

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
 MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
 SCIENTIFIQUE



جامعة سعد دحلب البليدة
 UNIVERSITE SAAD DAHLEB DE BLIDA
 FACULTE DES SCIENCES
 DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du Diplôme de

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Matière et Rayonnement

Par : Laidouci Abd El Moumene

Thème

**Effet de la perte d'énergie sur la probabilité de diffusion
 d'ions par une surface solide à basse énergie**

Soutenu publiquement le 28 /06 /2016 devant le jury composé de :

M.A. Benamar	Professeur à l'USDB	Président
L. Baba Ahmed	Maître de conférences à l'USDB	Examinatrice
M. Benrekia	Maître assistant à l'USDB	Promoteur

Remerciements

Louange et infinis remerciements au bon Dieu qui nous a fourni la force d'agir et la consistance à parcourir.

- ❖ je tiens à exprimer ma profonde gratitude au promoteur Monsieur **M. Benrekia**, maître assistant à l'Université Saâd Dahlab de Blida, pour avoir accepté la charge d'encadrer ce travail. pour les conseils et les observations qui été une aide bénéfique.
- ❖ Je tiens à remercier Monsieur, le président de membre de jury : **M^r M.A. Benamar** Professeur à l'Université Saâd Dahlab de Blida, à l'effort de l'encouragement et de suivre le sujet avec une sincérité et ouvrir une porte pour la recherche scientifique.
- ❖ Je tiens à remercier **M^{me} L. Baba Ahmed**, Maître de conférences à l'Université Saâd Dahlab de Blida, pour avoir accepté la chargée d'examiner ce travail. et aussi pour les conseils et les observations avec une sincérité.
- ❖ Je tiens à remercier tous les enseignants qui consacrent leurs efforts à enseigner cette discipline.

Laidouci . @

Résumé :

Nous nous intéressons dans ce travail au calcul de la probabilité de diffusion d'ions lents (quelques Kev) par une surface solide, ce calcul est basé sur la résolution de l'équation de Boltzmann dans la théorie de transport. Dans ce modèle valable pour les faibles angles de diffusion, les collisions sont binaires et la distribution des centres diffuseurs dans la cible est homogène, ce travail est pour but l'étude de l'effet de la perte d'énergie sur la probabilité de diffusion d'ions par une surface solide à basse énergie. Nous avons décrit l'interaction projectile-atome cible par un potentiel coulombien écranté proposé par Zigler - Birsack – Littmark potentiel (ZBL), Nous avons considéré les systèmes He+/Si et He+/Ni pour différentes valeurs de l'énergie incidente des projectiles .Différentes valeurs de l'angle de diffusion ont été étudiées. Dans une première étape, nous avons calculé ΔP_1 la probabilité de diffusion en négligeant la perte d'énergie du projectile dans la cible .Cependant, pour les grandes valeurs du parcours dans la cible, la perte d'énergie devient importante et donc non négligeable . Nous avons ainsi calculé la probabilité de diffusion ΔP_2 en tenant compte de cet effet .En calculant la correction relative apporté à la probabilité de diffusion, nous avons montré qu'elle dépend inversement à l'énergie incidente et l'angle de diffusion et proportionnellement au numéro atomique de la cible et de distance parcourue.

Abstract :

We are interested in this work to calculate the probability distribution of slow ions (few keV) with a solid surface, this calculation is based on solving the Boltzmann equation in the transport theory. In this model valid for small scattering angles, collisions are binary and distribution of scatterers in the target is homogeneous, this work is intended to study the effect of power loss on the probability distribution ion by a low energy solid surface. We described the projectile-atom target interaction by Coulomb screened potential offered by Zigler - Birsack - potential Littmark (ZBL) We considered systems He+ / Si and He+ / Ni for different values of incident energy projectiles. different scattering angle values were studied. In a first step, we calculated the probability distribution ΔP_1 neglecting the energy loss of the projectile into the target .However, for large values of the course in the target, the energy loss becomes significant and therefore not negligible. We calculated the probability distribution ΔP_2 taking into account this effect. In calculating the relative correction made to the probability distribution, we have shown that it depends inversely to the incident energy and the scattering angle and in proportion to atomic number of the target and distance traveled.

ملخص :

نحن في هذا العمل مهتمون بحساب التوزيع الاحتمالي لأيونات بطيئة (قليل من كيلو الكترون فولط) مع سطح صلب، ويستند هذا الحساب على حل معادلة بولتزمان في نظرية النقل. في هذا النموذج صحيحة لزوايا نثر صغيرة، التصادمات الثنائية وتوزيع عدسات في الهدف متجانس، ويهدف هذا العمل إلى دراسة تأثير فقدان الطاقة على التوزيع الاحتمالي لأيون من قبل سطح صلب لطاقة المنخفضة. وصفنا تفاعل قذيفة- ذرة بكمون كولومبي مضطرب مقترح من زيغلر و بيرسك و ليتمارك . لقد درسنا أنظمة (ايون هيليوم / سيلسيوم و ايون هيليوم / نيكل) لقيم مختلفة من طاقة القذيفة و تمت دراسة مختلف القيم زاوية التشتت. في خطوة اولى حسبنا التوزيع الاحتمال مع إهمال فقدان الطاقة من الجسم المقذوف ومع ذلك، من أجل قيم كبيرة لمسار القذيفة داخل الهدف . يصبح فقدان الطاقة مهم ولا يمكن اهماله. و حسبنا ايضا التوزيع الاحتمالي مع الأخذ بعين الاعتبار هذا التأثير. وفي حساب التصحيح النسبي التي أجريت على التوزيع الاحتمالي، ، لقد أظهرنا أنها تعتمد عكسيا على طاقة القذيفة وزاوية تشتت و تتناسب مع العدد الذري لهدف و المسافة المقطوعة لقذيفة في الهدف.

Table des matières

Introduction Générale.....	8
-----------------------------------	----------

Chapitre I : Notions fondamentales sur l'interaction ion-surface solide à basse énergie

1-1/ Introduction.....	10
1-2/ Cinématique de la collision élastique.....	11
1-3/ Potentiel d'interaction	14
1-4/ Section efficace de diffusion	15
1-5/ Perte d'énergie des Ions dans la cible	
1-5-1/Perte d'énergie élastique	18
1-5-2/Perte d'énergie inélastique	19
1-6/ Diffusions multiples	20

Chapitre II : Description du modèle de simulation Utilisé pour le calcul de la probabilité de diffusion

2-1/ Introduction	21
2-2/ Théorie de transport pour le calcul de la fonction de distribution	22
2-3/ Théorie de transport pour le calcul de la probabilité de diffusion (ΔP_1).....	25
2-4/ Théorie de transport pour le calcul de la probabilité de diffusion (ΔP_2).....	27
2-5/ Procédure numérique	30

Chapitre III : Résultats et discussion

3-1/Introduction.....	32
3-2/ Calcul de la probabilité de diffusion (ΔP_1).....	33
3-3/ Calcul de la probabilité de diffusion (ΔP_2).....	44
3-3-1/ Perte d'énergie totale	45
3-3-2/ Correction relative	56
3-3-3/ Conclusion.....	66
Conclusion générale.....	67
Références.....	69

Liste des figures :

Figure 1.1 : Diffusion d'ions lents par une surface solide.

Figure 1.2 : Schéma représentant une collision binaire entre deux particules de masses M_1 et M_2 dans les deux systèmes: (a) système du laboratoire et (b) système du centre de masse.

Figure 1.3 : Variation de la fonction d'écran en fonction du rapport (r/a) pour le potentiel (ZBL)

Figure 1.4 : Section efficace de diffusion dans le système du centre de masse.

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

Figure 2.2 : Définition des paramètres géométriques utilisés dans le calcul.

Figure 2.3 : Variation de la perte d'énergie totale $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{tot}$ en fonction de l'énergie incidente pour le potentiel ZBL et pour les deux systèmes He^+/Ni et He^+/Si .

Figure 2.4 : Variation de l'énergie du projectile en fonction du parcours dans la cible pour le potentiel ZBL et pour les deux systèmes $\text{He}^+(4 \text{ keV})/\text{Ni}$ et $\text{He}^+(4 \text{ keV})/\text{Si}$.

Figure 2.5 : Variation de l'énergie de la particule incidente avec le parcours dans la cible.

Figure 3.1 à 3.12 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1,2,4,10 \text{ keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\alpha = (5; 6)^\circ$ et $\alpha = (10; 12; 14)^\circ$.

Figure 3.13 à 3.22 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1,2,4 \text{ keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\alpha = (5; 6)^\circ$ et $\alpha = (10; 12; 14)^\circ$ pour système 10 Kev ($\alpha=5^\circ / \alpha=10^\circ$).

Figure 3.23 : Variation de la perte d'énergie totale en fonction de l'énergie du projectile pour le système He^+/Ni et pour le potentiel ZBL.

Figure 3.24 : Variation de la perte d'énergie totale en fonction de l'énergie du projectile pour le système He^+/Si et pour le potentiel ZBL.

Figure 3.25 : $E(X)$ pour le système (He^+/Ni) avec $E=4\text{Kev}$.

Figure 3.26 : $E(X)$ pour le système (He^+/Si) avec $E=4\text{Kev}$.

Figure 3.27 ;3.28 ;3.32 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 ;2 ;4 \text{ keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\alpha = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.29 ;3.30 ;3.31 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 ;2 ;4 \text{ keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\alpha = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.33 ; 3.35 ; 3.37: Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 ; 2 ; 4 \text{ keV})/\text{Ni}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.34 ; 3.36 ; 3.38: Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 ; 2 ; 4 \text{ keV})/\text{Si}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.39 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 \text{ keV})/\text{Ni}$ et pour le potentiel ZBL. L'angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 14^\circ$.

Figure 3.40: Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 \text{ keV})/\text{Ni}$ et pour le potentiel ZBL. L'angle d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 6^\circ$, $\alpha = 12^\circ$.

Figure 3.41 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 \text{ keV})/\text{Si}$ et pour le potentiel ZBL. L'angle d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 14^\circ$.

Figure 3.42 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 \text{ keV})/\text{Si}$ et pour le potentiel ZBL. L'angle d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 6^\circ$, $\alpha = 12^\circ$.

Figure 3.43 : variation de la correction relative (\mathcal{T}_C) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Ni) de l'énergie $E = 1 \text{ keV}$ pour $\alpha = 14^\circ$.

Figure 3.44 : variation de la correction relative (\mathcal{T}_C) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Ni) de l'énergie $E = 1 \text{ keV}$ pour $\alpha = 12^\circ$.

Figure 3.45 : variation de la correction relative (\mathcal{T}_C) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Ni) de l'énergie $E = 1 \text{ keV}$ pour $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.46 : variation de la correction relative (\mathcal{T}_C) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Si) de l'énergie $E = 1 \text{ keV}$ pour $\alpha = 14^\circ$.

Figure 3.47 : variation de la correction relative (\mathcal{T}_C) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Si) de l'énergie $E = 1 \text{ keV}$ pour $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.48 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Si) de l'énergie $E = 1 \text{ keV}$ pour $\alpha = 12^\circ$.

Figure 3.49 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Ni) de l'énergie $E = 2 \text{ keV}$ pour $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.50 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Si) de l'énergie $E = 2 \text{ keV}$ pour $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.51 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Ni) de l'énergie $E = 4 \text{ keV}$ pour $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.52 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Si) de l'énergie $E = 4 \text{ keV}$ pour $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.53 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de l'énergie incidente pour le système (He^+/Ni), pour $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.54 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de l'énergie incidente pour le système (He^+/Si), pour $\alpha = 10^\circ$.

Figure 3.55 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de l'angle de diffusion, pour le système (He^+/Ni), pour $\alpha = 10^\circ, 14^\circ$.

Figure 3.56 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de l'angle de diffusion, pour le système (He^+/Si), pour $\alpha = 10^\circ, 14^\circ$.

Figure 3.57 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de Z (cible), pour le système ($\text{He}^+/\text{Ni}, \text{Si}$), pour $\alpha = 10^\circ$ et $E = 1 \text{ keV}$.

Figure 3.58 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de Z (cible), pour le système ($\text{He}^+/\text{Ni}, \text{Si}$), pour $\alpha = 10^\circ$ et $E = 2 \text{ keV}$.

Figure 3.59 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de Z (cible), pour système le ($\text{He}^+/\text{Ni}, \text{Si}$), pour $\alpha = 10^\circ$ et $E = 4 \text{ keV}$.

Introduction générale

Introduction générale

Dans plusieurs domaines de la physique, l'étude des collisions entre des particules chargées et des cibles solides représente un intérêt aussi bien fondamental que pratique pour la compréhension de nombreux phénomènes.

La particularité des ions de basse énergie (quelques keV), associée à leur faible profondeur de pénétration dans le solide, suscite un intérêt croissant, notamment dans le domaine de l'analyse de surface, en ouvrant de nouvelles perspectives de structuration des surfaces à l'échelle de quelques Angströms [1, 2].

Lorsqu'un faisceau d'ions mono-énergétiques bombarde une cible solide, une partie de l'énergie incidente est transférée aux atomes de la cible, ce qui peut engendrer différents phénomènes [3] : diffusion d'ions, implantation ionique, rétrodiffusion, réactions nucléaires, émission de particules secondaires (électrons, atomes ou molécules sous forme d'ions ou des particules neutres), création de défauts dans le solide etc, tous ces processus se produisent avec des probabilités associées, et chaque phénomène prend une portion de la probabilité globale qui dépend de la caractéristique des particules chargées incidentes et des atomes de la cible.

Il existe trois principales techniques de simulation numérique des collisions atomiques dans les solides [4] :

- * 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. Mais lorsque l'énergie du projectile devient plus faible, il est nécessaire de tenir compte de l'interaction du projectile avec plusieurs atomes cible à la fois [4].

Le code TRIM [5] 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. Nous calculons la probabilité de diffusion d'ions lents par une surface solide. Ce calcul est basé sur la résolution de l'équation de Boltzmann dans la théorie de transport [6].

Introduction générale

L'interaction projectile-atome cible est décrite en utilisant le potentiel coulombien écranté proposé par Ziegler et al [7] (potentiel ZBL).

L'objectif principal de ce travail est d'étudier l'effet de la perte d'énergie sur la probabilité de diffusion calculée dans le cadre de la théorie de transport.

Dans cette étude, nous avons considéré les cas suivants :

* Premier cas : le système He^+/Ni pour différentes valeurs de l'énergie incidente.

* Deuxième cas : le système He^+/Si pour différentes valeurs de l'énergie incidente.

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, la perte d'énergie et les collisions multiples).

Le deuxième chapitre sera consacré à la description du modèle de simulation utilisé dans notre travail pour le calcul de la probabilité de diffusion d'un ion par une surface solide. Nous décrivons également la méthode numérique permettant de calculer cette probabilité de diffusion.

Nous présenterons dans le dernier chapitre les résultats obtenus. Il s'agit des probabilités de diffusion en fonction de longueurs parcourues, en négligeant et en tenant compte de la perte d'énergie dans la cible, en considérant le potentiel de (ZBL) pour les deux systèmes He^+/Ni et He^+/Si et pour trois valeurs de l'énergie incidente : $E_0=1\text{KeV}$, $E_0=2\text{KeV}$ et $E_0=4\text{KeV}$. Différentes valeurs de l'angle de diffusion sont considérées.

Dans le but de montrer l'effet de la perte d'énergie sur la probabilité de diffusion, nous présenterons également la variation de la correction relative apportée à la probabilité de diffusion en fonction des longueurs parcourues pour différents systèmes, énergies et géométries.

Nous discuterons tous les résultats obtenus et nous résumerons l'essentiel de notre travail dans la conclusion générale.

CHAPITRE 1

Notions fondamentales sur l'interaction ion-surface solide à basse énergie

1.1 Introduction :

L'étude de la diffusion de particule de basse énergie par des surfaces solides, fait appel à la fois à l'expérience et à la simulation numérique pour comprendre les processus fondamentales d'interaction entre la particule incidente et le solide.

Un faisceau d'ions de faible énergie (quelques keV) est envoyé sur une cible solide (Voir figure 1.1), λ est l'angle d'incidence et α l'angle de diffusion. Les particules diffusées sont ensuite analysées en angle, en énergie et en état de charge. L'énergie du projectile est déterminée à partir de la mesure du temps de vol.

« Le temps de vol est le temps que met la particule diffusée pour parcourir la distance cible-détecteur » [8].

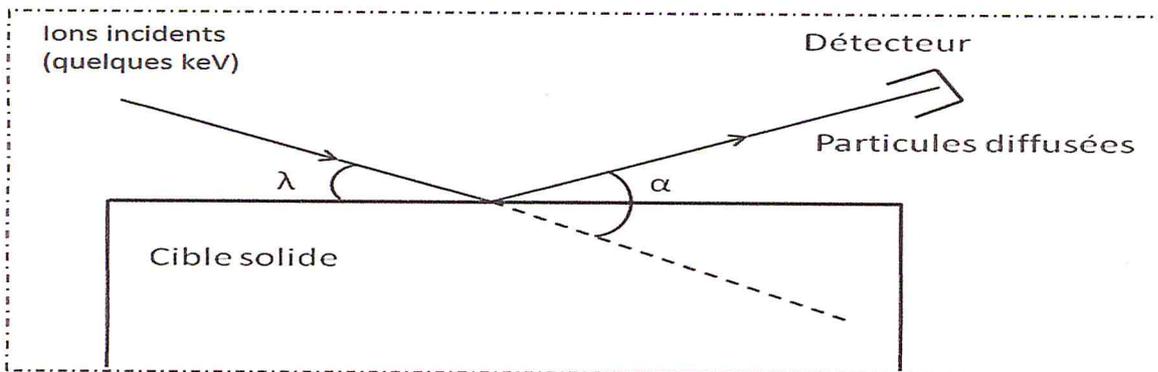


Figure 1.1 : Diffusion d'ions lents par une surface solide

Lors de l'interaction ion-surface solide à faible énergie (quelques keV), le mécanisme de la collision peut être décrit en effectuant un traitement classique. Ceci est

justifié par le fait que la longueur d'onde de Broglie $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2M_1E_0}}$ (où h est la constante de

Planck), est toujours plus petite devant les dimensions des caractéristiques de l'interaction (espace inter-atomique la distance minimale d'approche, paramètre d'impact). M_1 et E_0 sont, respectivement, la masse et l'énergie de l'ion incident.

1.2 Cinématique de la collision élastique :

Nous considérons un système formé de deux particules et dont l'interaction est décrite par un potentiel $V(r)$.

Dans le référentiel du laboratoire, le projectile de masse M_1 , a la vitesse V_1 . et l'atome cible de masse M_2 est au repos ($V_2=0$). Soient φ l'angle de diffusion du projectile et Θ l'angle de recul de l'atome cible après la collision (voir figure 1.2.a).

Pour simplifier l'étude de la collision et réduire les paramètres entre ces deux particules, nous travaillerons dans le système du centre de masse où ce problème sera ramené à l'étude d'une particule fictive de masse $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ et soumise au potentiel $V(r)$ (voir figure 1.2.b). b et θ représentent respectivement le paramètre d'impact et l'angle de diffusion dans le centre de masse.

Donc la diffusion est traitée dans le cadre du problème de Képler.

En appliquant les règles de conservation de l'énergie cinétique et de la quantité de mouvement lors de la collision, l'énergie de la particule diffusée E_1 est calculée comme suit :

$$E_1 = K(\varphi, A).E_0 \quad (1.1)$$

$K(\varphi, A)$ est le facteur cinématique défini comme suit :

$$K(\varphi, A) = \left[\frac{\cos \varphi \pm \sqrt{A^2 - \sin^2 \varphi}}{1 + A} \right]^2 \quad (1.2)$$

où :

$A = \frac{M_2}{M_1}$ et E_0 est l'énergie initiale du projectile.

