

République algérienne démocratique et populaire
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique
Université Saad Dahleb Blida 1



Faculté des sciences
Département de physique

Mémoire de fin d'étude
Pour l'obtention du diplôme de Master en Physique

Option : **physique appliquée**

Thème :

Perte d'énergie des ions dans la matière : étude et effet de différents paramètres.

Présenté par :

CHENNOUF-LAZEREGUE Lazreg

Soutenu le 24/ 07 / 2019 devant le jury composé de :

A. MOUZALI	Professeur	USDB1	Président
M. BENREKIA	Maitre assistant A	USDB1	Encadreur
M. ZILABDI	Maitre assistant A	USDB1	Examineur

Blida 1-2018/2019-

A la mémoire de mon père

A ma mère

A mes frères et mes sœurs

Remerciements

Ce travail a été réalisé au niveau de la faculté des Sciences à l'Université de Saad Dahlab Blida 1. Il a été dirigé par Monsieur Benrekia M'hamed, Maitre assistant à L'USDBI, à qui j'exprime ma très vive reconnaissance. Je tiens à le remercier pour sa disponibilité et ses précieux conseils qui m'ont beaucoup aidé pour mener à terme ce travail.

Je remercie le professeur à l'USDBI A. Mouzali, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance.

J'adresse également mon plus vif remerciement à M Zilabdi Maitre assistant à L'USDBI pour avoir accepté d'examiner le présent travail.

Je tien à exprimer ma profonde reconnaissance à Mr : S.Ouichaoui professeur à l'USTHB, pour ses qualités humaines, et son soutien moral.

Je remercie également : Mon frère K. Chennouf-Lazreg, cadre à l'OPGI, pour ses qualités humaines, et son soutien moral.

Je remercie également : Madame L. Baba Ahmed, maitre de conférences à l'USDBI, pour sa disponibilité, ses qualités humaines, et son soutien moral.

Je remercie tous mes amis et mes collègues qui m'ont aidé pendant la réalisation de ce travail, en particulier : I. Bensaada et Y. Rahma.

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

المخلص

دراسة تفاعل الأيونات مع المادة لا تزال موضوع الكثير من العمل العلمي. تحتوي هذه الدراسة ، في الواقع ، عل نتائج أساسية وتكنولوجية مهمة في مجالات متنوعة مثل الفيزياء والكيمياء والبيولوجيا والطب. عندما قصفت شعاع أيوني أحادي الطاقة هدفًا صلبًا ، يتم نقل جزء من طاقة الحادث إلى الذرات المستهدفة ، مما قد يؤدي إلى ظواهر مختلفة: انتشار الأيونات ، وزرع الأيونات ، والانتثار الخلفي ، ورد الفعل النووي ... الخ في الهدف ، يمكن أن يتم فقدان الطاقة وفقًا لآليتين: فقدان الطاقة المرنة وفقدان الطاقة غير المرنة. في هذا العمل ، نحن مهتمون بدراسة الآليات المختلفة التي تحكم فقدان الطاقة للأيونات في المادة. بالإضافة إلى ذلك ، ندرس المعلمات المختلفة التي لها تأثير على فقدان الطاقة.

Abstract

The study of the interaction of ions with matter is still the subject of much scientific work. This study has, in fact, important fundamental and technological spin-offs in fields as varied as physics, chemistry, biology and medicine. When a mono-energetic ion beam bombarded a solid target, a part of the incident energy is transferred to the target atoms, which can lead to different phenomena: ion diffusion, ion implantation, backscattering, nuclear reaction etc. In the target, the loss of energy can be done according to two mechanisms: a loss of elastic energy and a loss of inelastic energy. In this work, we are interested in the study of the different mechanisms that govern the energy loss of ions in matter. In addition, we study the different parameters that have an effect on energy loss.

Résumé

L'étude de l'interaction des ions avec la matière fait encore l'objet de nombreux travaux scientifiques. Cette étude a, en effet, des retombées fondamentales et technologique importantes dans des domaines aussi variés que la physique, la chimie, la biologie et la médecine. Lorsqu'un faisceau d'ion mono-énergétique bombarde une cible solide, une partie de l'énergie incidente est transférée aux atomes de la cible, ce qui peut engendrer différents phénomènes : diffusion d'ions, implantation ionique, rétrodiffusion, réaction nucléaire etc. Dans la cible, la perte d'énergie peut se faire selon deux mécanismes : une perte d'énergie élastique et une perte d'énergie inélastique. Nous nous intéressons dans ce travail à l'étude des différents mécanismes qui régissent la perte d'énergie des ions dans la matière. Par ailleurs, nous étudions les différents paramètres qui ont un effet sur la perte d'énergie.

Table des matières

Introduction générale	8
Chapitre I : Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière	11
I.1. introduction	11
I.2. Collisions simples.....	11
I.3. Perte d'énergie des ions dans la cible.....	14
I.3.1. Perte d'énergie élastique.....	14
I.3.2. Perte d'énergie inélastique.....	16
I.4. Le modèle des collisions multiples.....	17
I.5. Potentiel d'interaction.....	17
I.5.1. Modèle de firsov.....	18
I.6. Mécanismes de transfert de charge.....	19
I.6.1. Processus de transition au voisinage de la surface.....	19
I.6.2. Processus d'échange de la charge dans le volume.....	21
Chapitre II : Description du modèle de simulation utilisé pour calculé la perte d'énergie de diffusion.	22
I. Introduction	23
II. Les outils développés dans la littérature	23
II.1. Description de SRIM.....	23
II.1.1. Condition d'utilisation lors de la simulation par SRIM 2013.....	24
II.1.2. Implantation des ions.....	26
II.1.3. Simulation des pouvoirs d'arrêt.....	26
II.2. Description d'Origin.....	28

Chapitre III : Résultats et discussion	31
III.1. Introduction.....	32
III.2. Calcul de la perte d'énergie.....	33
III.3.L'effet de la charge de l'atome cible sur la perte d'énergie.....	33
III.4. L'effet de l'angle sur la perte d'énergie	42
III.5. Calcul de la perte d'énergie pour trois potentiels ZBL, TFM et LJ.....	46
III.6. L'effet de la charge de l'ion incident sur la perte d'énergie	48
III.7. Conclusion	51
Conclusion générale	52
Référence.....	53

Tables des figures

Figure I.1. Schéma représentant une collision entre deux particules de masse M_1 et M_2 : paramètres de la diffusion dans le système du laboratoire (a) et dans le système du centre de masse (b).

Figure I.2 : diagramme vectoriel liant la vitesse et les angles de diffusion dans les systèmes du laboratoire (L) et du centre de masse (CM).

Figure I.3. Schéma énergétique représentant les différents processus d'échange de charge au voisinage de la surface.

Figure II.1. Schéma représentant le format de SRIM 2013.

Figure II.2 : Schéma représentant les paramètres de SRIM 2013 utilisés.

Figure II.3 : Variation de l'énergie de la particule incidente avec le parcours dans la cible.

Figure II.4 : Simulation des pouvoirs d'arrêt (nucléaire et électronique) des ions He^+/Cu .

Figure II.5. Schéma représentant l'interface d'Origin 6.0.

Figure II.5. L'ajustement au pouvoir d'arrêt pour des ions He^+/Cu .

Figure II.7. Schéma représentant les commandes Analysis et Polynomial fit d'Origin 6.0.

Figure II.8. Schéma représentant la variation de la perte d'énergie en fonction du parcours $L(\text{\AA})$.

Figure III.1: Variation de la perte d'énergie électronique en fonction de la distance parcourue en \AA pour le système $\text{He}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, Si et Ni, la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Figure III.2: Variation de la perte d'énergie nucléaire en fonction de la distance parcourue en \AA pour le système $\text{He}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, Si et Ni, la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Figure III.3: Variation de la perte d'énergie (électronique+ nucléaire) en fonction de la distance parcourue en \AA pour le système $\text{He}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, Si et Ni, la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Figure III.4: Variation de la perte d'énergie électronique en fonction de la distance parcourue en \AA pour le système $\text{H}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, Si et Ni, la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Figure III.5: Variation de la perte d'énergie nucléaire en fonction de la distance parcourue en \AA pour le système $\text{H}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, Si et Ni, la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Figure III.6: Variation de la perte d'énergie électronique + nucléaire en fonction de la distance parcourue en \AA pour le système $\text{H}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, Si et Ni, la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Figure III.7: Variation de la perte d'énergie électronique en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{Li}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, Si et Ni, la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Figure III.8: Variation de la perte d'énergie nucléaire en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{Li}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, Si et Ni, la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Figure III.9: Variation de la perte d'énergie électronique + nucléaire en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{Li}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, Si et Ni, la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Figure III.10: Variation de la perte d'énergie(électronique + nucléaire) en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{H}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, la charge Z de la cible fixée, les angles de diffusion sont variables 12° , 14° et 16° .

Figure III.11: Variation de la perte d'énergie(électronique + nucléaire) en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{He}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Si}$, la charge Z de la cible fixée, les angles de diffusion sont variables 12° , 14° et 16° .

Figure III.12: Variation de la perte d'énergie(électronique + nucléaire) en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{Li}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Ni}$, la charge Z de la cible fixée, les angles de diffusion sont variables 12° , 14° et 16° .

Figure III.13. Variation de l'énergie en fonction de distance parcourue dans la cible pour le système H^+/Cu , pour les trois potentiels étudiés dans ce travail.

Figure III.14. Variation de l'énergie en fonction de distance parcourue dans la cible pour le système H^+/Cu , pour les trois potentiels étudiés dans ce travail.

Figure III.15: Variation de la perte d'énergie électronique de diffusion en fonction de la distance parcourue en Å pour les systèmes $\text{He}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, H^+/Cu et Li^+/Cu , la charge Z de l'atome incident variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Figure III.16: Variation de la perte d'énergie nucléaire de diffusion en fonction de la distance parcourue en Å pour les systèmes $\text{He}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, H^+/Cu et Li^+/Cu , la charge Z de l'atome incident variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Introduction générale

Introduction générale

Introduction générale

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

L'utilisation des faisceaux d'ions est devenue une méthode performante destinée à l'analyse élémentaire et structurale des surfaces solides. Plusieurs techniques d'analyse ont été et sont encore développées en ce sens, utilisant des projectiles divers [1,10] (photons, électrons plus ou moins rapides, particules plus ou moins lourdes, agrégats, etc) selon le type d'analyse recherchée (élémentaire ou structurale) ou la profondeur étudiée (couches superficielles ou couches profondes).

Les modèles de simulation numérique ne cessent de se développer. Dans le domaine de l'interaction ion-matière, ils ont été utilisés en premier lieu, pour l'étude de la diffusion d'ions de hautes énergies avant d'être étendus par la suite avec succès au domaine des faibles énergies.

Il existe trois principales techniques de simulation numérique des collisions atomiques dans les solides :

- * La simulation Monte Carlo.
- * La dynamique moléculaire.
- * La simulation basée sur la théorie de transport.

A basse énergie (quelques keV), il est possible d'utiliser l'approximation des collisions binaires dans la simulation (BCA : Binary Collision Approximation). Mais lorsque l'énergie du projectile devient plus faible, il est nécessaire de tenir compte de l'interaction du projectile avec plusieurs atomes cibles à la fois.

Le code SRIM(2013) est le code de simulation le plus utilisé dans ce domaine.

Dans ce travail, nous nous intéressons à la diffusion d'ions de faible énergie (quelques keV) par une surface solide amorphe. Le calcul de la perte d'énergie de diffusion d'ions lents par une surface solide est effectué. Il faut noter ici que dans ces travaux, l'interaction projectile-atome cible est décrite en utilisant le potentiel coulombien écranté proposé par Ziegler et al [3] (potentiel ZBL).

L'objectif principal de ce travail est d'étudier l'effet du potentiel d'interaction sur la perte

Introduction générale

d'énergie de diffusion calculée dans le cadre de simulation par SRIM. Nous avons considéré pour cela trois potentiels : le potentiel ZBL (Ziegler-Biersack-Littmark), le potentiel TFM (Thomas-Fermi-Molière) et le potentiel LJ (Lenz-Jensen).

Dans cette étude, nous avons considéré les cas suivants :

* Premier cas : les systèmes H^+/Ni , H^+/Si , H^+/Cu , He^+/Ni , He^+/Cu , He^+/Si , Li^+/Cu , Li^+/Ni et Li^+/Si , pour différentes valeurs de l'énergie incidente et l'angle fixé.

* Deuxième cas : les systèmes He^+/Si , H^+/Cu , Li^+/Ni pour différentes valeurs de l'énergie incidente et les angles.

* Troisième cas : les systèmes He^+/Si et H^+/Cu pour différentes valeurs de l'énergie incidente.

Le travail présenté ici est organisé de la façon suivante:

Dans le premier chapitre, nous présentons les principaux mécanismes relatifs à l'interaction ion-matière à basse énergie (la collision élastique, le potentiel d'interaction, la section efficace de diffusion élastique, le pouvoir d'arrêt et les collisions multiples).

Le deuxième chapitre sera consacré à la description du modèle de simulation utilisé dans notre travail pour étudier l'effet de différents paramètres sur la perte d'énergie de diffusion d'un ion par une surface solide.

Dans le dernier chapitre, nous présenterons les résultats obtenus. Il s'agit des distributions en longueurs parcourues obtenues en considérant les trois potentiels d'interaction ZBL, TFM et LJ et ce pour les systèmes précédents (pour une gamme d'énergie [0eV à 10keV]). Différentes valeurs de l'angle de diffusion sont considérées.

Tous les résultats présentés seront discutés.

Chapitre I

Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière

Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière

I.1. introduction

Le ralentissement d'une particule chargée au cours de son cheminement dans la matière s'effectue par collisions successives avec les constituants du milieu ralentisseur : les électrons et les noyaux cibles. Ces interactions tendent non seulement à la ralentir, mais également à la défléchir de sa trajectoire initiale par diffusion et éventuellement à modifier son état de charge. Parmi ces collisions, il y a les collisions inélastiques et les collisions élastiques.

Les collisions inélastiques aux cours desquelles se produit soit, une excitation soit une ionisation des atomes cibles. Le projectile perd son énergie par interaction avec les électrons du milieu ralentisseur. La perte d'énergie correspondante est dite électronique.

Les collisions élastiques pour lesquelles l'énergie cinétique totale des particules entrant en collision est conservée soit l'énergie interne des particules est conservée. La collision peut se traduire par une modification importante de la trajectoire et provoque un transfert d'énergie cinétique entre la particule incidente et le noyau de l'atome cible. La perte d'énergie correspondante est dite nucléaire.

La perte d'énergie ΔE du projectile au voisinage de l'énergie E rapportée à l'unité de parcours ΔX est appelée pouvoir d'arrêt $S(E) = -(\Delta E/\Delta X)$. Cette énergie par unité de parcours est la somme de ralentissement dus aux deux processus d'interaction : électronique et nucléaire. L'importance relative du ralentissement électronique et du ralentissement nucléaire dépend de la vitesse incidente, de l'état de charge du projectile et de la nature du milieu ralentisseur.

