169–218.
- [20] J. F. Ziegler and J. P. Biersack, “The Stopping and Range of Ions in Matter BT - Treatise on Heavy-Ion Science: Volume 6: Astrophysics, Chemistry, and Condensed Matter,” D. A. Bromley, Ed., Boston, MA: Springer US, 1985, pp. 93–129. doi: 10.1007/978-1-4615-8103-1\_3.
- [21] J. W. Mayer and E. Rimini, *Ion beam handbook for material analysis*. Elsevier, 2012.
- [22] S. J. Zinkle, 1.03 - Radiation-Induced Effects on Microstructure, 1st ed., vol. 1–5, no. February. Elsevier Inc., 2012. doi: 10.1016/B978-0-08-056033-5.00003-3.
- [23] L. A. Giannuzzi, *Introduction to Focused Ion Beams: Instrumentation, Theory, Techniques and Practice*. New York, NY, USA: Springer Science & Business Media, 2006.
- [24] H. Paganetti, *Proton Therapy Physics*. Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 2025.
- [25] G. F. Knoll, *Radiation Detection and Measurement*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, 2010.
- [26] S. Ikegami, “A new screening length for small angle multiple scattering,” *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 311, pp. 14–19, 2013, doi: 10.1016/j.nimb.2013.06.006.
- [27] M. Hollmark, I. Gudowska, D. Belkić, A. Brahme, and N. Sobolevsky, “An analytical model for light ion pencil beam dose distributions: Multiple scattering of primary and secondary ions,” *Phys Med Biol*, vol. 53, no. 13, pp. 3477–3491, 2008, doi: 10.1088/0031-9155/53/13/005.
- [28] K. Wittmaack, “Misconceptions impairing the validity of the stopping power tables in the SRIM library and suggestions for doing better in the future,” *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, 2016, doi: 10.1016/j.nimb.2016.04.057.
- [29] W. Bothe, “Die Gültigkeitsgrenzen des Gaußschen Fehlergesetzes für unabhängige Elementarfehlerquellen,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 4, no. 2, pp. 161–177, 1921.
- [30] G. Wentzel, “Zur systematik der röntgenspektren,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 6, no. 1, pp. 84–99, 1921.

- [31] S. Goudsmit and J. L. Saunderson, "Multiple scattering of electrons," *Physical review*, vol. 57, no. 1, p. 24, 1940. doi: 10.1103/PhysRev.57.24.
- [32] H. W. Lewis, "Multiple scattering in an infinite medium," *Physical Review*, vol. 78, no. 5, pp. 526–529, 1950, doi: 10.1103/PhysRev.78.526.
- [33] P. Sigmund, K. B. Winterbon, C. Rivernuclearlaboratories, and C. River, "Small-Angle Multiple Scattering of Ions in the Screened Coloumb Region," *Nuclear Instruments & Methods*, vol. 119, pp. 541–557, 1974.
- [34] L. Meyer, "Plural and multiple scattering of low-energy heavy particles in solids," *physica status solidi (b)*, vol. 44, no. 1, pp. 253–268, 1971.
- [35] J. E. Valdés and N. R. Arista, "Energy-loss effects in multiple-scattering angular distributions of ions in matter," *Phys Rev A (Coll Park)*, vol. 49, no. 4, p. 2690, 1994. doi: 10.1103/PhysRevA.49.2690
- [36] W. T. Scott, "The Theory of Small-Angle Multiple Scattering of Fast Charged Particles," *Rev Mod Phys*, vol. 35, no. 2, pp. 231–313, Apr. 1963, doi: 10.1103/RevModPhys.35.231.
- [37] P. Sigmund, *Stopping of heavy ions: a theoretical approach*, vol. 204. Springer Science & Business Media, 2004.
- [38] M. Walker, M. G. Brown, M. Draxler, L. Fishwick, M. G. Dowsett, and C. F. Mcconville, "Analysis of the interactions between He + ions and transition metal surfaces using co-axial impact collision ion scattering spectroscopy," *Surf Sci*, vol. 605, no. 1–2, pp. 107–115, 2011, doi: 10.1016/j.susc.2010.10.007.
- [39] D. Primetzhofer, S. N. Markin, M. Draxler, R. Beikler, E. Taglauer, and P. Bauer, "Strength of the interatomic potential derived from angular scans in LEIS," *Surf Sci*, vol. 602, no. 17, pp. 2921–2926, Sep. 2008, doi: 10.1016/j.susc.2008.07.030.
- [40] R. Souda and M. Aono, "Interactions of low-energy He+, He0, and He\* with solid surfaces," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 15, no. 1–6, pp. 114–121, 1986, doi.org/10.1016/0168-583X(86)90265-X
- [41] C. V. Cushman et al., "Low energy ion scattering (LEIS). A practical introduction to its theory, instrumentation, and applications," *Analytical Methods*, vol. 8, no. 17, pp. 3419–3439, 2016, doi: 10.1039/c6ay00765a.
- [42] D. P. Smith and R. F. Goff, "Binary scattering of 100 to 2000 eV noble gas ions from solid surfaces," in *Bulletin Of The American Physical Society*, 1969, p. 788.
- [43] D. P. Smith, "Analysis of surface composition with low-energy backscattered ions," *Surf Sci*, vol. 25, no. 1, pp. 171–191, 1971.
- [44] H. H. Andersen, J. Bøttiger, H. Knudsen, P. M. Petersen, and T. Wohlenberg, "Multiple scattering of heavy ions of keV energies transmitted through thin films," *Phys Rev A (Coll Park)*, vol. 10, no. 5, p. 1568, 1974.

- [45] B. Efken, D. Hahn, D. Hilscher, and G. Wüstefeld, “Energy loss and energy loss straggling of N, Ne, and Ar ions in thin targets,” *Nuclear Instruments and Methods*, vol. 129, no. 1, pp. 219–225, 1975.
- [46] B. W. Hooton, J. M. Freeman, and P. P. Kane, “Small angle multiple scattering of 12--40 MeV heavy ions from thin foils,” *Nuclear Instruments and Methods*, vol. 124, no. 1, pp. 29–39, 1975.
- [47] H. Knudsen, F. Besenbacher, J. Heinemeier, and P. Hvelplund, “Lateral multiple scattering of energetic ions in very thin targets: Z 1 oscillations,” *Phys Rev A (Coll Park)*, vol. 13, no. 6, p. 2095, 1976.
- [48] H. H. Brongersma, M. Draxler, M. de Ridder, and P. Bauer, “Surface composition analysis by low-energy ion scattering,” *Surf Sci Rep*, vol. 62, no. 3, pp. 63–109, 2007, doi: 10.1016/j.surfrep.2006.12.002.
- [49] D. Primetzhofer, S. N. Markin, M. Draxler, R. Beikler, E. Taglauer, and P. Bauer, “Surface Science Strength of the interatomic potential derived from angular scans in LEIS,” vol. 602, pp. 2921–2926, 2008, doi: 10.1016/j.susc.2008.07.030.
- [50] E. D. Cantero, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, F. C. Lovey, and N. R. Arista, “Multiple-scattering distributions and angular dependence of the energy loss of slow protons in copper and silver,” *Phys Rev A*, vol. 81, no. 4, 2010, doi: 10.1103/PhysRevA.81.042902.
- [51] E. D. Cantero, G. H. Lantschner, and N. R. Arista, “Interaction of low energy protons, deuterons, H +2 and D +2 with carbon foils: Energy-angle distributions and velocity dependence of the energy loss,” *European Physical Journal D*, vol. 65, no. 3, pp. 397–404, 2011, doi: 10.1140/epjd/e2011-20397-3.
- [52] M. Walker, M. G. Brown, M. Draxler, L. Fishwick, M. G. Dowsett, and C. F. Mcconville, “Analysis of the interactions between He + ions and transition metal surfaces using co-axial impact collision ion scattering spectroscopy,” *Surf Sci*, vol. 605, no. 1–2, pp. 107–115, 2011, doi: 10.1016/j.susc.2010.10.007.
- [53] P. Brüner, A. Wucher, T. Wirth, and K. D. Schierbaum, “Thin film analysis by low-energy ion scattering by use of TRBS simulations,” *J. Vac. Sci. Technol. A*, vol. 33, no. 1, p. 01A122, Jan. 2015, doi: 10.1116/1.4901451.
- [54] D. Goebel, K. Khalal-Kouache, D. Roth, E. Steinbauer, and P. Bauer, “Energy loss of low-energy ions in transmission and backscattering experiments,” *Phys Rev A*, vol. 88, no. 3, pp. 1–8, 2013, doi: 10.1103/PhysRevA.88.032901.
- [55] C. Archubi et al., “Angular dispersion of protons transmitted through thin gold films,” in *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, Aug. 2004, pp. 2389–2393. doi: 10.1002/pssb.200304862.
- [56] E. S. Mashkova and V. A. Molchanov, “The energy distributions of light ions scattered by solid surfaces,” *Radiat Eff*, vol. 13, no. 1–2, pp. 131–135, 2007, doi: 10.1080/00337577208231170

- [57] A. Narmann, W. Heiland, F. Flores, R. M. Noga, and P. M. Echenique, "Charge exchange and energy loss of particles interacting with surfaces," *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, vol. 48, pp. 359–364, 1990.
- [58] K. Khalal-Kouache, B. Bruckner, D. Roth, D. Goebel, and P. Bauer, "Charge exchange processes in He<sup>+</sup>/Cu scattering at low energy," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 382, pp. 11–14, 2016. doi.org/10.1016/j.nimb.2016.04.046
- [59] A. Arnau, "Charge states and energy loss of ions in solids," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 93, no. 2, pp. 195–202, Jul. 1994, doi: 10.1016/0168-583X(94)95687-1.
- [60] D. P. Smith, "Analysis of surface composition with low-energy backscattered ions," *Surf Sci*, vol. 25, no. 1, pp. 171–191, 1971, doi: 10.1016/0039-6028(71)90214-7.
- [61] M. Richard-Viard, N. Benazeth, P. Benoit-Cattin, J. P. Ziesel, C. Benazeth, and P. Cafarelli, "Charge exchange in scattering of atomic and molecular deuterium ions on a NaCl surface," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 149, no. 1–2, pp. 7–16, 1999, doi: 10.1016/S0168-583X(98)00633-8.
- [62] C. Benazeth, N. Benazeth, P. Benoit-Cattin, P. Cafarelli, S. Mouhammad, and J. P. Ziesel, "Experimental charge fractions and angular distributions of particles scattered in Ne<sup>+</sup>/Si interactions," *Surf Sci*, vol. 343, no. 3, pp. 240–246, 1995, doi: 10.1016/0039-6028(95)00801-2.
- [63] P. Brüner *et al.*, "Thin film analysis by low-energy ion scattering by use of TRBS simulations," *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, vol. 33, no. 1, p. 01A122, Jan. 2015, doi: 10.1116/1.4901451.
- [64] N. P. Wang and E. A. Garcia, "Low-energy ion neutralization at surfaces: Resonant and Auger processes," vol. 64, pp. 1–8, 2001, doi: 10.1103/PhysRevA.64.012901.
- [65] A. HIDOUCHE, "Contribution à l'étude de l'effet image sur la diffusion d'ions lents par des surfaces solides," Thèse de Magister, Université Des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, 2001.
- [66] M. Kato, R. S. Williams, and M. Aono, "Interatomic and image potentials in low energy ion scattering at metal surfaces," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 33, no. 1, pp. 462–465, 1988, doi: https://doi.org/10.1016/0168-583X(88)90608-8.
- [67] M. Kato, R. S. Williams, and M. Aono, "Interatomic and image potentials in low energy ion scattering at metal surfaces," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 33, no. 1, pp. 462–465, 1988, doi: 10.1016/0168-583X(88)90608-8.
- [68] K. Khalal-Kouache, A. C. Chami, M. Boudjema, and C. Bénazeth, "Monte Carlo simulation of charge exchange processes in the scattering of 4 keV He<sup>+</sup> ions by an amorphous silicon surface," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 258, no. 1, pp. 40–43, 2007. Doi:10.1016/j.nimb.2006.12.085
- [69] K. Khalal-Kouache, D. Primetzhofer, and P. Bauer, "Simulation of energy spectra of slow He<sup>+</sup> ions scattered from a copper surface," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 269, no. 12, pp. 1425–1427, 2011. doi :10.1016/j.nimb.2011.04.002

- [70] J. P. Biersack, E. Steinbauer, and P. Bauer, "A particularly fast TRIM version for ion backscattering and high energy ion implantation," *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B*, vol. 61, no. 1, pp. 77–82, 1991, doi: 10.1016/0168-583X(91)95564-T.
- [71] R. L. Liboff, *Kinetic theory: classical, quantum, and relativistic descriptions*. Springer Science & Business Media, 2003.
- [72] Pascal Brault. *Dynamique moléculaire classique*. Ecole thématique. Texte de cours amendé le 23/01/2008, Atelier simulations moléculaires pour l'élaboration et le traitement de matériau. Orléans, 8-12 juillet 2002, pp.16. ffccl-00214298f
- [73] M. A. Karolewski, "Kalypso: a software package for molecular dynamics simulation of atomic collisions at surfaces," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 230, no. 1, pp. 402–405, 2005, doi: <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2004.12.074>.

## **Chapitre 2 :**

### **Modèle et méthode de calcul**

## 1. Introduction

L'interaction des ions légers avec les métaux a fait l'objet de plusieurs travaux [1- 2]. Cette interaction prend différentes formes en fonction de l'énergie initiale des ions incidents. La gamme d'énergie qui nous intéresse est de quelques keV (<10keV). Elle se situe dans la région des basses énergies. Dans cette dernière, les ions incidents peuvent être diffusés ou transmis. Dans notre thèse, on se focalise sur l'étude de la diffusion des protons de quelques keV par des surfaces solides. Beaucoup de recherches ont été menées sur les paramètres de collision comme le potentiel d'interaction [3- 4], la perte d'énergie [5-6]et l'échange de charge [7-8].

Des études précédentes se sont intéressées au calcul du coefficient de réflexion [9] et des distributions angulaires d'ions transmis [10]. Dans une continuité, notre but est de calculer des spectres en énergie pour des protons diffusés par des surfaces métalliques.