L'énergie de recul de l'atome cible E_2 est donnée par la relation suivante:

$$E_2 = \cos^2 \Theta \left[\frac{4A}{(1+A)^2} \right] E_0 \quad (1.3)$$

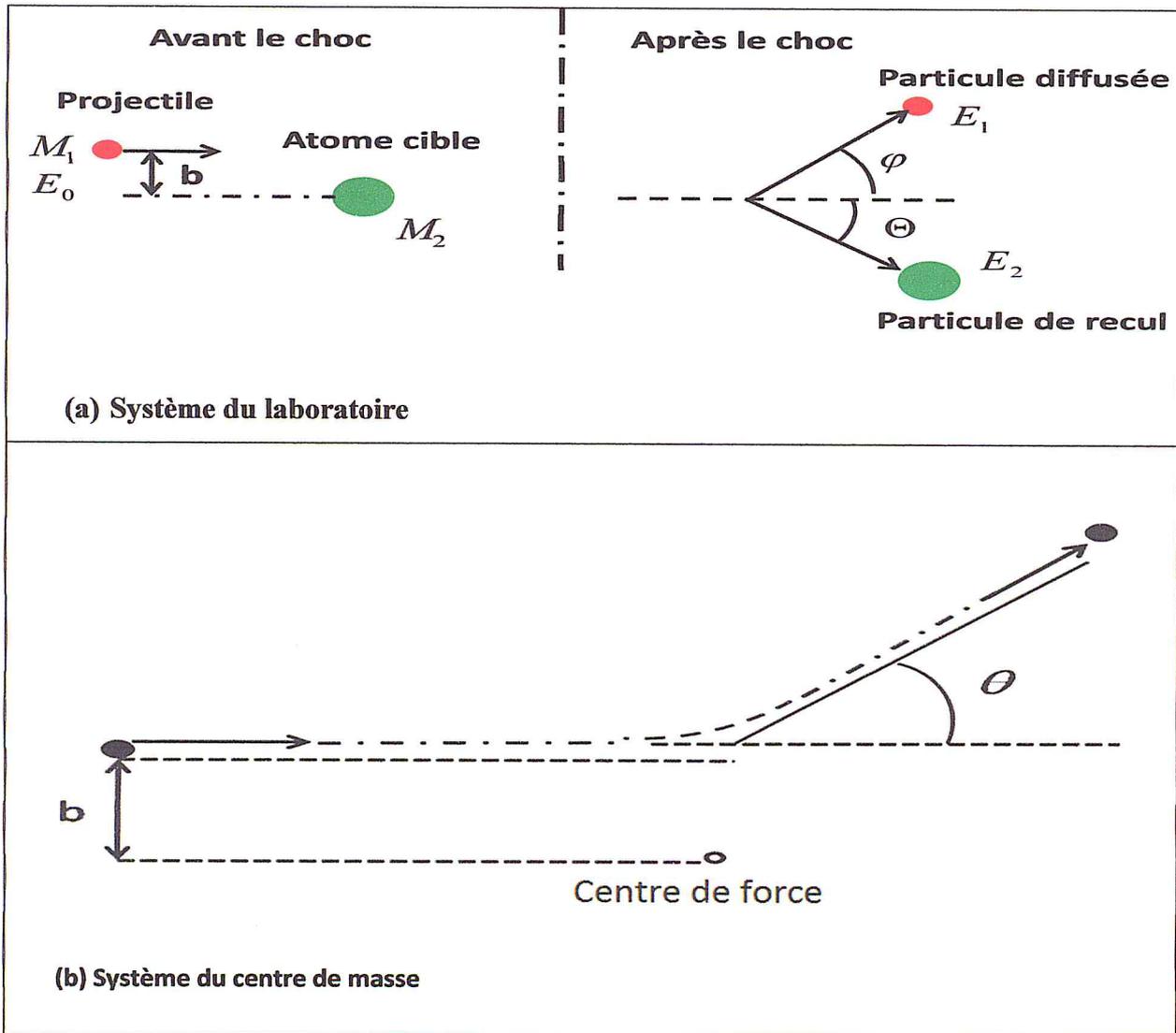


Figure 1.2 : Schéma représentant une collision binaire entre deux particules de masses M_1 et M_2 dans les deux systèmes: (a) système du laboratoire et (b) système du centre de masse

L'énergie dans le système du centre de masse est donnée par :

$$E_{cdm} = \frac{E_0 M_2}{M_1 + M_2} \quad (1.4)$$

L'angle de diffusion θ , dans le référentiel du centre de masse, peut être déterminé par application des lois de conservation de l'énergie cinétique et du moment cinétique [9] :

$$\theta = \pi - 2b \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_{cdm}} - \frac{b^2}{r^2}}} \quad (1.5)$$

où :

$V(r)$ est le potentiel décrivant l'interaction entre les deux particules.

r est la distance entre les deux particules.

r_{\min} est la distance minimale d'approche. Cette valeur est déterminée à partir de la résolution de l'équation suivante :

$$\frac{V(r_{\min})}{E_{cdm}} = \left(1 - \frac{b^2}{r_{\min}^2} \right) \quad (1.6)$$

Les angles de diffusion φ et de recul Θ , définis dans le référentiel du laboratoire, peuvent être exprimés en fonction de l'angle de diffusion θ défini dans le référentiel du centre de masse, par les relations suivantes :

$$\tan \varphi = \frac{\sin \theta}{\left(\frac{M_1}{M_2} + \cos \theta \right)} \quad (1.7)$$

$$\Theta = 0.5(\pi - \theta) \quad (1.8)$$

1.3 Potentiel d'interaction :

Lorsqu'un ion, de numéro atomique Z_1 , pénètre dans un solide, il interagit avec les atomes du milieu (la cible), de numéro atomique Z_2 , par le biais d'un potentiel coulombien réduit par un effet d'écrantage dû à la présence des électrons.

Ce potentiel coulombien écranté s'écrit sous la forme :

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

Où :

e est la charge de l'électron.

a est le rayon d'écran.

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

Plusieurs formes de la fonction d'écran ont été proposées ; parmi les plus utilisées, nous citons

celle proposée par Ziegler, Biersack et Littmark [7], qui s'écrit :

$$\chi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^4 \alpha_i \exp\left(-\beta_i \frac{r}{a}\right) \quad (1.10)$$

Le potentiel de Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) [7] qui est appelé également le potentiel universel.

Les paramètres α_i et β_i sont appelés constantes d'ajustement.

	α_1	α_2	α_3	α_4	β_1	β_2	β_3	β_4
ZBL	0.18175	0.50986	0.28022	0.028171	3.1998	0.94229	0.4029	0.216

Tableau 1.1 : Valeurs des constantes d'ajustement pour le potentiel ZBL [7].

Le rayon d'écran pour le potentiel de ZBL s'écrit comme suit [7] :

$$a_{ZBL} = \frac{0.88534}{(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} a_0 \quad (1.11)$$

où a_0 est le rayon de Bohr ($a_0 = 0.5292 \text{ \AA}$).

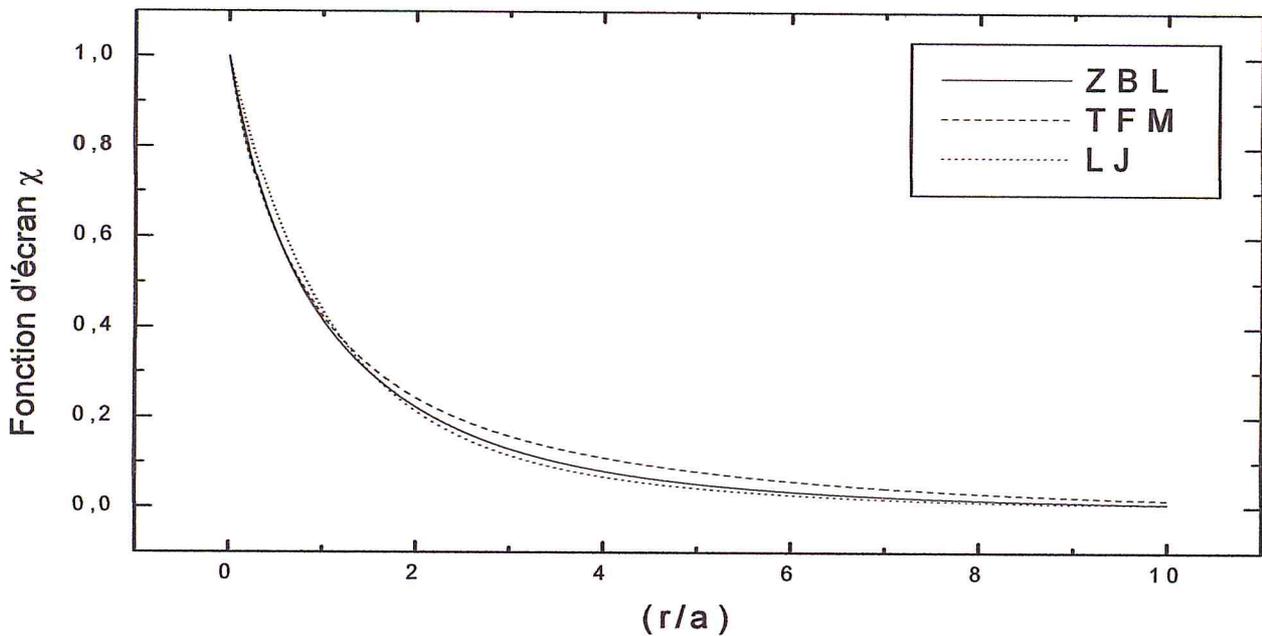


Figure 1.3 : Variation de la fonction d'écran en fonction du rapport (r/a) pour les trois potentiels considérés [4]

1.4 Section efficace de diffusion (élastique) :

La section efficace de diffusion est une grandeur importante dans la description de l'interaction ion-surface solide. Elle correspond à la probabilité de diffusion du projectile dans un angle solide correspondant à un angle de diffusion compris entre θ et $\theta + d\theta$ (voir figure 1.4). Elle s'écrit en fonction du paramètre d'impact b comme suit:

$$d\sigma = 2\pi b db \quad (1.13)$$

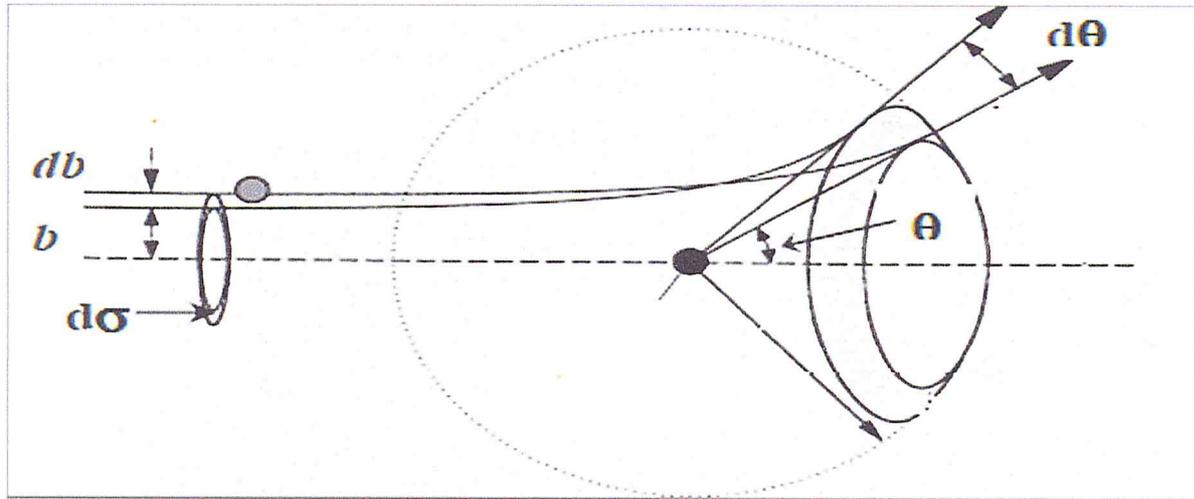


Figure 1.4 :Section efficace de diffusion dans le système du centre de masse

Lindhard et al [10] ont proposé une expression simplifiée de la section efficace différentielle de diffusion en utilisant les paramètres réduits :

$$d\sigma(t^{1/2}) = \pi a^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \quad (1.14)$$

où :

$f(t^{1/2})$ est la fonction universelle de diffusion qui est donnée par [6]:

$$f(t^{1/2}) = \lambda_0 t^{1/2-m} [1 + (2\lambda_0 t^{1-m})^q]^{-1/q} \quad (1.15)$$

(f) dépend de la forme de la fonction d'écran choisie.

$$t^{1/2} = \varepsilon \sin \frac{1}{2}\theta \quad (1.16)$$

ε est l'énergie réduite dont l'expression est la suivante :

$$\varepsilon = \frac{aM_2}{Z_1Z_2e^2(M_1 + M_2)} E_0 \quad (1.17)$$

θ : angle de diffusion dans le référentiel du centre de masse.

M_1 : masse de l'ion incident.

M_2 : masse de l'atome cible.

Z_1 : numéro atomique de l'ion incident.

Z_2 : numéro atomique de l'atome cible.

E_0 : énergie de la particule incidente.

e : charge de l'électron.

a : rayon d'écran .

Dans la limite des petits angles, nous avons [6] :

$$t^{1/2} = \tilde{\varphi} = \frac{E_0 a}{2Z_1 Z_2 e^2} \varphi \quad (1.18)$$

L'angle solide s'écrit :

$$d\Omega = 2\pi \varphi d\varphi \quad (1.19)$$

En utilisant les deux dernières expressions (1.18) et (1.19), nous pouvons déduire l'expression suivante de la section efficace différentielle de diffusion :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2Z_1 Z_2 e^2 a}{E_0 \varphi^3} f(t^{1/2}) \quad (1.20)$$

1.5 Perte d'énergie des ions dans la cible :

Le pouvoir d'arrêt est défini comme étant l'énergie perdue par unité de longueur parcourue par le projectile.

Dans la cible, la perte d'énergie peut se faire selon deux mécanismes :

1/ Une perte d'énergie élastique (nucléaire)

2/ Une perte d'énergie inélastique (électronique).

1.5.1 Perte d'énergie élastique :

La perte d'énergie par collision élastique entre le projectile et les atomes de la cible est également appelée perte d'énergie nucléaire. Elle correspond à la quantité d'énergie transférée aux noyaux des atomes de la cible par l'ion incident, par répulsion coulombienne, au cours de la collision, la répulsion est plus ou moins écrantée par le cortège électronique.

Cette perte d'énergie entraîne la déviation de la particule incidente de sa trajectoire initiale ainsi que la mise en mouvement des atomes heurtés.

Le pouvoir d'arrêt nucléaire est défini comme suit :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = -N \int_{\sigma(T=0)}^{\sigma(T=T_{\max})} T d\sigma(T, E) \quad (1.21)$$

où T est l'énergie transférée à l'atome cible durant la collision, T_{\max} est la valeur maximale de l'énergie transférée, elle est donnée par :

$$T_{\max} = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (1.22)$$

E : énergie de l'ion incident.

N : nombre d'atomes de la cible par unité de volume.

L'expression du pouvoir d'arrêt nucléaire (équation 1.21) de Lindhard et al [11] devient en fonction de l'énergie réduite ε (équation 1.17) et le parcours réduit ρ :

$$S_n(\varepsilon) = \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = \frac{1}{\varepsilon} \int_0^\varepsilon f(t^{1/2}) dt^{1/2} \quad (1.23)$$

où :

$$\rho = RN M_2 4\pi a^2 \frac{M_1}{(M_1 + M_2)^2} \quad (1.24)$$

R est le parcours total de la particule incidente.

$f(t^{1/2})$ est la fonction universelle de diffusion définie précédemment dans l'équation (1.15).

1.5.2 Perte d'énergie inélastique :

La perte d'énergie par collision inélastique entre le projectile et la cible est appelée également perte d'énergie électronique. Une partie de l'énergie cinétique perdue par l'ion projectile peut être transmise aux électrons, conduisant à des processus d'excitation et d'ionisation. L'énergie perdue par le projectile est proportionnelle à sa vitesse dans le domaine des faibles vitesses [10].

Lindhard et al [10] ont proposé une expression du pouvoir d'arrêt électronique dans le domaine des basses énergies du projectile (théorie LSS) « Lindhard , Scharff et Schiott » :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = k\sqrt{E_0} \quad (1.25)$$

avec :

$$k = 0.0793 \frac{Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} (M_1 + M_2)^{3/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} M_1^{3/2} M_2^{1/2}} \quad (1.26)$$

« Lindhard » a constaté que la perte d'énergie électronique dépend de l'énergie de faisceau incident, ce qui veut dire lorsque l'énergie de faisceau incident augmente la perte d'énergie électronique augmente.

En utilisant les deux expressions de l'énergie réduite \mathcal{E} (équation 1.17) et du parcours réduit ρ (Équation 1.24) [12], le pouvoir d'arrêt électronique réduit s'écrit :

$$S_e(\mathcal{E}) = \left(\frac{d\mathcal{E}}{d\rho}\right)_e = k\sqrt{\mathcal{E}} \quad (1.27)$$

Le pouvoir d'arrêt total est la somme des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{tot} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e \quad (1.28)$$

1.6 Diffusions multiples :

A basse énergie, les collisions multiples deviennent importantes. Dans ce cas, le libre parcours moyen du projectile est de l'ordre de la distance interatomique de la cible et le projectile va subir plusieurs collisions avant sa diffusion.

Donc l'énergie cinétique du projectile après avoir subi n collisions binaires est donnée par :

$$E_n = E_0 \left(\prod_{i=1}^n K(\varphi_i, A) \right) \quad (1.29)$$

où :

$K(\varphi, A)$ est le facteur cinématique correspondant à l'angle de diffusion φ_i (équation 1.2).

CHAPITRE 2

Description du modèle de simulation utilisé pour

Le calcul de la probabilité de diffusion

2.1 Introduction :

L'analyse des matériaux solides par faisceaux d'ions est largement utilisée. La simulation numérique joue un rôle très important pour bien comprendre les principaux phénomènes de la physique dans le cadre de l'interaction ion-surface solide.

Nous rappelons que dans le domaine de l'interaction ion-surface solide, il y a trois principales techniques de simulation : la simulation de type Monte Carlo, la théorie de transport et la dynamique moléculaire.

1/ La simulation Monte Carlo consiste à suivre l'histoire d'un très grand nombre de particules incidentes diffusées par des atomes cibles. Parmi les différents codes existant dans la simulation Monte Carlo dans le domaine ion-surface solide, on peut citer ici le code TRIM [7] et le code MARLOWE [13].

2/ La théorie de transport est basée sur les équations intégral-différentielles qui sont des outils standards dans le traitement des collisions multiples, comme les phénomènes de ralentissement des neutrons et la diffusion d'électrons et des rayons X [14]. Dans ce domaine de l'interaction ion-surface solide, cette méthode est largement utilisée pour l'étude des particules transmises par des cibles solides [15] et pour l'étude de l'énergie transférée par des gaz rares à des surfaces [16], ainsi pour la pulvérisation [17]. Cette théorie est basée sur des hypothèses et des approximations, ainsi que sur des méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann.

3/ La dynamique moléculaire : l'évolution temporelle du système (projectile + cible) peut être déterminée en résolvant les équations de Newton de toutes les particules [18]. Cette technique est utilisée pour modéliser l'interaction atome-surface pour les collisions à très faibles d'énergie, dans ce cas l'énergie est partagée entre plusieurs particules donc l'approximation des Collision binaires n'est plus valable [19].

Dans ce travail, nous allons calculer la probabilité de diffusion d'un ion par une surface solide en utilisant une méthode de simulation basée sur la résolution de l'équation de Boltzmann dans la théorie de transport.

2.2 Théorie de transport pour le calcul de la fonction de distribution :

Considérons un faisceau d'ions initialement collimaté dans la direction Ox (Figure 2.1). L'équation de transport pour l'étude des particules transmises à travers une cible solide d'épaisseur x dans le cas stationnaire et en négligeant la perte d'énergie s'écrit comme suit [20] :

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

$F = F(\vec{r}, \vec{\Omega})$ est la fonction de distribution des atomes de la cible dans l'espace réel \vec{r} et suivant la direction $\vec{\Omega}$.