I.2. Collisions simple

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

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

Où :

Θ : angle de diffusion dans le système du laboratoire (voir la figure 1.1.a).

$$A = (M_2 / M_1)$$

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

Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière

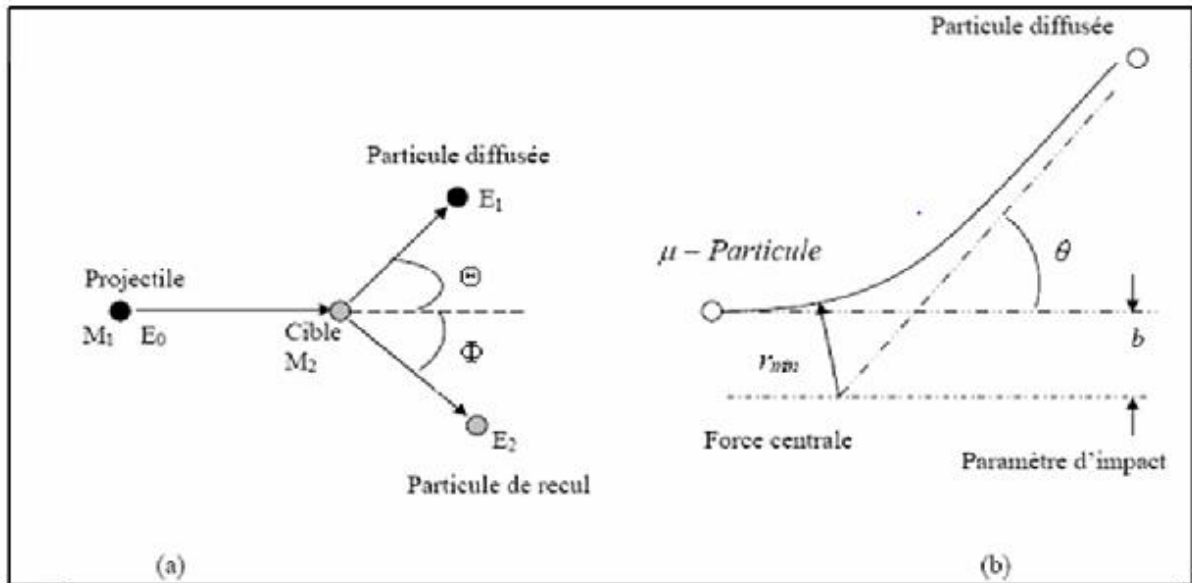


Figure I.1 : Schéma représentant une collision entre deux particules de masse M_1 et M_2 : paramètres de la diffusion dans le système du laboratoire (a) et dans le système de centre de masse (b).

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

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

$$E_2 = \cos^2\Theta [4A/(1+A)^2] E_0 \quad (1.2)$$

Θ : Est l'angle de recul défini dans le système du laboratoire (voir figure 1.1.a).

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

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

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

Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière

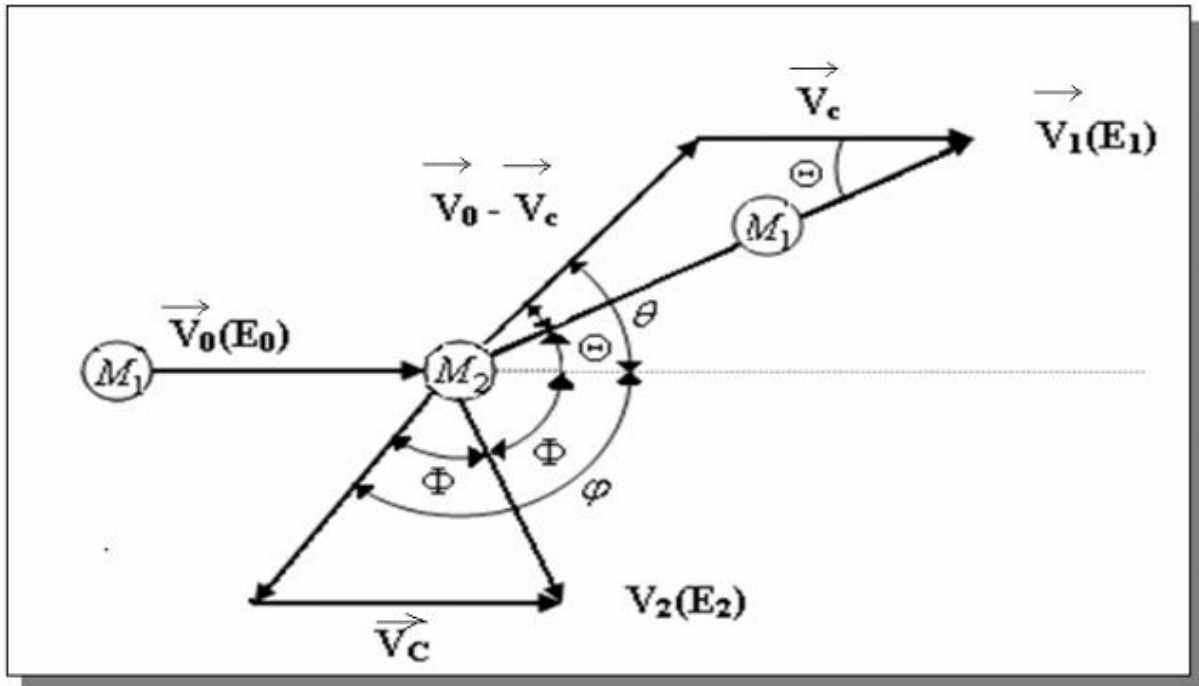


Figure I.2 : diagramme vectoriel liant la vitesse et les angles de diffusion dans les systèmes du laboratoire (L) et du centre de masse (CM).

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

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

Les angles de diffusion Θ et de recul Φ , définis dans le système du laboratoire, sont exprimés en fonction de l'angle de diffusion θ dans le (CM) par les relations suivantes :

$$\tan\Theta = \sin\theta / ((M_1/M_2) + \cos\theta) \quad (1.4)$$

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

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

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

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

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

Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière

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

I.3. Perte d'énergie des ions dans la cible

Le long de son parcours dans la cible, le projectile subit de nombreux chocs atomiques. Ces collisions conduisent à des pertes d'énergie responsables du ralentissement de l'ion dans la matière, jusqu'à sa diffusion, sa transmission ou son arrêt dans la cible. Dans tout le domaine énergétique, deux types de perte d'énergie existent : la perte d'énergie électronique (ou inélastique) et la perte d'énergie nucléaire (ou élastique).

Ces deux pertes d'énergie, bien que corrélées [1, 2], sont considérées comme indépendantes avec une bonne approximation [3].

I.3.1. Perte d'énergie élastique

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

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

$$S_{el}(E) = - (1/N) (dE/dx)_{el} \quad (1.8)$$

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

$$V(r) = (Z_1 Z_2 e^2 / r) \Phi(r/a). \quad (1.9)$$

Où :

Z_1 : numéro atomique de l'ion incident.

Z_2 : numéro atomique de l'atome cible.

r : distance ion-atome cible.

e : charge de l'électron.

$\Phi(r/a)$: fonction d'écran.

Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière

Plusieurs formes de la fonction d'écran ont été proposées. Parmi les plus utilisées, nous citons celle proposée par Ziegler, Biersack et Littmark [3], qui s'écrit :

$$\Phi(r/\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^4 \alpha_i e^{-\frac{\beta_i r}{\mathbf{a}}} \quad (1.10)$$

La distance d'écran universelle \mathbf{a} s'écrit :

$$\mathbf{a} = \frac{0.88534}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \mathbf{a}_0 \quad (1.11)$$

Où \mathbf{a}_0 est le rayon de Bohr ($\mathbf{a}_0 = 0.5292 \text{ \AA}$). les valeurs de β_i et α_i sont données dans le tableau 1.1 [3] :

I	1	2	3	4
α_i	0.028171	0.28022	0.50986	0.18175
β_i	0.20162	0.40290	0.94229	3.1998

Tableau 1.1 : valeurs des constantes d'ajustement pour le potentiel ZBL [3].

La section efficace de diffusion s'exprime comme suit :

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

Où b est le paramètre d'impact défini précédemment.

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

$$d(t^{1/2}) = \pi \mathbf{a}^2 \frac{dt}{2t^2} f_s(t^{1/2}) \quad (1.13)$$

Où f est la fonction universelle de diffusion qui de la forme de la fonction d'écran choisie.

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

\mathcal{E} est l'énergie réduite donnée par :

$$\mathcal{E} = [(\mathbf{a} M_2) / (Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2))] E_0 \quad (1.15)$$

E_0 : énergie de l'ion incident.

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

θ : angle de diffusion dans le système du centre de masse et la variable S choisie selon le type d'écrantage à traiter :

$S=1$ pour un potentiel non écranté,

Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière

$S=1.5$ pour un faible écrantage,

$S = 2$ pour un écrantage moyen,

$S = 3$ pour un écrantage très fort.

Aux valeurs élevées de t , la fonction $f(t^{1/2})$ pour un écrantage moyen rejoint la diffusion coulombienne de Rutherford.

En utilisant l'énergie réduite \mathcal{E} et le parcours réduit ρ (voir ci-dessus), Lindhard, Scharff et Schiott (LSS)[4].

On introduit une expression plus commode du pouvoir d'arrêt du au ralentissement nucléaire :

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

Où :

$$\rho = RN M_2 4\pi a^2 (M_1 / (M_1 + M_2))^2 \quad (1.17)$$

R : parcours total de la particule incidente.

N : nombre d'atomes par unité de volume.

I.3.2 perte d'énergie inélastique

La perte d'énergie inélastique correspond à la quantité d'énergie cédée aux électrons des atomes qui composent le matériau. Ce phénomène entraîne soit l'ionisation des atomes de la cible au voisinage de la trajectoire de l'ion incident, soit l'excitation de leurs niveaux électroniques. La section efficace d'arrêt inélastique $S_{in}(E)$ est défini par :

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

Lindhard et al. ont montré que le pouvoir d'arrêt électronique est proportionnel à la vitesse de l'ion incident V dans le domaine des basses énergies [5] (théorie LSS), soit :

$$(-dE/dx)_{in} = kE^{1/2} \quad (1.19)$$

Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière

En utilisant les unités réduites [4] de l'énergie (eq. 1.15) et du parcours (eq. 1.17), l'équation (1.18) devient :

$$S_{in}(E) = - (dE/d\rho)_{in} = kE^{1/2} \quad (1.20)$$

$$\text{Avec : } k = 0.0793 \frac{z_1^{2/3} z_2^{1/2} (M_1 + M_2)^{3/2}}{(z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{3/4} M_1^{3/2} M_2^{1/2}} \quad (1.21)$$

Les pouvoir d'arrêt élastique et inélastique étant supposés indépendants [3], le pouvoir d'arrêt global s'écrit comme la somme de ces deux contributions, soit :

$$(dE/dx)_T = (dE/dx)_{el} + (dE/dx)_{nu} = N [S_{nu}(E) + S_{el}(E)] \quad (1.22)$$

I.4. le modèle des collisions multiples

L'échec de l'approche en collision simple dans l'analyse de la diffusion d'ions lents (quelques keV d'énergie) par une surface solide [6] a conduit à développer un modèle tenant compte des collisions multiples pour interpréter les spectres en énergie de la diffusion. D'autre part, il a été montré [7, 8,9] que la fraction de particules ayant subi un seul choc dans la cible est très faible.

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

L'approximation des collisions binaires ou BCA [10], l'énergie perdue par une particule par chocs nucléaire après n collisions est donnée par :

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

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

$$K(\Theta_i, A) = \left[\frac{\cos \Theta_i \sqrt{A^2 - \sin^2 \Theta_i}}{(1+A)} \right]^2 \quad (1.24)$$

Cette approximation est valable si l'énergie de la particule incidente est supérieure à quelques dizaines d'eV [11].

I.5. Potentiel d'interaction

L'effet d'écran signifie qu'au lieu de considérer un potentiel purement coulombien $V_C(r) = zZe^2/r$, il faut utiliser un potentiel moyen tenant compte de toutes les interactions :

$$V_r(r) = V_{CN}(r) + V_{CE}(r) + V_{EC}(r)$$

Où : $V_{CN}(r)$ est le potentiel coulombien entre les noyaux,

Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière

$V_{CE}(r)$ est le potentiel coulombien électronique,

$V_{EC}(r)$ est le potentiel d'échange et de corrélation [11].

Les différentes méthodes proposées [12,13] pour le calcul du potentiel résultant $V_r(r)$ sont basées sur la méthode du champ self-consistent et nécessitent généralement de gros calculs. Il existe cependant une méthode d'approximation, relativement simple, qui consiste à prendre un potentiel coulombien écranté du type :

$$V_r(r) = V_C(r)\Phi(r/\alpha) \quad (1.25)$$

La fonction d'écran $\Phi(r/\alpha)$ doit rendre compte à la fois, de l'écran électronique du noyau cible et de l'écran électronique du noyau incident. Bohr a proposé une fonction d'écran du type :

$$\Phi(r/\alpha) = \exp(-r/\alpha) \quad (1.26)$$

Toutefois, bien d'autres formulations sont aussi utilisées pour la fonction d'écran $\Phi(r/\alpha)$.

Parmi les expressions proposées pour le calcul de la fonction d'écran $\Phi(r/\alpha)$, nous pouvons citer, celles de :

Thomas-fermi[16] $\Phi(r/\alpha) = [1+(x/\alpha)^\lambda]^{-3/\lambda}$ où $\lambda = 0.8034$

$$\alpha = 12^{2/3}$$

Lenz-Jensen[17] $\Phi(r/\alpha) = (0.7466e^{-1.038x}) + (2433e^{-3876x}) + (0.1018e^{-206x})$

Molière [18] $\Phi(r/\alpha) = (35e^{-3x}) + (5.5e^{-1.2x}) + (0.1e^{-6.0x})$

Biersack[14] $\Phi(r/\alpha) = (1818e^{-3.21x}) (5099e^{-9423x}) (2802e^{-4028x}) (02817e^{-2016x})$

$$x = r/a$$

$$\text{où } a = (1/4)(9\pi^2/2)^{1/3} (\hbar^2/m^2) (1/(z^{1/3} + Z^{1/3})) (0.8853/z^{2/3} + Z^{2/3})^{1/3} a_0 \quad (1.27)$$

La fonction d'écran proposée par Beirsack et al [14] a été déterminée en fonction du rayon d'écran $X1 = 0.8854 (z^{0.23} + Z^{0.23}) a_0$.

I.5.1. Modèle de Firsov

Firsov [19] a utilisé le modèle semi empirique de thomas-fermi [16] pour la cible la description des atomes cibles et du projectile. Il considère que les nuages électroniques du

Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière

Projectile et de la cible s'interpénètrent profondément et il définit une surface fictive S_f séparant les deux particules. Celle-ci correspond à un minimum de potentiel, situé approximativement à mi-distance entre le projectile et la cible.

Firsov choisi un rayon d'écran tenant compte de la polarisation des nuages d'électrons s'interpénétrant :

$$a_F = 0.8853 a_0 (z+Z)^{-1/3} \quad (1.28)$$

le pouvoir d'arrêt électronique du Firsov est proportionnel à la vitesse du projectile.

$$S_e^F = 5.15 \cdot 10^{-15} (z+Z)(v/v_0) \quad \text{en eVcm}^2/\text{atome} \quad (1.29)$$

I.6. Mécanismes de transfert de charge

Lorsque des ions sont diffusés par une surface solide, ils peuvent échanger des électrons avec les atomes de cette surface [20]. Cet échange peut se produire dans les phases d'approche et d'éloignement et en volume (à l'intérieur du solide).