## 2. Calcul de la probabilité de diffusion $\Delta P$

Afin d'atteindre le but précité, nous devons passer par le calcul de la probabilité de diffusion. Nous allons donner les étapes de calcul pour obtenir la probabilité de diffusion et nous allons détailler tous les paramètres qui interviennent dans le processus de diffusion.

### 2.1. Théorie de diffusion

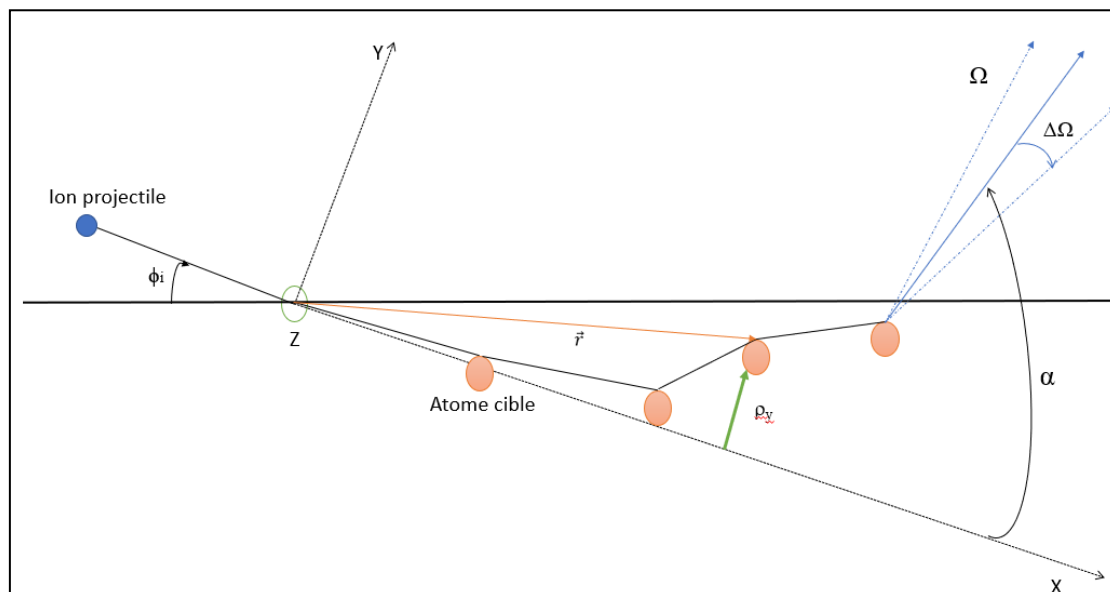
La géométrie de diffusion d'un faisceau d'ions envoyé sur une cible solide est représentée dans la figure (2.1). On voit que le projectile fait un angle  $\phi_i$  avec la surface d'une cible amorphe. Cette dernière contient N centres diffuseurs par unité de volume.

Lorsque le faisceau incident traverse la cible, une partie des ions projectiles va entrer dans la cible. Le nombre de projectiles qui se trouvent dans la cible à un instant t dans une position  $\vec{r}$  ( $d^3 r$ ) avec une énergie E(dE) et dirigés dans une direction  $\vec{\Omega}$  ( $d^2 \Omega$ ) est donné par la fonction de distribution  $F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)d^3 r dE d^2 \Omega$ . Cette dernière obéit à l'équation de Boltzmann [11]comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial t} F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) + v \vec{\Omega} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = N \int dE' d^2 \Omega' \left\{ \tilde{K}(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega}) v' F(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) - \tilde{K}(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') v' F(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \right\} \quad (2.1)$$

v est la vitesse du projectile d'énergie E

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



**Figure 2.1** Schéma illustrant la géométrie de diffusion utilisée pour le calcul de la probabilité de diffusion.

Dans leur article, Sigmund et Winterbon ont développé un modèle théorique qui étudie le cas des particules chargées transmises à travers des surfaces solides [12]. Ce dernier est valable lorsque la diffusion vérifie les quatre conditions suivantes :

- Une distribution homogène des centres diffuseurs dans une cible amorphe :  
Lorsqu'un faisceau d'ions à basse énergie interagit avec une surface solide, ces ions pénètrent dans le matériau et subissent des collisions avec les atomes qui composent la cible [12]. Il est nécessaire de supposer que les centres diffuseurs qui sont les atomes responsables des collisions, soient répartis de manière uniforme à travers le matériau. Dans une cible amorphe, les atomes ne sont pas arrangés de manière ordonnée comme dans un cristal. Donc, on suppose que la distribution de ces atomes est homogène, ce qui signifie que la probabilité de rencontre entre un ion incident et un centre diffuseur est constante partout dans le matériau ce qui rend les interactions cohérentes et prévisibles. Cette condition de distribution homogène permet de simplifier le traitement mathématique de la diffusion ionique.
- L'approximation des collisions binaires (BCA) :  
C'est une partie essentielle dans la simulation des interactions entre les particules chargées et les atomes cibles. Les collisions des ions avec les atomes cibles sont supposées binaires. Elle se base sur l'hypothèse que les interactions peuvent être décomposées en une série de collisions distinctes de courte durée. L'énergie des particules incidentes est transférée aux atomes cibles à proximité. Cette approche permet de modéliser la déviation des projectiles sur des échelles plus petites que les distances interatomiques. En évaluant précisément les vitesses et les trajectoires des particules après chaque collision, offrant ainsi une description détaillée et

précise des interactions à l'échelle atomique [13]. A titre d'exemple, il y a le Code MARLOWE qui se base sur cette théorie [14].

- La perte d'énergie dans la cible est négligeable :

La particule chargée, pénètre une cible solide et interagit avec les atomes de cette cible. Ces interactions peuvent entraîner des pertes d'énergie pour l'ion projectile par divers mécanismes, notamment les collisions élastiques et inélastiques avec les atomes de la cible. A basse énergie, l'ion a une énergie relativement faible, il traverse la matière sans causer de perturbations significatives aux atomes. Donc, la quantité d'énergie transférée lors de chaque collision est minimale [15].

- La limite des faibles angles de diffusion :

Molière a spécifié les faibles angles de diffusion comme étant limités à 20° [16]. La section efficace atteint un maximum dans le cas des faibles angles, de sorte que les parcours à grands angles ne contribuent pas de manière significative à l'intégrale de la section efficace différentielle (calculée pour la première fois par Bothe avec l'approximation des faibles angles). Par conséquent, les angles doivent être suffisamment petits pour que la longueur du trajet parcouru soit égale approximativement à la profondeur pénétrée (l'épaisseur), soit  $L = x$  [17].

En se basant sur ce modèle, un nouveau modèle a été développé au sein du laboratoire SNIRM afin de calculer la probabilité de diffusion [18]

## 2.2. Calcul de la probabilité de diffusion sans tenir compte de la perte d'énergie $\Delta P_1$

Afin de pouvoir calculer la probabilité de diffusion  $\Delta P_1$ , nous avons utilisé l'expression simplifiée donnée par Marwick de la fonction de distribution [19]. En utilisant une transformée de Fourier du deuxième ordre, la fonction de distribution prend la forme suivante [19]:

$$F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2\pi^4} \frac{1}{x^2} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} kK \cos(K \cdot \gamma + k \cdot \alpha) \cdot e^{-\tau \int_0^1 \Delta(z) dz} dK dk d\theta_1 d\theta_2 \quad (2.2)$$

$\Delta(z)$  est la section efficace de transport réduite [20]. Cette dernière s'écrit comme suit :

$$\Delta(z) = \int_0^\infty d\tilde{\phi} \frac{f(\tilde{\phi})}{\tilde{\phi}^2} [1 + J_0(z \tilde{\phi})] \quad (2.3)$$

En fonction des variables posées par Thomas-Fermi [21]

$$\tilde{\phi} = \frac{E a}{2Z_1 Z_2 e^2} \phi \text{ à la limite des faibles angles}$$

$\phi$  est l'angle de la diffusion simple dans le système du laboratoire

$$z = \frac{E a}{2Z_1 Z_2 e^2} |\vec{k} - \beta \vec{K}| \quad (2.4)$$

L'épaisseur réduite est définie comme :  $\tau = \pi a^2 N x$

$J_0$  est la fonction de Bessel d'ordre zéro du premier type.

$N$  est le nombre d'atomes cible par unité de volume

$a$  est le rayon d'écran

$E$  est l'énergie initiale

$x$  est la distance parcourue par le projectile dans la cible.

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

$\vec{k}(k, \theta_1)$  et  $\vec{K}(K, \theta_2)$ .

$\vec{\Omega} = (1, \vec{\alpha})$

$\vec{r} = (x, \vec{\rho})$  et  $\vec{\gamma} = \frac{\vec{\rho}}{x} - \vec{\alpha}$

On voit dans l'équation (2.2) que la fonction de distribution  $F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha})$  prend la forme d'une intégrale multidimensionnelle. Cette dernière va être utilisée dans nos calculs.

En utilisant l'expression de l'équation (2.2), on peut calculer la probabilité pour qu'une particule soit diffusée d'un angle  $\theta$  (dans une direction  $\vec{\Omega}$ ), dans l'angle solide  $\Delta\Omega$  et pour qu'elle soit repérée au moment de sa diffusion par un vecteur  $\vec{r}$  dont l'abscisse est comprise entre  $x$  et  $x+dx$ . Cette probabilité est donnée sous forme d'une intégrale (eq (2.5)) [9][22][23]:

$$\Delta P_1 = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{2}{x^2} \int_{\rho_z=-\infty}^{+\infty} F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) \rho_z (\theta - \phi_i) \Delta x \Delta \Omega \quad (2.5)$$

Les limites de cette intégrale sont fixées de telle sorte que la diffusion est supposée avoir lieu dans le plan xOy :  $\vec{\alpha}(\alpha_y = \theta, \alpha_z = 0)$

$\rho_y$  est supposé nulle car la détection se fait dans le plan d'incidence. Aussi, la fonction de distribution  $F$  est une fonction paire et la valeur de la limite supérieure de  $\rho_z$  est estimée à  $\frac{x}{2}$  [24]. Donc, on peut l'écrire sous cette forme :

$$\Delta P_1 = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{2}{x^2} \int_0^{\rho_{zlim}=\frac{x}{2}} F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) \rho_z (\theta - \phi_i) \Delta x \Delta \Omega \quad (2.6)$$

### -Calcul de $\Delta P$ pour un parcours $L=0$ :

A la surface, la diffusion de l'ion incident est considérée comme étant une diffusion simple. Donc, en se basant sur cette approximation,  $\Delta P(L=0)$  s'écrira comme suit [24] :

$$\Delta P(L = 0) = N \frac{d\sigma}{d\Omega} \Delta x \Delta \Omega \quad (2.7)$$

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$  est la section efficace différentielle précitée dans le chapitre 1 (eq(1.26)).

La probabilité  $\Delta P_1$  est très importante car elle nous permet de calculer le spectre énergétique des ions diffusés [25].

### 2.3. Introduction de la perte d'énergie dans le calcul de la probabilité de diffusion

Dans le calcul précédent de la probabilité de diffusion, la perte d'énergie de l'ion incident a été supposée négligeable. Cette approximation est justifiée dans le cas des faibles valeurs de parcours. Néanmoins, il a été démontré que cette condition n'est pas valide pour les grandes valeurs de parcours  $L$  [17].

Afin d'inclure la perte d'énergie dans le calcul de la probabilité de diffusion  $\Delta P$ , nous devons tenir compte du fait que l'énergie de l'ion incident varie d'une manière continue dans le solide et affecte la valeur de la section efficace différentielle de diffusion .

Donc, la substitution suivante est utilisée dans l'équation (2.2) [26]

$$N x \int_0^1 \sigma_0(|k - \beta K|, E_0) d\beta \rightarrow N \int_0^x dx' \int_0^1 \sigma_0(|k - \beta K|, E(x')) d\beta \quad (2.8)$$

$E(x')$  est l'énergie d'un ion incident à un parcours  $x'$  dans la cible. Cette dernière peut être évaluée comme suit :

$$E(x') = E_0 - \Delta E = E_0 - \int_0^{x'} \left( \frac{dE}{dx} \right) dx \quad (2.9)$$

$\Delta E$  est la perte d'énergie totale

$\frac{dE}{dx}$  est le pouvoir d'arrêt total (la somme des pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire).

Les valeurs des pouvoirs d'arrêt proviennent de la base de données SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) 2008 [27]. Elle fournit des calculs détaillés sur les pouvoirs d'arrêt des ions dans différents matériaux, permettant ainsi d'estimer la perte d'énergie des ions en fonction de leur énergie initiale et de leur trajectoire dans la matière. La somme des deux types de pouvoir d'arrêt permet de déterminer le pouvoir d'arrêt total. Ensuite, en multipliant le pouvoir d'arrêt par la distance parcourue, nous obtenons la perte d'énergie à une distance spécifiée.