On peut écrire les deux vecteurs \vec{r} et $\vec{\Omega}$ dans l'approximation des faibles angles de diffusion comme suit :

$$\vec{r} = (x, \vec{\rho}) \text{ et } \vec{\Omega} = (1, \vec{\alpha}) .$$

où $\vec{\rho}$ et $\vec{\alpha}$ sont deux vecteurs du plan (yoz)

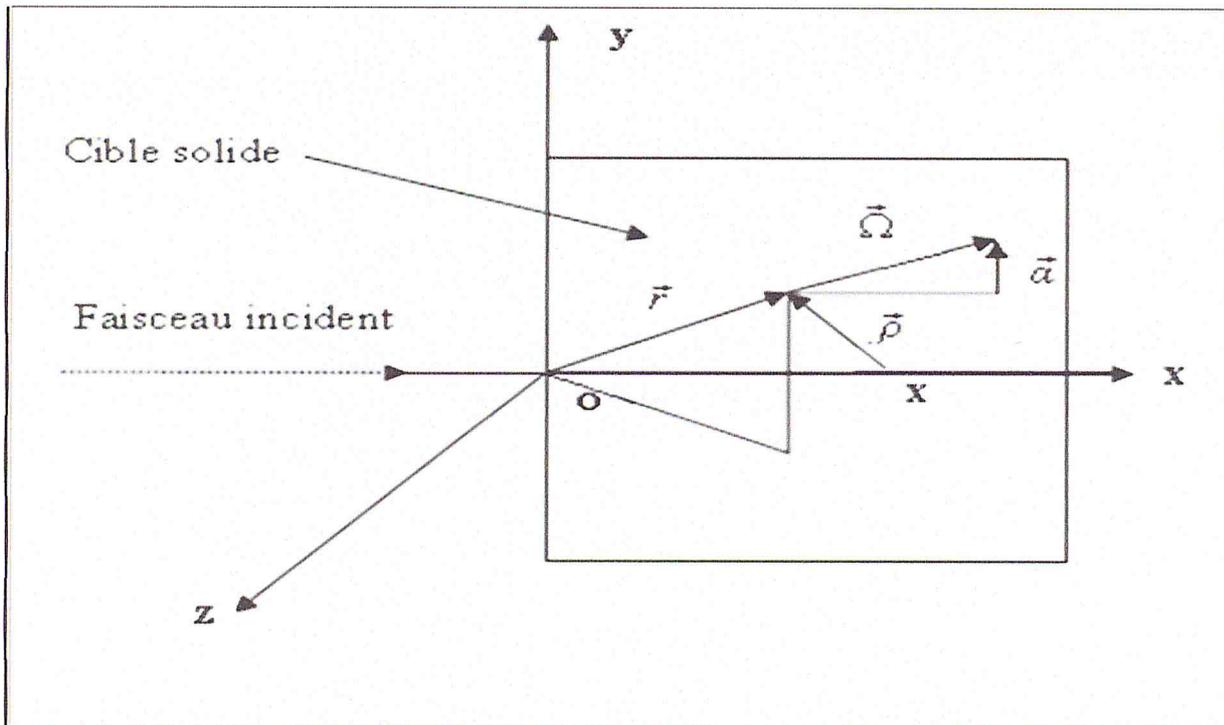


Figure 2.1 : Schéma représentant la géométrie utilisée dans le calcul des distributions angulaires des particules transmises

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

N_0 est le nombre de centres diffuseurs par unité de volume.

L'équation de transport (2.1) a pour solution [20]:

$$F(\vec{r}, \vec{\Omega}) = F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2\pi^4} \frac{1}{x^2} \int \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp\{-N_0 x \int_0^1 \sigma_0(|\vec{k} - \beta \vec{K}|, E_0) d\beta\} d\vec{k} d\vec{K} \quad (2.2)$$

où \vec{k} et \vec{K} sont deux vecteurs du plan (yoz) qu'on peut écrire en coordonnées polaires : $\vec{k}(k, \theta_1)$ et $\vec{K}(K, \theta_2)$.

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

$\sigma_0(k)$ est la section efficace différentielle de diffusion qui s'écrit sous la forme suivante :

$$\sigma_0(k, E_0) = \sigma_0(k) = \int_0^\infty d\sigma(\varphi) [1 - J_0(k\varphi)]. \quad (2.3)$$

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

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

a : rayon d'écran.

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

$\tilde{\varphi}$: est l'angle de diffusion réduit donné par la relation la suivante :

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

f : fonction universelle de diffusion qui dépend du potentiel d'interaction.

E_0 : énergie de la particule incidente.

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

e : charge de l'électron.

La théorie de transport basée sur les hypothèses suivantes :

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

En définissant les deux variables z et τ comme suit (variables de Thomas-Fermi) :

$$z = \frac{2Z_1Z_2e^2}{E_0a} |\vec{k} - \beta\vec{K}| \quad (2.6)$$

$$\tau = \pi a^2 N_0 x \quad (2.7)$$

et en exprimant les deux vecteurs \vec{k} et \vec{K} en coordonnées polaires, la fonction de distribution devient alors :

$$F(\vec{r}, \vec{\Omega}) = F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2\pi^4} \frac{1}{x^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} kK \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp(-\tau \int_0^1 \Delta(z) d\beta) dk dK d\theta_1 d\theta_2 \quad (2.8)$$

Où $\Delta(z)$ est la section efficace de transport réduite [21] définie par la relation suivante :

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

2.3 Théorie de transport pour le calcul de la probabilité de diffusion ΔP_1 :

ΔP_1 est la probabilité de diffusion d'un ion par une surface solide, calculée en négligeant la perte d'énergie . Dans ce cas, l'énergie du projectile est supposée constante et la section efficace de diffusion est toujours calculée à la même énergie sur tout le parcours du projectile dans la cible.

Nous considérons la diffusion d'un faisceau mono énergétique de particules parallèle à l'axe Ox et incident sur une surface solide sous un angle d'incidence λ (voir figure 2.2).

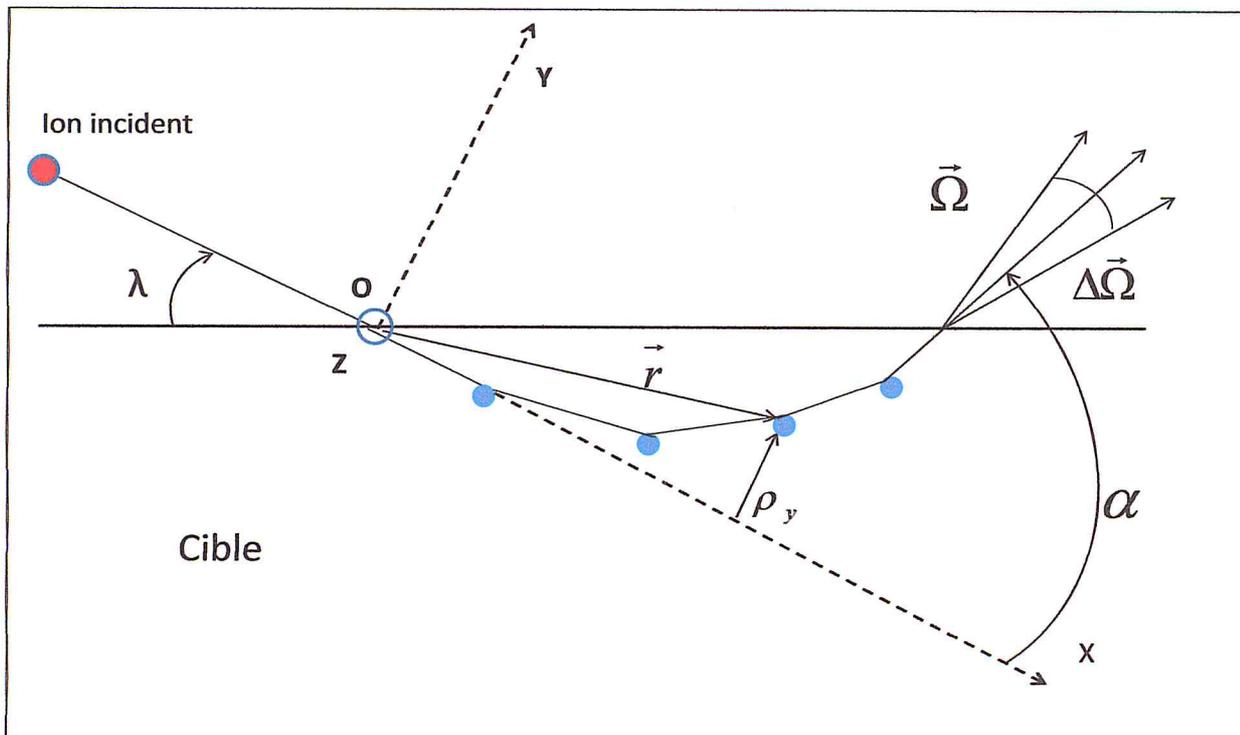


Figure 2.2 : Définition des paramètres géométriques utilisés dans le calcul

La probabilité pour qu'une particule soit diffusée d'un angle α , suivant la 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 compris entre x et $x + \Delta x$ (voir figure 2.2)

est [22] :

$$\Delta P_1 = \int_{\rho_z=-\infty}^{+\infty} F(x, \rho_y = \lambda x, \rho_z, \alpha_y, \alpha_z = 0) d\rho_z (\alpha - \lambda) \Delta x \Delta\Omega \quad (2.10)$$

La détection des particules diffusées se fait expérimentalement dans le plan d'incidence (plan xOy), pour cette raison nous n'avons considéré que les particules diffusées dans ce plan. Nous avons donc pris : $\vec{\alpha} (\alpha_y = \alpha, \alpha_z = 0)$.

Il a été déduit de l'équation (2.10) que l'expression finale de la probabilité de diffusion d'ions ΔP_1 se met sous la forme suivante [23] :

$$\Delta P_1 = \frac{1}{2\pi^4} \frac{2}{x^2} \int_0^{x/2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (\alpha - \lambda) k K \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp[-\tau \int_0^1 \Delta(z) d\beta] dk dK d\theta_1 d\theta_2 d\rho_z \Delta x \Delta\Omega \quad (2.11)$$

Pour les faibles angles de diffusion, il est possible d'utiliser l'approximation $L \approx x$ [22], ou L est le parcours total du projectile dans la cible avant sa diffusion.

Nous pouvons donc calculer la Probabilité de diffusion ΔP_1 pour différentes valeurs du parcours, Pour calculer ΔP_1 à la limite $x = 0$, nous allons utiliser l'approximation de la diffusion simple en surface [24] :

$$\Delta P_1(x = 0) = \frac{d\sigma}{d\Omega} N_0 \Delta x \Delta\Omega \quad (2.12)$$

où $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ est la section efficace différentielle de diffusion.

2.4 Théorie de transport pour le calcul de la probabilité de diffusion ΔP_2 :

Nous avons calculé la probabilité de diffusion ΔP_1 donnée par l'équation (2.11), sans tenir compte de la perte d'énergie. Cette approximation reste valable pour les faibles parcours. mais si le projectile est diffusé avec une valeur importante du parcours dans la cible, la perte d'énergie totale dans la cible devient importante et donc non négligeable. Pour tenir compte de cet effet, nous faisons la substitution suivante [6] :

$$\exp \left\{ \underbrace{-N_0 x \int_0^1 \sigma_0(|\vec{k} - \beta \vec{K}|, E_0) d\beta}_{\Delta P_1} \right\} \rightarrow \exp \left\{ \underbrace{-N_0 \int_0^x \int_0^1 \sigma_0(|\vec{k} - \beta \vec{K}|, E(x')) d\beta dx'}_{\Delta P_2} \right\} \quad (2.13)$$

La probabilité de diffusion ainsi obtenue est appelée ΔP_2 .

$E(x)$ est l'énergie de la particule incidente pour un parcours x dans la cible. Cette énergie est donnée par l'expression suivante :

$$E(x) = E_0 - \int_0^x \left(\frac{dE}{dx} \right)_{tot} dx \quad (2.14)$$

$\left(\frac{dE}{dx} \right)_{tot}$ est la perte d'énergie totale (électronique et nucléaire) et E_0 est l'énergie initiale du projectile.

La figure 2.3 donne la variation de la perte d'énergie totale $\left(\frac{dE}{dx} \right)_{tot}$ en fonction de l'énergie du projectile pour le potentiel ZBL est pour les deux systèmes He^+/Ni et He^+/Si . Pour les mêmes Conditions, la variation de l'énergie du projectile en fonction du parcours dans la cible $E(x)$ est donnée (figure 2.4).

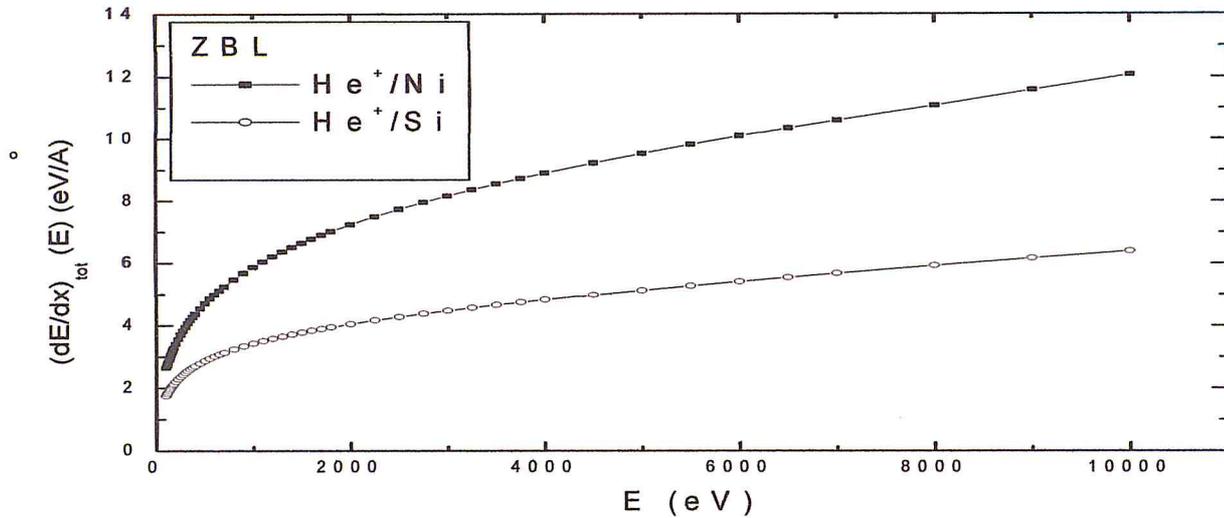


Figure 2.3 : Variation de la perte d'énergie totale $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{tot}$ en fonction de l'énergie incidente pour le potentiel ZBL et pour les deux systèmes He⁺/Ni et He⁺/Si [4]

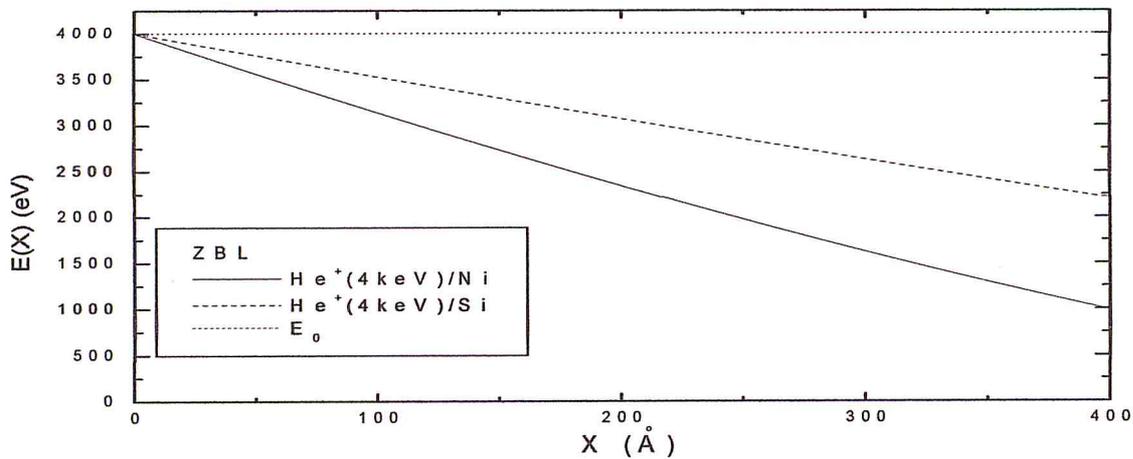


Figure 2.4 : Variation de l'énergie du projectile en fonction du parcours dans la cible pour le potentiel ZBL et pour les deux systèmes He⁺(4 keV)/Ni et He⁺(4 keV)/Si [4]

En effectuant la substitution (2.13), nous écrivons maintenant la nouvelle expression de la fonction de distribution :

$$F(\vec{r}, \vec{\Omega}) = F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2\pi^4} \frac{1}{x^2} \int \cos(\vec{K} \cdot \vec{\rho} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp\left[-N_0 \pi a^2 \int_0^x \int_0^1 \Delta(z') d\beta dx'\right] d\vec{k} d\vec{K} \quad (2.15)$$

où les deux nouvelles expressions de z' et $\Delta(z')$ s'écrivent comme suit :

$$z' = \frac{2Z_1Z_2e^2}{E(x)a} \left| \vec{k} - \beta\vec{K} \right| \quad (2.16)$$

et :

$$\Delta(z') = \int_0^\infty d\tilde{\varphi} \frac{f(\tilde{\varphi})}{\tilde{\varphi}^2} [1 - J_0(z'\tilde{\varphi})] \quad (2.17)$$

Dans l'équation 2.15, l'intégrale sur le parcours x est remplacée par une sommation discrète, le parcours total x dans la cible, est décomposé en m éléments identiques de longueur égale à e_0 où $x = me_0$. Dans chaque élément, l'énergie est supposée constante (voir figure 2.5).

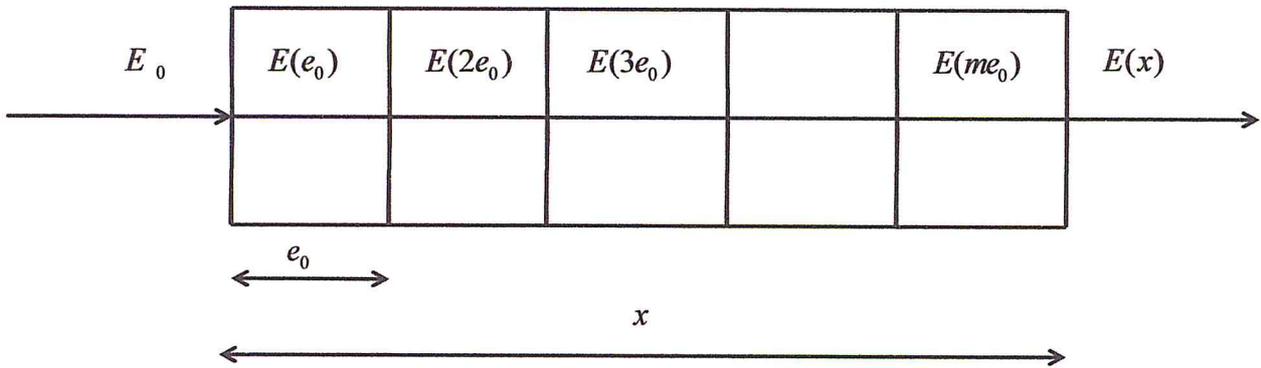


Figure 2.5 : Variation de l'énergie de la particule incidente avec le parcours dans la cible

L'expression finale de la fonction de distribution est donc :

$$F(x, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2\pi^4} \frac{1}{x^2} \int \cos(\vec{K} \cdot \vec{\psi} + \vec{k} \cdot \vec{\alpha}) \exp[-\tau' \sum_{j=1}^m \int_0^1 \Delta(z_j) d\beta] d\vec{k} d\vec{K} \quad (2.18)$$

Où :

$$\tau' = \pi a^2 N_0 e_0 \quad (2.19)$$

n est le nombre de tirs aléatoires effectués pour la détermination des différentes valeurs x_i du domaine D , ce qui permet de calculer cette moyenne.

Nous avons utilisé le langage FORTRAN pour calculer la probabilité de diffusion, nous avons remarqué que pour de grandes valeurs du parcours L , les deux valeurs de k_{\max} et K_{\max} sont relativement faibles. avec K_{\max}, k_{\max} sont des limites d'intégration (programme). Le domaine d'intégration étant dans ces cas petit, la valeur moyenne est obtenue avec une bonne précision avec un temps de calcul réduit. Cependant, pour les faibles valeurs de L , le domaine d'intégration devient important, ce qui donne des temps de calculs très grands.

CHAPITRE 3

Résultats et discussions

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

3.1 Introduction :

Le but de ce travail est l'étude de l'effet de la perte d'énergie sur la probabilité 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 He^+ par une surface de nickel pour différentes valeurs de l'énergie incidente $E_0=1\text{KeV}$, $E_0=2\text{KeV}$ et $E_0=4\text{KeV}$.

* Diffusion d'ions He^+ par une surface de silicium pour les mêmes valeurs de l'énergie incidente utilisées pour le Nickel .