I.6.1. Processus de transition au voisinage de la surface

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

L'ion incident peut se neutraliser suivant trois possibilités :

Neutralisation radiative.

Neutralisation résonnante.

Neutralisation Auger.

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

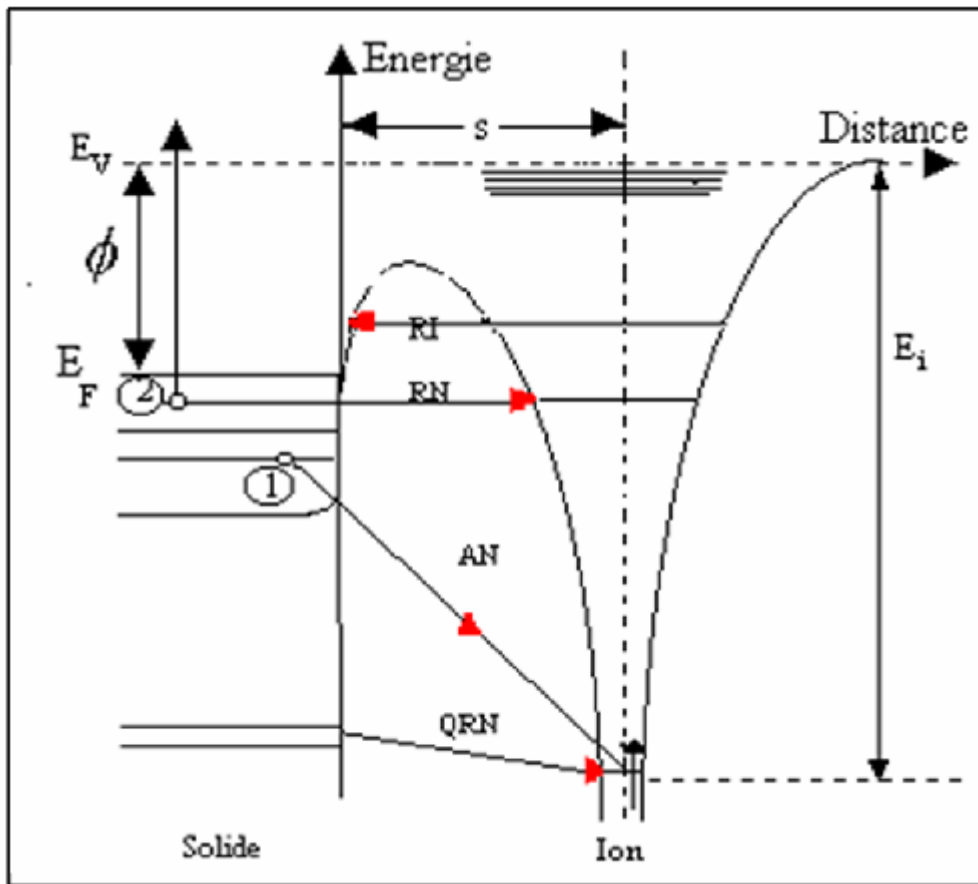


Figure I.3 Schéma énergétique représentant les différents processus d'échange de charge au voisinage de la surface.

La neutralisation résonnante (RN) correspond à la transition d'un électron par effet tunnel, vers un état atomique de l'ion incident à travers la barrière de potentiel entre l'atome et le solide. Le processus est dit résonnant car l'électron transféré entre le projectile et la cible conserve son énergie.

L'ionisation résonnante (RI) est le processus inverse, en compétition avec la neutralisation résonnante, qui correspond au transfert d'un électron se trouvant sur un niveau excité de la particule incidente à un niveau non rempli du solide.

La neutralisation quasi-résonnante (QRN) : c'est une neutralisation résonnante qui concerne des niveaux plus profonds de la bande du solide.

La neutralisation Auger (AN) fait intervenir 2 électrons de valence du métal. Le premier électron est capturé sur un état lié de l'ion. L'énergie libérée est récupérée par le second électron qui va être éjecté dans le vide.

Généralités sur les processus d'interaction des particules chargées avec la matière

La désexcitation Auger fait intervenir un électron de la bande de valence du solide et un électron du projectile situé à un niveau excité.

Autoionisation : les deux électrons proviennent du projectile.

I.6.2. Processus d'échange de charge dans le volume

Indépendamment de la neutralisation et de l'ionisation qui se produisent au voisinage de la surface, l'échange de charge peut se produire également suivant un processus local lors de la collision avec un atome cible à l'intérieur de solide, menant à la neutralisation ou la ré-ionisation du projectile [21].

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

Chapitre II

Description du modèle de simulation utilisé

I. Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter les paramètres essentiels qui dérivent les phénomènes résultant de l'interaction entre un projectile chargé et une cible. Nous mettons l'accent sur ceux qui nous intéressent dans le cadre de ce travail, tels que la perte d'énergie et les notions des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique. Nous terminons par l'utilisation du logiciel SRIM-2013 (Stopping Range Ion in Matter) qui permet de simuler les collisions successives entre deux espèces pour pouvoir estimer l'emplacement des ions implantés et les déplacements des atomes de la cible.

II. Les outils développés dans la littérature

Il existe de nombreux programmes permettant de simuler l'impact d'un ou plusieurs ions dans la matière.

A l'échelle des atomes, les calculs par Dynamique Moléculaire permettent de simuler l'interaction des ions ou atomes. En principe, cela consiste à calculer, pour chaque pas de temps, la position, la vitesse et l'interaction entre chaque particule. C'est un outil très puissant pour déterminer les mécanismes à très petite échelle. Il est désormais utilisé dans nombreux domaines tel que la science des matériaux, la physique des particules, la chimie ou la biologie. De plus, cela implique une très bonne connaissance des interactions au sein du matériau à analyser.

Les logiciels basés sur l'approximation des cascades de collision binaires, grâce à des modèles statistiques qui reposent sur la méthode de Monte-Carlo, permettent des calculs rapides du comportement des atomes émis. En contrepartie, ils ne sont prévus que pour des conditions particulières et ne seront donc valables que pour certains types de résultats et une gamme de paramètres précis. Les codes ou programmes rencontrés le plus régulièrement dans la littérature sont SRIM [22], TRIDYN [23].

II.1. Description de SRIM

Les simulations ont été effectuées avec SRIM 2013 (Stopping and Range of Ion in Matter). Ce groupe de programmes a été développé par Ziegler et al [22]. Il a été conçu principalement pour le calcul des trajectoires et des pouvoirs d'arrêt des ions primaires et des atomes de la cible lors de cascade de collision. Les collisions prennent en considération les effets quantiques des interactions ions-atome. Il permet de définir les paramètres initiaux de la cible (composition, densité) et des ions primaires (énergie), et le calcul rapide de l'implantation et de pulvérisation. Les résultats de simulation du pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire sont stockés dans des fichiers output.

Un ion incident a une trajectoire rectiligne avec des pertes d'énergie par collisions électroniques, puis change de direction sous l'influence des collisions nucléaires.

Description du modèle de simulation utilisé

Lorsque l'énergie de l'ion est inférieure à son énergie de déplacement E_d , il s'arrête et il y a dissipation d'énergie sous forme de phonons.

Ce programme permet de calculer différents paramètres liés à l'implantation d'ions dans une cible, entre autres [24].

La distribution spatiale des ions implantés (profondeur moyenne, dispersion, distribution latérale)

Les distributions des pertes d'énergies électronique et nucléaire en fonction de la profondeur (ce sont les distributions moyennes pour un ion, elles sont exprimées en eV/Å).

La distribution des lacunes (atome déplacés) calculée à partir du modèle de Kinchin-Pease modifié.

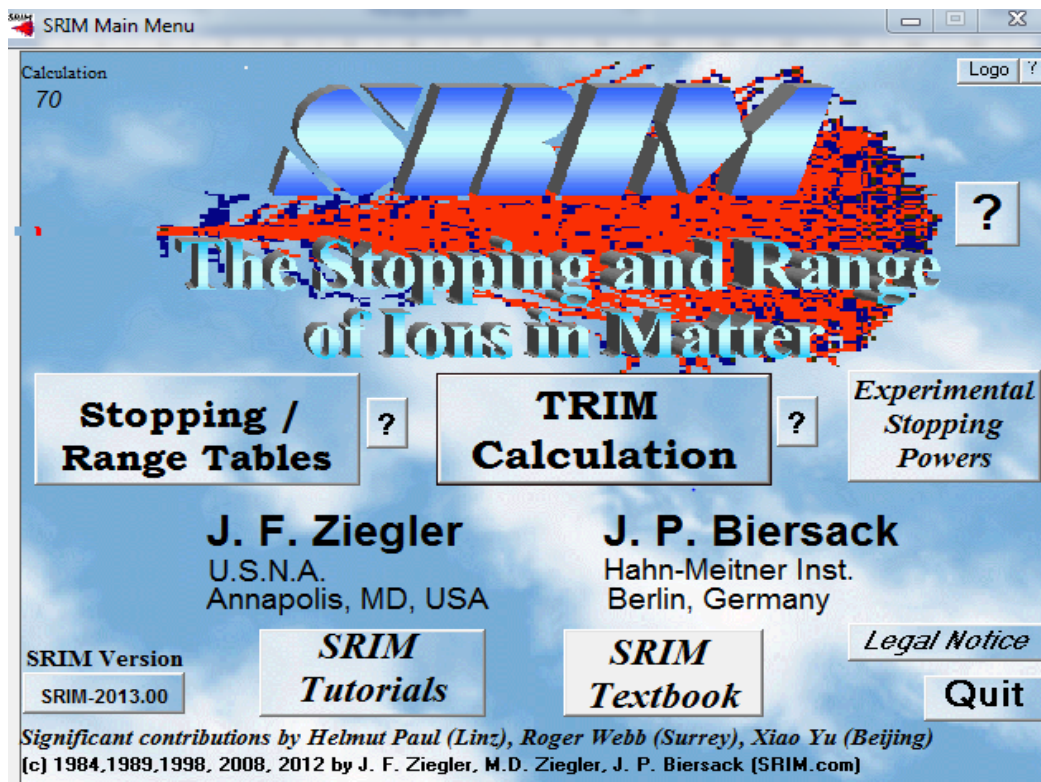


Figure II.1. Schéma représentant le format de SRIM 2013.

Description du modèle de simulation utilisé

II.1.2. Condition d'utilisation lors de la simulation par SRIM 2013

Au cours de la simulation par SRIM2013, en première étape, nous avons utilisé le type de calcul appelé " Ion Stopping and Range Tables" qui est basé sur la formalisation de J.F.Ziegler et en deuxième étape nous utilisons le " Target" pour choix de l'ion projectile et de l'atome cible. En troisième étape nous utilisons "Stopping Power Units" pour le choix de l'unité, et en quatrième étape nous utilisons le " Ions Energy Lowest", (Range (keV) Highest" pour le choix de la gamme d'énergie. Dans la dernière étape nous utilisons le paramètre " Calculate Table" pour exécuter le programme.

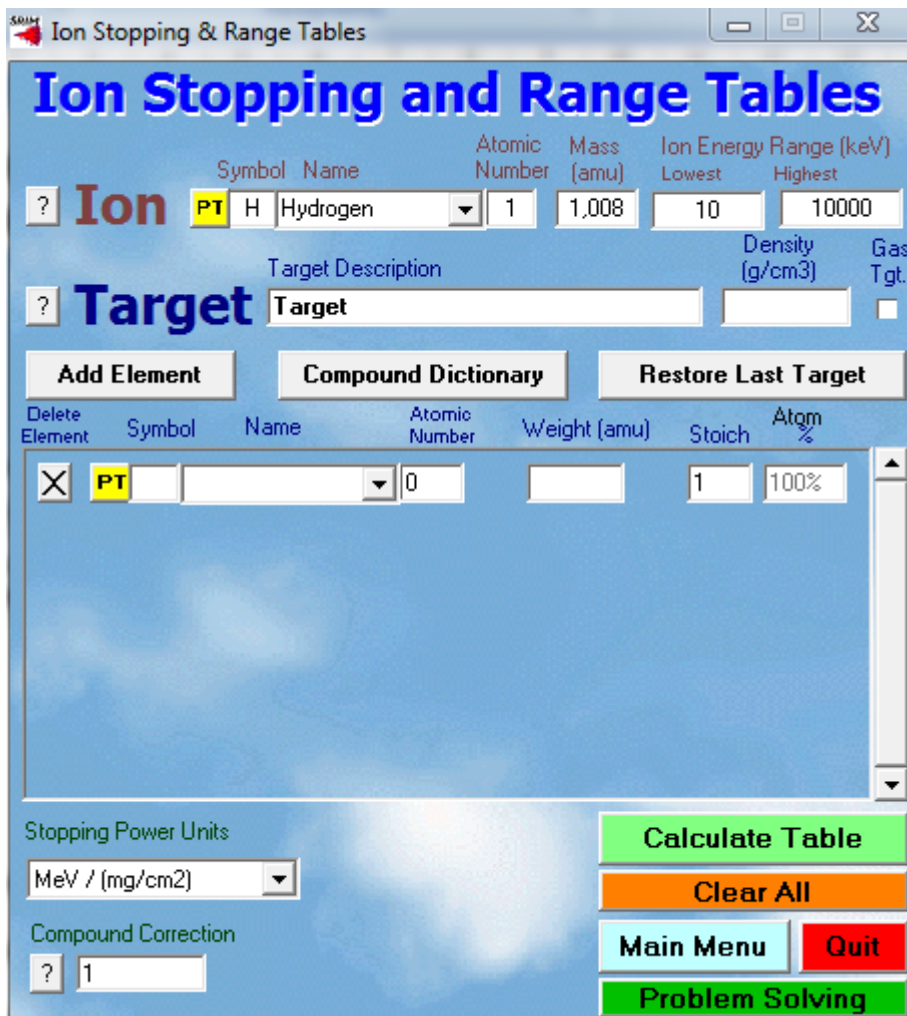


Figure II.2. Schéma représentant les paramètres de SRIM 2013 utilisé.

Description du modèle de simulation utilisé

II.1.3. Implantations des ions

Lors de sa pénétration dans la cible, l'ion provoque plusieurs collisions d'atomes qui se mettent en mouvement et se déplacent jusqu'à percuter d'autres atomes qui eux-mêmes se déplacent, et ainsi de suite. L'énergie de l'ion incident est de l'ordre de dizaine de KeV, tandis que l'énergie minimale nécessaire au déplacement d'un atome dans la matrice cristalline est de l'ordre de dizaine d'eV.

Il y a production d'un grand nombre de déplacements dans la cible, on parle alors de 'cascade de collisions' ou 'cascade de déplacements'. Ceci est illustré dans la figure (II.5).

Les atomes déplacés terminent leur mouvement dès qu'ils ne reçoivent plus suffisamment d'énergie pour se déplacer.