### 2.4. Calcul de la probabilité de diffusion avec perte d'énergie $\Delta P_2$

Après l'introduction de la perte d'énergie dans le calcul, la nouvelle probabilité de diffusion est  $\Delta P_2$ . En remplaçant la relation (2.8) dans l'équation (2.2) pour déterminer la nouvelle expression de la fonction de distribution qui prend la forme suivante :

$$F'(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2\pi^4} \frac{1}{x^2} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} k K \cos(K \cdot \gamma + k \cdot \alpha) \cdot e^{-N\pi a^2 \int_0^x \int_0^1 \Delta(z') d\beta dx'} dK dk d\theta_1 d\theta_2 \quad (2.10)$$

la variable  $z'$  est définie comme suit :

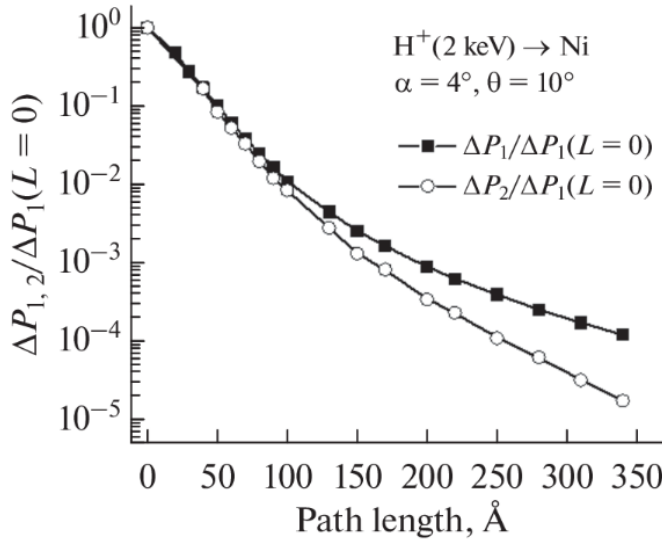
$$z' = \frac{E(x')a}{2Z_1Z_2e^2} |\vec{k} - \beta\vec{K}| \quad (2.11)$$

La section efficace réduite devient comme suit:

$$\Delta(z') = \int_0^\infty d\tilde{\phi} \frac{f(\tilde{\phi})}{\tilde{\phi}^2} [1 + J_0(z'\tilde{\phi})] \quad (2.12)$$

Les valeurs de  $\Delta P_1$  ont été évaluées pour le cas de la diffusion des protons de 2keV sur une cible de Nickel pour une variété d'angles incidents et d'angles de diffusion à l'aide de l'expression (2.6). En utilisant les équations (2.8) et (2.9) dans l'équation (2.13), les valeurs de  $\Delta P_2$  ont été élaborées pour les mêmes systèmes et géométries. Le potentiel ZBL a été utilisé pour décrire l'interaction projectile-atome cible. La figure 2.2 [26] est donnée comme exemple de ces calculs pour un angle incident de  $4^\circ$  et un angle de diffusion de  $10^\circ$ . Ces résultats montrent clairement que les deux probabilités sont pratiquement les mêmes pour les valeurs de L inférieures à  $100\text{\AA}$ . Au-delà de cette valeur, la déviation entre les deux probabilités devient plus significative. Cela confirme clairement la nécessité d'incorporer la perte d'énergie dans le modèle qui calcule la probabilité de diffusion. Par conséquent, cette étape alourdit le calcul et rend le temps de calcul de  $\Delta P_2$  beaucoup plus long que celui de  $\Delta P_1$ .

$$\Delta P_2 = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{2}{x^2} \int_0^{\rho_{zlim}=\frac{x}{2}} F'(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) \rho_z (\theta - \phi_i) \Delta x \Delta \Omega \quad (2.13)$$



**Figure 2.2** Variation de  $\Delta P_1/\Delta P_1(L=0)$  et  $\Delta P_2/\Delta P_1(L=0)$  en fonction du parcours total L pour des ions de  $H^+(2 \text{ keV})$  diffusés sur une cible de Nickel. L'angle d'incidence et de diffusion sont respectivement  $4^\circ$  et  $10^\circ$ [28]

### 3. Procédure numérique

Comme le montre l'expression de la probabilité de diffusion  $\Delta P_1$  dans l'équation (2.5), elle se présente sous forme d'une intégrale multidimensionnelle. Le calcul de cette intégrale nécessite l'utilisation de la méthode de Monte Carlo.

La méthode de Monte Carlo est une technique de calcul statistique utilisée pour simplifier les intégrales complexes en les approximant par des sommes. En générant un grand nombre d'échantillons aléatoires, cette méthode évalue l'intégrale en calculant la moyenne des valeurs de la fonction aux points échantillonnés. Cette approche est particulièrement efficace pour les intégrales compliquées et permet de réduire significativement la complexité computationnelle.

La méthode de Monte Carlo est largement utilisée pour résoudre les problèmes de physique statistique et dans d'autres domaines qui nécessitent des calculs numériques intensifs [29]. Son efficacité augmente avec le nombre de points échantillonnés (itérations).

$$\int_a^b \int_c^d \int_e^f F(x, y, z) \approx (b - a)(d - c)(f - e)\langle F \rangle \quad (2.14)$$

$\langle F \rangle$  est la valeur moyenne de la fonction  $F$  à intégrer dans un domaine constitué par les bornes  $a, b, c, d, e$  et  $f$  de l'intégrale.

L'expression de la valeur moyenne  $\langle F \rangle$  est donnée dans l'équation (2.15) [30].

$$\langle F \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F(x_i, y_i, z_i) \quad (2.15)$$

$N$  est le nombre d'itérations.

L'erreur  $\sigma$  estimée sur l'intégrale Monte Carlo à  $N$  itérations est donnée par [30].

$$\sigma = \sqrt{\frac{\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2}{N}} \quad (2.16)$$

$$\langle F^2 \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F^2(x_i, y_i, z_i) \quad (2.17)$$

Nous avons pu intégrer l'équation (2.6) pour calculer  $\Delta P_1$  et par la suite  $\Delta P_2$  avec une précision de 2%. Nous avons pu obtenir des distributions en longueurs et des spectres en énergie.

### 4. Approximation de l'énergie moyenne :

Pour aborder efficacement le problème de la durée de calcul, il est proposé d'utiliser la méthode de l'énergie moyenne pour déterminer la probabilité  $\Delta P_2$ . Cette méthode repose sur l'observation que l'énergie d'un projectile varie de manière continue lorsqu'il traverse une cible. En particulier, la méthode de l'énergie moyenne a démontré son

efficacité dans le calcul des distributions angulaires des particules transmises dans des configurations de transmission [10]. Ces calculs se basent sur la recherche d'une valeur moyenne représentative de l'énergie du projectile tout au long de son parcours à travers le matériau. L'énergie moyenne  $\bar{E}$  prend la valeur de l'énergie initiale  $E_0$  dans le modèle utilisé pour calculer  $\Delta P_1$  (eq (2.6)).

$$E_0 \rightarrow \bar{E}(E_0, E_s) \quad (2.18)$$

L'étude des interactions entre les particules et la matière a conduit à la proposition de plusieurs fonctions pour modéliser l'énergie moyenne des projectiles. Ces fonctions sont essentielles pour comprendre et prédire le comportement des particules lorsqu'elles traversent une cible.

La recherche la plus consistante de  $\bar{E}$  a été établie par Valdès et Arista [30], [31]. Ils ont établi une méthode détaillée et systématique pour déterminer l'énergie moyenne des projectiles. Ils ont proposé une formulation de l'énergie moyenne qui prend en compte les variations continues de l'énergie des projectiles tout au long de leur parcours à travers le matériau.

La fonction  $\bar{E}_{m1}$  a été déduite :

$$\bar{E}_{m1} = \frac{1}{4} E_0 (1 + \mu^{1/2})^2 \quad (2.19)$$

La variable  $\mu$  est définie comme étant le rapport des énergies dans l'équation (2.19)

$$\mu = \frac{E_s}{E_0} \quad (2.20)$$

Récemment, ce problème a été révisé dans les cas des protons à basse énergie [28] [31]. Une nouvelle fonction  $\bar{E}_{m2}$  a été trouvée pour être un bon choix de  $\bar{E}$  (eq (2.21)).

$$\bar{E}_{m2} = \frac{1}{15} E_0 (1 + 223\mu + \mu^2)^{1/2} \quad (2.21)$$

En plus de sa simplicité, cette méthode demande moins de temps de calcul comparée à la fonction précédente spécialement pour les grands parcours.

## 5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit le modèle utilisé dans le calcul de notre étude, en mettant l'accent sur le processus de diffusion à basse énergie. Nous avons cité les équations et les différents paramètres inclus dans notre calcul. De plus, nous avons détaillé l'introduction de la perte d'énergie et la procédure numérique. A la fin nous avons abordé brièvement l'approximation de l'énergie moyenne.

## Références

- [1] S. N. Markin<sup>1</sup>, D. Primetzhofer, S. Prusa, M. Brunmayr, G. Kowarik, F. Aumayr, and P. Bauer., “Electronic interaction of very slow light ions in Au: Electronic stopping and electron emission,” *Phys Rev B Condens Matter Mater Phys*, vol. 78, no. 19, pp. 2–7, 2008, doi: 10.1103/PhysRevB.78.195122.
- [2] P. Y. Babenko, A. N. Zinoviev, and A. P. Shergin, “Energy spectra of Ar ions scattered on Al and Ge surfaces,” *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 354, pp. 137–141, 2015, doi: 10.1016/j.nimb.2014.12.035.
- [3] B. Bruckner, T. Strapko, M. A. Sortica, P. Bauer, and D. Primetzhofer, “On the influence of uncertainties in scattering potentials on quantitative analysis using keV ions,” *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 470, pp. 21–27, 2020, doi: 10.1016/j.nimb.2020.02.018.
- [4] D. Primetzhofer, S. N. Markin, M. Draxler, R. Beikler, E. Taglauer, and P. Bauer, “Surface Science Strength of the interatomic potential derived from angular scans in LEIS,” vol. 602, pp. 2921–2926, 2008, doi: 10.1016/j.susc.2008.07.030.
- [5] M. A. Zeb, J. Kohanoff, D. Sánchez-Portal, A. Arnau, J. I. Juaristi, and E. Artacho, “Electronic stopping power in gold: The role of d electrons and the H/He anomaly,” *Phys Rev Lett*, vol. 108, no. 22, May 2012, doi: 10.1103/PhysRevLett.108.225504.
- [6] D. Goebel, K. Khalal-Kouache, D. Roth, E. Steinbauer, and P. Bauer, “Energy loss of low-energy ions in transmission and backscattering experiments,” *Phys Rev A*, vol. 88, no. 3, pp. 1–8, 2013, doi: 10.1103/PhysRevA.88.032901.
- [7] P. Riccardi, A. Sindona, and C. A. Dukes, “Local charge exchange of He + ions at Aluminum surfaces,” *Phys Lett A*, vol. 381, no. 13, pp. 1174–1176, 2017, doi: 10.1016/j.physleta.2017.01.051.
- [8] A. Narmann, W. Heiland, F. Flores, R. M. Noga, and P. M. Echenique, “Charge exchange and energy loss of particles interacting with surfaces,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, vol. 48, pp. 359–364, 1990.
- [9] K. Khalal-Kouache, A. C. Chami, M. Boudjema, P. Benoit-Cattin, C. Benazeth, and Y. Boudouma, “Transport theory and Monte Carlo simulation of the scattering of low energy Li<sup>+</sup> ions from a polycrystalline nickel surface,” *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 183, no. 3–4, 2001, doi: 10.1016/S0168-583X(01)00739-X.
- [10] A. Mekhtiche, “Etude de la transmission d’ions légers à travers des cibles solides à basse énergie”. Thèse de doctorat, Université Des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, 2016
- [11] K. T. Waldeer and H. M. Urbassek, “Small-angle multiple scattering of light particles at glancing incidence for screened Coulomb interaction,” *J Phys A Math Gen*, vol. 25, no. 4, pp. 807–832, 1992, doi: 10.1088/0305-4470/25/4/019.
- [12] P. Sigmund and B. Winterbon, “Small-angle multiple scattering of ions in the screened Coulomb region : I . Angular distributions,” no. October 2017, 1974, doi: 10.1016/0029-554X(74)90805-2.

- [13] E. S. Parilis, *Atomic Collisions on Solid Surfaces*. North-Holland, 1993.
- [14] G. Eckstein, *Computer Simulation of Ion-Solid Interactions*, vol. 10 of Springer Series in Materials Science. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 1991.
- [15] P. Sigmund and B. Winterbon, "Small-angle multiple scattering of ions in the screened Coulomb region : I. Angular distributions," no. October 2017, 1974, doi: 10.1016/0029-554X(74)90805-2.
- [16] P. Sigmund and K. B. Winterbon, "Small-angle multiple scattering of ions in the screened Coulomb region. I. Angular distributions," *Nuclear Instruments and Methods*, vol. 119, no. C, pp. 541–557, 1974, doi: 10.1016/0029-554X(74)90805-2.
- [17] K. Khalal-Kouache, B. Aissous, A. Mekhtiche, and A. C. Chami, "Effect of energy loss in the simulation of slow ion scattering by a solid surface," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 266, no. 5, pp. 714–718, 2008. Doi: doi :10.1016/j.nimb.2007.11.043
- [18] A. D. Marwick and P. Sigmund, "Small-angle multiple scattering of ions in the screened Coulomb region. 2. Lateral spread," *Nuclear Instruments and Methods*, vol. 126, no. 3, pp. 317–323, Jun. 1975, doi: 10.1016/0029-554X(75)90693-X.
- [19] L. Meyer, "Plural and multiple scattering of low-energy heavy particles in solids," *physica status solidi (b)*, vol. 44, no. 1, pp. 253–268, 1971.
- [20] J. Lindhard, V. Nielsen, and M. Scharff, "approximation method in classical scattering by screened coulomb fields.," *Kgl. Dan. Vidensk. Selsk., Mat.-Fys. Medd.*, 36: 31p(1968)..
- [21] A. Mekhtiche, "Diffusion d'ions de faible énergie par une surface solide : Simulation basée sur la théorie de transport pour le calcul du coefficient de réflexion". Thèse de Magister, Université Des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, 2005.
- [22] Khalal née Kouache Karima, 'Etude de la diffusion d'ions de basse énergie (quelque keV) par une surface solide amorphe ou polycristalline', Thèse de Doctorat d'état, faculté de physique, USTHB, 2002.
- [23] K Khalal-Kouache, A Mekhtiche, AC Chami, M Boudjema, Scattering of low-energy ions from a solid surface: Transport theory calculation of the reflection coefficient
- [24] K. Khalal-Kouache, A. C. Chami, M. Boudjema, and C. Benazeth, "Monte Carlo simulation of charge exchange processes in the scattering of 4 keV He<sup>+</sup> ions by an amorphous silicon surface," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 258, no. 1, pp. 40–43, May 2007, doi: 10.1016/j.nimb.2006.12.085.
- [25] A. Mekhtiche and K. Khalal-Kouache, "Multiple scattering of low energy ions in matter: Influence of energy loss and interaction potential," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 354, pp. 151–154, 2015, doi: 10.1016/j.nimb.2014.11.086.