3.2 calcul de la probabilité de diffusion ΔP_1 :

ΔP_1 est la probabilité de diffusion d'un ion par une surface, dans l'angle solide $\Delta\Omega$ avec un parcours dans la cible compris entre x et $x + \Delta x$ dont l'expression est donnée par l'équation (2.11).

Nous rappelons que la probabilité de diffusion ΔP_1 est calculée en négligeant la perte d'énergie du projectile dans la cible. Dans ces conditions et pour calculer ΔP_1 , nous utilisons la valeur de la section efficace de diffusion calculée à énergie constante (énergie initiale du projectile).

Il est à noter que nous avons calculé ΔP_1 pour différentes valeurs de l'angle de diffusion α . Nous présentons ici quelques résultats à l'aide d'un programme écrit en langage fortran.

En considérant le potentiel d'interaction ZBL, pour les deux systèmes He^+/Ni et He^+/Si et pour trois valeurs de l'énergie incidente $E_0=1\text{KeV}$, $E_0=2\text{KeV}$ et $E_0=4\text{KeV}$. Différentes valeurs de l'angle de diffusion sont considérées.

La figure 3.1 représente la variation de la probabilité ΔP_1 en fonction du parcours L dans la cible pour le système He^+/Ni , pour une énergie incidente $E_0=1\text{KeV}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\kappa = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$. Des résultats analogues pour d'autres angles de diffusion et d'autres valeurs de l'énergie incidente sont représentés dans les figures de 3.2 jusqu'à 3.12.

La variation de la probabilité ΔP_1 en fonction du parcours L dans la cible pour le système He^+/Si , pour une énergie incidente $E_0=1\text{KeV}$ ($\kappa = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$)

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

est également représentée dans la figure 3.13. Nous présentons également des résultats analogues pour d'autres angles de diffusion et d'autres valeurs de l'énergie incidente dans les figures de 3.13 jusqu'à 3.22.

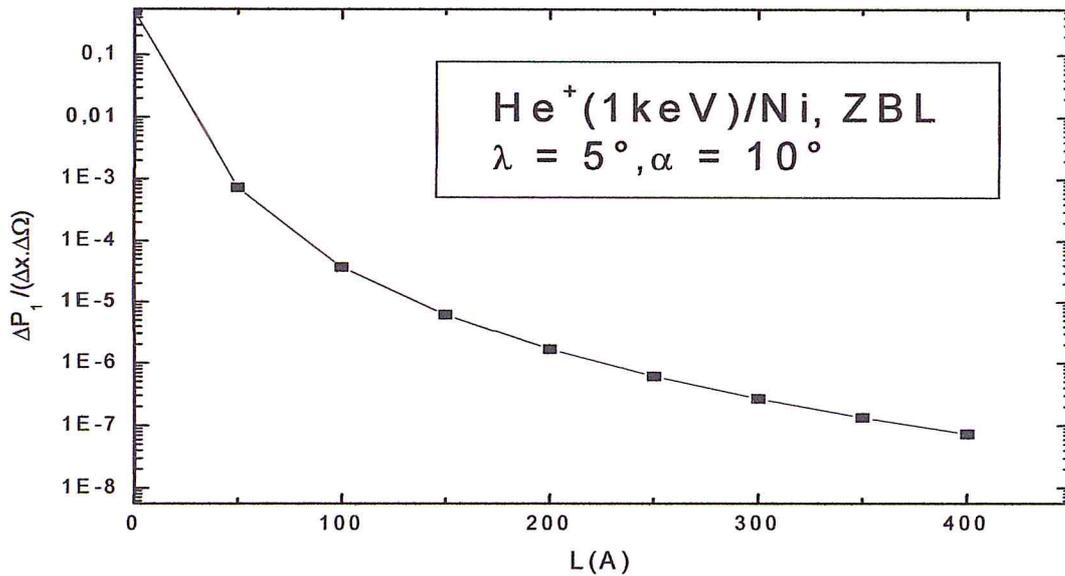


Figure 3.1: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

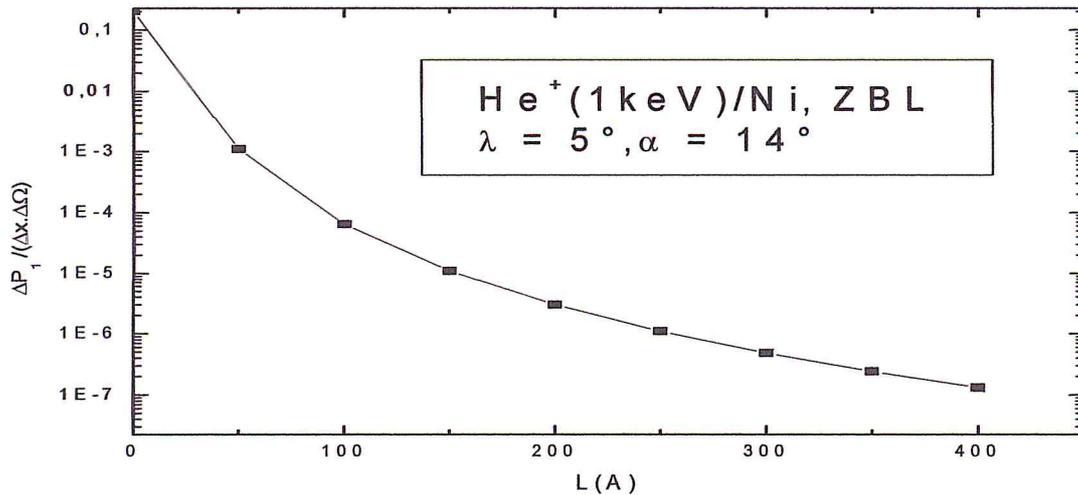


Figure 3.2 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 14^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

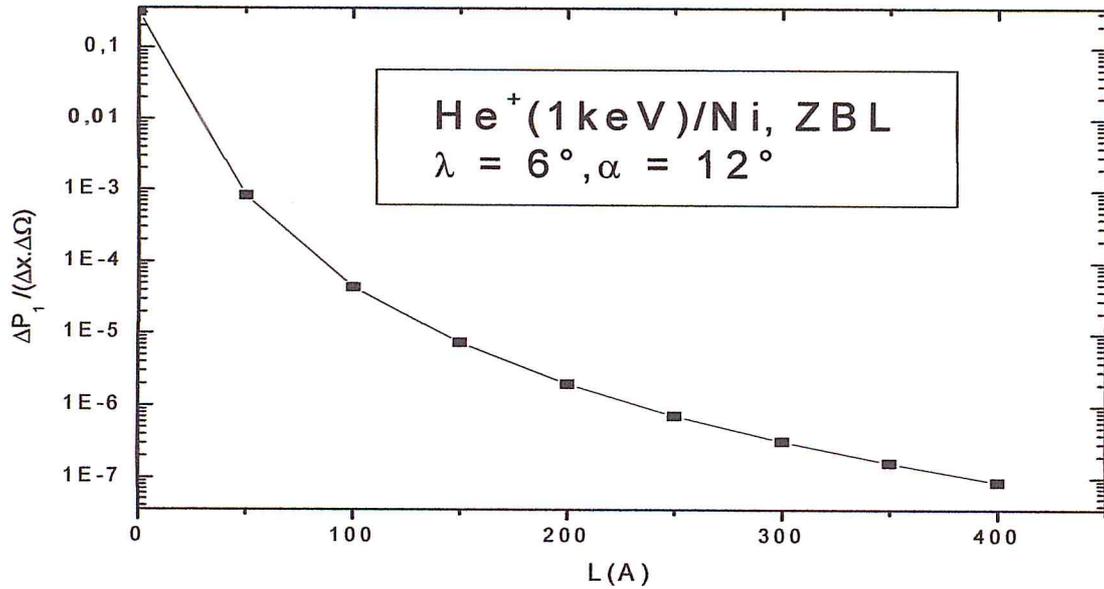


Figure 3.3: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 6^\circ$ et $\alpha = 12^\circ$

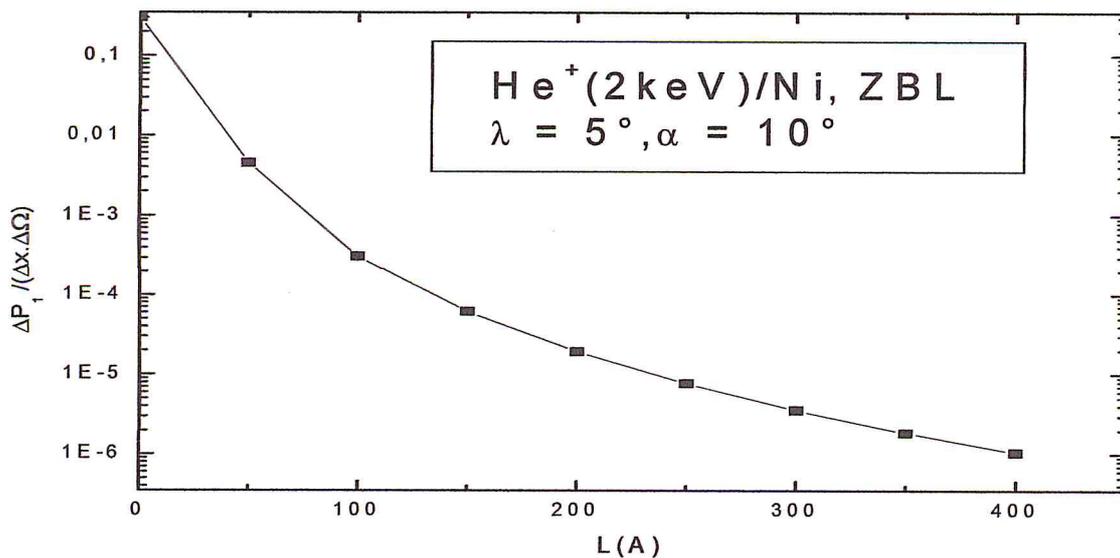


Figure 3.4: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(2\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

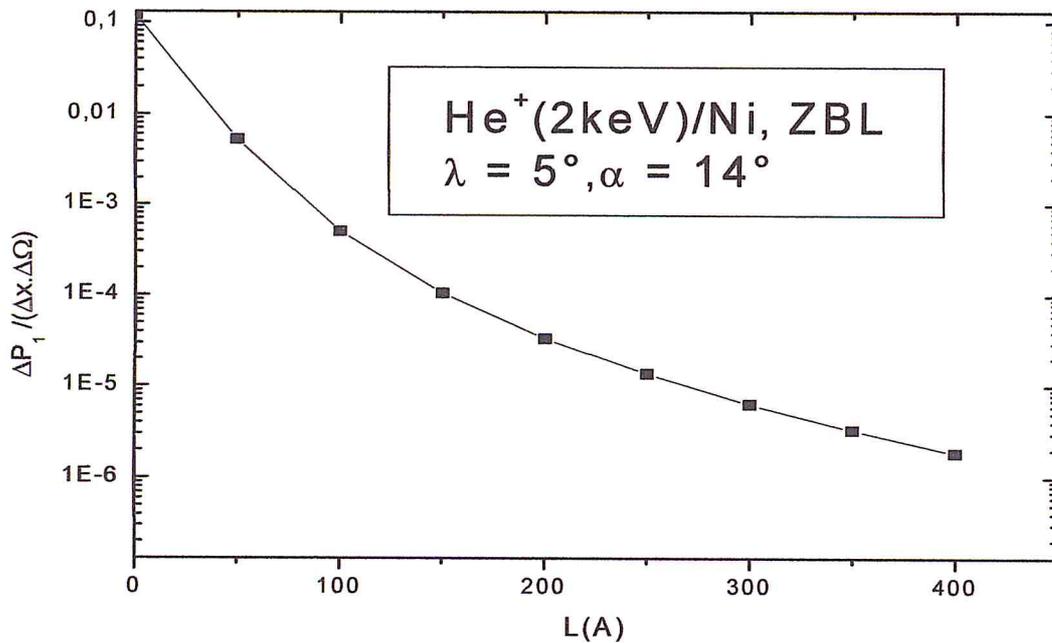


Figure 3.5 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(2\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 14^\circ$

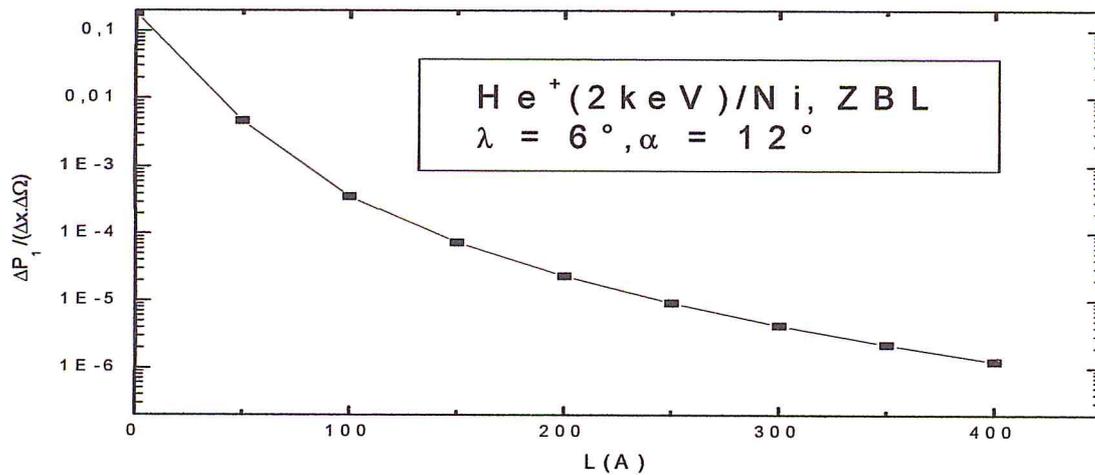


Figure 3.6 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(2\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 6^\circ$ et $\alpha = 12^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

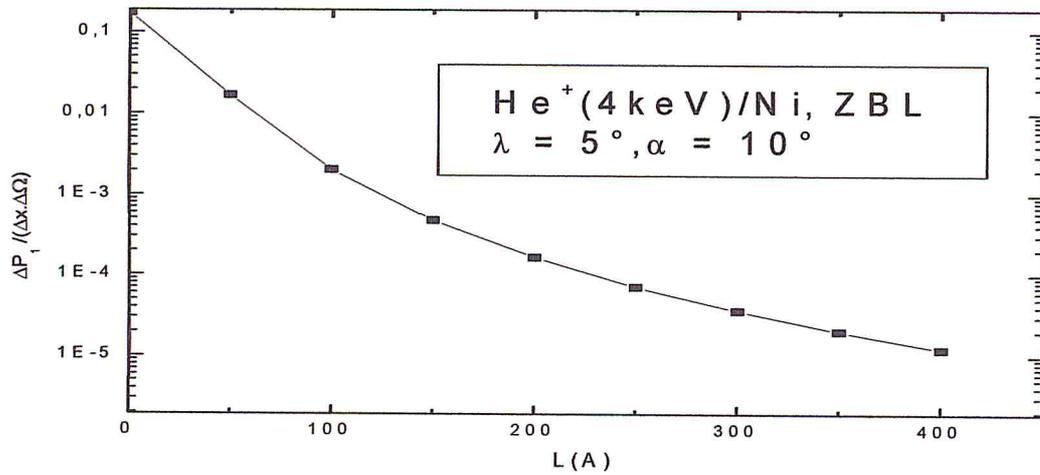


Figure 3.7: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(4\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

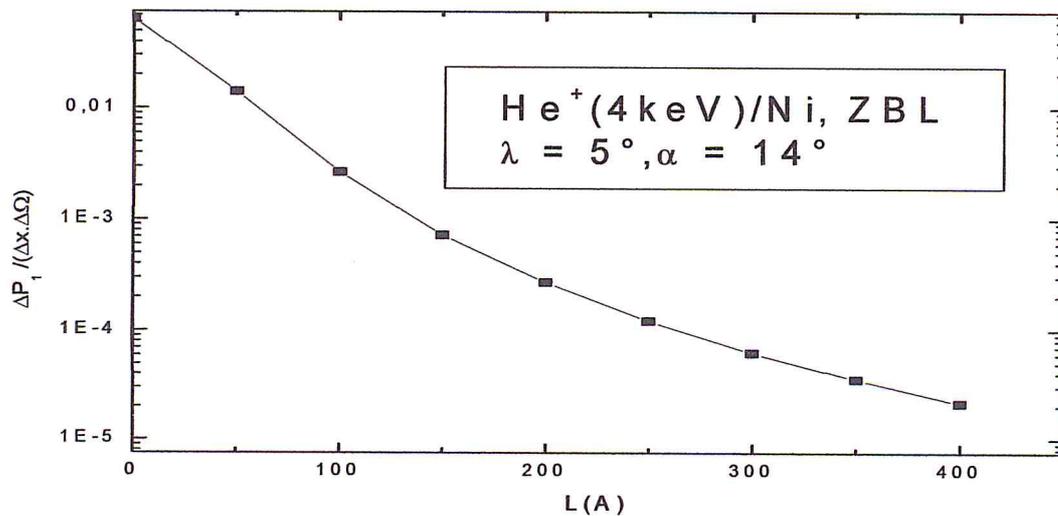


Figure 3.8: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(4\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 14^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

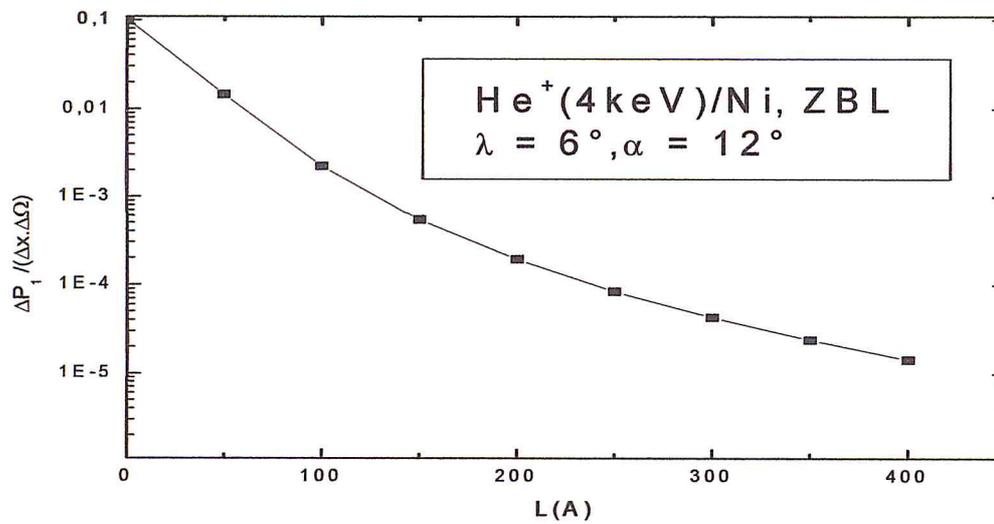


Figure 3.9 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(4\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 6^\circ$ et $\alpha = 12^\circ$

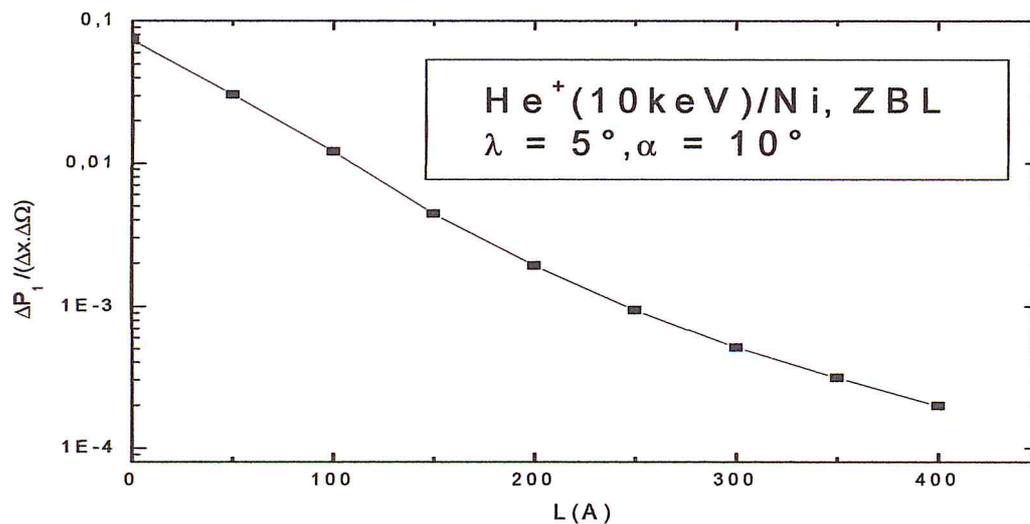


Figure 3.10 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(10\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