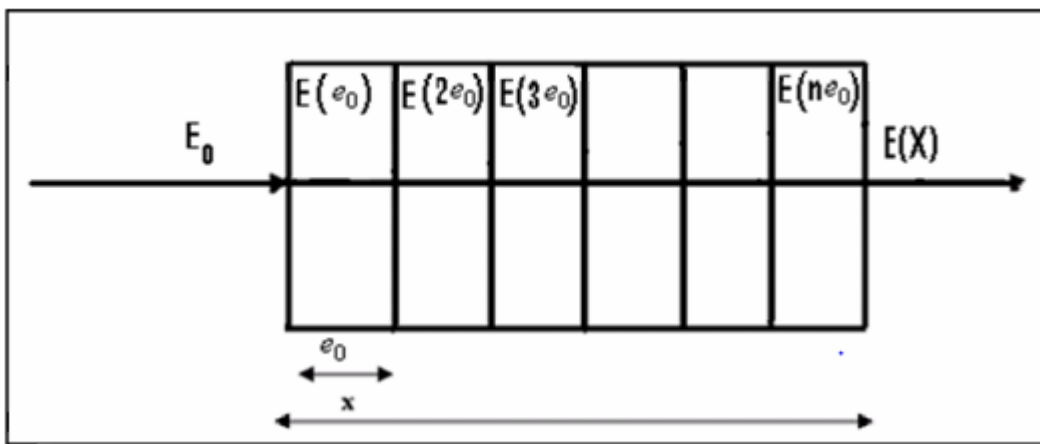


Figure II.3. Variation de l'énergie de la particule incidente avec le parcours dans la cible.

II.1.4. Simulation des pouvoir d'arrêt

Les ions qui heurtent la cible sont freinés par deux types d'interactions : électronique et nucléaire. On prend un exemple de He^+/Cu . A partir de la figure(II.4), correspondant au cas de l'interaction des ions d'Hélium avec une cible de Cuivre, nous ne distinguons que l'évolution du pouvoir d'arrêt électronique qui est différente de celle relative au pouvoir d'arrêt nucléaire. En effet :

Description du modèle de simulation utilisé

Le pouvoir d'arrêt électronique (Fig II.4.) est caractérisé par une allure sensiblement proportionnelle à l'énergie de l'ion. Notons que ce type d'interaction inélastique ne produit pas directement le déplacement d'atomes.

Le pouvoir d'arrêt nucléaire est caractérisé par deux zones plus importantes que le ralentissement électronique. Notons que ce type d'interaction élastique peut entraîner une cascade de chocs secondaire pouvant induire des déplacements d'atomes dans le matériau cible. Sur la figure (II.4), on indique trois points particuliers délimitant approximativement les différents mécanismes d'arrêt.

Le premier point correspondant au minimum des pouvoirs d'arrêts nucléaire et électronique est identique. Le point 2 correspond au maximum du pouvoir d'arrêt nucléaire. Au point 3, les pouvoirs d'arrêts nucléaire et électronique sont identiques, il correspond à une énergie de 7 KeV. Finalement, pour la zone indiquée par le point 4, le pouvoir d'arrêt d'ions est principalement gouverné par les interactions inélastiques provenant des interactions électroniques.

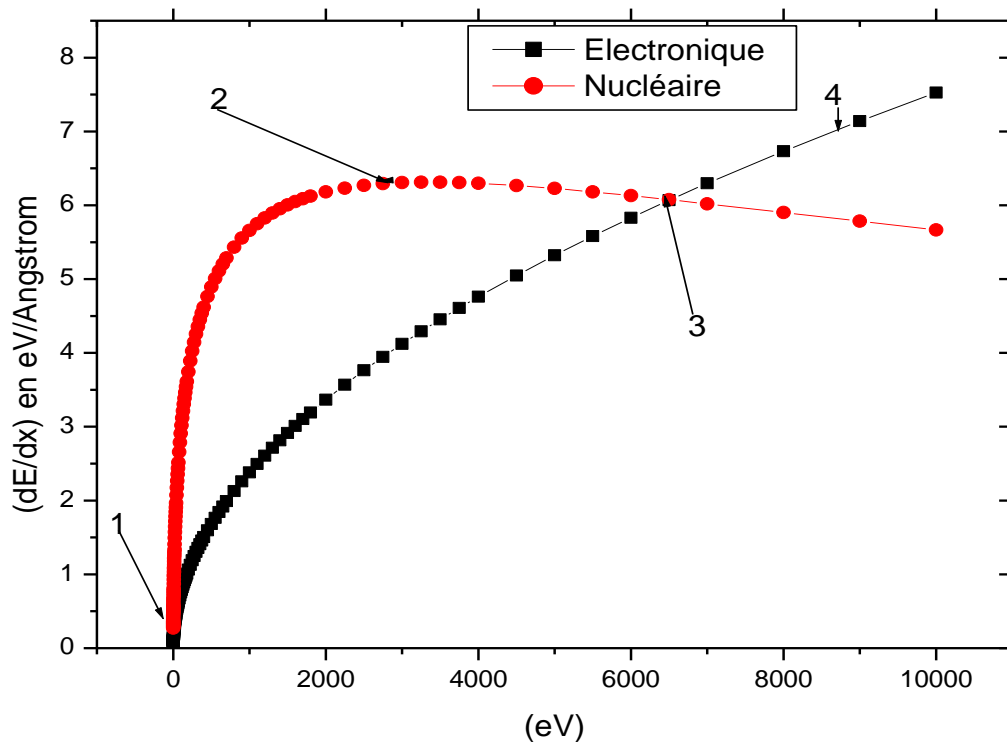


Figure II.4. Simulation des pouvoir d'arrêt (nucléaire et électronique) des ions He^+ / Cu .

Description du modèle de simulation utilisé

II.2. Description d'Origin

Dans la suite des calculs, nous avons utilisé le logiciel Origin 6.0 pour calculer le pouvoir d'arrêt total et tracer les courbes des pouvoirs d'arrêt (total, électronique et nucléaire).



Figure II.5. Schéma représentant l'interface d'Origin 6.0.

Après, nous avons ajusté ces courbes par une fonction polynômiale de degré de puissance 6 au moyen de la commande 'Fit Polynomiale', ces ajustements nous permettent de déterminer les coefficients de polynôme de degré 6 pour chaque courbe.

Description du modèle de simulation utilisé

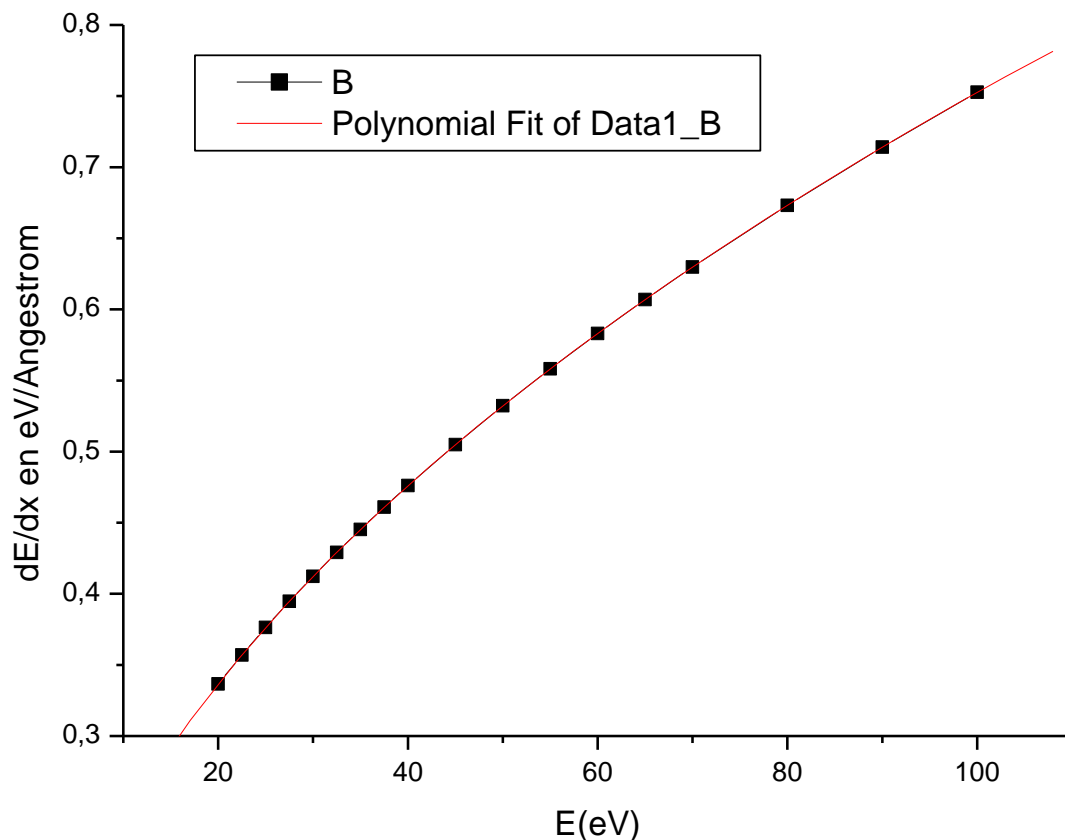


Figure II.6. L'ajustement du pouvoir d'arrêt pour des ions He^+ / Cu .

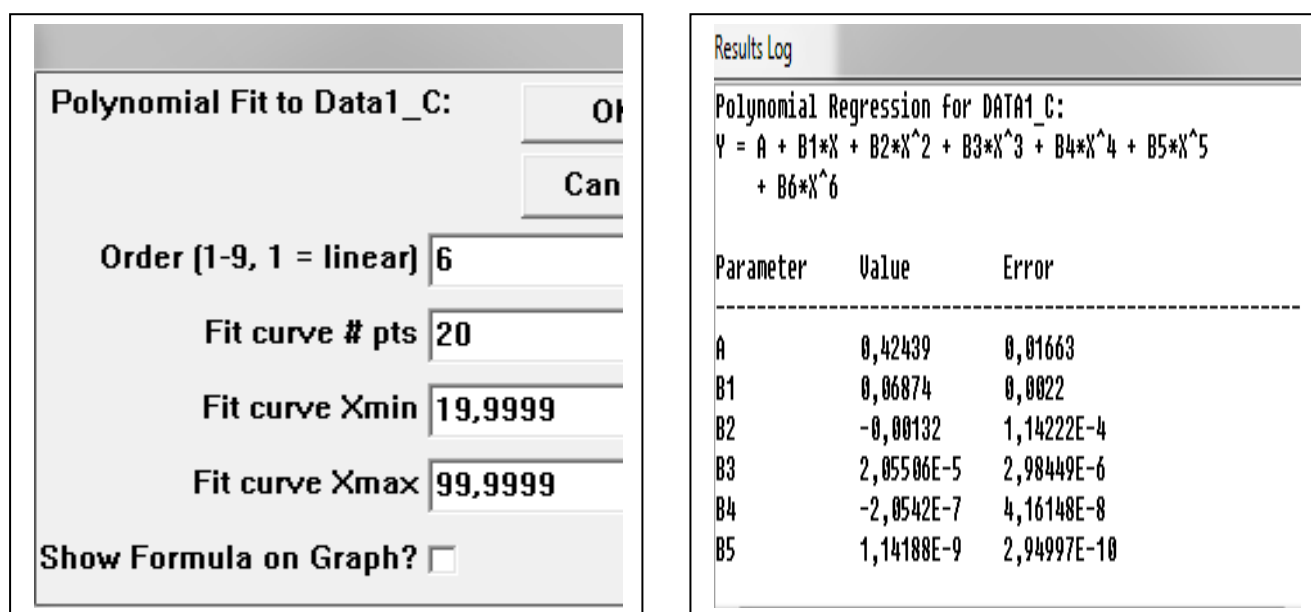


Figure II.7. Schéma représentant les commandes Analysis et Polynomial fit d'Origin 6.0.

Description du modèle de simulation utilisé

Finalement, nous avons écrit un programme en langage fortran. Ensuite, nous avons utilisé les coefficients de polynomial précédent dans un programme Fortran qui permet de calculer la perte d'énergie pour chaque série de calcul. Les résultats calculés de la perte d'énergie électronique, nucléaire et totale sont stockés dans des fichiers output Ces résultats sont représentées sous la forme suivante :

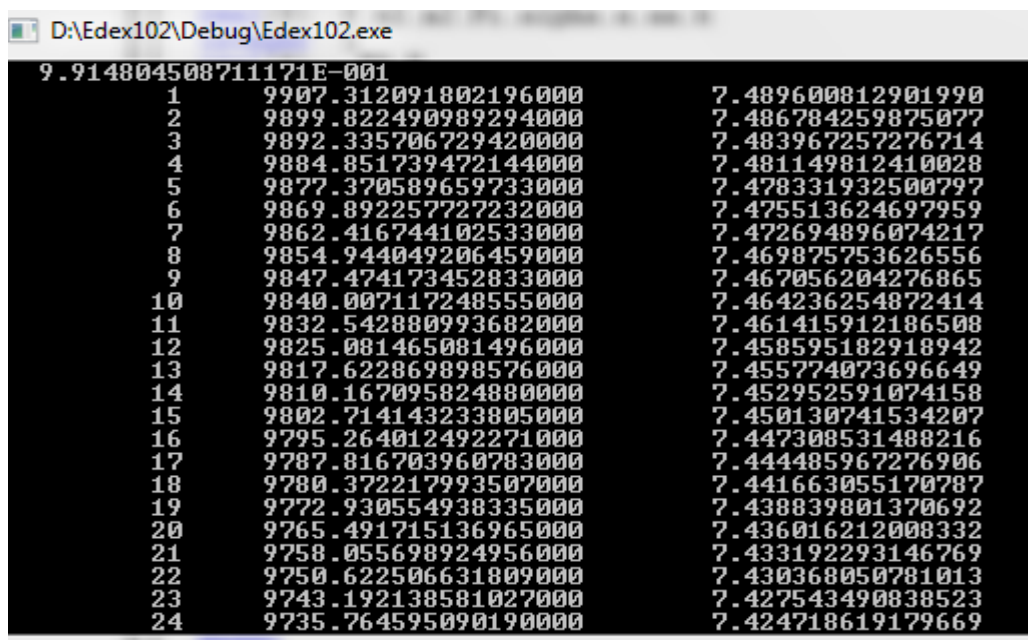


Figure II.8. Schéma représentant la variation de la perte d'énergie en fonction de parcours $L(\text{\AA})$.

On a encore utilisé le logiciel Origin, par la commande Import ASCII pour importer les résultats calculés à l'aide du langage fortran et stockés dans des fichiers output. Les résultats de la perte d'énergie de chaque série de calcul seront discutés dans le chapitre suivant.

Chapitre III

Résultats et discussion

I. Introduction

Le but de ce travail est l'étude de l'effet de la charge, les angles et les différents potentiels sur la perte d'énergie de diffusion d'un ion de faible énergie sur une surface solide. Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats relatifs aux cas suivants :

* Diffusion d'ions H^+ , He^+ et Li^+ par une surface de Nickel pour la gamme de l'énergie incidente variant de ($E_0=0eV$ à $10KeV$).

* Diffusion d'ions H^+ , He^+ et Li^+ par une surface de Silicium et de Cuivre pour les mêmes valeurs de l'énergie incidente utilisées pour le Nickel.