- [26] J.F.Ziegler, The Stopping and Ranges of Ions in Matter ("SRIM-2000"), Computer software package. Can be downloaded via internet <http://www.SRIM.org>
- [27] A. Mansour, A. Mekhtiche, and K. Khalal-Kouache, "Reflection of H+(2 keV) Ions from Metallic Surfaces: Transport Theory Calculation of the Reflection Probability with the Mean Energy Approximation," *Journal of Surface Investigation*, vol. 16, no. 6, pp. 1231–1236, 2022, doi: 10.1134/S1027451022060416.
- [28] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics: Chapters 1-4," *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, pp. 1–130, 1999.
- [29] K. Rummukainen, "Monte Carlo simulations in physics," Cours, Department of physical sciences, University of Oulu, 2008.
- [30] J. E. Valdés and N. R. Arista, "Energy-loss effects in multiple-scattering angular distributions of ions in matter," *Phys Rev A (Coll Park)*, vol. 49, no. 4, p. 2690, 1994. doi: 10.1103/PhysRevA.49.2690
- [31] A. Mekhtiche and K. Khalal-kouache, "Multiple scattering of low energy H + ions in matter: Approximation of mean energy on the Sigmund and Winterbon model," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 2016, doi: 10.1016/j.nimb.2016.04.040.

# **Chapitre 3 :**

## **Résultats et discussions**

## 1. Introduction

A basse énergie, il est crucial de comprendre l'impact de divers paramètres sur les processus de diffusion. La probabilité de diffusion est une grandeur essentielle pour étudier les interactions ions-surface. La détermination de la probabilité de diffusion constitue l'axe central de notre étude portant sur la diffusion des protons de 2keV sur des cibles solides. Afin d'obtenir des spectres énergétiques, nous avons entamé ce chapitre en calculant la probabilité de diffusion sans prendre en compte la perte d'énergie. Par la suite, nous avons intégré l'effet de la perte d'énergie dans nos calculs afin d'améliorer la précision des résultats et de définir la plage d'épaisseurs où on arrive à voir l'influence de cette perte d'énergie. Par la suite, notre attention s'est portée sur la recherche de l'expression de l'énergie moyenne qui nous permet de calculer la probabilité de diffusion. Nous avons évalué l'impact du potentiel d'interaction, de la nature de la cible, de la géométrie et de la perte d'énergie électronique sur nos calculs. En étudiant l'effet de ces différentes variables sur l'énergie moyenne, nous sommes en mesure de mieux comprendre leur contribution au phénomène de diffusion.

## 2. La probabilité de diffusion sans tenir compte de la perte d'énergie $\Delta P_1$

Dans le cadre de cette étude, nous avons procédé au calcul de la probabilité de diffusion pour différents parcours. Pour cela, nous avons considéré le système constitué par des protons de 2 keV diffusés par une cible en nickel pour un angle d'incidence  $\phi_i = 4^\circ$  et un angle de diffusion  $\theta = 10^\circ$ . Notre objectif initial était de calculer  $\Delta P_1$  [1] sur une large gamme d'épaisseurs, allant de zéro Å à 350 Å avec l'équation (2.5).

Nous avons effectué ces calculs en utilisant les trois potentiels couramment rencontrés dans la littérature pour traiter les interactions à basse énergie : ZBL (Ziegler-Biersack-Littmark) [2], TFM (Thomas-Fermi-Molière) [3] et L-J (Lenz-Jensen) [4]. La figure 3.1 présente l'ensemble des valeurs de  $\Delta P_1$  que nous avons calculé pour ces potentiels.

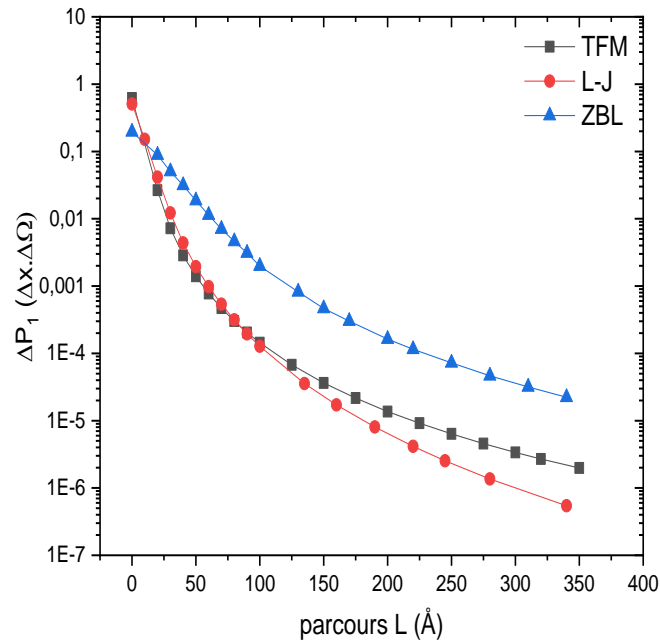
Comme le montre la figure 3.1, les valeurs de  $\Delta P_1$  sont plus élevées pour les faibles parcours par rapport aux grands parcours.

Le potentiel ZBL conduit à des valeurs de  $\Delta P_1$  plus élevées que celles obtenues avec TFM et L-J. Nous constatons également que les résultats obtenus avec les potentiels TFM et L-J sont très similaires et se superposent dans l'intervalle des parcours  $L$  inférieurs à 100 Å. Nous avons donc décidé de choisir le potentiel ZBL dans les calculs qui suivent

On note aussi que le temps de calcul augmente significativement pour des trajectoires de l'ordre de quelques dizaines d'Angströms, car dans ce cas, la fonction  $F$  (eq(2.2)) présente de fortes oscillations.

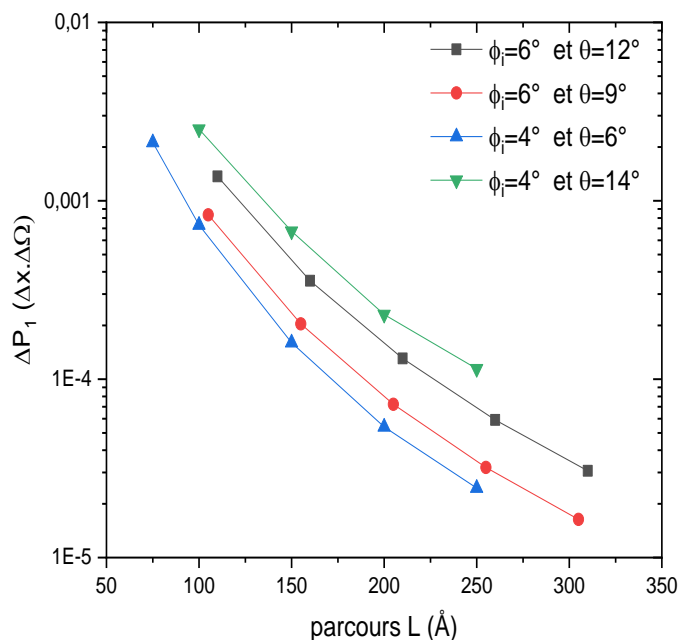
Pour continuer notre étude, nous avons entrepris d'étudier l'influence de la géométrie sur les interactions. Pour ce faire, nous avons considéré les géométries suivantes :  $(\phi_i, \theta) = \{(4^\circ, 6^\circ), (4^\circ, 14^\circ), (6^\circ, 9^\circ), (6^\circ, 12^\circ)\}$ . Nous avons fixé  $\phi_i$  à  $4^\circ$  pour différentes valeurs de  $\theta$ , puis nous avons augmenté  $\phi_i$  à  $6^\circ$  en prenant deux autres valeurs de  $\theta$  dans le cas du potentiel ZBL.

Ainsi, nous avons pu observer comment la géométrie de diffusion influence la valeur de la probabilité de diffusion. Pour visualiser cette relation, nous avons tracé la variation de la probabilité de diffusion en fonction du parcours  $L$ .



**Fig3.1** : La variation de  $\Delta P_1$  en fonction du parcours L pour le système  $H^+(2keV)/Ni$  dans la géométrie  $\phi_i = 4^\circ$  et  $\theta = 10^\circ$  pour les 3 potentiels écrantés ZBL, TFM et L-J

Comme on le voit sur la figure 3.2, pour les différentes géométries on observe la même allure que celle de  $\phi_i=4^\circ$  et  $\theta = 10^\circ$ . Par conséquent, ces configurations géométriques peuvent être considérées comme représentatives pour la poursuite de l'étude.



**Fig3.2** : La variation de  $\Delta P_1$  en fonction du parcours L pour Le système  $H^+(2keV)/Ni$  dans les géométries  $(\phi_i, \theta) = \{(4^\circ, 6^\circ), (4^\circ, 14^\circ), (6^\circ, 9^\circ), (6^\circ, 12^\circ)\}$ .

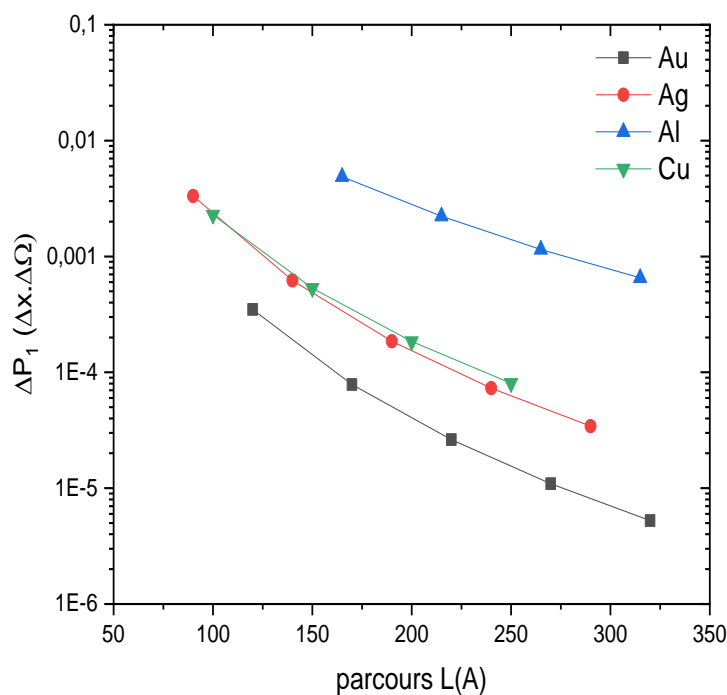
Afin de poursuivre notre étude, une autre partie a été consacrée à l'exploration d'autres cibles métalliques, notamment l'or, l'argent, le cuivre et l'aluminium, afin d'observer le comportement de leurs courbes de probabilité de diffusion. Pour cette analyse, le potentiel de Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) a été choisi pour le calcul de la probabilité de diffusion.

La même géométrie de collision utilisée précédemment pour le nickel a été adoptée, avec un angle d'incidence  $\phi_i$  de  $4^\circ$  et un angle de diffusion  $\theta$  de  $10^\circ$ .

Les résultats obtenus sont présentés dans la figure 3.3. Il est intéressant de noter que les courbes de diffusion pour les quatre cibles métalliques présentent une allure similaire. De plus, les valeurs de la probabilité de diffusion pour le cuivre et l'argent sont relativement voisines. En revanche, on constate que l'aluminium affiche des valeurs de probabilité de diffusion supérieures par rapport aux autres cibles. Enfin, il est important de souligner que l'or se distingue par des valeurs de probabilité de diffusion plus basses par rapport aux trois autres cibles.

Cette analyse comparative des courbes de diffusion entre différentes cibles métalliques offre des informations précieuses sur les propriétés d'interaction des protons avec ces matériaux. Ces résultats permettent de mieux comprendre la dépendance de diffusion en fonction de la cible choisie, ce qui peut être essentiel dans le cadre de la conception de dispositifs ou de la recherche de matériaux appropriés pour des applications spécifiques.

Ces résultats nous permettent de mieux comprendre l'impact de la géométrie, la nature de la cible et le potentiel d'interaction sur la probabilité de diffusion des protons dans notre système.



**Fig3.3** : La variation de  $\Delta P_1$  en fonction du parcours L dans les systèmes  $H^+(2keV) / Au$ ,  $H^+(2keV) / Ag$ ,  $H^+(2keV) / Al$  et  $H^+(2keV) / Cu$  dans la géométrie  $(\phi_i, \theta) = (4^\circ, 10^\circ)$

### 3. La probabilité de diffusion avec perte d'énergie $\Delta P_2$

Dans cette étude, nous nous pencherons sur l'influence de la perte d'énergie sur le calcul de la probabilité de diffusion, en analysant les courbes de  $\Delta P_2$  et de  $\Delta P_1$ . Nous examinerons également l'effet de l'introduction de la perte d'énergie en reprenant les géométries, les cibles et les potentiels interatomiques ainsi étudiés pour  $\Delta P_1$ .

L'énergie du projectile varie en fonction de la distance parcourue dans la cible. Pour exprimer la variation continue de l'énergie incidente à travers son parcours dans la cible, nous avons intégré dans le calcul une formule mathématique qui représente l'énergie incidente  $E$  sous forme d'un polynôme du second ordre en fonction du parcours  $L$ .

Le calcul de la probabilité de diffusion avec perte d'énergie  $\Delta P_2$  s'est fait en utilisant l'équation (2.13).