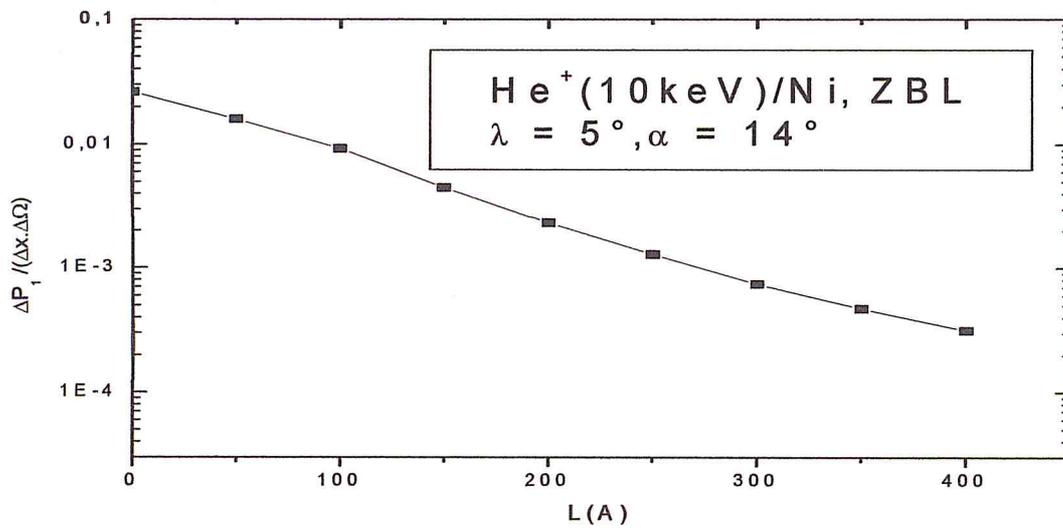


Figure 3.11 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(10\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 14^\circ$

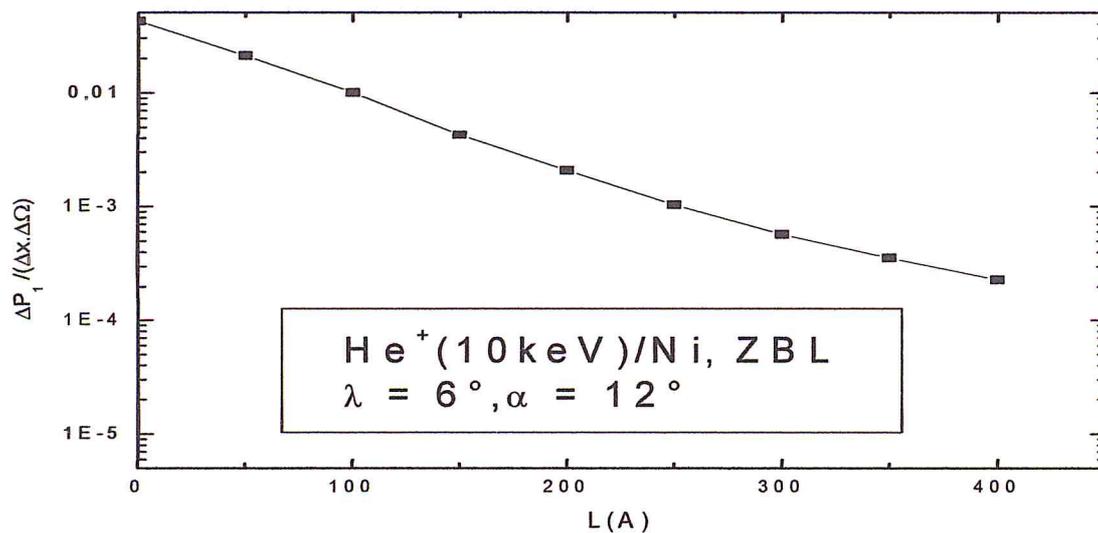


Figure 3.12 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(10\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 6^\circ$ et $\alpha = 12^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

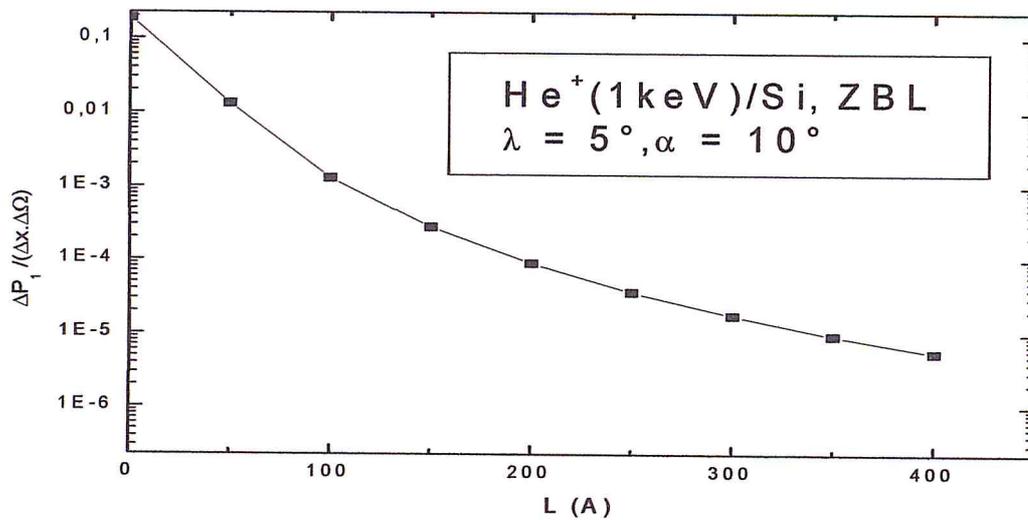


Figure 3.13 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL , Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

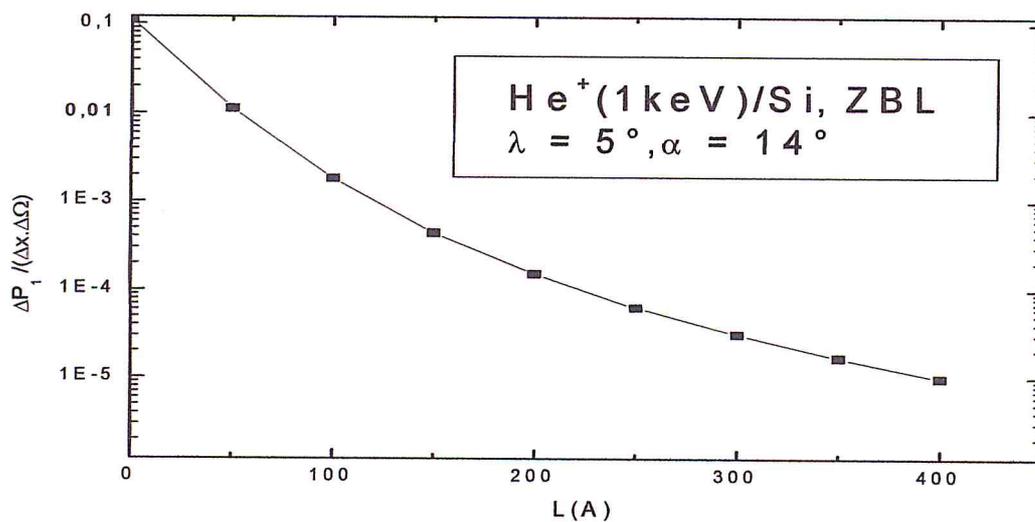


Figure 3.14: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL , Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 14^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

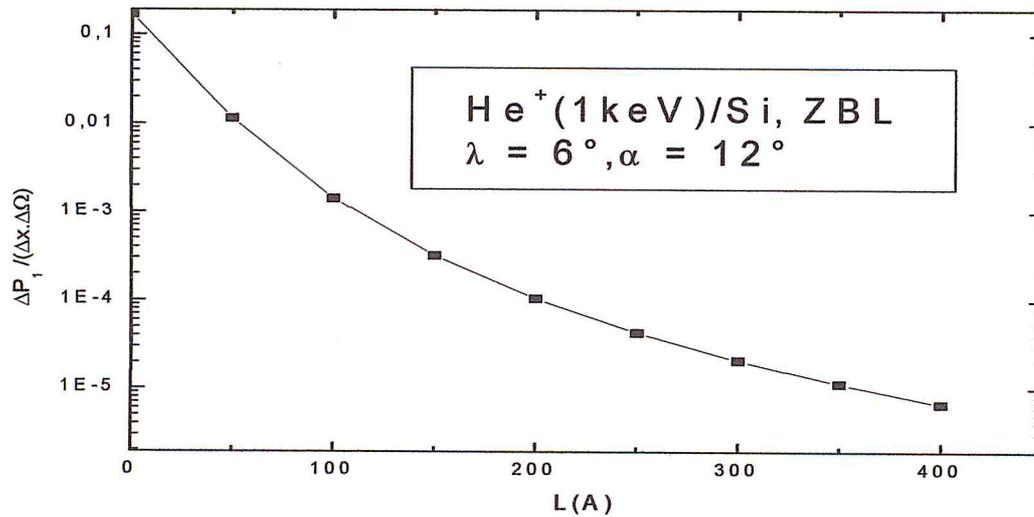


Figure 3.15 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL , Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 6^\circ$ et $\alpha = 12^\circ$

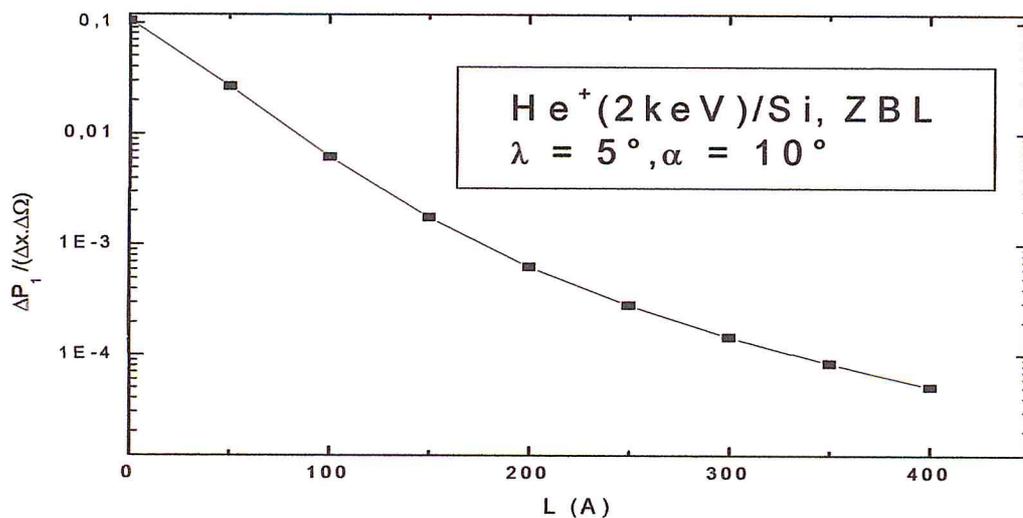


Figure 3.16: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(2\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL , Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

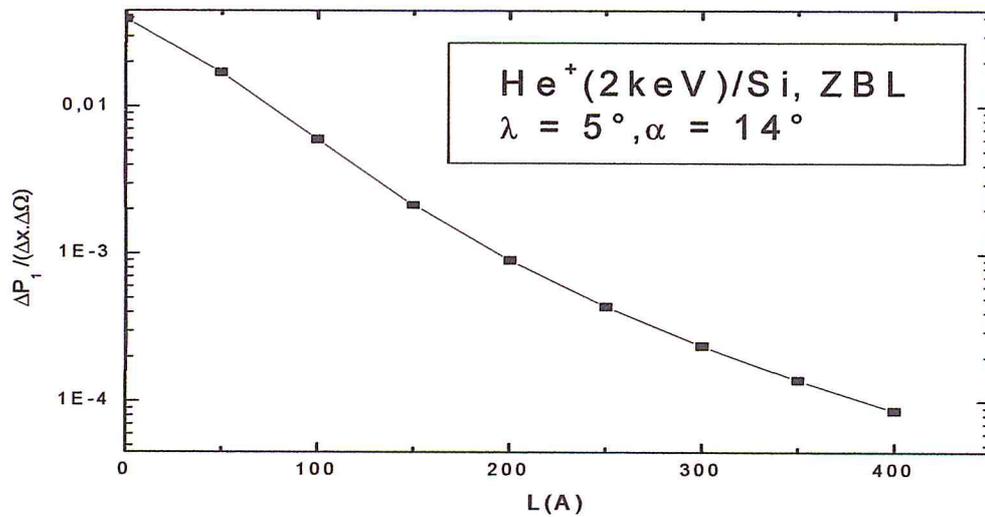


Figure 3.17: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(2\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 14^\circ$

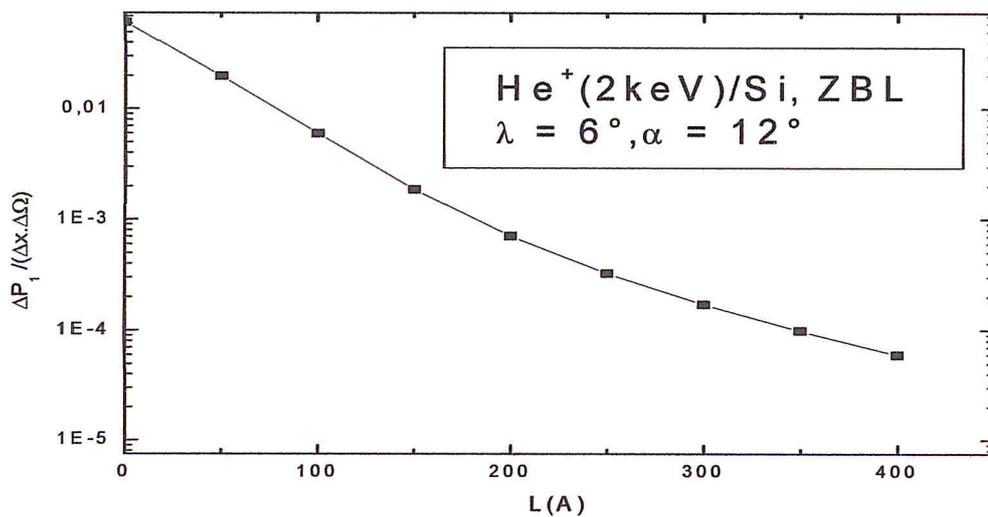


Figure 3.18: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(2\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 6^\circ$ et $\alpha = 12^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

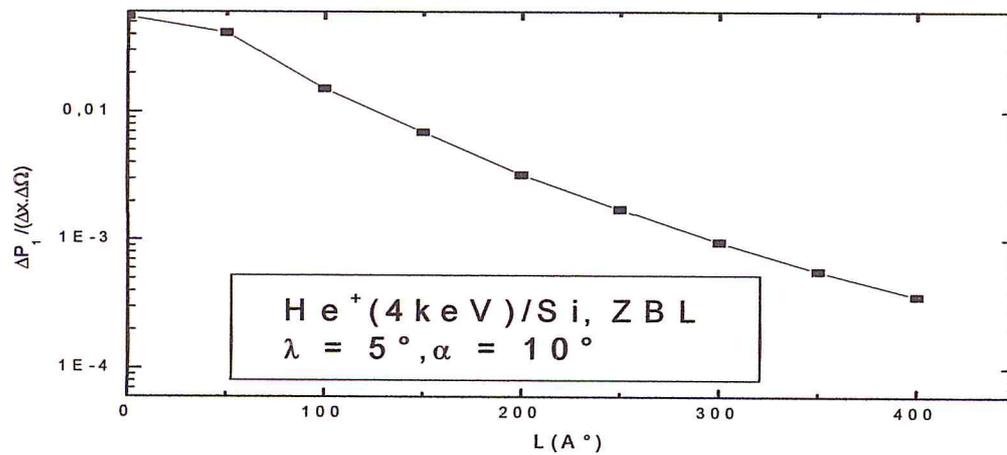


Figure 3.19 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(4\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL , Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

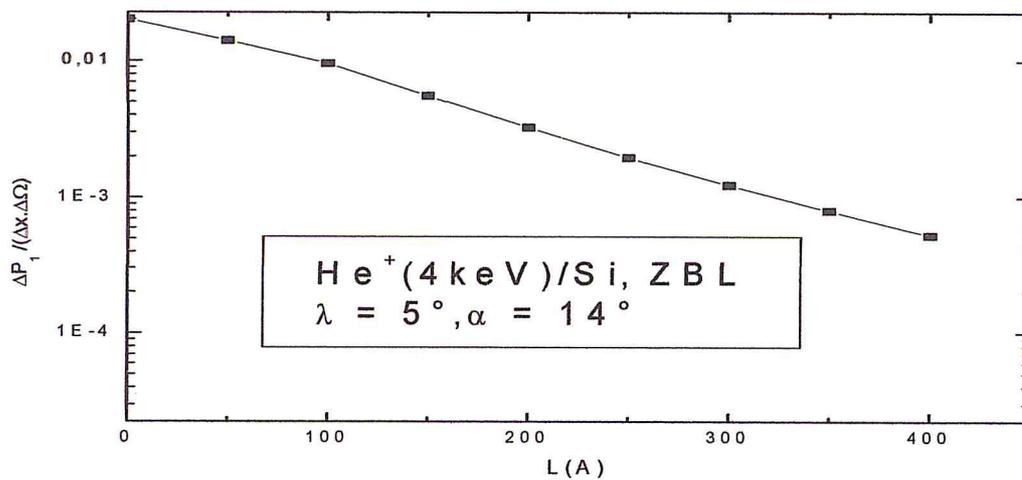


Figure 3.20: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(4\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL , Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 14^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

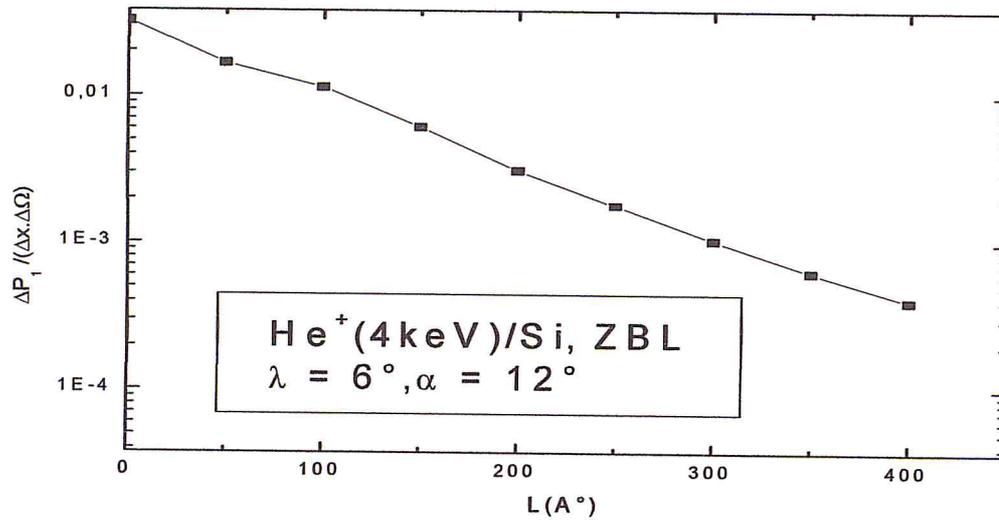


Figure 3.21: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(4\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 6^\circ$ et $\alpha = 12^\circ$

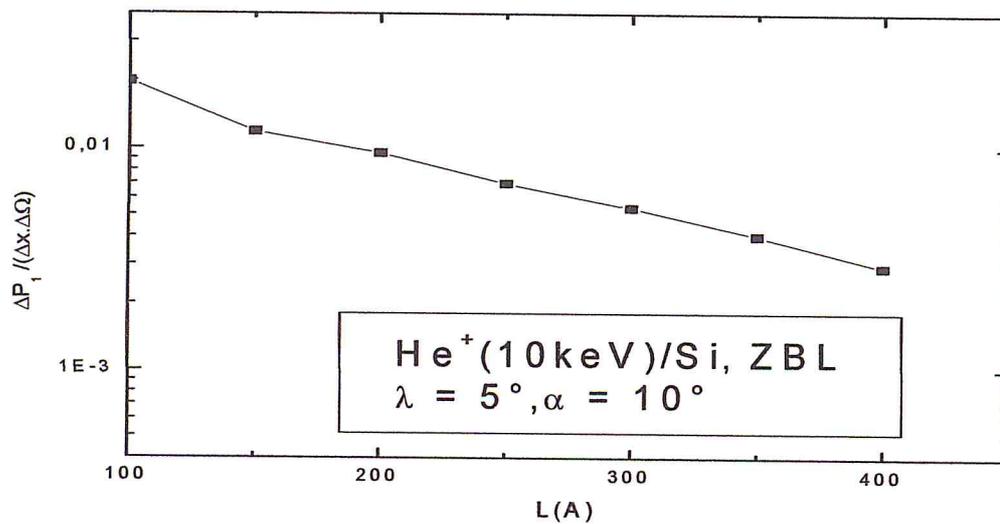


Figure 3.22: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_1 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(10\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

Il est à noter que les valeurs calculées de ΔP_1 sont représentées suivant une échelle logarithmique pour pouvoir étudier une large gamme des parcours dans la cible.