*Diffusion d'ions H^+ , He^+ et Li^+ par une surface de Silicium, Cuivre et de Nickel pour différentes valeurs des angles 12° , 14° et 16° .

Résultats et discussion

III.2. Calcul de la perte d'énergie

Nous rappelons que la perte d'énergie de diffusion $E(x)$ est calculée par le pouvoir d'arrêt.

Il est à noter que nous avons calculé la perte d'énergie pour une valeur de l'angle de diffusion constante. Nous présentons ici quelques résultats à l'aide d'un programme écrit en langage fortran. On considère le potentiel d'interaction ZBL, pour les trois systèmes (H^+ , He^+ et Li^+ /Ni), (H^+ , He^+ et Li^+ /Si) et (H^+ , He^+ et Li^+ /Cu) pour les valeurs de l'énergie incidente variant de $E_0=0eV$ à $10KeV$. Les valeurs des angles de diffusion étant variables.

III.3. L'effet de la charge de l'atome cible sur la perte d'énergie

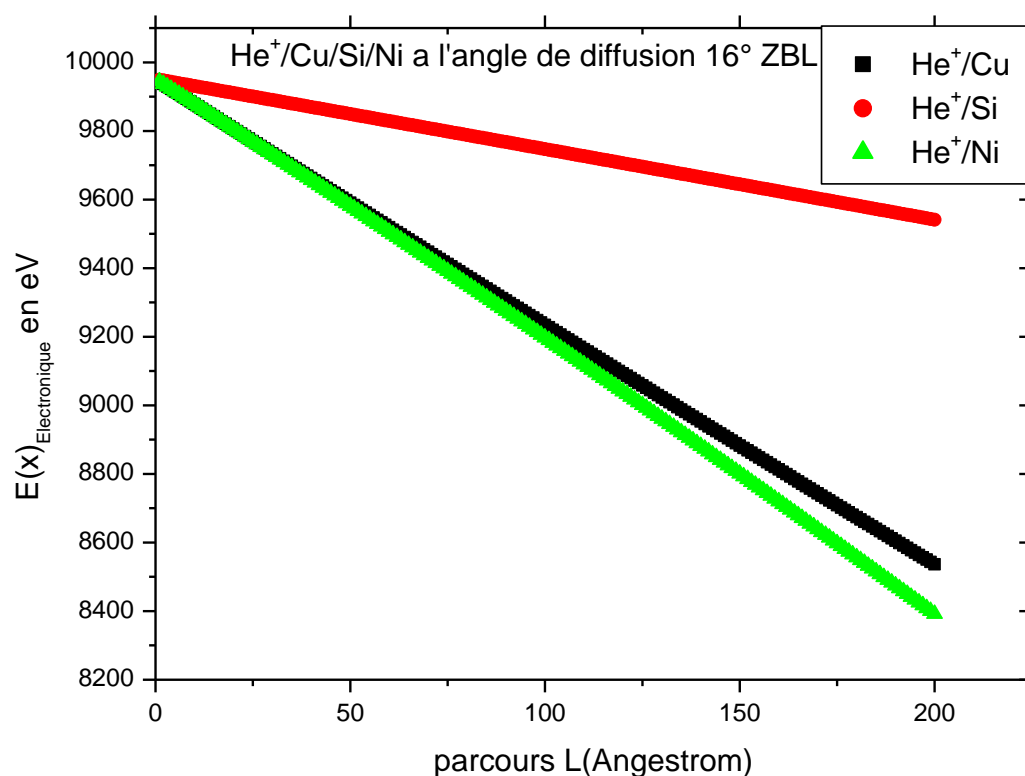


Figure III.1: Variation de la perte d'énergie électronique de diffusion en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{He}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}, \text{Si}$ et Ni , la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Résultats et discussion

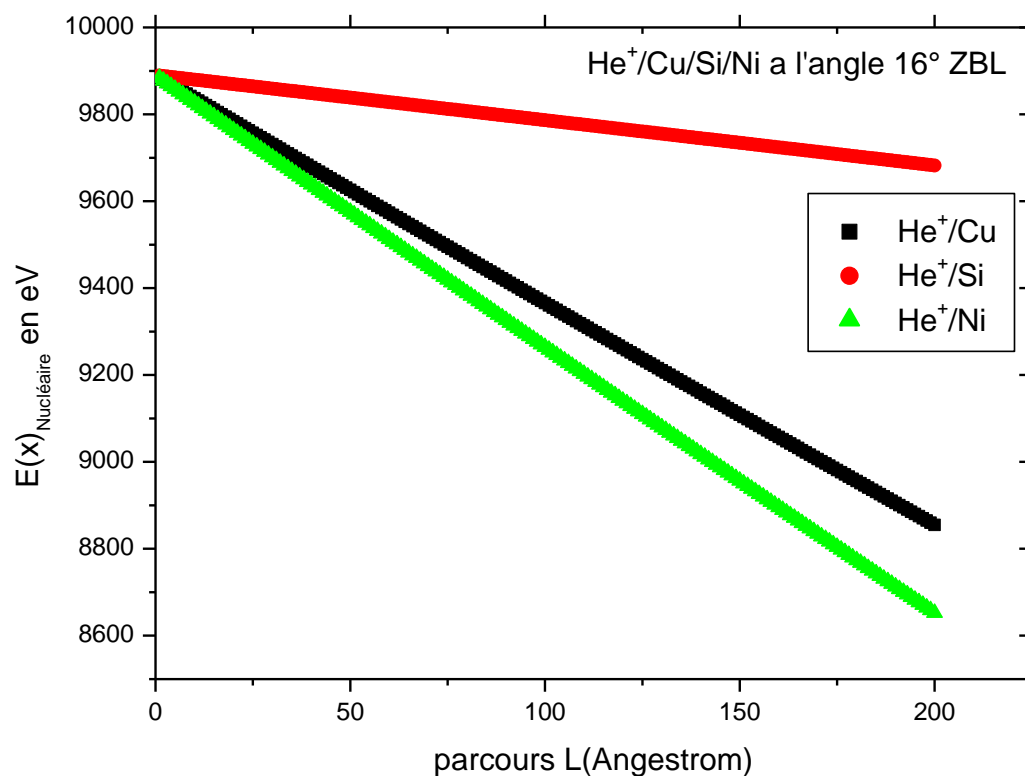


Figure III.2: Variation de la perte d'énergie nucléaire en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{He}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}, \text{Si}$ et Ni , la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Résultats et discussion

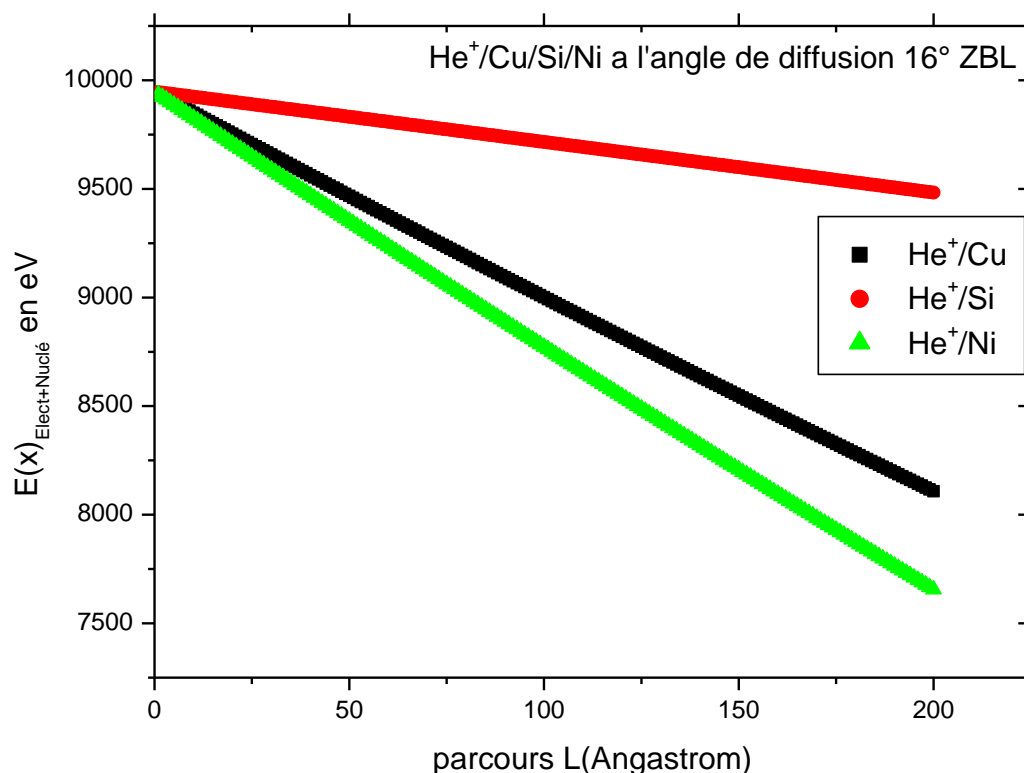


Figure III.3: Variation de la perte d'énergie (électronique + nucléaire) en fonction de la distance parcourue en Å pour le système He⁺(0eV, 10keV)/Cu, Si et Ni, la charge Z de la cible variable , l' angle de diffusion fixé à 16°.

Dans les figures III.1, III.2 et III.3. On utilise les même ions de projectile et différentes cible (He⁺/Cu/Si/Ni), au même angle de diffusion. Pour les trois cas de la perte d'énergie électronique, nucléaire et totale. Dans le cas de la perte d'énergie électronique, nous remarquons, dans le cas d'un faible parcours, que les valeurs obtenues pour He⁺/Cu et He⁺/Ni sont pratiquement identiques et sont plus grandes que pour He⁺/Si. A partir de 100 Å les résultats de la perte d'énergie de He⁺/Cu et He⁺/Ni ne sont plus identiques et la diminution de E(x) est plus forte que pour He⁺/Si. Mais pour les deux cas de la perte d'énergie nucléaire et

totale nous remarquons, dans les deux cas et pour un faible parcours, que les valeurs obtenues pour He^+/Cu et He^+/Ni sont pratiquement identiques et plus grandes que pour He^+/Si .

Résultats et discussion

Nous pouvons dire que cette différence est due à l'effet de la charge de la cible car quand la charge est grande la perte est grande et la diminution plus forte. Donc, la perte d'énergie est proportionnelle à la charge.

Dans les figures III.4, III.5 et III.6. On utilise les même ions projectiles et différentes cibles ($\text{H}^+/\text{Cu}/\text{Si}/\text{Ni}$), au même angle de diffusion, pour les trois cas de la perte d'énergie électronique, nucléaire et totale.

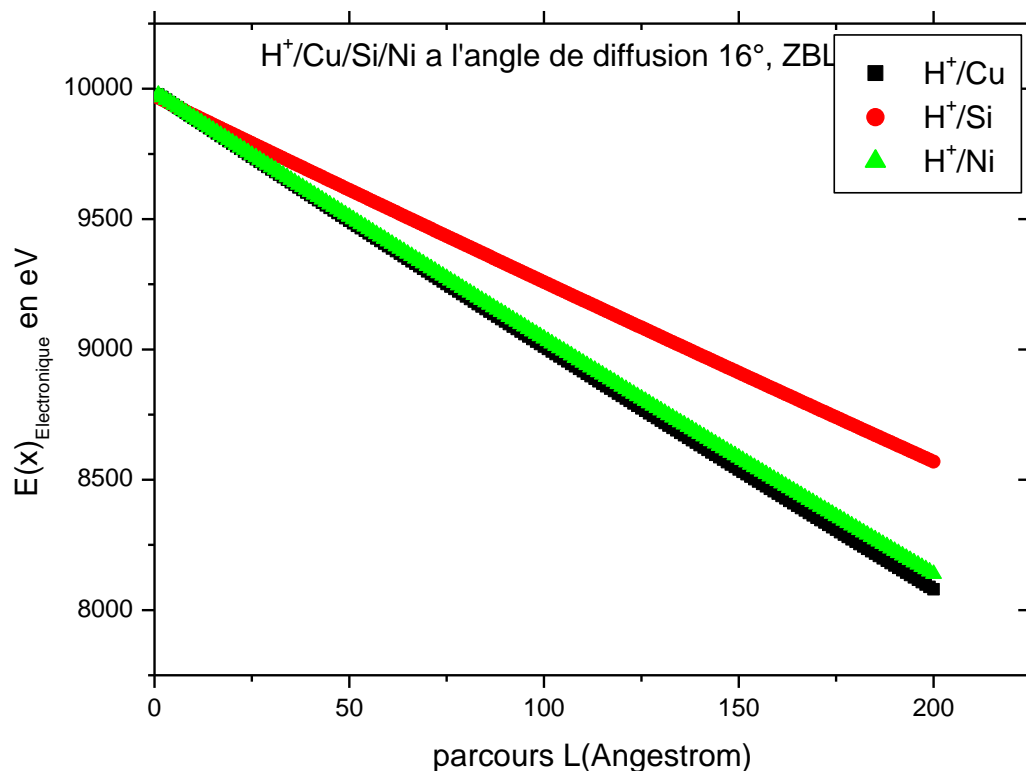


Figure III.4: Variation de la perte d'énergie électronique en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{H}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}, \text{Si}$ et Ni , la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Résultats et discussion

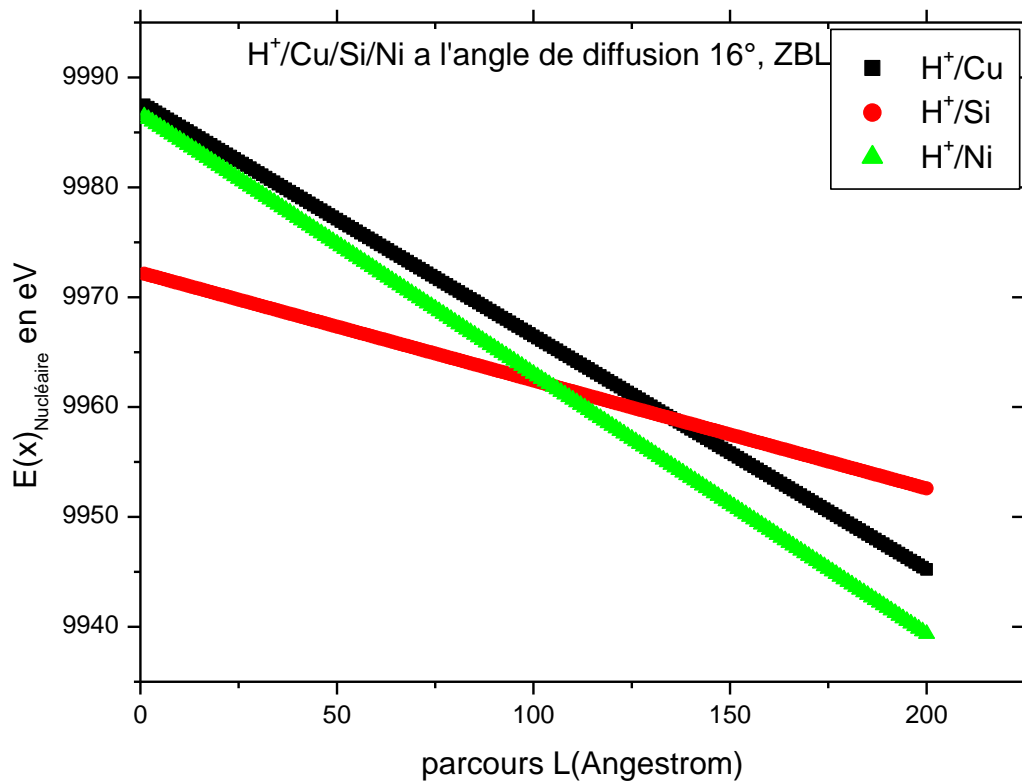


Figure III.5: Variation de la perte d'énergie nucléaire de en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $H^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, Si et Ni, la charge Z de la cible variable, l' angle de diffusion fixé à 16° .