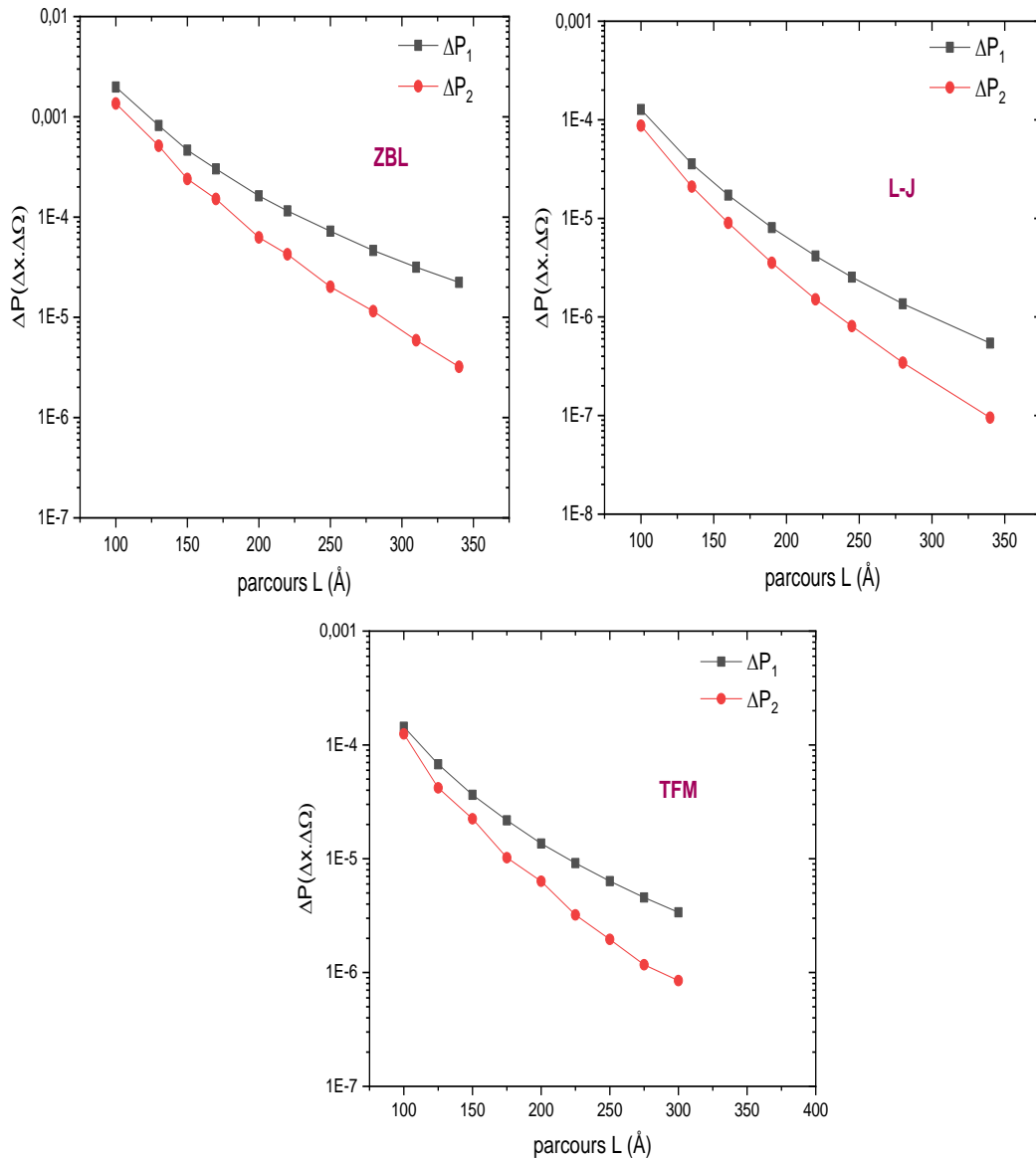
On a choisi dans la première partie de ce chapitre de considérer le système proton de 2keV comme projectile envoyé sur une cible de Nickel dans la géométrie  $\phi_i = 4^\circ$  et  $\theta = 10^\circ$ .

On a déterminé cette nouvelle probabilité pour les trois potentiels précédemment cités et on a ajouté les valeurs de  $\Delta P_1$  dans les courbes de la figure 3.4 afin de pouvoir comparer les valeurs de  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$ .

La figure 3.4 révèle un écart significatif entre les valeurs de  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$ . Cette disparité est particulièrement notable pour les grands parcours et diminue progressivement pour les faibles parcours, pour finalement s'annuler lorsque la distance est inférieure à 100 Å.

L'écart est clairement visible pour les trois potentiels étudiés. La différence qu'on trouve entre les valeurs de  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  est expliquée par l'effet de la perte d'énergie introduite dans le calcul de  $\Delta P_2$ . Cette dernière montre que l'énergie perdue dans la cible lors de la diffusion est considérable pour les grands parcours  $L > 100 \text{Å}$ . Donc, on ne peut pas négliger cette dernière lorsqu'on calcule la probabilité de diffusion dans cet intervalle d'épaisseurs.

Dans une prochaine étape, nous procéderons au calcul de  $\Delta P_2$  pour différentes cibles et plusieurs géométries. On se limite aux parcours supérieurs à 100Å pour l'étude de la perte d'énergie pour d'autres cibles et géométries.

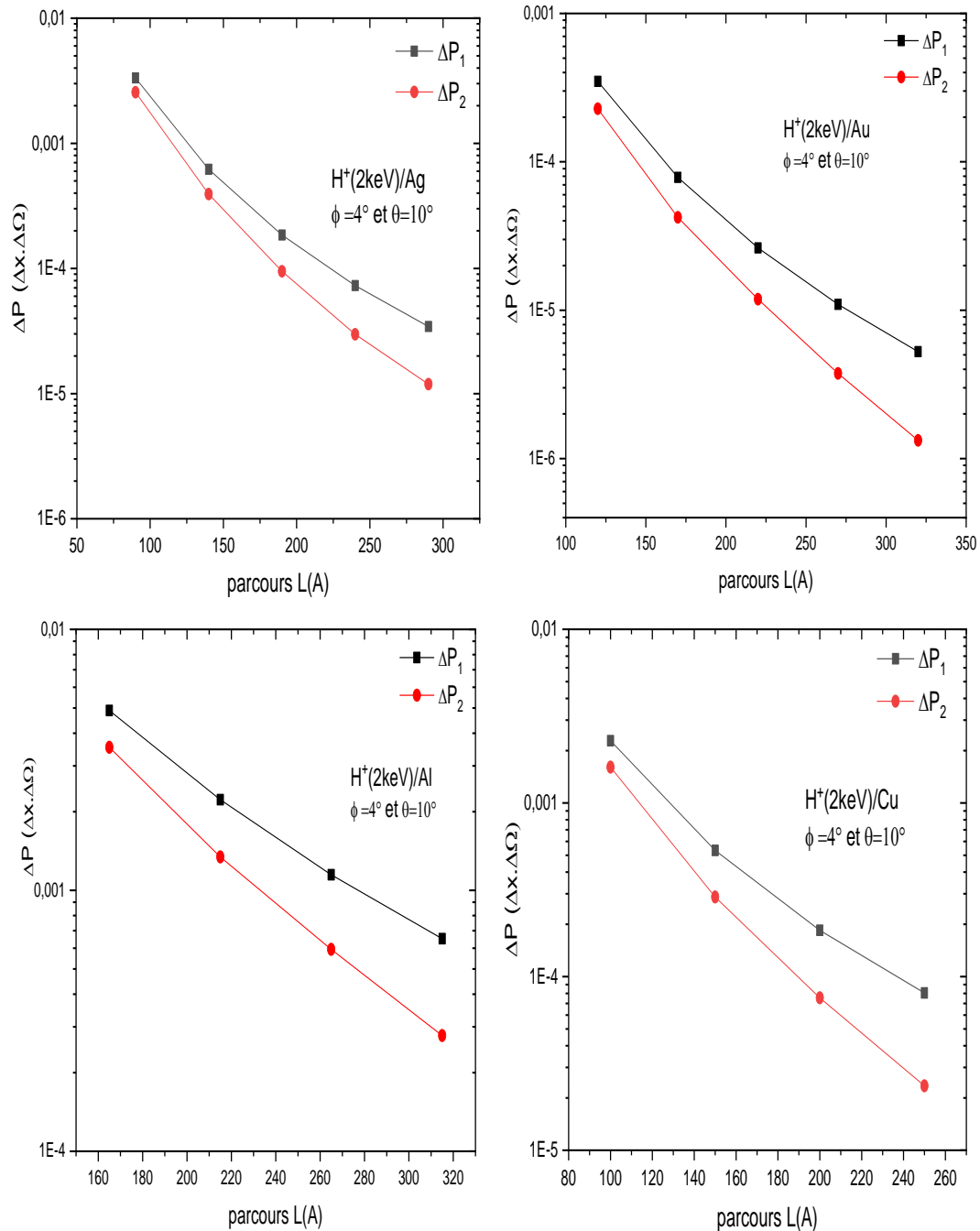


**Fig3.4** : La variation de  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  en fonction du parcours  $L$  pour le système  $H^+(2keV)/Ni$  dans la géométrie  $\phi_i = 4^\circ$  et  $\theta = 10^\circ$  pour les 3 potentiels écrantés ZBL, TFM et L-J

On a repris les mêmes cibles que pour le calcul de  $\Delta P_1$ . On a calculé  $\Delta P_2$  pour les cas des protons de 2keV diffusés par l'Or, l'Argent, l'Aluminium et le Cuivre. La géométrie qu'on considère dans ces systèmes est un angle d'incidence  $\phi_i = 4^\circ$  et un angle de diffusion  $\theta = 10^\circ$  et on a choisi le potentiel écranté ZBL. La figure 3.5 présente les résultats de  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  pour chaque cible afin de montrer l'écart entre les deux valeurs de probabilités.

Sur la figure 3.5, nous observons une tendance similaire à celle de la cible de Nickel déjà représentée dans la figure 3.4 (ZBL). Cependant, un écart persiste entre les valeurs de  $\Delta P_1$  et

$\Delta P_2$  pour les parcours supérieurs à 100 Å. Cette observation suggère que, même dans cette gamme de distance, il existe une variation significative entre les résultats obtenus pour les deux valeurs  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$ .

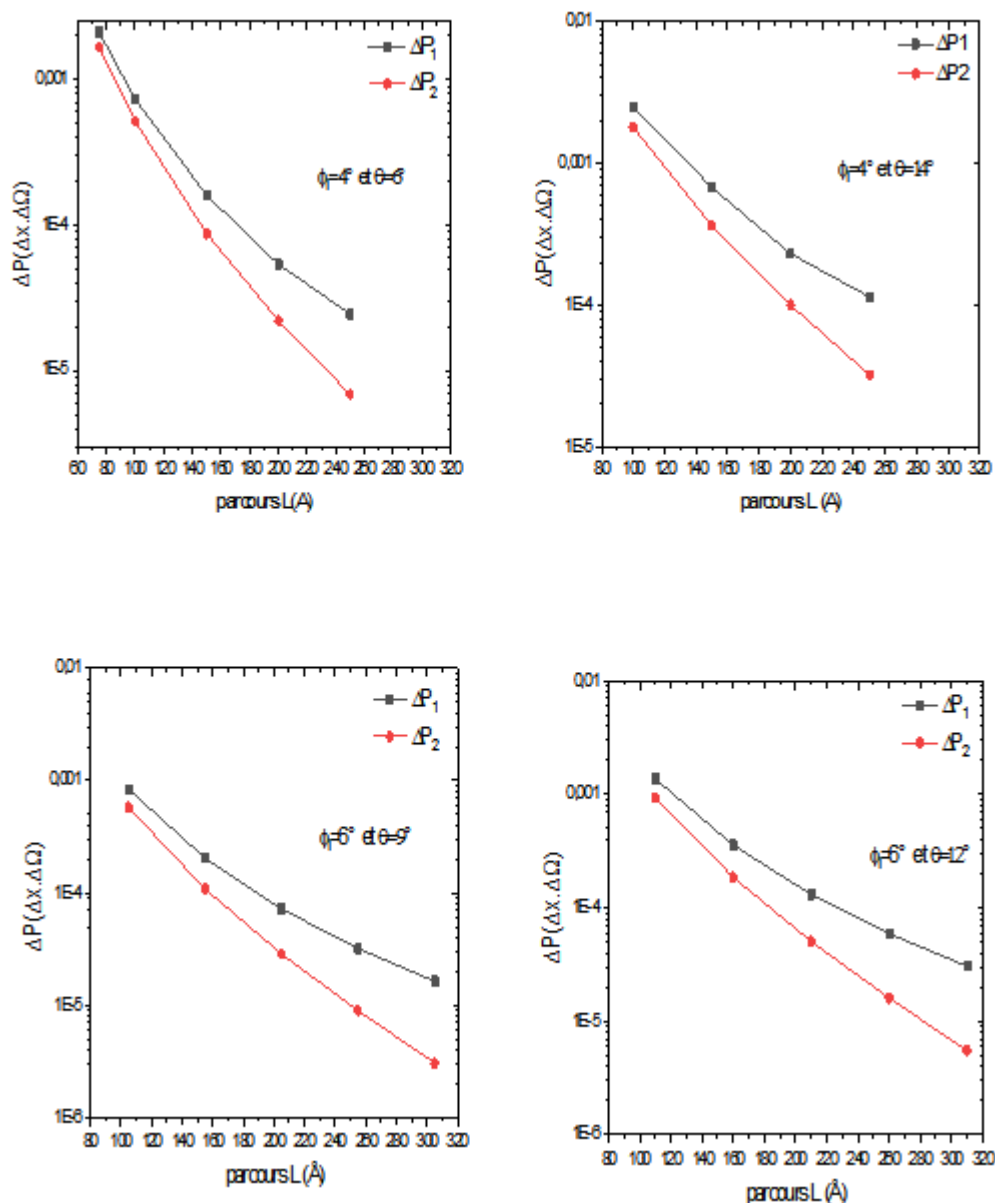


**Fig3.5** : La variation de  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  en fonction du parcours  $L$  pour les systèmes  $H^+(2\text{keV})$  /Au,  $H^+(2\text{keV})$  /Ag,  $H^+(2\text{keV})$  /Al et  $H^+(2\text{keV})$  /Cu dans la géométrie  $(\phi_i, \theta) = (4^\circ, 10^\circ)$

Cette disparité peut indiquer une influence notable de la perte d'énergie sur le calcul de la probabilité de diffusion.

On a repris les géométries précédemment considérées pour calculer  $\Delta P_1$  pour comparer leurs résultats avec les valeurs de  $\Delta P_2$ . On a choisi la cible de Nickel avec des protons de 2keV et le potentiel écranté ZBL.

Dans ce contexte, nous avons calculé les valeurs de  $\Delta P_2$  pour ces géométries afin de les confronter aux valeurs de  $\Delta P_1$  obtenues. Plus spécifiquement, nous avons sélectionné la cible de Nickel comme configuration de référence, tout en utilisant des protons de 2keV et le potentiel écranté ZBL (fig.3.6).