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

Dans les différents cas considérés ici, nous remarquons que la valeur calculée de la probabilité de diffusion ΔP_1 dépend de la longueur parcourue dans la cible.

3.3 calcul de la probabilité de diffusion ΔP_2 :

Nous rappelons que ΔP_2 est la probabilité de diffusion des ions par une surface solide calculée en tenant compte de la perte d'énergie (équation 2.21). Ainsi, la section efficace de diffusion est déterminée pour chaque valeur de l'énergie du projectile qui varie tout au long de son parcours dans la cible.

Dans ce travail, nous avons considéré les deux systèmes He⁺/Ni 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 la perte d'énergie nucléaire. Les valeurs de la perte d'énergie électronique ont été obtenues à partir de SRIM 2010 [26]. La perte d'énergie nucléaire peut être calculée, pour chaque potentiel.

3.3.1 perte d'énergie totale :

Le pouvoir d'arrêt ou la perte d'énergie totale est la somme des pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique (1.28) :

$$\left(\frac{dE}{dx} \right)_{tot} = \left(\frac{dE}{dx} \right)_n + \left(\frac{dE}{dx} \right)_e$$

La perte d'énergie nucléaire $\left. \frac{dE}{dx} \right|_n$ peut être déterminée à partir de la relation suivante [11]: (1.23)

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_n = \frac{-N \pi a^2 T_M}{\varepsilon^2} \int_0^\varepsilon f \left(t^{1/2} \right) dt^{1/2} \quad (3.1)$$

Lindhard et al [10] ont proposé une expression du pouvoir d'arrêt électronique dans le domaine des basses énergies du projectile (théorie LSS) : (1.25)

$$\left(\frac{dE}{dx} \right)_e = k \sqrt{E_0} \quad (3.2)$$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

Les figures (3.23) et (3.24) représentent la variation de la perte d'énergie totale en fonction de l'énergie du projectile et calculée pour les deux systèmes He^+/Ni et He^+/Si respectivement.

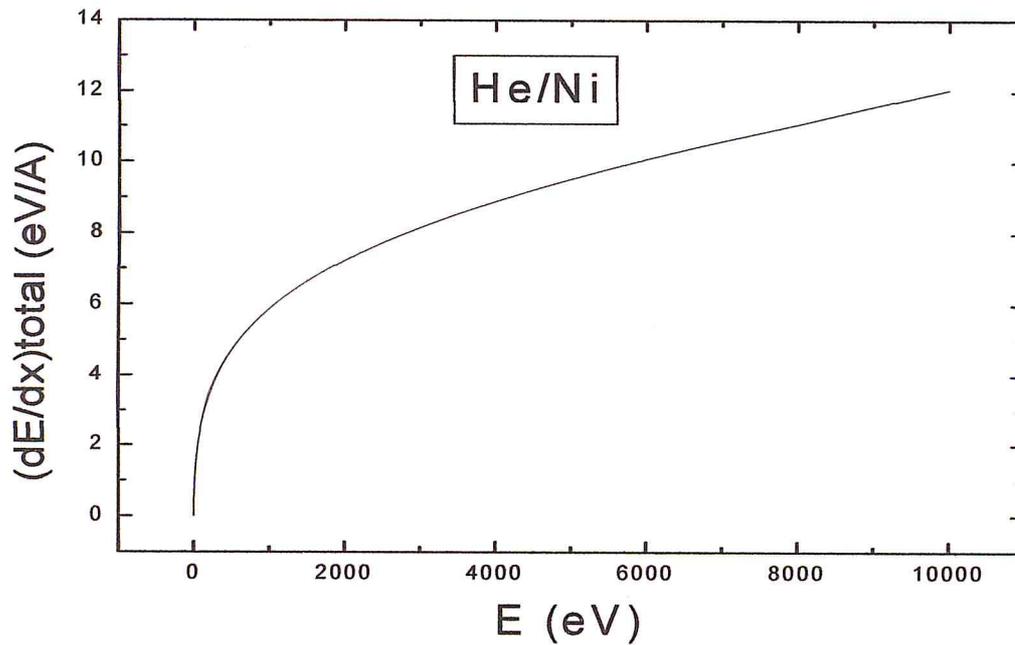


Figure 3.23 : Variation de la perte d'énergie totale en fonction de l'énergie du projectile pour le système He^+/Ni et pour le potentiel ZBL

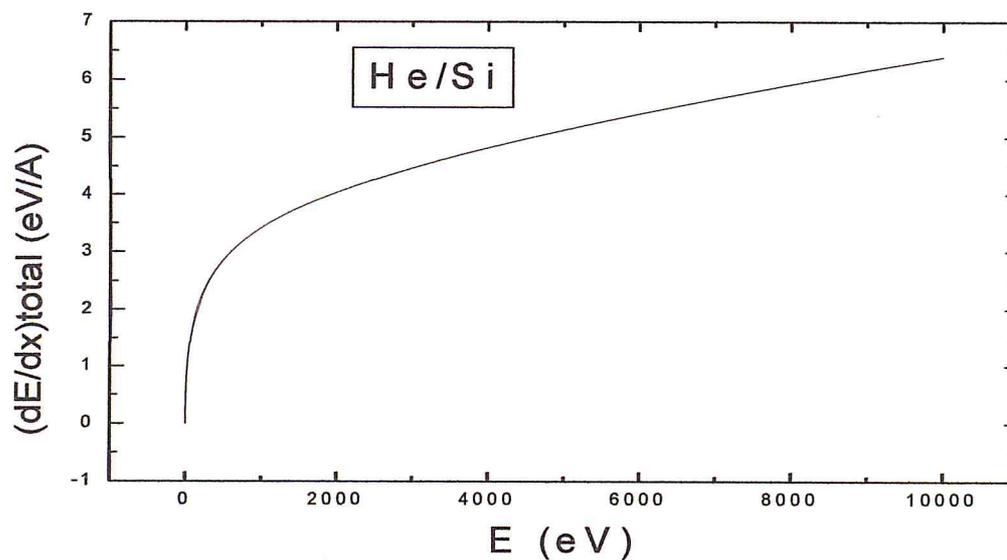


Figure 3.24 : Variation de la perte d'énergie totale en fonction de l'énergie du projectile pour le système He^+/Si et pour le potentiel ZBL

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

Connaissant la variation de la perte d'énergie totale, en fonction de l'énergie, pour le potentiel (ZBL), il est possible de calculer la variation de l'énergie du projectile en fonction de la distance parcourue. Les figures 3.25 et 3.26 représentent respectivement cette variation pour les deux systèmes He^+/Ni et He^+/Si et pour le potentiel (ZBL) considéré dans cette étude.

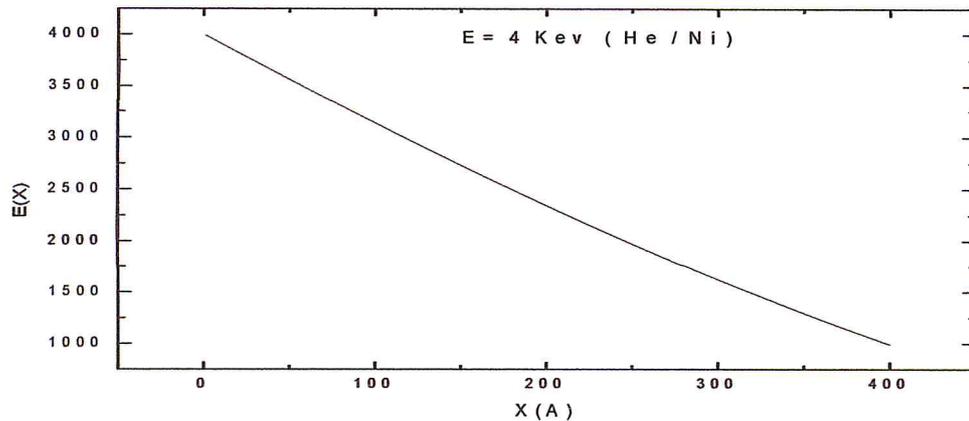


Figure 3.25 : $E(X)$ pour le système (He^+/Ni) avec $E=4\text{KeV}$

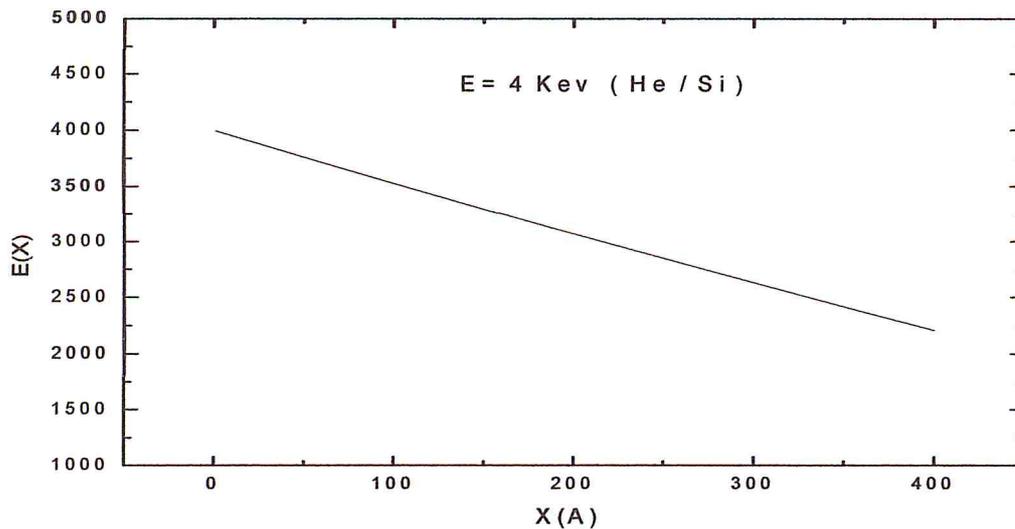


Figure 3.26 : $E(X)$ pour le système (He^+/Si) avec $E=4\text{KeV}$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

On remarque que la perte d'énergie totale est plus importante dans la cible de nickel. Pour le cas de l'énergie égale à (4 keV) pour les deux systèmes « la diminution de $E(x)$ avec la distance parcourue est plus forte pour cette cible que pour la cible de silicium ».

Il est à noter que les valeurs calculées de ΔP_2 sont représentées suivant une échelle Logarithmique pour pouvoir étudier une large gamme des parcours dans la cible.

La figure 3.27 représente la variation de la probabilité de diffusion ΔP_2 calculée pour le système He^+/Ni , pour une énergie incidente $E_0=1\text{keV}$ en fonction du parcours L dans la cible. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$. Ces résultats sont obtenus en considérant le potentiel d'interaction ZBL. Des résultats analogues pour d'autres angles de diffusion et d'autres valeurs de l'énergie incidente sont représentés dans les figures de 3.28 et 3.32.

Les résultats correspondants au système He^+/Si et obtenus dans les mêmes conditions précédentes, sont représentés dans la figure 3.28, 3.29 et 3.30.

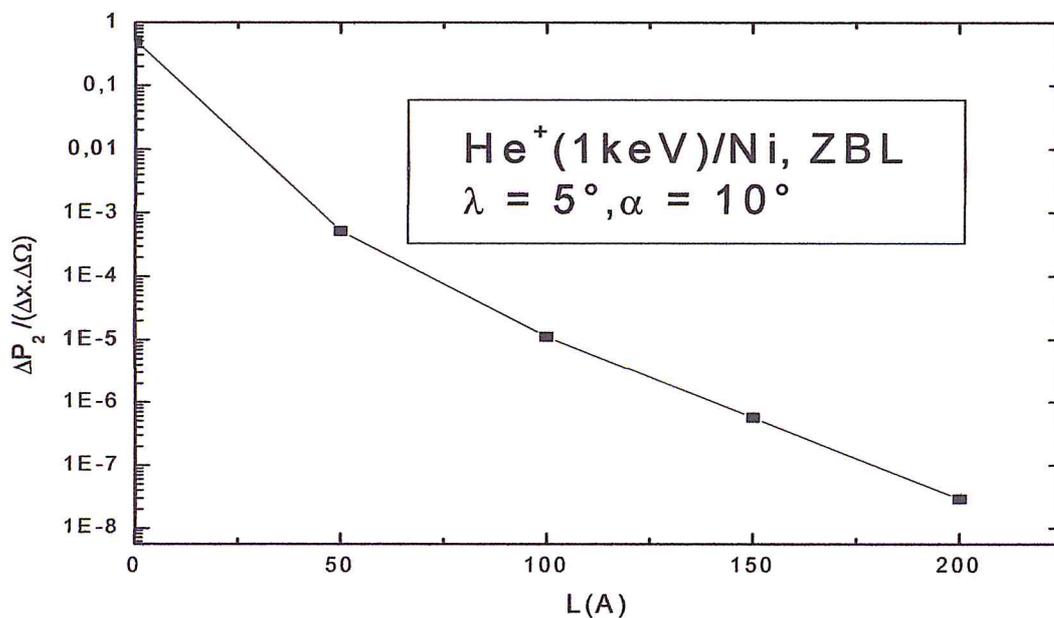


Figure 3.27 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

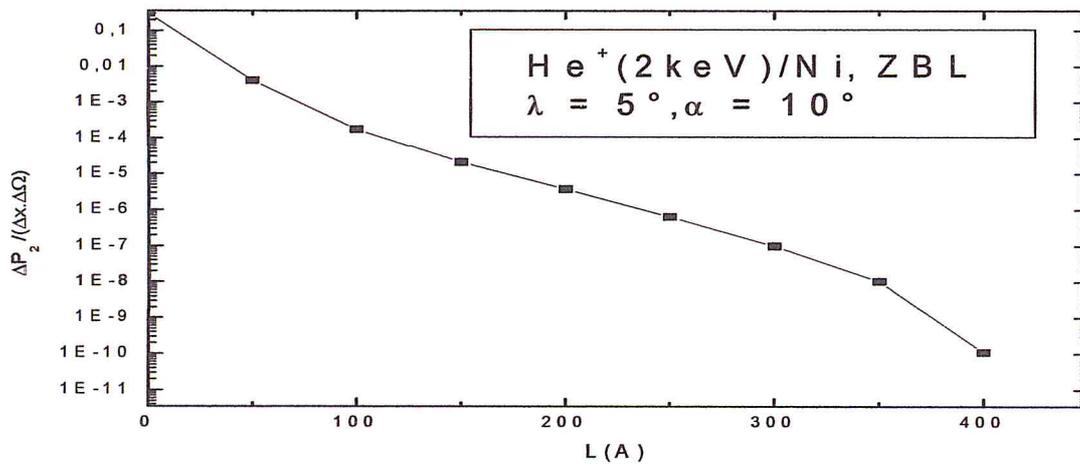


Figure 3.28 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(2\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

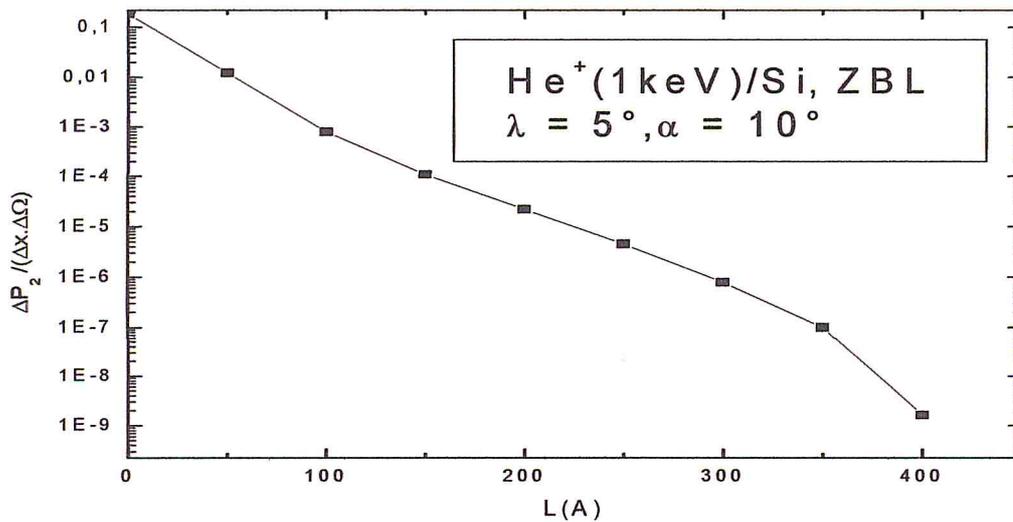


Figure 3.29 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

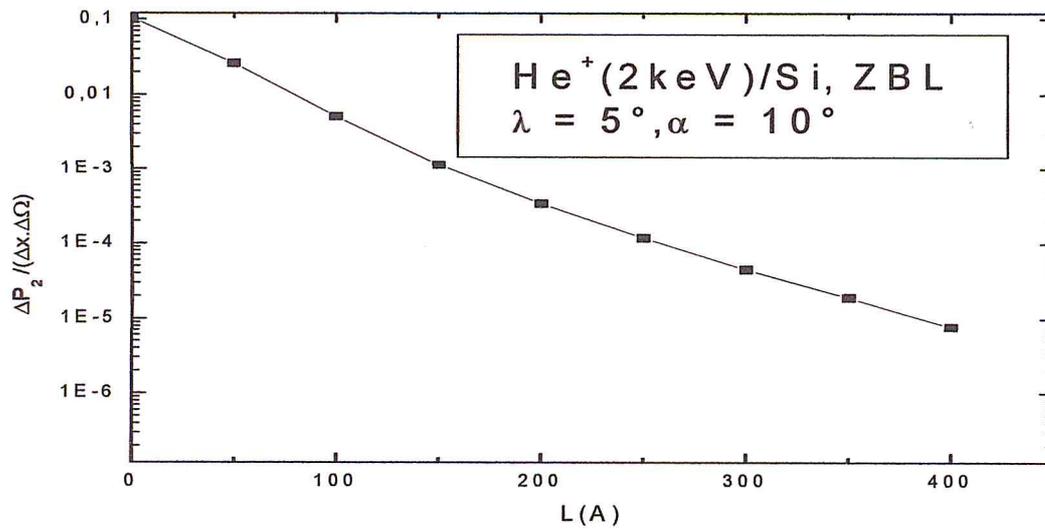


Figure 3.30: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(2\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

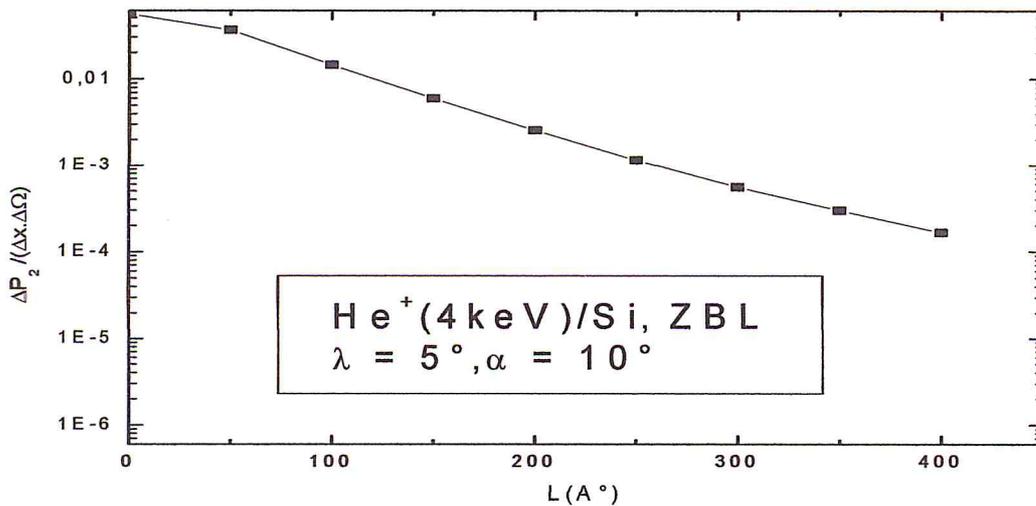


Figure 3.31: Variation de la probabilité de diffusion ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(4\text{keV})/\text{Si}$ et pour potentiels ZBL, Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

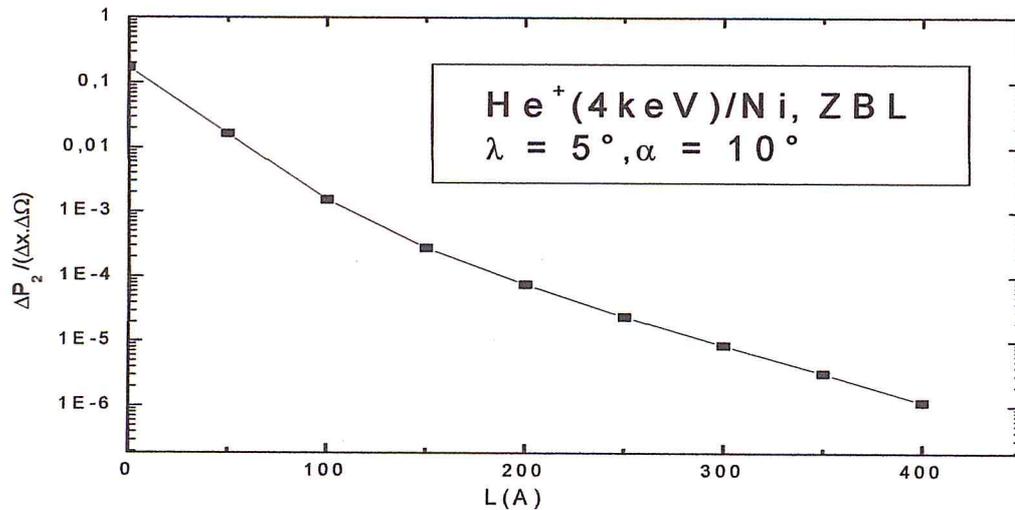


Figure 3.32 : Variation de la probabilité de diffusion ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(4\text{keV})/\text{Ni}$ et pour potentiels ZBL , Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$ et $\alpha = 10^\circ$

Nous présentons maintenant les variations des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 calculées pour les deux systèmes He^+/Ni et He^+/Si , pour différentes valeurs de l'énergie incidente et des angles d'incidence et de diffusion en fonction du parcours L dans la cible dans les figures allant de 3.33 jusqu'à 3.42. Ces résultats sont obtenus en considérant le potentiel d'interaction ZBL.