Résultats et discussion

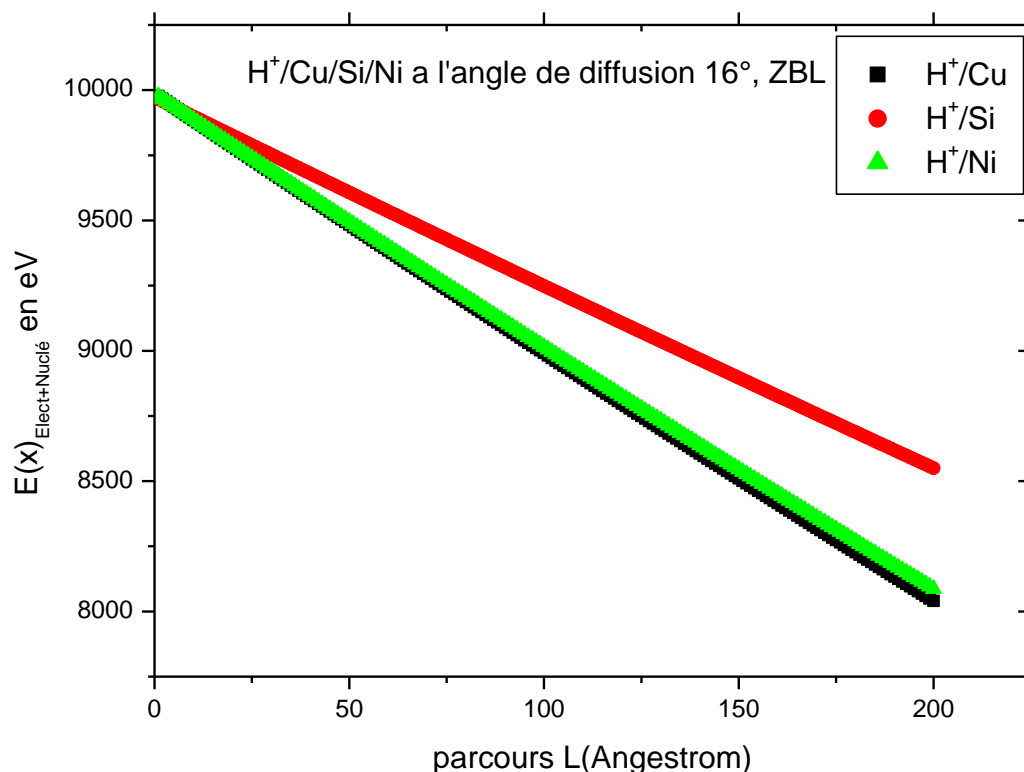


Figure III.6: Variation de la perte d'énergie(électronique + nucléaire) en fonction de la distance parcourue en Å pour le système H⁺(0eV, 10keV)/Cu, Si et Ni, la charge Z de la cible variable , l' angle de diffusion fixé à 16°.

Dans le cas de la perte d'énergie électronique, nous remarquons, dans les deux cas de H⁺/Cu et H⁺/Ni et sur tout le parcours, que les valeurs obtenues sont pratiquement identiques et plus grandes que pour H⁺/Si. La diminution de E(x) pour H⁺/Cu et H⁺/Ni est plus forte que pour H⁺/Si. En effet dans le cas de la cible de Silicium, pour un parcours égal à 200 Å, la perte d'énergie est de l'ordre de 1.5 keV et pour le Cu et Ni de l'ordre de 2 keV. Nous notons ici que la perte d'énergie totale est plus importante dans la cible de Nickel et de Cuivre. Pour le cas de la perte d'énergie nucléaire, nous remarquons, dans les deux cas de H⁺/Cu et H⁺/Ni deux phases différentes dans le parcours : les valeurs obtenues pour H⁺/Cu et H⁺/Ni sur [0 Å

à 40 Å] sont pratiquement identiques et plus faibles que pour H⁺/Si, mais sont différentes sur [140 Å à 200 Å]. La diminution de E(x) de H⁺/Cu et H⁺/Ni est plus forte que

Résultats et discussion

pour H⁺/Si. En effet dans le cas de la cible de Nickel et Cuivre, pour un parcours égal à 200 Å, la perte d'énergie est de l'ordre de 0.1 keV et pour le Si de l'ordre de 0.06 keV.

Dans le cas de la perte d'énergie totale, nous remarquons, que les résultats obtenus sont similaires avec les résultats obtenus pour la perte d'énergie électronique.

Nous pouvons dire que cette différence est causée par l'effet de la charge de la cible : quand la charge est grande la perte est grande et la diminution plus forte. Donc, la perte d'énergie est proportionnelle à la charge.

Dans les figures III.7, III.8 et III.9. On utilise les mêmes ions comme projectile et différentes cibles (Li⁺/Cu/Si/Ni), au même angle de diffusion et pour les trois cas de la perte d'énergie électronique, nucléaire et totale.

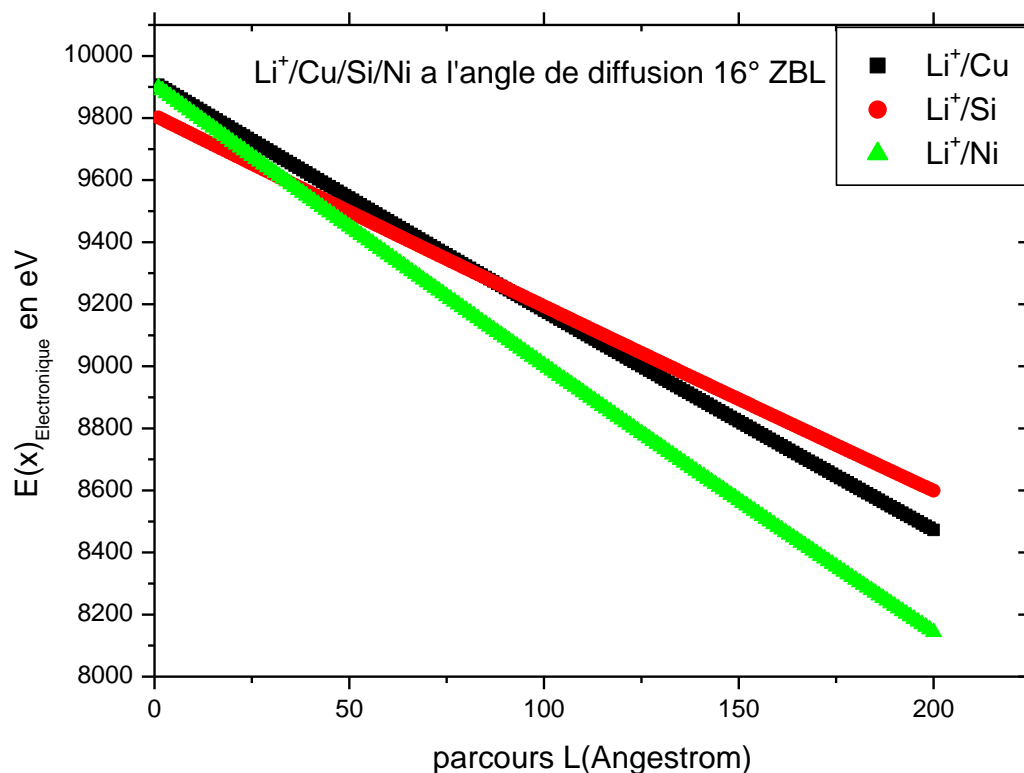


Figure III.7: Variation de la perte d'énergie électronique en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{Li}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}, \text{Si}$ et Ni , la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Résultats et discussion

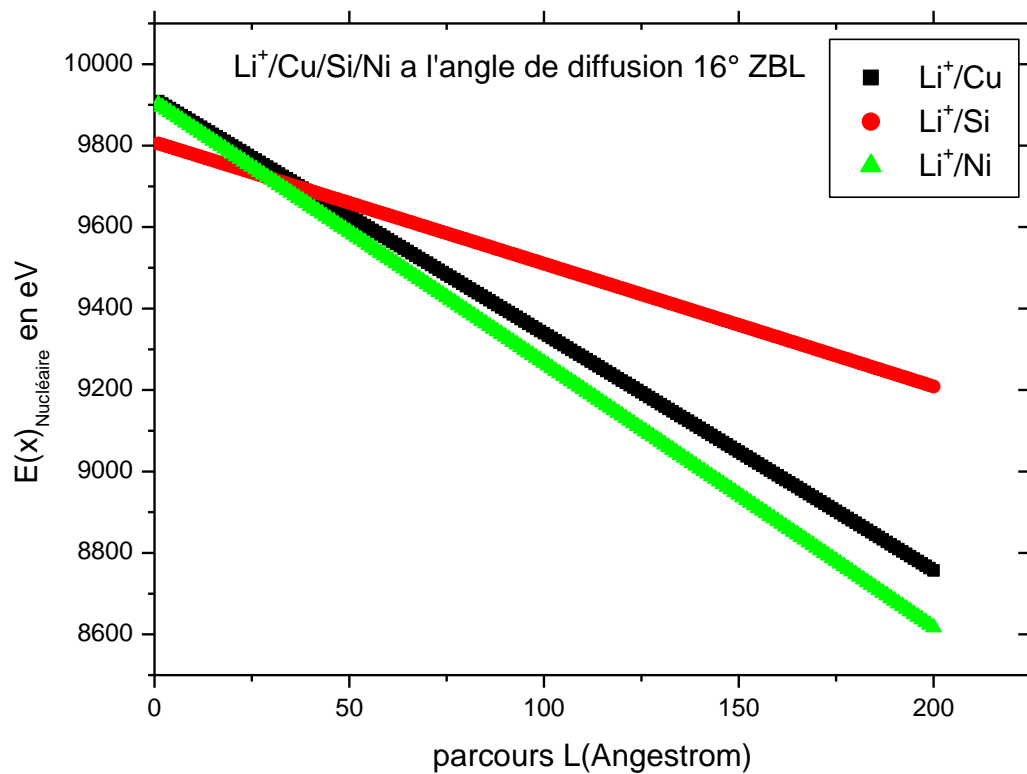


Figure III.8: Variation de la perte d'énergie nucléaire en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{Li}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}, \text{Si}$ et Ni , la charge Z de la cible variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Résultats et discussion

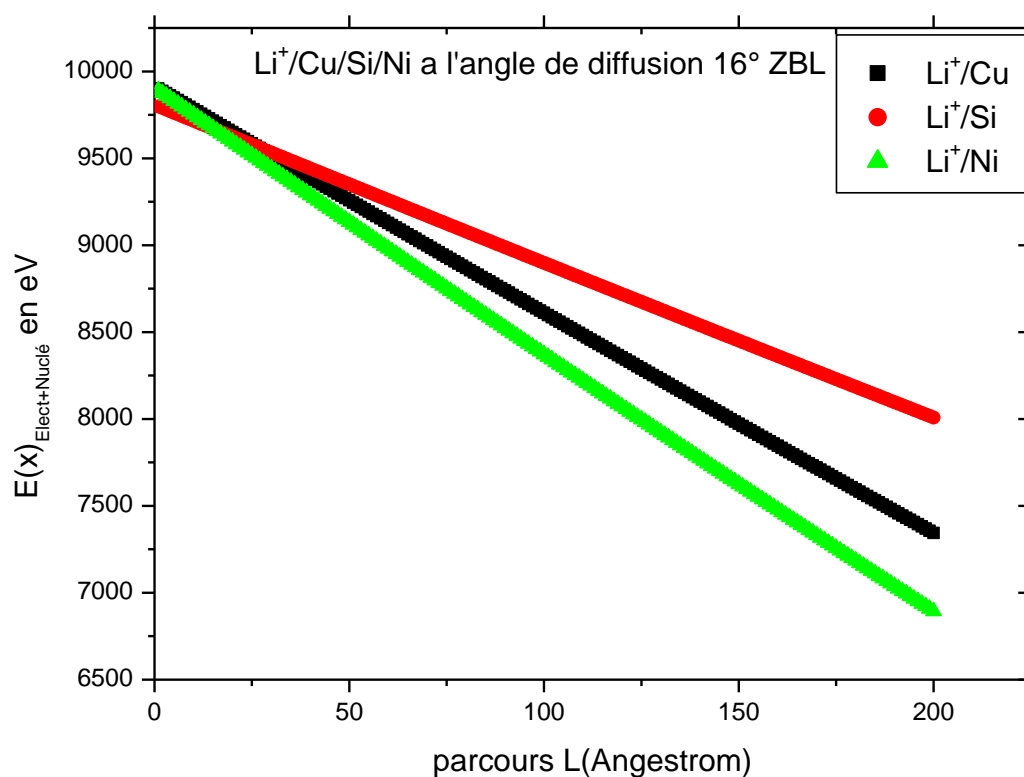


Figure III.9: Variation de la perte d'énergie(électronique + nucléaire) en fonction de la distance parcourue en Å pour le système Li⁺(0eV, 10keV)/Cu, Si et Ni, la charge Z de la cible variable , l' angle de diffusion fixé à 16°.

Dans le cas de la perte d'énergie électronique, nous remarquons, dans les deux cas de Li⁺/Cu et Li⁺/Si trois phases différentes dans le parcours : les valeurs obtenues pour Li⁺/Cu et Li⁺/Si sur [0 à 40 Å] sont différentes mais pratiquement identiques sur [40 Å à 140 Å] elles sont aussi différentes sur [140 Å à 200 Å] et plus faible que pour Li⁺/Ni. La diminution de E(x) pour Li⁺/Ni est plus forte que pour Li⁺/Si et Li/Cu. En effet dans le cas des cibles de Silicium

et de Cuivre et pour un parcours égal à 200 Å, la perte d'énergie est de l'ordre de 1.5 keV et pour le Ni de l'ordre de 2.6 keV.

Résultats et discussion

Dans le cas où les pertes d'énergie nucléaire et totale sont similaires, nous remarquons dans les deux cas de Li⁺/Cu et Li⁺/Ni deux phases différentes dans le parcours : les valeurs obtenues pour Li⁺/Cu et Li⁺/Ni sont pratiquement identiques sur [0 à 50 Å] mais différentes sur [50 Å à 200 Å] et plus grandes que pour Li⁺/Si. La diminution de E(x) de Li⁺/Cu et Li⁺/Ni est plus forte que pour Li⁺/Si. En effet dans le cas des cibles de Nickel et Cuivre, pour un parcours égal à 200 Å, la perte d'énergie est de l'ordre de 2.6 keV et pour le Si de l'ordre de 1.5 keV.