**Fig3.6** : La variation de  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  en fonction du parcours  $L$  pour le système  $H^+(2keV)/Ni$  dans les géométries  $(\phi_i, \theta) = \{(4^\circ, 6^\circ), (4^\circ, 14^\circ), (6^\circ, 9^\circ), (6^\circ, 12^\circ)\}$

Nous avons pu examiner la façon dont ces différentes configurations géométriques influencent les résultats. Cela nous a permis d'analyser les différences entre les valeurs de  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$ . Nous avons pu obtenir des résultats comparatifs pour évaluer les variations entre les deux calculs (fig.3.6).

La présentation des deux probabilités simultanément sur le même graphe nous a offert une opportunité de mieux comprendre comment les paramètres, tels que la géométrie de l'interaction, la nature de la cible et le choix du potentiel d'interaction, peuvent affecter les résultats de nos calculs de la probabilité de diffusion.

Notre analyse comparative des probabilités  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  a mis en évidence l'influence significative de la perte d'énergie sur la probabilité de diffusion, quelle que soit la configuration étudiée. L'écart observé entre les deux probabilités augmente de manière systématique avec le parcours, suggérant un lien direct entre la perte d'énergie et la modification de la probabilité de diffusion. Ces résultats soulignent la nécessité d'approfondir nos recherches pour mieux comprendre ce phénomène et évaluer son impact sur nos conclusions.

#### **4. Calcul du rapport R : $(\Delta P_1 - \Delta P_2) / \Delta P_2$**

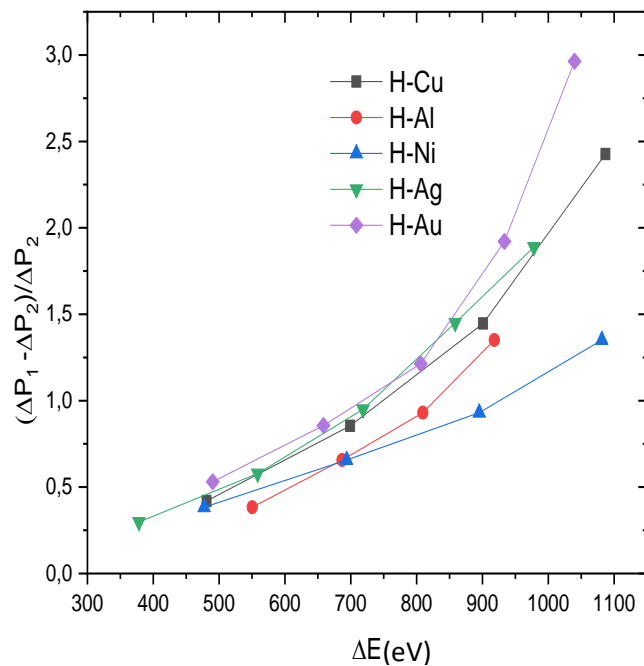
Lors de la comparaison des tracés de  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$ , nous avons observé un écart significatif entre les deux valeurs de la probabilité. Dans le but de mieux comprendre cette variation, on a envisagé de tracer le rapport R ; qui représente la différence entre  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  divisée par  $\Delta P_2$ , en fonction de l'énergie perdue dans la cible pour différents parcours L (eq (3.1)). Cette approche nous permettra d'explorer de façon plus explicite la relation entre l'énergie perdue et l'écart entre  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$ .

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

On présente dans les figures 3.7 et 3.8 le rapport R pour plusieurs géométries et pour des cibles différentes. Nous avons choisi un intervalle d'épaisseurs allant de 100 Å à 350Å et nous avons pu calculer la perte d'énergie correspondante à chaque épaisseur.

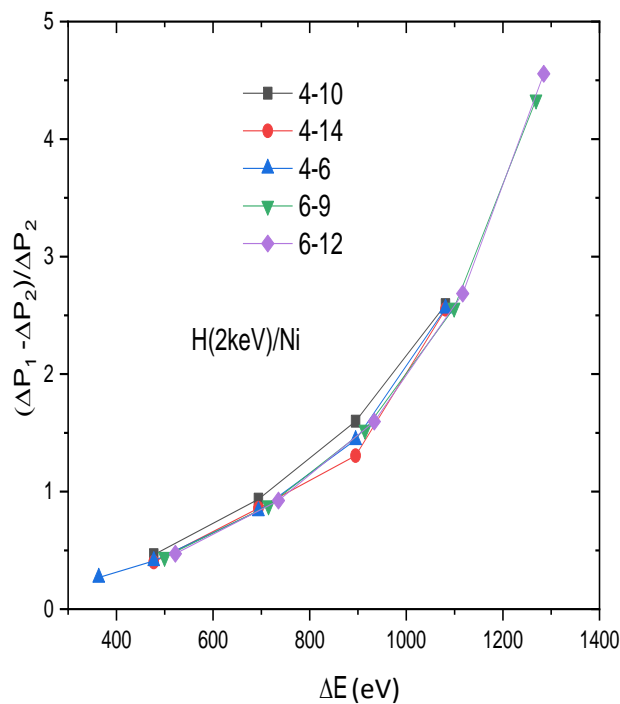
En analysant les résultats obtenus, nous avons pu identifier des tendances spécifiques en fonction des différents parcours des particules. Nous avons observé des variations dans la manière dont l'écart entre  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  évolue en fonction de l'énergie perdue, ce qui peut être attribué à des facteurs tels que la distance parcourue, les propriétés de la cible et les interactions interatomiques.

Pour de faibles pertes d'énergie, correspondant à de courts parcours, le rapport R est quasiment



**Fig3.7** : La variation du rapport R en fonction de la perte d'énergie  $\Delta E$  pour les systèmes  $H^+(2keV) / Ni$ ,  $H^+(2keV) / Au$ ,  $H^+(2keV) / Ag$ ,  $H^+(2keV) / Al$  et  $H^+(2keV) / Cu$  dans la géométrie  $(\phi_i, \theta) = (4^\circ, 10^\circ)$ .

négligeable. En revanche, elle devient de plus en plus significative à mesure que la perte d'énergie augmente. Ce comportement est observé de manière similaire dans tous les cas



**Fig3.8** : La variation du rapport R en fonction de la perte d'énergie  $\Delta E$  pour le système  $H^+(2keV) / Ni$  dans les géométries  $(\phi_i, \theta) = \{ (4^\circ-10^\circ), (4^\circ-6^\circ), (4^\circ-14^\circ), (6^\circ-9^\circ), (6^\circ-12^\circ) \}$

étudiés. Cela confirme qu'il est justifié de négliger la perte d'énergie pour de faibles parcours, tandis qu'elle doit être prise en compte pour des parcours plus longs.

Le tracé du rapport R nous a permis d'obtenir des résultats qui nous permettent de confirmer que la perte d'énergie est négligeable au niveau des faibles parcours, indiquant que le rapport R tend vers zéro dans cette plage. Cela suggère que l'effet de la perte d'énergie est minime lorsque le parcours est court. Cependant, aux grands parcours (supérieurs à 100 Å), nous avons observé une augmentation significative du rapport R lorsque le parcours augmente, allant de 100 Å à 350 Å. Ces observations indiquent que l'effet de la perte d'énergie devient de plus en plus important lorsque le parcours s'allonge.

Sur la base de ces résultats, nous avons décidé de poursuivre notre étude en nous concentrant principalement sur les grands parcours ( $L > 100 \text{ \AA}$ ). On arrive à observer des variations significatives du rapport R.

## 5. Spectres énergétiques

Notre travail fait suite à l'étude de Mekhtiche et al. [1] qui s'est concentrée sur le calcul des distributions angulaires. Nous avons poursuivi cette recherche en calculant les distributions et les spectres énergétiques.

Le présent chapitre se concentre sur l'analyse approfondie des résultats obtenus à travers des calculs effectués avec la méthode de Monte Carlo visant à reproduire les spectres énergétiques des protons de basse énergie (2 keV) diffusés par des surfaces solides. L'objectif principal de cette étude est de dévoiler les caractéristiques fondamentales du phénomène de diffusion, en examinant comment les protons interagissent avec la surface et comment leur énergie est redistribuée. Leur utilité réside dans la compréhension approfondie du processus de diffusion, la validation du modèle théorique, et la possibilité d'optimiser les conditions expérimentales pour diverses applications pratiques.

Dans cette partie, on présente les résultats obtenus de  $dN/dE$  (la probabilité de diffusion par unité d'énergie) en fonction de l'énergie de sortie ; qui est l'énergie avec laquelle l'ion incident quitte la cible après avoir subi des collisions multiples avec ces atomes.

A l'aide des courbes de la probabilité de diffusion  $\Delta P_2$ , en tenant compte de la perte d'énergie qui représente le nombre de particules (protons) diffusés par unité de longueur parcourue dans la cible, et en utilisant la perte d'énergie issue par parcours  $\Delta E_L = E_0 - E_s$ . Le rapport de ces deux grandeurs nous permet d'avoir le nombre d'ions (protons) diffusés par unité d'énergie afin de pouvoir calculer les spectres énergétiques.

$$\frac{dN}{dE} = \frac{\left(\frac{dN}{dL}\right)}{\left(\frac{dE}{dL}\right)} \quad (3.2)$$

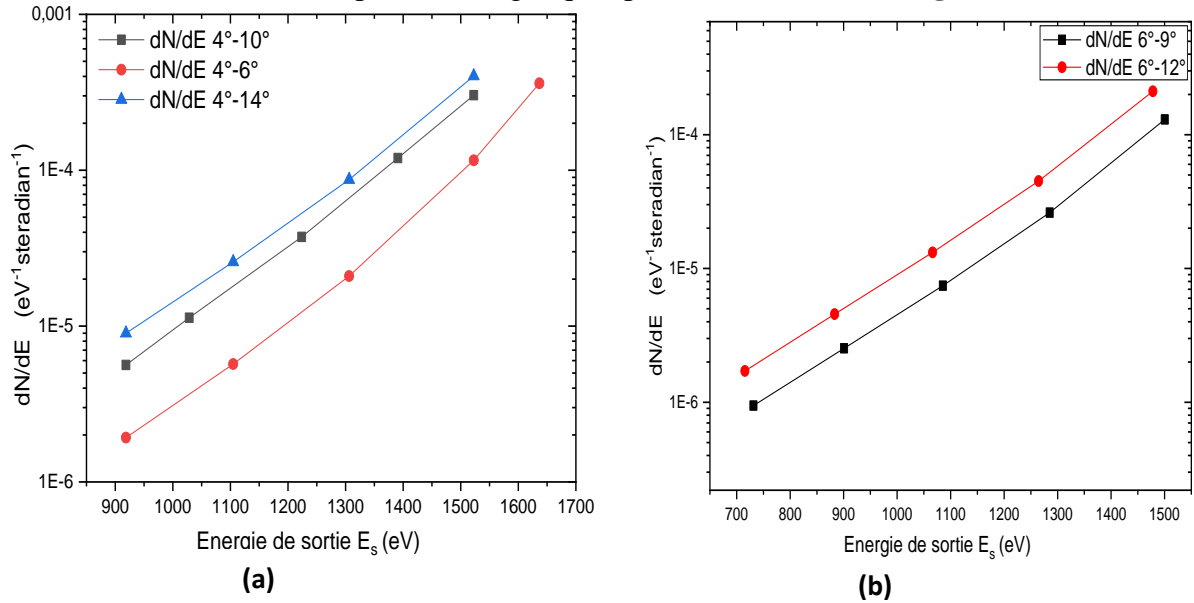
$\left(\frac{dN}{dL}\right)$  : correspond à la probabilité  $\Delta P_2$

$\left(\frac{dE}{dL}\right)$  : est la perte d'énergie pour un parcours donné

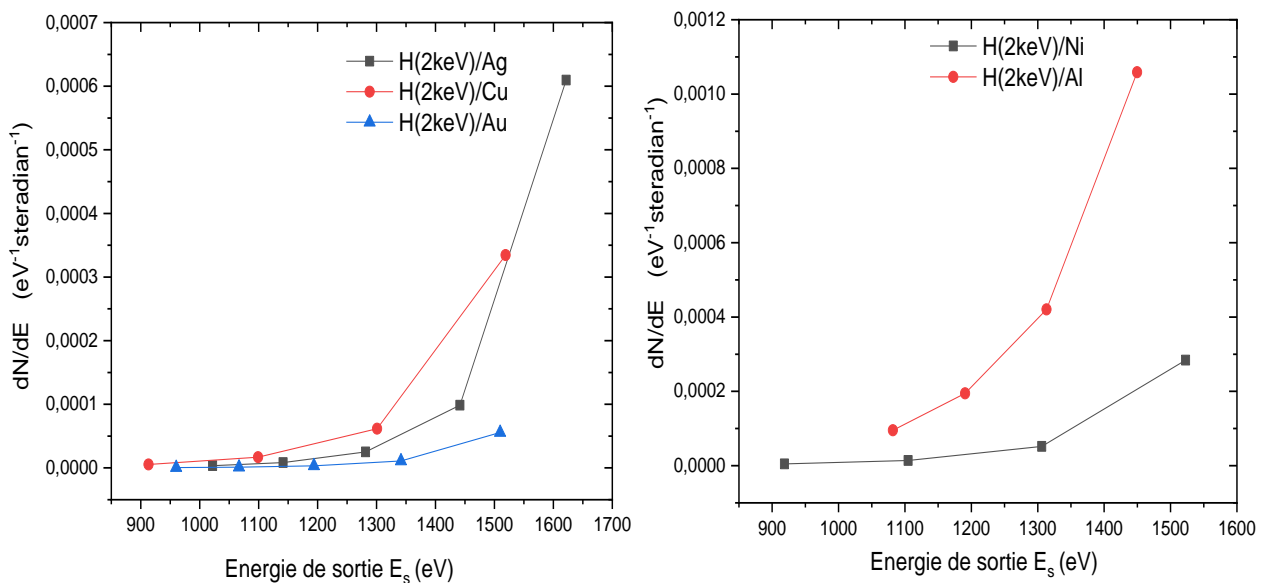
On représente le nombre de protons diffusés par unité d'énergie en fonction de l'énergie de sortie qui correspond à chaque parcours.