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

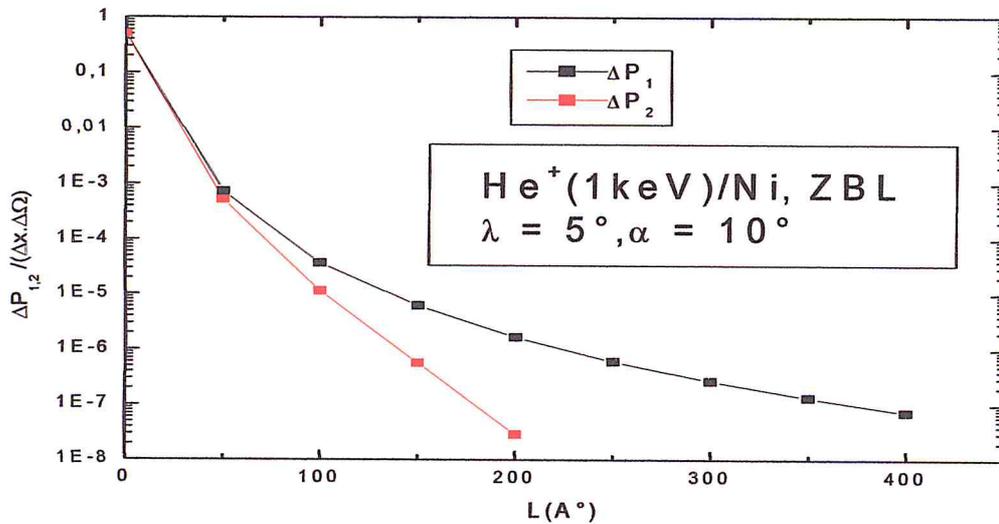


Figure 3.33 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 \text{ keV})/\text{Ni}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 10^\circ$

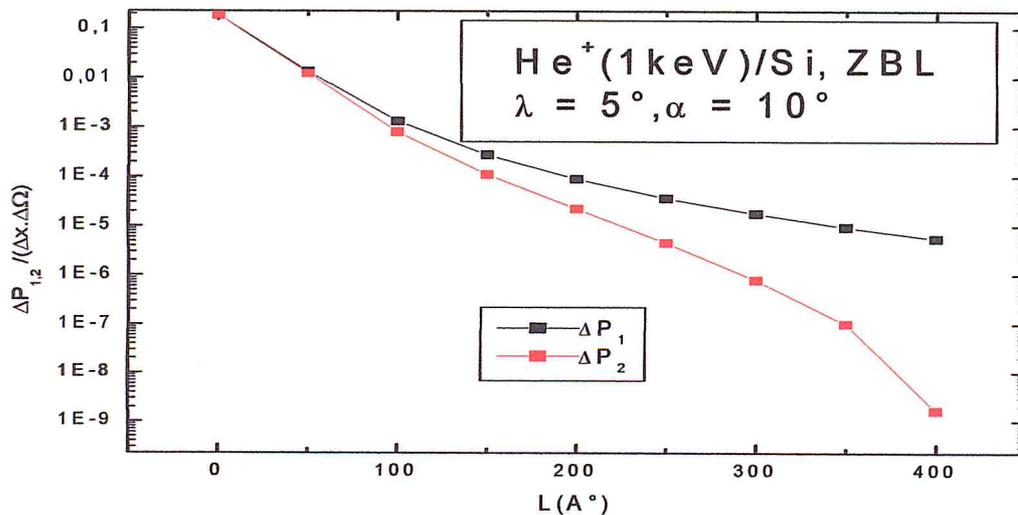


Figure 3.34 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 \text{ keV})/\text{Si}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

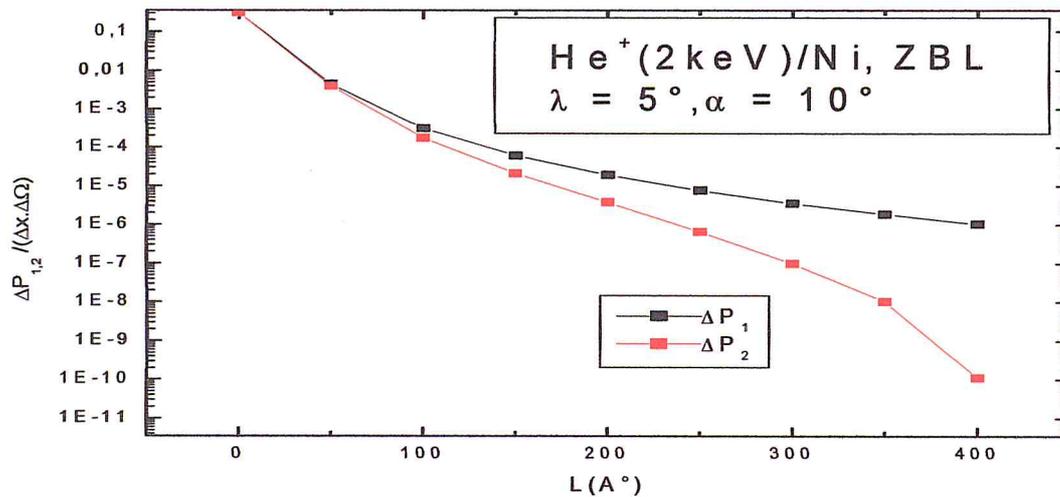


Figure 3.35 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(2 \text{ keV})/\text{Ni}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 10^\circ$

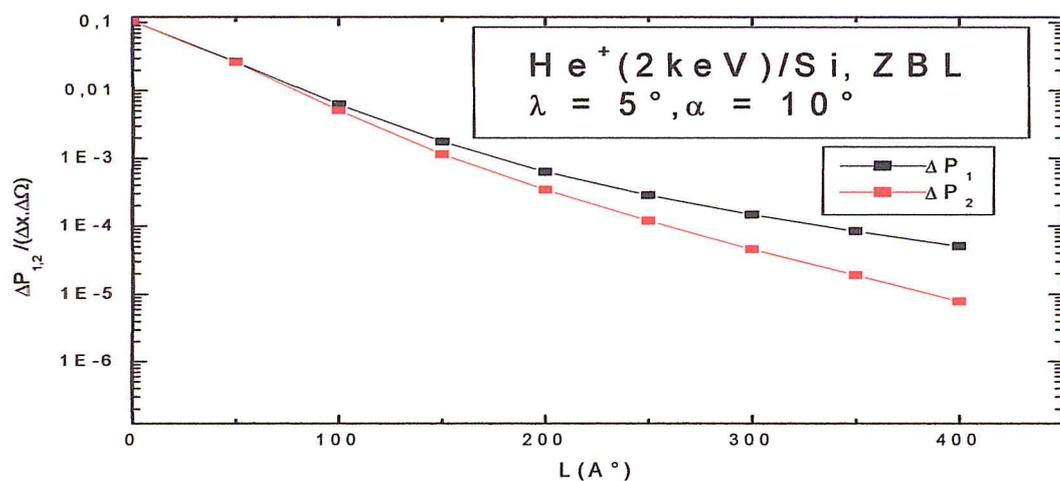


Figure 3.36: Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(2 \text{ keV})/\text{Si}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

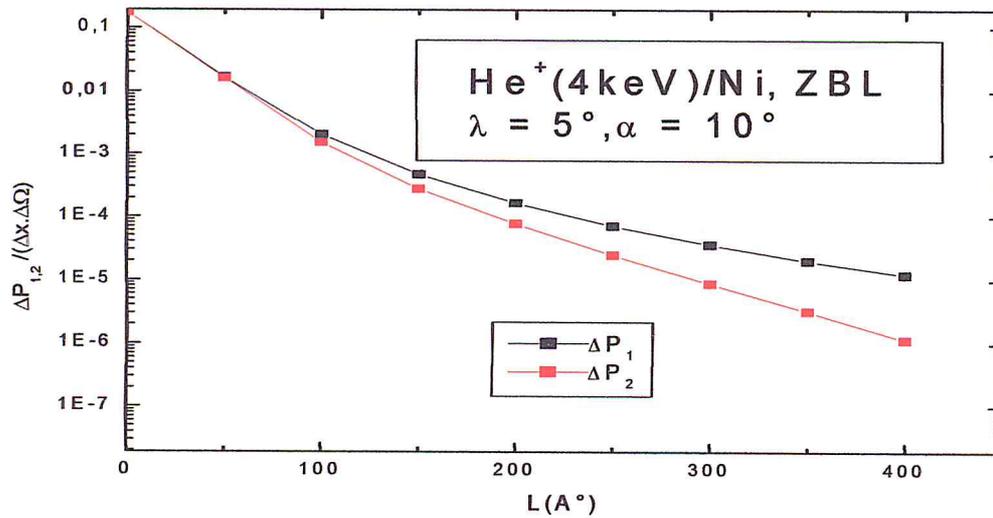


Figure 3.37 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(4 \text{ keV})/\text{Ni}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 10^\circ$

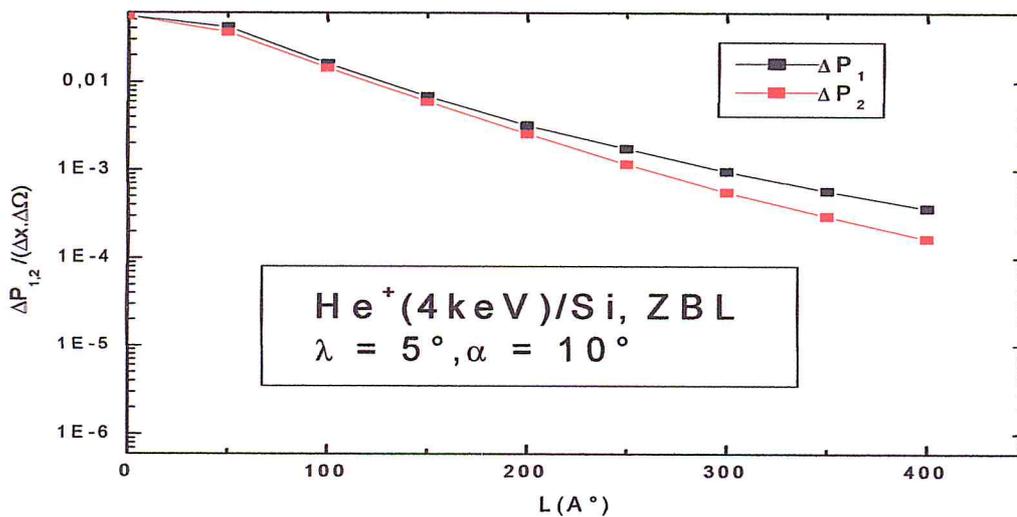


Figure 3.38 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(4 \text{ keV})/\text{Si}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

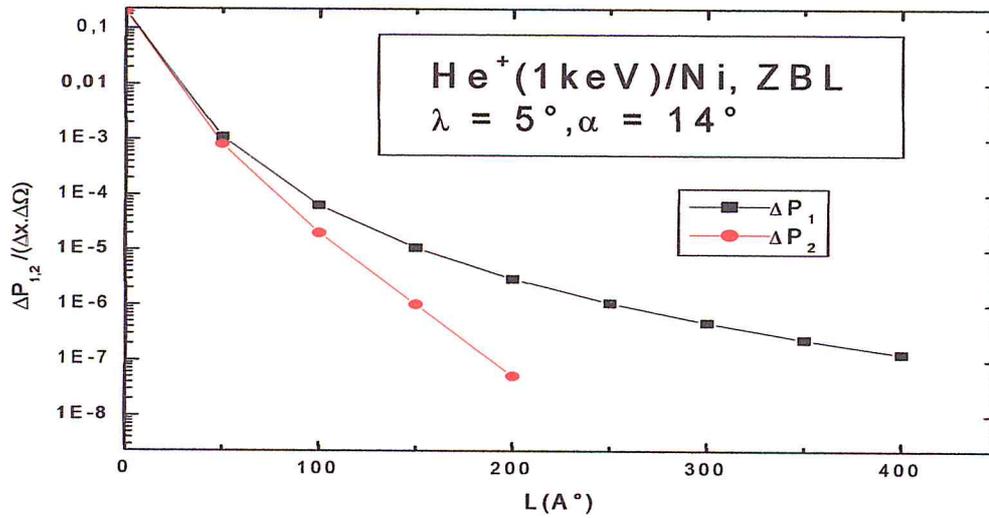


Figure 3.39 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 \text{ keV})/\text{Ni}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 14^\circ$

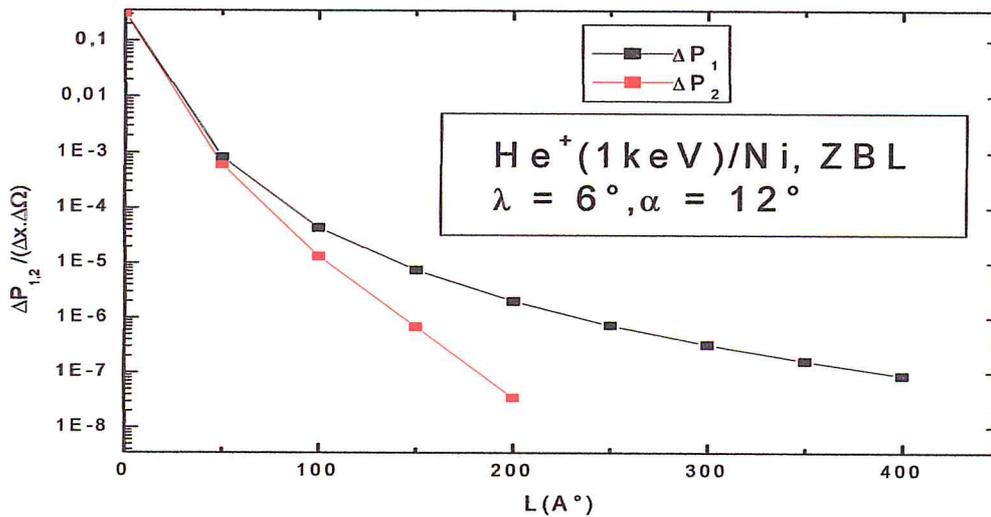


Figure 3.40 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 \text{ keV})/\text{Ni}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 6^\circ$, $\alpha = 12^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

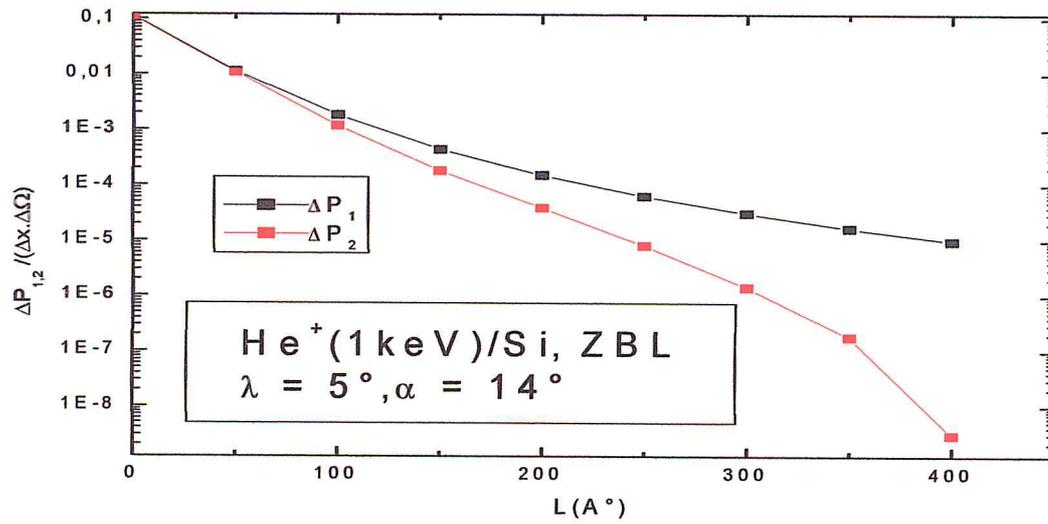


Figure 3.41 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 \text{ keV})/\text{Si}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 5^\circ$, $\alpha = 14^\circ$

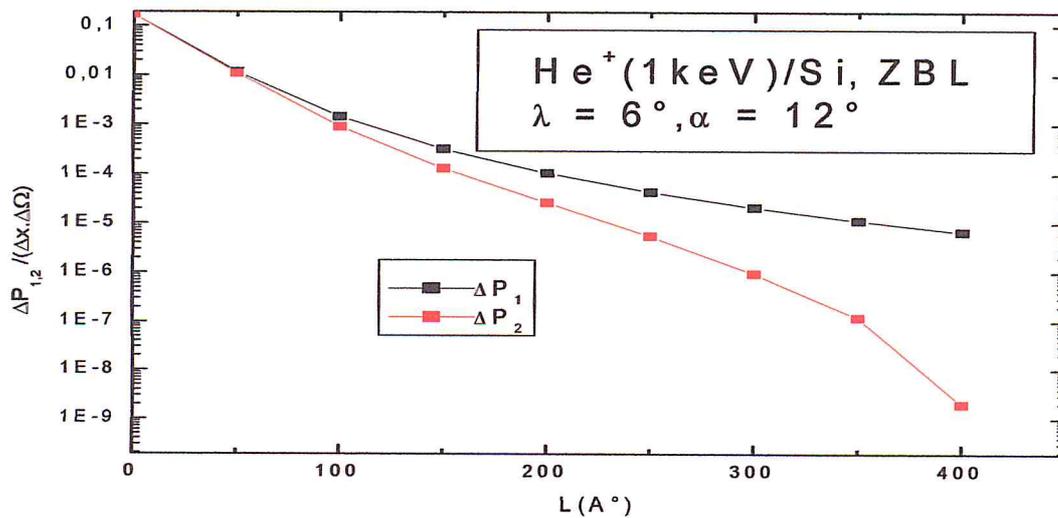


Figure 3.42 : Variation des probabilités de diffusion ΔP_1 et ΔP_2 en fonction de la distance parcourue L pour le système $\text{He}^+(1 \text{ keV})/\text{Si}$ et pour le potentiel ZBL. Les angles d'incidence et de diffusion sont respectivement $\lambda = 6^\circ$, $\alpha = 12^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

Nous remarquons, dans les deux cas et pour les faibles parcours, que les valeurs calculées de ΔP_1 et ΔP_2 sont pratiquement identiques. Ceci s'explique par le fait que pour ces parcours, la perte d'énergie est faible et peut par conséquent être négligée. Cependant, pour des valeurs plus élevées de L , la perte d'énergie devient plus importante et nous obtenons ainsi des valeurs de ΔP_2 plus faibles que celles de ΔP_1 .