Par comparaison entre tous les systèmes (H⁺, He⁺ et Li⁺/Ni), (H⁺, He⁺ et Li⁺/Si) et (H⁺, He⁺ et Li⁺/Cu), nous remarquons que la perte d'énergie dans le potentiel ZBL est proportionnelle à la charge de l'ion incident, car quand la charge de l'ion (projectile) est grande, il pénètre dans la surface solide sur une longue distance.

III.4. L'effet de l'angle sur la perte d'énergie

Les figures III.10, III.11 et III.12 représentent les valeurs de la perte d'énergie de diffusion calculées pour le système H⁺/Cu, He⁺/Si et Li⁺/Ni respectivement, à différents angles en fonction du parcours L dans la cible. Ces résultats sont obtenus en considérant le potentiel d'interaction ZBL.

Résultats et discussion

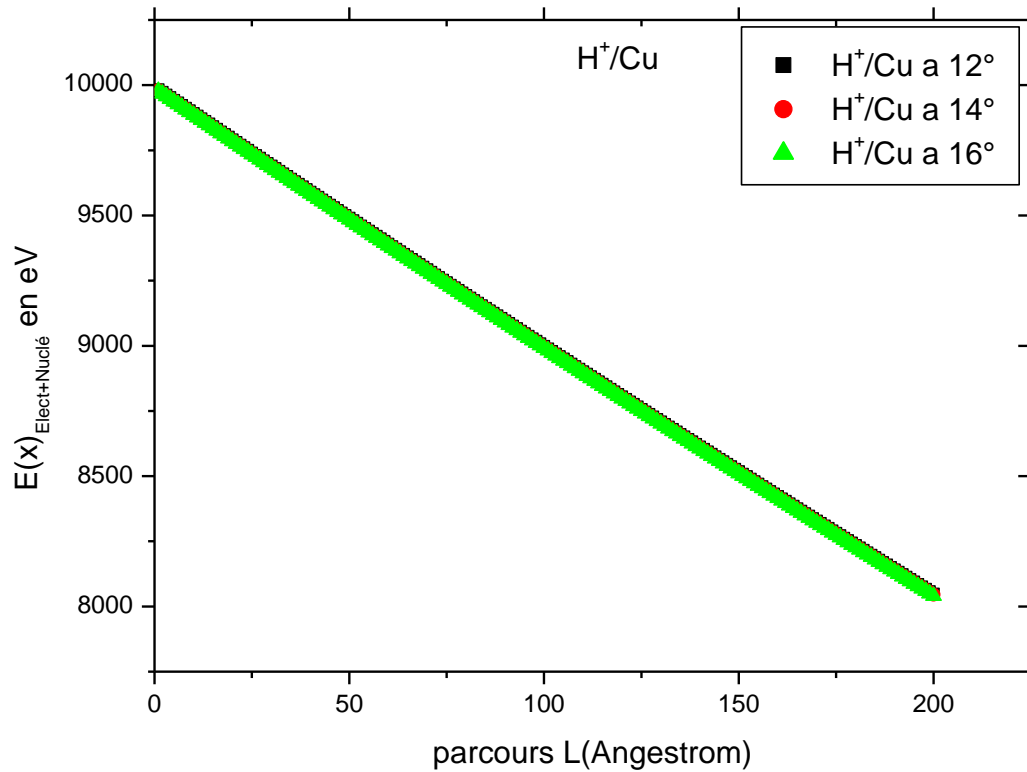


Figure III.10: Variation de la perte d'énergie(électronique + nucléaire) en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{H}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Cu}$, la charge Z de la cible fixée , les angles de diffusion sont 12° , 14° et 16° .

Résultats et discussion

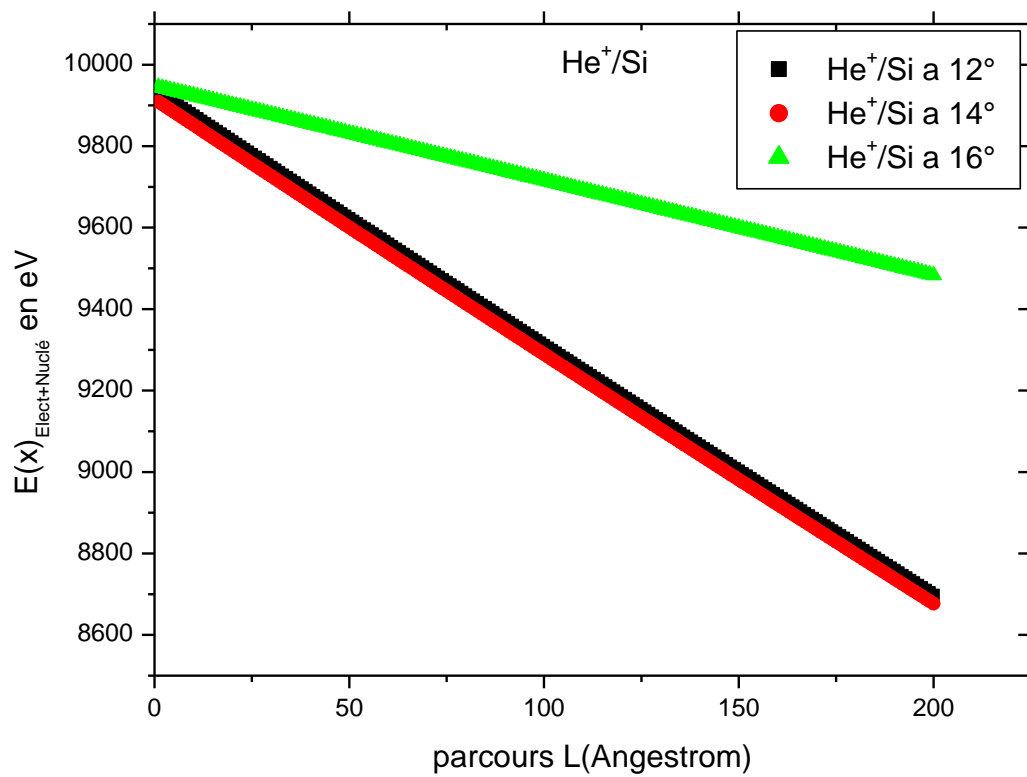


Figure III.11: Variation de la perte d'énergie(électronique + nucléaire) en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{He}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Si}$, la charge Z de la cible fixée, les angles de diffusion sont 12° , 14° et 16° .

Résultats et discussion

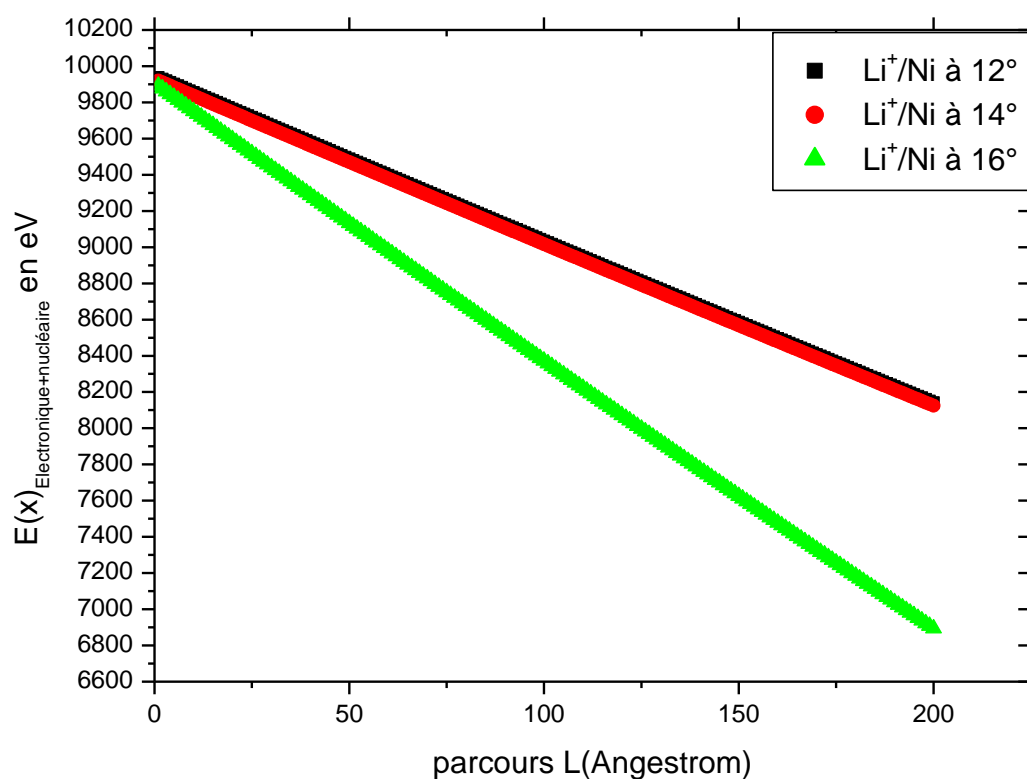


Figure III.12: Variation de la perte d'énergie (électronique + nucléaire) en fonction de la distance parcourue en Å pour le système $\text{Li}^+(0\text{eV}, 10\text{keV})/\text{Ni}$, la charge Z de la cible fixée, les angles de diffusion sont 12° , 14° et 16° .

Dans la figure III.10 Nous remarquons, dans les trois cas des angles différents que pour toute la distance de parcours les résultats de la perte d'énergie sont identiques à cause du faible écart entre les angles de diffusion. Aussi la perte d'énergie est plus forte.

Figure III.11 Nous remarquons, que la perte d'énergie pour les deux angles de diffusion à 12° et 14° est pratiquement identique. La diminution de $E(x)$ est plus forte que pour l'angle de 16° .

Figure III.12 : Nous utilisons les ions de Li^+ , l'atome de Lithium est un alcalin, nous remarquons que la perte d'énergie à angles de diffusion de 12° et 14° est plus faible, et

Résultats et discussion

pratiquement identiques. La perte d'énergie de diffusion à 16° est plus grande et la diminution de $E(x)$ est plus forte.

Par la comparaison entre les trois systèmes nous pouvons dire que la différence, est due la charge de l'ion incident : si elle est plus grande pour un angle petit, elle donne une perte d'énergie plus faible. Si la charge de l'ion incident est plus grande pour un angle grand la perte d'énergie est plus forte. Il y' a une relation inverse entre la charge de l'ion et l'angle de diffusion.

III.5. L'effet de différents potentiels (ZBL, TFM et LJ) sur la perte d'énergie

Dans ce travail, nous avons étudié les deux systèmes H^+/Cu et He^+/Si . Dans chaque cas, nous avons calculé la perte d'énergie totale du projectile dans la cible. Cette dernière est égale à la somme de la perte d'énergie électronique et le perte d'énergie nucléaire. Les valeurs de la perte d'énergie électronique ont été obtenues à partir de SRIM 2003. La perte d'énergie nucléaire peut être calculée, pour chaque potentiel, à partir d'un programme de langage fortran. Connaissant la variation de la perte d'énergie totale, en fonction de longueur parcourue, pour différents potentiel, il est possible de calculer la variation de l'énergie du projectile en fonction de la distance parcourue. Les figures III.13 et III.14 représentent cette variation pour les deux systèmes H^+/Cu et He^+/Si respectivement et pour les trois potentiels considérés dans cette étude.

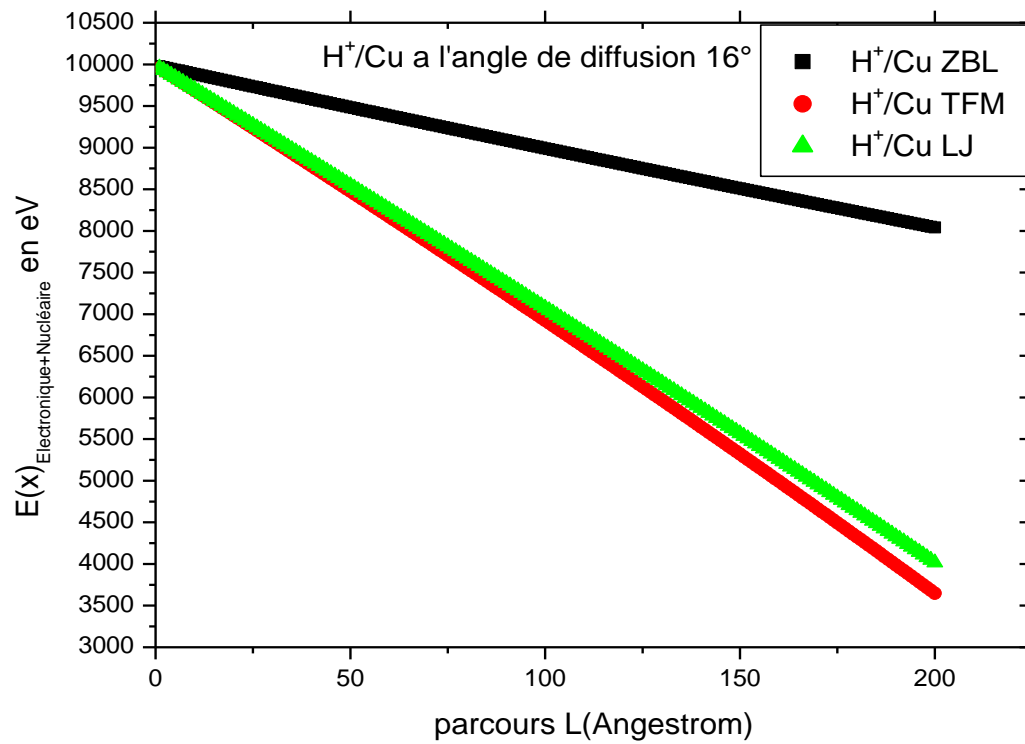


Figure III.13. Variation de la perte d'énergie en fonction de la distance parcourue dans la cible pour le système H⁺/Cu, pour les trois potentiels étudiés dans ce travail.

Résultats et discussion

Nous remarquons, pour les deux potentiels TFL et LJ et à faible parcours, que les valeurs obtenues pour H^+/Cu , sont pratiquement identiques et plus grandes que pour le potentiel ZBL.

Nous notons ici que, la perte d'énergie totale est plus importante dans les potentiels de TFM et LJ. Par conséquent, la diminution de $E(x)$ avec la distance parcourue est plus forte pour ces potentiels que pour le potentiel de ZBL.