On considère le système composé des projectiles de protons de 2keV et une cible de Nickel mis dans plusieurs géométries de diffusion. Les résultats sont présentés dans la figure 3.5. À gauche, l'angle d'incidence est de  $4^\circ$  et l'angle de diffusion varie entre  $6^\circ$ ,  $10^\circ$  et  $14^\circ$ . À droite, l'angle d'incidence est de  $6^\circ$  et l'angle de diffusion varie entre  $9^\circ$  et  $12^\circ$ . On observe des spectres similaires pour chaque configuration.

Par la suite, on a calculé les spectres énergétiques pour les autres cibles (**fig 3.7**). On constate



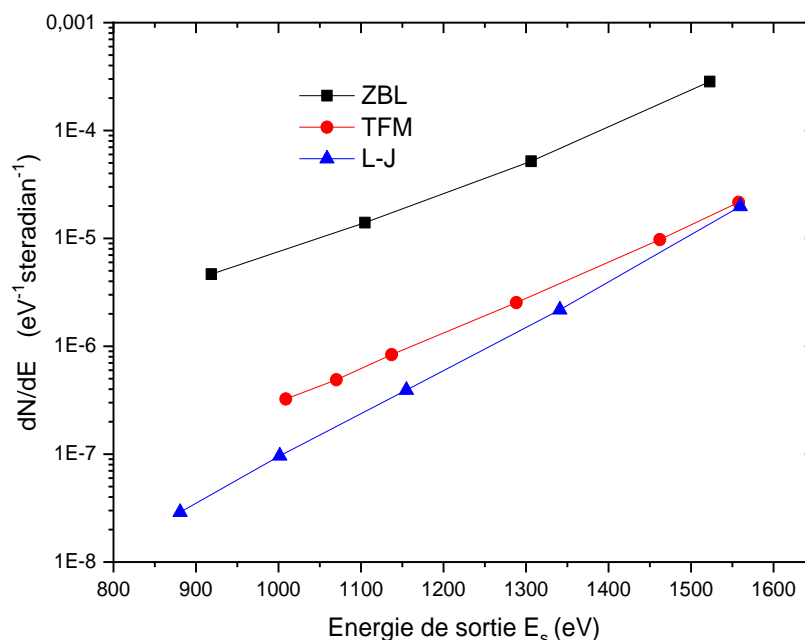
**Fig3.9** : Spectres énergétiques en fonction de l'énergie de sortie  $E_s$  du système  $\text{H}^+(2\text{keV})/\text{Ni}$  dans les géométries : (a)-  $(\phi_i, \theta) = \{(4^\circ-6^\circ), (4^\circ-10^\circ), (4^\circ-14^\circ)\}$   
 (b)-  $(\phi_i, \theta) = \{(6^\circ-9^\circ), (6^\circ-12^\circ)\}$



**Fig3.10** : Spectres énergétiques en fonction de l'énergie de sortie  $E_s$  des systèmes  $\text{H}^+(2\text{keV})/\text{Ag}$ ,  $\text{H}^+(2\text{keV})/\text{Cu}$ ,  $\text{H}^+(2\text{keV})/\text{Au}$  et des systèmes  $\text{H}^+(2\text{keV})/\text{Ni}$  et  $\text{H}^+(2\text{keV})/\text{Al}$  dans la géométrie  $(\phi_i, \theta) = (4^\circ, 10^\circ)$ .

un comportement similaire pour les cibles de Nickel, d'Or, d'Argent, d'Aluminium et de Cuivre.

En outre, on a calculé les spectres énergétiques pour les trois potentiels. La figure 3.8 illustre la similitude des formes des spectres énergétiques obtenus avec les potentiels ZBL, TFM et L-J.



**Fig3.11** : Spectres énergétiques en fonction de l'énergie de sortie  $E_s$  des systèmes  $H^+(2keV)/Ni$  dans la géométrie  $(\phi_i, \theta) = (4^\circ, 10^\circ)$  pour les potentiels ZBL, TFM, L-J

## 6. L'approximation de l'énergie moyenne $E_m$ :

La dernière partie du chapitre a pour but de présenter les résultats obtenus au cours de notre recherche, mettant en lumière une analyse approfondie de l'approximation de l'énergie moyenne dans le contexte de notre étude. L'approximation de l'énergie moyenne émerge comme un outil essentiel dans la compréhension des caractéristiques énergétiques des particules en interaction. En intégrant cette approche dans nos calculs, nous cherchons à dévoiler les tendances et les variations de l'énergie moyenne des protons de basse énergie au sein de la cible. Elle permet d'offrir une perspective holistique sur le comportement moyen des deux membres de notre système d'interaction. Les prochaines sections détailleront les implications et les avantages de cette approche. La relation intrinsèque entre la perte d'énergie et l'approximation moyenne constitue l'axe principal de cette partie de notre étude. Lorsque nous examinons les spectres énergétiques des protons diffusés à travers des surfaces solides ainsi trouvés, l'application de l'approximation de l'énergie moyenne se révèle être une stratégie cruciale pour suivre le processus de diffusion. Cette approximation permet d'obtenir une valeur représentative de l'énergie moyenne des protons incidents.

A travers les résultats de la probabilité de diffusion  $\Delta P_1$  et  $\Delta P_2$  pour différentes cibles, géométries et potentiels, nous avons pu extraire des informations pertinentes afin de trouver une solution pour réduire le temps de calcul. En se basant sur le fait que l'énergie de l'ion

incident varie d'une manière continue dans la cible solide [5], on a fait appel à l'approximation de l'énergie moyenne pour déterminer une nouvelle valeur d'énergie.

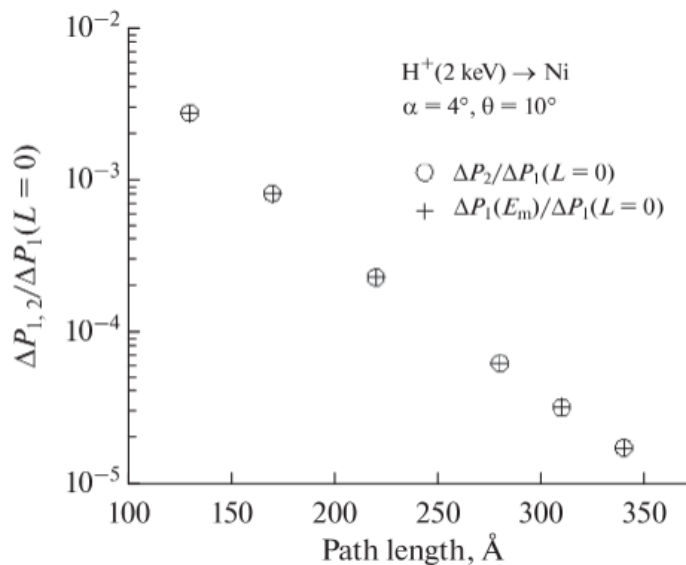
Dans le cadre d'une étude visant à évaluer l'efficacité de l'approximation de l'énergie moyenne dans le calcul de la probabilité de diffusion, nous avons procédé au calcul de  $\Delta P_1$  en utilisant l'énergie moyenne  $E_m$ . Pour déterminer cette énergie, une exploration a été menée sur une plage d'énergies s'étendant de l'énergie initiale  $E_0$  de l'ion incident à sa valeur finale à la sortie de la cible  $E_s$ . Cette méthodologie permet d'établir une corrélation entre l'énergie moyenne et la variation de probabilité de diffusion, offrant ainsi des perspectives précieuses sur l'impact de cette approximation dans le contexte de la diffusion d'ions à travers les surfaces métalliques.

$$\bar{E}(E_0, E_s) = E_m \quad (3.3)$$

Donc, L'énergie moyenne  $E_m$  est déduite lorsque la probabilité de diffusion  $\Delta P_1$  obtenue à cette énergie coïncide avec la valeur de la probabilité  $\Delta P_2$

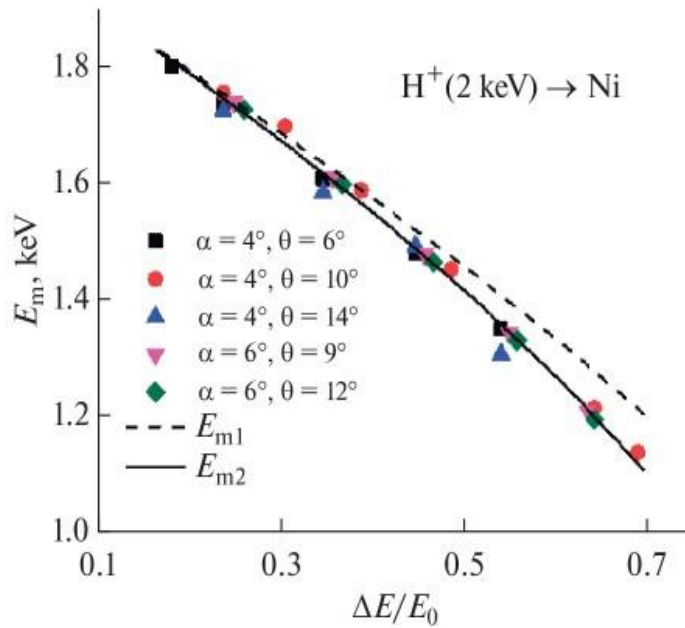
$$\Delta P_1(E_m) = \Delta P_2 \quad (3.4)$$

Un exemple de ce calcul est illustré dans la figure 3.12. Les valeurs de  $E_m$  sont déduites pour différentes valeurs du parcours L dans la géométrie  $\phi_i=4^\circ$  et  $\theta=10^\circ$  pour le système constitué de  $H^+(2keV)/Ni$ .



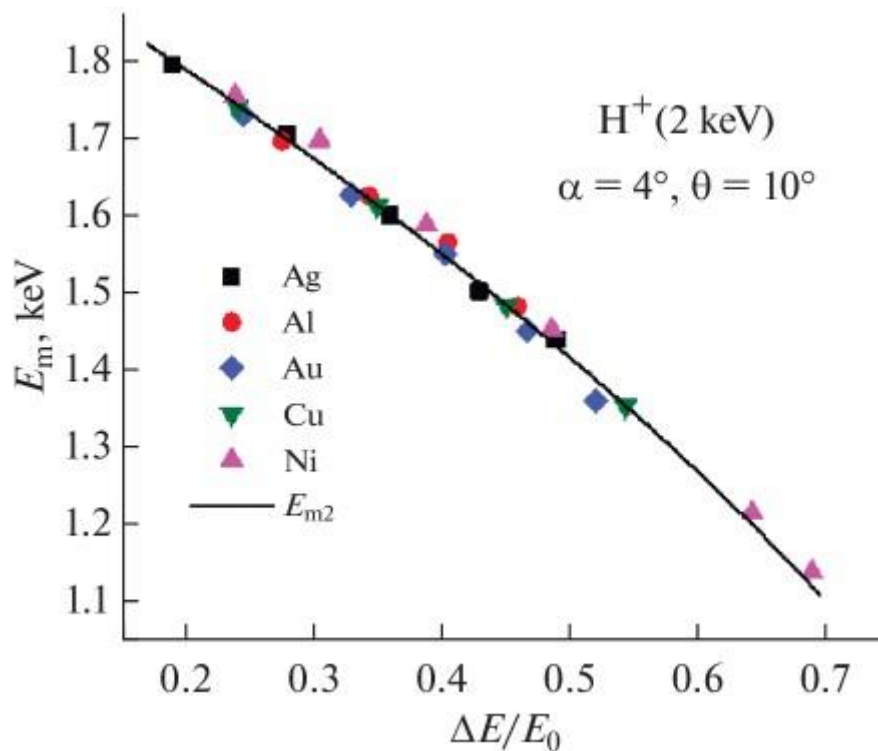
**Figure 3.12:** Variation de  $\Delta P_2/\Delta P_1(L=0)$  avec le parcours L pour le système d'ions de  $H^+(2keV)$  diffusés sur une cible de Nickel. L'énergie moyenne est déduite lorsque  $\Delta P_1(E_m)=\Delta P_2$ . L'angle d'incidence et de diffusion sont respectivement  $\phi_i=4^\circ$  et  $\theta=10^\circ$

La figure 3.13 [6] illustre la variation des énergies moyennes  $E_m$  obtenues à partir de la perte d'énergie relative donnée par le rapport  $(\Delta E/E_0)$  lors de la diffusion d'ions  $H^+(2keV)$  à travers une cible en nickel, pour différentes valeurs de l'angle d'incidence ( $\phi_i$ ) et de l'angle de diffusion ( $\theta$ ). En accord avec les prévisions anticipées, la distribution de  $E_m$  en fonction de la perte d'énergie relative présente une allure uniforme pour les différentes géométries. À ce stade, notre objectif est d'identifier la fonction mathématique  $E_m$  optimale pour ajuster nos résultats. Cette analyse est cruciale pour la détermination de l'énergie et suivre sa variation à travers son



**Figure 3.13:** Variation de l'énergie moyenne  $E_m$  en fonction de la perte d'énergie relative dans la cible de Nickel dans les géométries  $(\phi_i, \theta) = \{(4^\circ, 6^\circ), (4^\circ, 10^\circ), (4^\circ, 14^\circ), (6^\circ, 9^\circ), (6^\circ, 12^\circ)\}$

parcours dans la cible. Elle contribue ainsi à une meilleure compréhension du phénomène de diffusion.

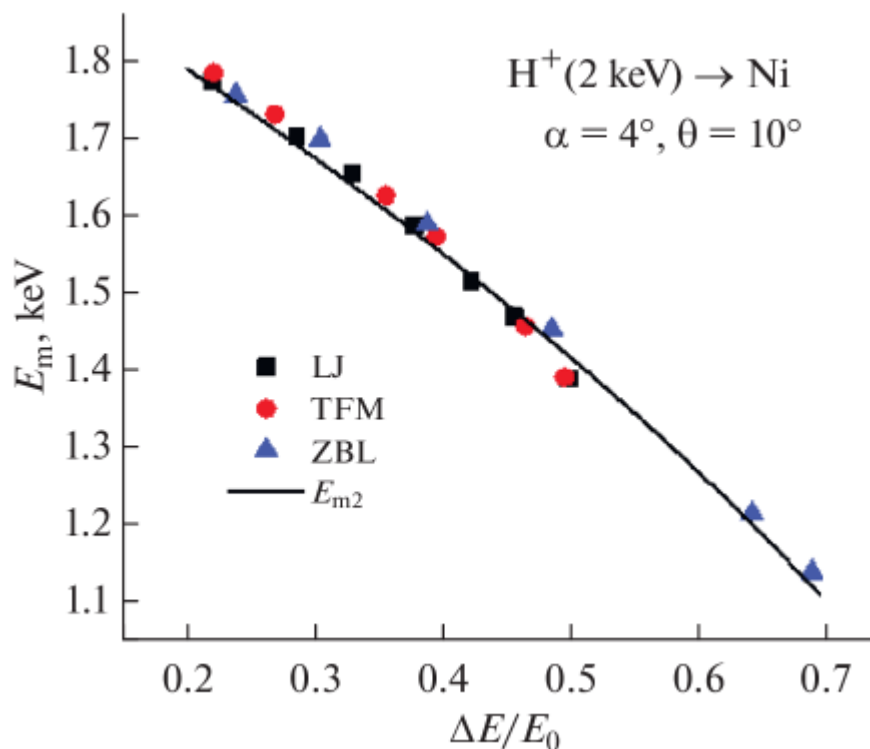


**Figure 3.14:** Variation de l'énergie moyenne  $E_m$  en fonction de la perte d'énergie relative pour différentes cibles dans le système  $\phi_i = 4^\circ$  et  $\theta = 10^\circ$

Par la suite, pour tester la validité de l'approximation  $E_{m2}$  sur d'autres cibles. On a fait le calcul de l'énergie moyenne  $E_m$  et de la perte d'énergie relative  $\Delta E/E_0$  sur des cibles d'Aluminium, Cuivre, Argent et d'Or. La figure 3.14[6] montre les résultats obtenus de  $E_m$  en fonction de  $\Delta E/E_0$  dans la géométrie  $\phi_i = 4^\circ$  et  $\theta = 10^\circ$ . La même figure représente aussi la variation de  $E_{m2}$  avec  $\Delta E/E_0$ . Ce dernier montre que  $E_{m2}$  est le bon choix d'énergie moyenne pour les cibles sélectionnées[7].

Dans la partie suivante de notre travail, on voulait tester la validité de l'approximation de l'énergie moyenne  $E_{m2}$  sur d'autres potentiels interatomiques. On a calculé les valeurs de l'énergie moyenne  $E_m$  en fonction de la perte d'énergie relative pour des ions de  $H^+$  de 2keV diffusés sur une cible de Nickel.

Les potentiels qu'on a utilisés sont TFM et L-J. La figure 3.15 [6] illustre un exemple de ces calculs dans la géométrie  $\phi_i = 4^\circ$  et  $\theta = 10^\circ$ . On a rajouté dans la figure les valeurs de  $E_m$  pour le potentiel ZBL. On constate que pour ces trois potentiels, l'énergie moyenne  $E_m$  garde la même allure pratiquement sur tout l'intervalle de  $\Delta E/E_0$ . On voit aussi que le fit représenté par la fonction  $E_{m2}$  s'ajuste bien avec nos résultats [7].

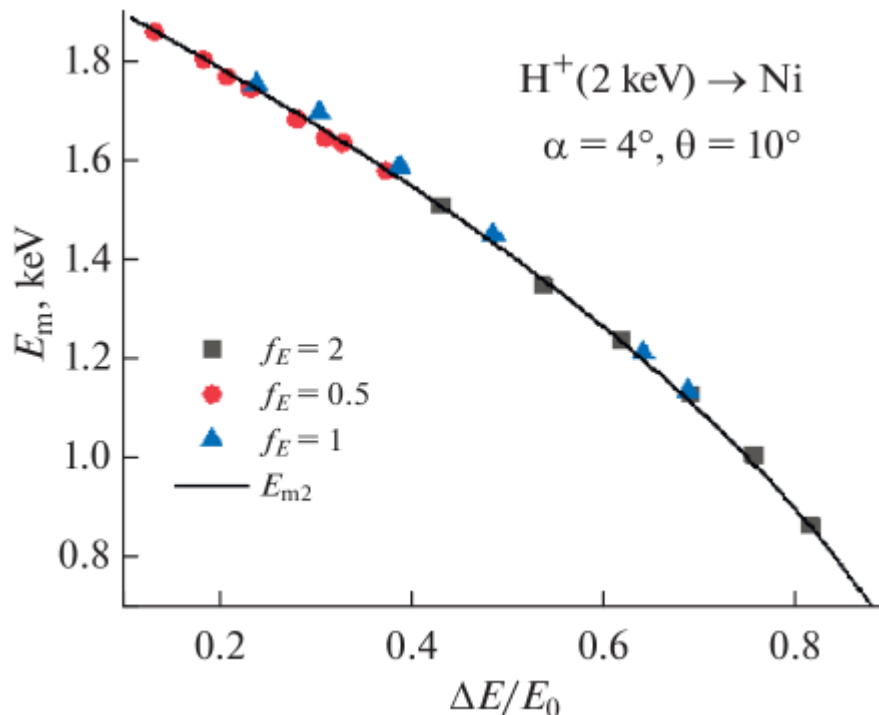


**Figure 3.15** : Variation de l'énergie moyenne  $E_m$  en fonction de la perte d'énergie relative dans la cible du Nickel pour les potentiels : ZBL, TFM et L-J.

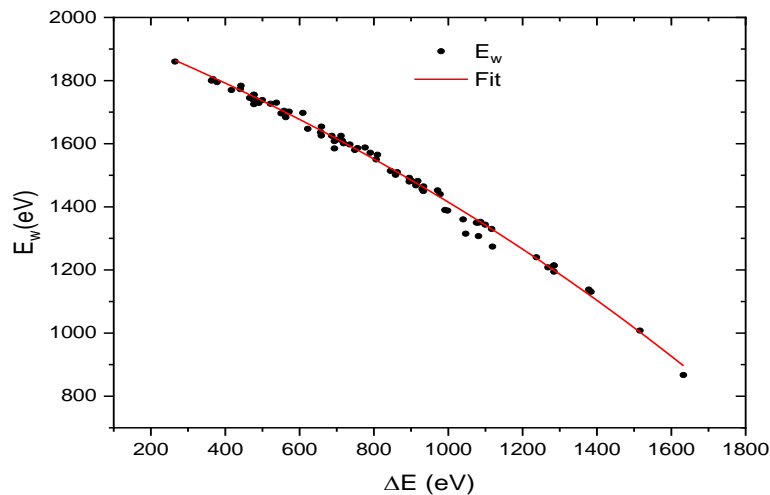
Dans les calculs précédents, la probabilité de diffusion a été calculée en utilisant les valeurs de la perte d'énergie inélastique (électronique) issue de SRIM 2008 [8]. Dans une dernière partie, on voulait tester la validité de l'approximation  $E_{m2}$  sur d'autres valeurs de la perte d'énergie inélastique  $(dE/dx)_e$ . Pour cela, on a calculé la probabilité de diffusion pour trois cas de  $(dE/dx)_e$ . On multiplie sa valeur par un facteur  $f_E$ .

On a supposé deux valeurs de ce facteur :  $f_E = 0.5$  et  $f_E = 2$ . Les résultats obtenus sont représentés dans la figure 3.16 [6] en fonction de  $\Delta E/E_0$  pour la géométrie  $\phi_i = 4^\circ$  et  $\theta = 10^\circ$ . On représente aussi dans cette figure les résultats précédents de  $E_m$  qui ont été obtenus pour un facteur  $f_E = 1$ . La figure 3.16 montre clairement que les valeurs de  $E_m$  sont bien ajustées par la fonction  $E_{m2}$  sur tout l'intervalle de  $\Delta E/E_0$ .

Dans une dernière partie de ce chapitre, on a voulu englober toutes les courbes de l'énergie moyenne dans un seul graphe. Afin de faire ceci, nous avons mis les résultats des figures 3.13, 3.14, 3.15 et 3.16 dans la figure 3.17 [6]. Cette dernière montre une cohérence avec les courbes précédemment présentées et elle est ajustée par le fit  $E_{m2}$ . Ce graphe donne une image globale sur les valeurs obtenues dans le cadre de l'approximation de l'énergie moyenne.



**Figure 3.16 :** Variation de l'énergie moyenne  $E_m$  en fonction de la perte d'énergie relative dans la cible du Nickel pour les potentiels : ZBL, TFM et L-J.



**Figure 3.17:** Représentation globale de l'énergie moyenne en fonction de la perte d'énergie totale

## **7. Conclusion**

Nos calculs de la probabilité de diffusion pour différents parcours, en utilisant différentes géométries et potentiels, ont fourni des informations précieuses pour mieux appréhender les phénomènes d'interaction entre les protons et la cible en nickel. Ces résultats ouvrent la voie à de nouvelles perspectives de recherche et d'applications dans divers domaines tels que la physique des matériaux et la conception de dispositifs électroniques à l'échelle nanométrique. Notre étude s'est appuyée sur le calcul de la probabilité de diffusion, en tenant compte de l'effet de la perte d'énergie, pour explorer les spectres énergétiques, le rapport R et l'énergie moyenne. Les informations issues des résultats obtenus sont essentielles pour comprendre le processus de diffusion.

## Références

- [1] A. Mekhtiche, "Diffusion d'ions de faible énergie par une surface solide : Simulation basée sur la théorie de transport pour le calcul du coefficient de réflexion," Thèse de Magister, Université Des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, 2005.
- [2] J. F. Ziegler and J. P. Biersack, "The stopping and range of ions in matter," in *Treatise on heavy-ion science*, Springer, 1985, pp. 93–129.
- [3] Molière Gert, "Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld," 1947. doi: 10.1515/zna-1947-0302.
- [4] W. Lenz, "Über die Anwendbarkeit der statistischen Methode auf Ionengitter," *Zeitschrift für Physik*, vol. 77, no. 11–12, pp. 713–721, 1932.
- [5] K. Khalal-Kouache, B. Aissous, A. Mekhtiche, and A. C. Chami, "Effect of energy loss in the simulation of slow ion scattering by a solid surface," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 266, no. 5, pp. 714–718, 2008. Doi:10.1016/j.nimb.2007.11.043
- [6] A. Mansour, A. Mekhtiche, and K. Khalal-Kouache, "Reflection of H+(2 keV) Ions from Metallic Surfaces: Transport Theory Calculation of the Reflection Probability with the Mean Energy Approximation," *Journal of Surface Investigation*, vol. 16, no. 6, pp. 1231–1236, 2022, doi: 10.1134/S1027451022060416.
- [7] A. Mekhtiche and K. Khalal-Kouache, "Multiple scattering of low energy H+ ions in matter: Approximation of mean energy on the Sigmund and Winterbon model," *Nucl Instrum Methods Phys Res B*, vol. 382, pp. 32–35, 2016. doi:10.1016/j.nimb.2016.04.040
- [8] J.F.Ziegler, *The Stopping and Ranges of Ions in Matter ("SRIM-2000")*, Computer software package. Can be downloaded via internet <http://www.SRIM.org>.

## **Conclusion générale**

## Conclusion générale

À travers cette thèse, les travaux présentés ont pour objectif d'approfondir la compréhension des mécanismes d'interactions entre les particules chargées, et plus particulièrement les protons, avec la matière à basse énergie. En se focalisant sur le phénomène de diffusion ion- surface, nous avons pu calculer la probabilité de diffusion en tenant compte de la perte d'énergie.

Nous avons commencé par établir les bases théoriques de notre étude en présentant les concepts fondamentaux de la diffusion et de la perte d'énergie. Nous avons ensuite détaillé le modèle utilisé qui est basé sur la résolution de l'équation de Boltzmann dans le cadre de la théorie de transport, en employant l'approximation des collisions binaires et la théorie des collisions multiples. Nous avons donné les équations nécessaires et la procédure numérique, en incluant la perte d'énergie et l'approximation de l'énergie moyenne. Nous avons utilisé la méthode d'intégration de Monte Carlo pour réaliser ce calcul et nous avons décrit l'interaction par le potentiel ZBL (Ziegler- Biersack- Littemark).

Nous avons effectué le calcul de la probabilité de diffusion en tenant compte de la perte d'énergie pour des protons de 2keV sur une cible de Nickel pour les trois potentiels précités et dans différentes géométries. Nous avons aussi calculé cette probabilité pour des cibles de Cuivre, Argent, Or et Aluminium dans une même géométrie.

Les résultats obtenus de nos calculs de probabilité de diffusion, réalisés sur différentes géométries, cibles et potentiels, ont permis d'acquérir des informations précieuses sur la diffusion des protons de faible énergie et l'influence de la perte d'énergie. Nos résultats ont été représentés sous forme de distributions en longueurs et spectres énergétiques d'où on est passé à l'approximation de l'énergie moyenne et on a trouvé un bon accord avec les études précédentes [1]-[2].

Les résultats de cette thèse ouvrent de nouvelles perspectives de recherche dans le domaine de l'interaction ion-matière à basse énergie. Ils peuvent notamment servir de base pour développer de nouveaux modèles numériques plus précis et plus efficaces pour simuler les interactions ion-surface. Ils contribuent au développement de nouvelles techniques d'analyse de surface, basées sur la diffusion d'ions.

## Références :

[1] A. Mekhtiche and K. Khalal-Kouache, "scattering of low energy H + ions in matter : Approximation of mean energy on the Sigmund and Winterbon model," Nuclear Instruments And Methods In Physics B, 2016, doi: 10.1016/j.nimb.2016.04.040.

[2] A. Mansour, A. Mekhtiche, and K. Khalal-Kouache, "Reflection of H+(2 keV) Ions from Metallic Surfaces: Transport Theory Calculation of the Reflection Probability with the Mean Energy Approximation," Journal of Surface Investigation, vol. 16, no. 6, pp. 1231–1236, 2022, doi: 10.1134/S1027451022060416.