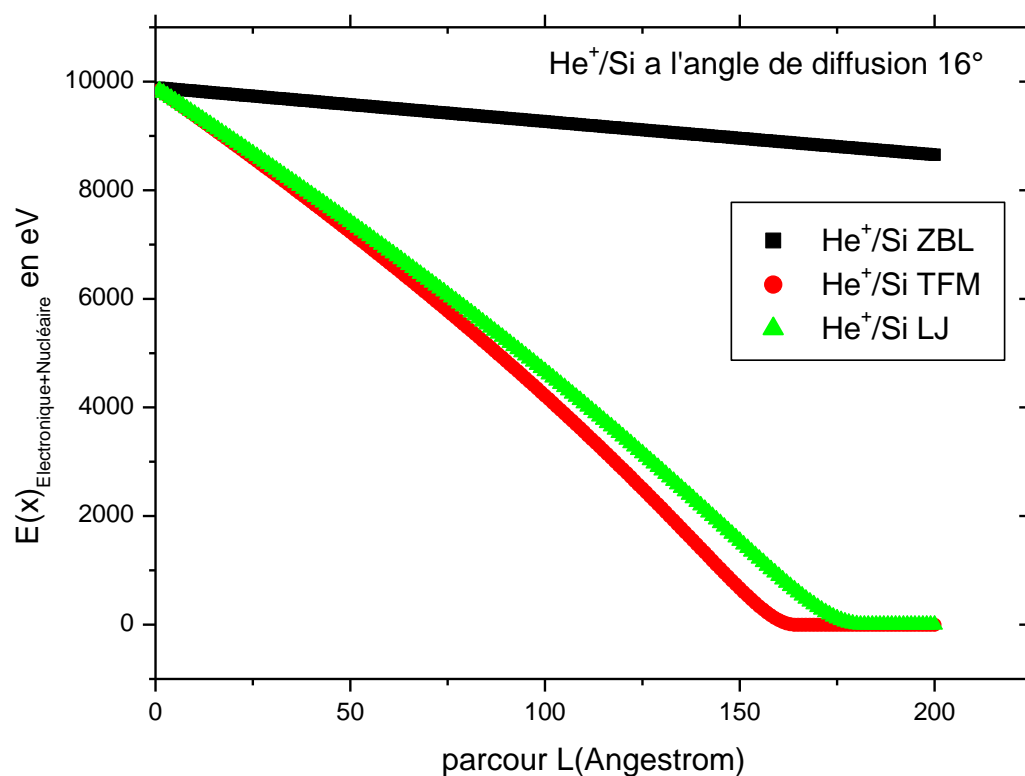


Figure III.14. Variation de la perte d'énergie en fonction de la distance parcourue dans la cible pour le système He^+/Cu , pour les trois potentiels étudiés dans ce travail.

Nous remarquons, dans les deux potentiels TFL et LJ à faible parcours, que les valeurs obtenues pour He^+/Si , sont pratiquement identiques et plus grandes que pour le potentiel ZBL. Pour les potentiels TFM et LJ la perte reste constante à partir d'épaisseur 160 Å et 175 Å respectivement.

La différence entre les deux systèmes (H^+/Cu et He^+/Si), est due à l'effet des différents potentiels sur la perte d'énergie.

III.6. L'effet de la charge de l'ion incident sur la perte d'énergie

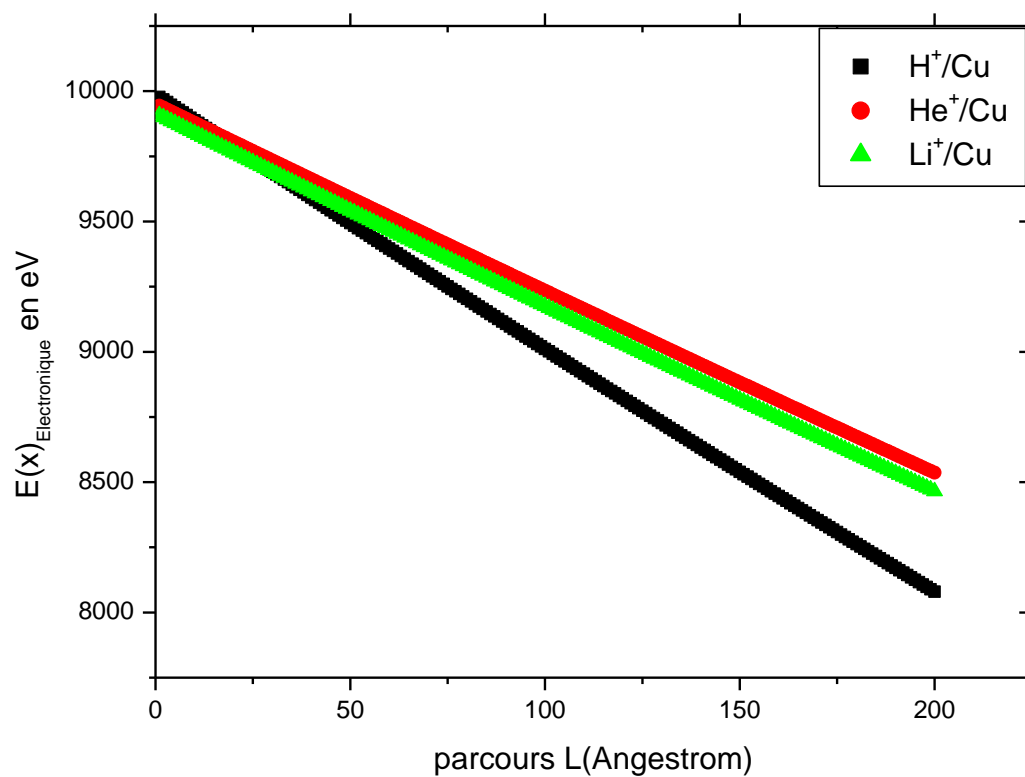


Figure III.15: Variation de la perte d'énergie électronique de diffusion en fonction de la distance parcourue en Å pour les systèmes He⁺(0eV, 10keV)/Cu, H⁺/Cu et Li⁺/Cu, la charge Z de l'ion incident variable, l'angle de diffusion fixé à 16°.

Résultats et discussion

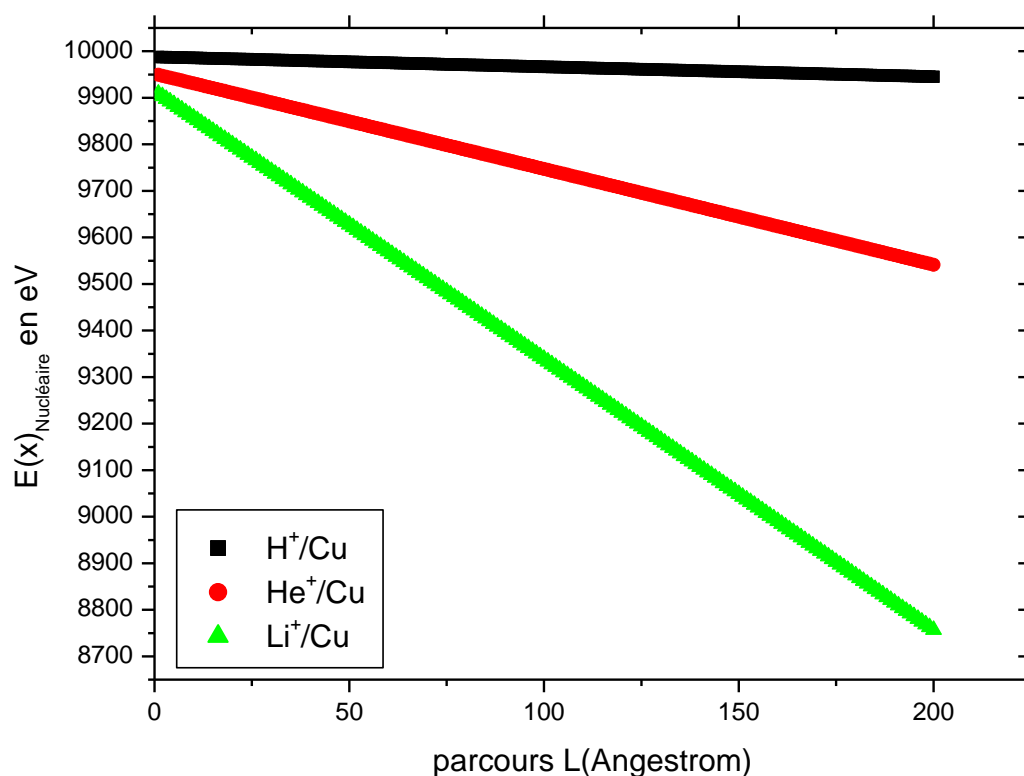


Figure III.16: Variation de la perte d'énergie nucléaire de diffusion en fonction de la distance parcourue en Å pour les systèmes $He^+(0eV, 10keV)/Cu$, H^+/Cu et Li^+/Cu , la charge Z de l'ion incident variable, l'angle de diffusion fixé à 16° .

Dans les figures III.15 et III.16. On utilise différents ions comme projectile et les mêmes cibles (He^+/Cu , H^+/Cu et Li^+/Cu), au même angle de diffusion. Pour les trois cas de la perte d'énergie électronique et nucléaire.

Dans le cas de la perte d'énergie électronique, nous remarquons, pour les deux cas et les faibles parcours que les valeurs obtenues sont pratiquement identiques. A partir de 100 Å les résultats de la perte d'énergie ne sont pas identiques et la diminution de $E(x)$ est plus forte. Mais pour la perte d'énergie nucléaire on remarque pour He^+/Cu et H^+/Cu , que la perte d'énergie est plus faible que pour Li^+/Cu ou elle décroît plus vite.

Résultats et discussion

Nous pouvons dire que cette différence est due à l'effet de la charge de l'ion incident. Dans la perte d'énergie électronique, quand la charge est grande la perte est petite et la diminution est plus forte. Donc, la perte d'énergie est inversement proportionnelle à la charge de l'atome incident. Mais pour la perte d'énergie nucléaire, quand la charge de l'ion incident est grande la perte est grande et sa diminution plus forte. Donc, la perte d'énergie est proportionnelle à la charge de l'ion incident.

Résultats et discussion

III.7. Conclusion

Nous avons présenté dans cette partie les résultats relatifs du potentiel d'interaction et l'effet des différents paramètres (charge et angle) sur la perte d'énergie en longueurs parcourues des particules diffusées pour les trois systèmes $\text{He}^+/\text{Cu}/\text{Si}/\text{Ni}$, $\text{H}^+/\text{Cu}/\text{Si}/\text{Ni}$ et $\text{Li}^+/\text{Cu}/\text{Si}/\text{Ni}$. Une seule gamme d'énergie et plusieurs angles de diffusion ont été considérés.

Dans une première étape, nous avons calculé le pouvoir d'arrêt de diffusion par trois potentiels ZBL, TFM et LJ.

Dans une deuxième étape, nous avons introduit le pouvoir d'arrêt dans les calculs de la perte d'énergie. Pour les faibles valeurs du parcours L , les valeurs de la perte d'énergie sont pratiquement identiques car dans cette région la perte d'énergie est faible et peut être négligée. Pour des parcours plus grands et angles de diffusions plus petits, les valeurs de la perte d'énergie deviennent plus fortes.

Pour différents potentiels, nous remarquons que la perte d'énergie des potentiels TFM et LJ est plus forte que pour le potentiel de ZBL.

Conclusion générale

Conclusion générale

Ce travail a porté sur l'étude de la diffusion d'ions de faible énergie de (quelques Kev), par une surface solide. Dans le but de mieux comprendre les processus physiques impliqués dans l'interaction d'un faisceau d'ions avec une surface solide, nous avons eu recours à la simulation numérique. Nous avons utilisé une méthode basée sur la résolution de potentiel d'interaction, qui a été initialement envisagée pour l'étude des particules transmises à travers une cible solide ayant une certaine épaisseur X . Ce modèle tient compte des collisions multiples qui sont importantes dans notre cas, il est basé sur l'approximation des collisions binaires et il est valable pour les faibles angles d'incidence et de diffusion. Nous avons calculé les pertes d'énergie de diffusion des ions en fonction de leur parcours.

En première étape nous avons calculé le pouvoir d'arrêt, après, nous avons introduit le pouvoir d'arrêt dans le calcul de la perte d'énergie. Pour les faibles valeurs du parcours L , les valeurs de $E(x)$ sont pratiquement identiques, car dans cette région, la perte d'énergie est faible et peut être négligée. Pour des parcours plus grands et dans le cas des cibles de Cu et Ni, les valeurs de $E(x)$ sont plus grandes que pour Si.

Dans ce travail, on a remarqué que la perte d'énergie est inversement proportionnelle à l'angle de diffusion et l'énergie incidente du faisceau d'ions est proportionnelle au numéro atomique de la cible et à la distance parcourue.

Le problème majeur de cette méthode réside dans le calcul de la perte d'énergie de diffusion $E(x)$ pour l'injection des coefficients d'ajustement polynomial. .

Pour des parcours plus grands et angles de diffusions plus petits, les valeurs de la perte d'énergie deviennent plus grandes et ses diminutions plus fortes.

Pour différentes potentiels, nous remarquons que la perte d'énergie des potentiels TFM et LJ est plus grande et plus forte que pour le potentiel de ZBL.

Références

Références

- [1] H. Narmann and W. Heiland. E. Tagluar, Surf. Sci. Rep. 17(1993) 213.
- [2] M.T. Robinson, I.M. Torrens, Phys. Rev. B 9 (1994) 5008.
- [3] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, The Stopping and Ranges of Ions in Solids Interaction. Pergamon Press. New York 1985.
- [4] J. Lindhard, M. Scharff, Phys. Rev. 124 (1961) 128.
- [5] J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schiott, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Sels. 33 (1963) 14.
- [6] D.P. Jackson, W.Heiland and E.Tglauer, Phys. Rev. B 24 (1981) 4198.
- [7] D.P. Jackson, W.Heiland and E.Tglauer, Phys. Rev. B 24 (1981) 4198.
- [8] Overbury. S.H, Nucl.Instr.Meth. B 27 (1987) 65.
- [9] H. Niehus and E. Preuss, Surf. Sci. 119 (1982) 349.
- [10] W. Eckstein, V.A. Molchanov and H. Verbeek. Nuc. Inst. Meth 149 (1978) 599.
- [11] V.L Moruzzi, J.F. Janak and A.R. Williams, Calculations of Electronic properties in metals (Pergamon Press, New York, 1978).
- [12] P.T.Wedephol, "Augmented n Press, New York (1967).
- [13] A.Bohr, Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd. 18,N°8(1948).
- [14] J.P.Biersack and J.F. Ziegler, Nucl. Inst. And Meth, 194 (1982) 722.
- [16] E.Fermi and E. Teller, Phys. Rev. 72 (1947) 399 et C.kitel, Introduction à la physique de l'Etat Solide, Dunod, P. 278.
- [17] W. Lenz, Z.F. Physik 77 (1932) 713. ; H Jensen, Z. F . Physik 77(1932)722.
- [18] G.Moliere, Z.F. Naturforsch A 2 (1947) 133.
- [19] J. Lindhard and M. Scharff, Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd. 27 N°15(1953) et F. Bloch, Z. Phys., 81 (1933)363.
- [20] J.A. Yarmoff, Y. Yang, G.F. Lui, X. Chen, Z. Roubek, Vaccum 73 (2004) 25.
- [21] R. Souda et M. Aono, Nucl. Instr. and Meth. B 15 (1986) 114.

[22] J.F. Ziegler, <<SRIM2003>>, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B, 219-220(1-4), pp.1027-1036(2004).

[23] W. Moeller et W. Eckstein, <<Tridyn – A TRIM simulation code including dynamic composition changes.>>, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B, 230(1983).

[24] H. Faik-Etienne, << étude de l'implantation ionique dans les miroirs multicouches mo/si : applications aux optiques diffractives.>> thèse de doctorat, université Toulouse, France, 20005.