3.3.2 la correction relative τ_c :

Nous introduisons la correction relative notée (τ_c) comme suit :

$$\tau_c = \frac{\Delta p_1 - \Delta p_2}{\Delta p_2}$$

Nous avons calculé la correction relative (τ_c) pour les deux systèmes He+/Ni et He+/Si en fonction de la distance parcourue .

Nous présentons ici quelques résultats :

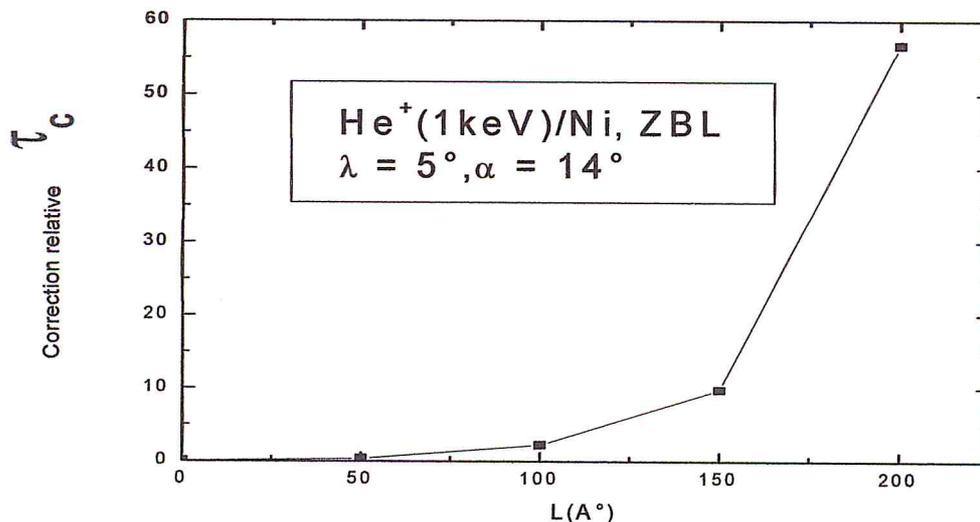


Figure 3.43 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de la distance parcourue pour le système (He⁺/Ni) de l'énergie $E = 1$ keV pour $\alpha = 14^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

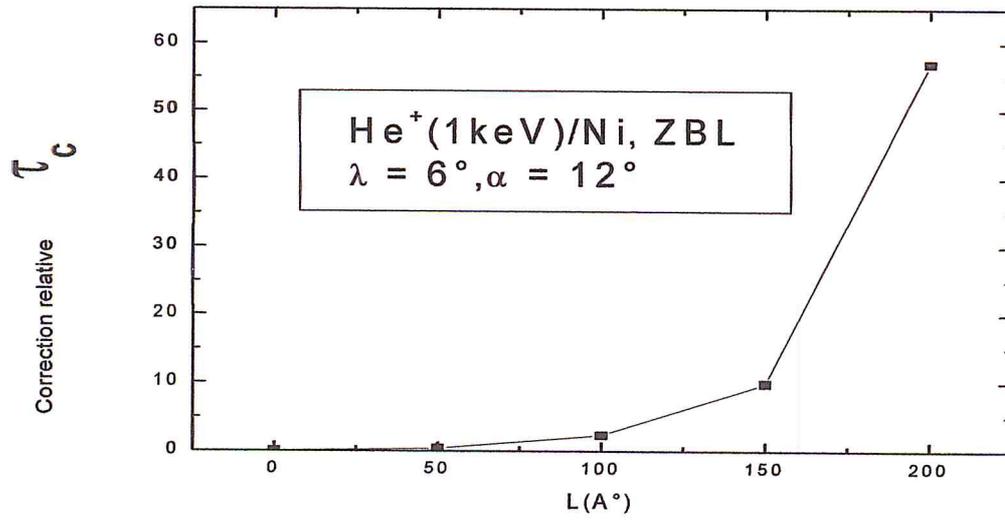


Figure 3.44 : variation de la correction relative (τ_C) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Ni) de l'énergie $E = 1 \text{ keV}$ pour $\alpha = 12^\circ$

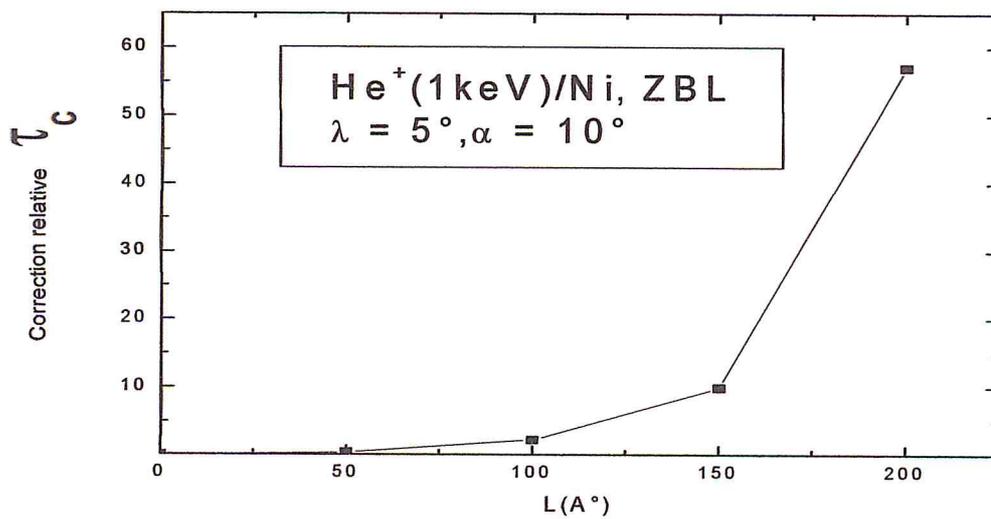


Figure 3.45 : variation de la correction relative (τ_C) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Ni) de l'énergie $E = 1 \text{ keV}$ pour $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

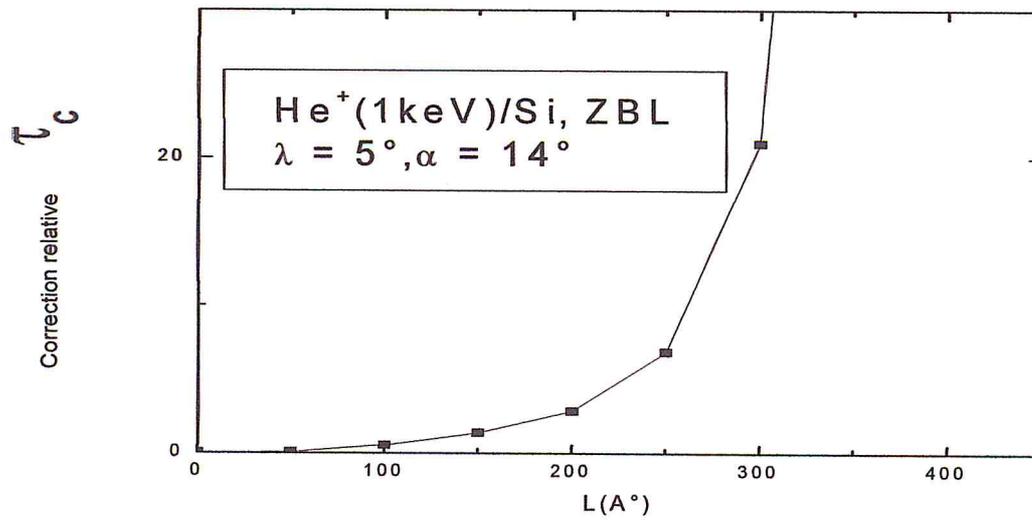


Figure 3.46 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Si) de l'énergie $E = 1 \text{ keV}$ pour $\alpha = 14^\circ$

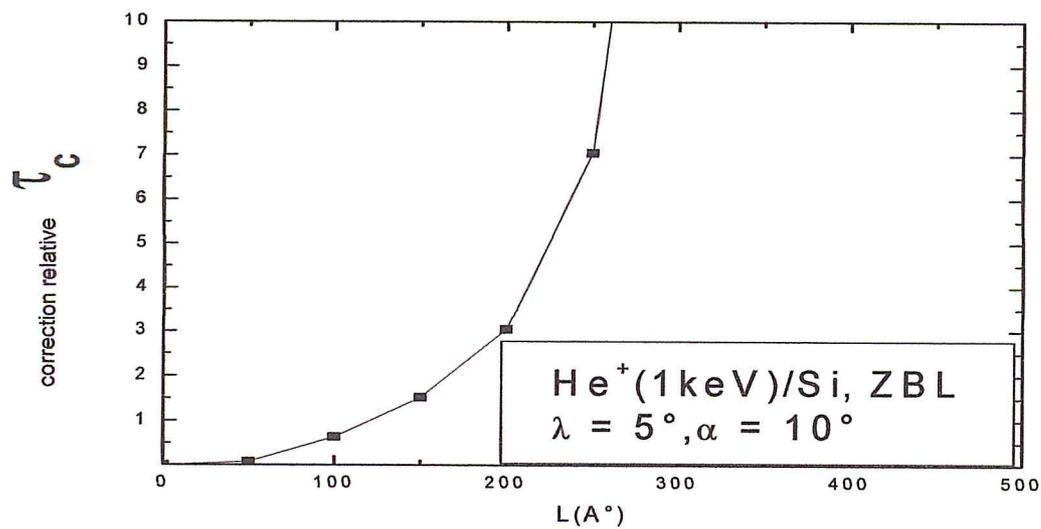


Figure 3.47 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de la distance parcourue pour le système (He^+/Si) de l'énergie $E = 1 \text{ keV}$ pour $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

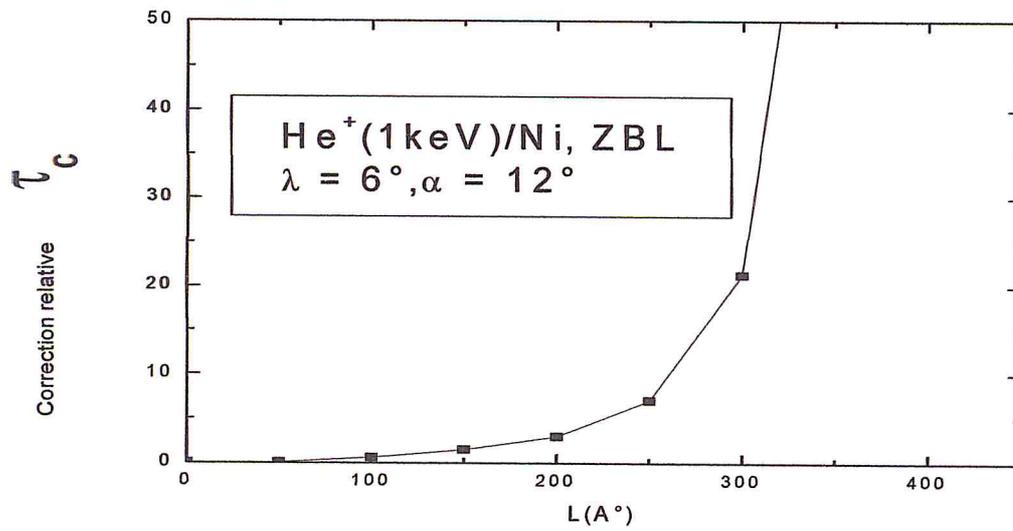


Figure 3.48 : variation de la correction relative (τ_C) en fonction de la distance parcourue pour système (He⁺/Si) de l'énergie E = 1 kev pour $\alpha = 12^\circ$

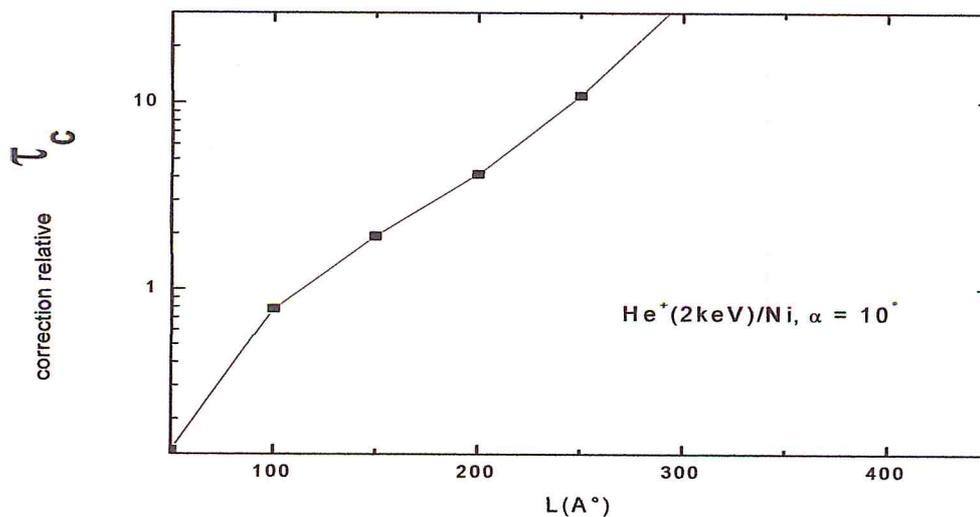


Figure 3.49 : variation de la correction relative (τ_C) en fonction de la distance parcourue pour le système (He⁺/Ni) de l'énergie E = 2 kev pour $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

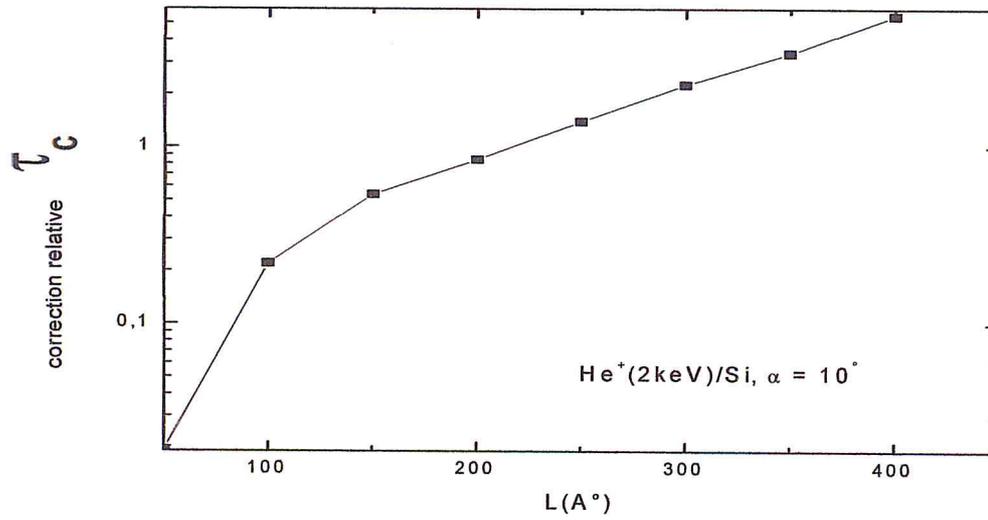


Figure 3.50 : variation de la correction relative (τ_C) en fonction de la distance parcourue pour système (He⁺/Si) de l'énergie E = 2 keV pour $\alpha = 10^\circ$

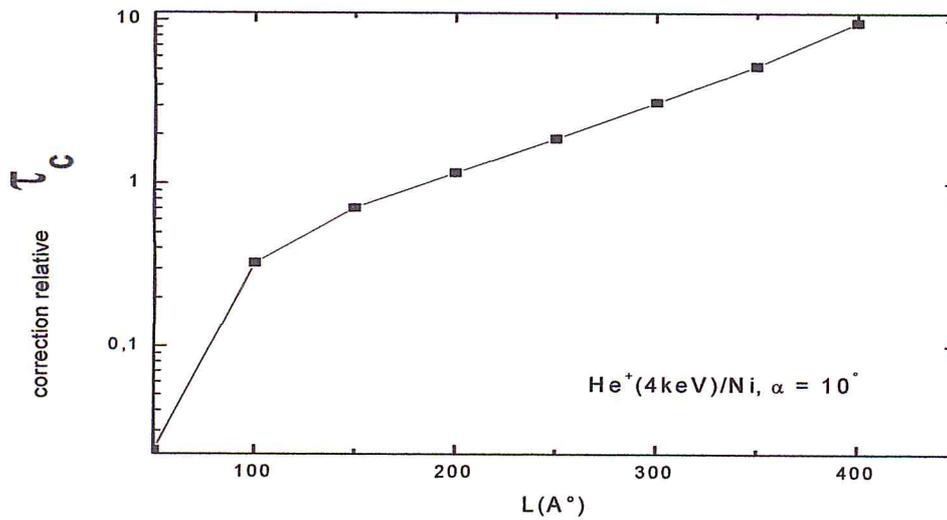


Figure 3.51 : variation de la correction relative (τ_C) en fonction de la distance parcourue pour système (He⁺/Ni) de l'énergie E = 4 keV pour $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

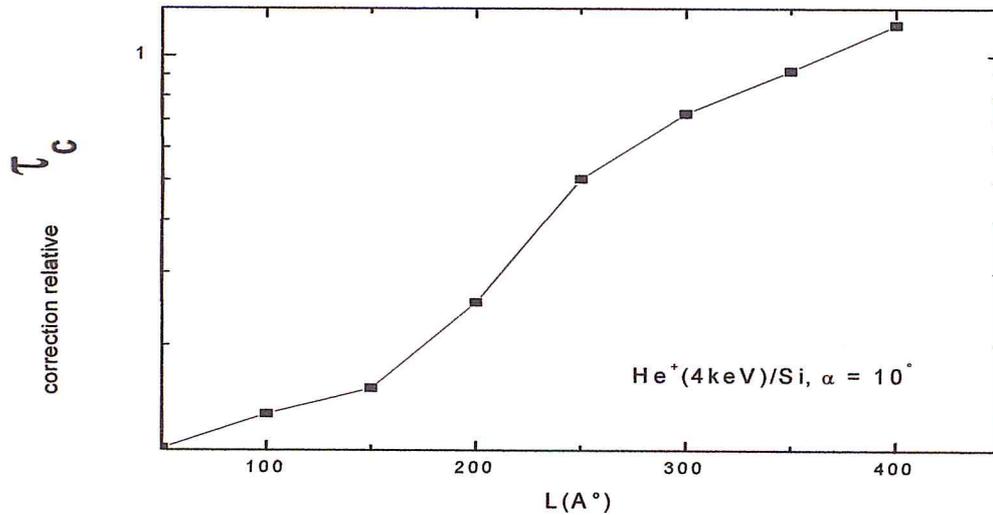


Figure 3.52 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de la distance parcourue pour système (He^+/Si) de l'énergie $E = 4 \text{ keV}$ pour $\alpha = 10^\circ$

Si on introduit la perte d'énergie dans le calcul de la probabilité nous avons obtenu nouvelles valeurs de la probabilité notées ΔP_2 .

On remarque pour les faibles valeurs du parcours L , les valeurs de ΔP_1 et ΔP_2 sont identiques ($\Delta p_1 = \Delta p_2$), car dans cette région, la perte d'énergie est faible et donc on peut la négliger. Pour des parcours plus grands, les valeurs de ΔP_2 deviennent plus faibles que celles de ΔP_1 .

On remarque que pour les faibles valeurs du parcours L , la correction relative τ_c est nulle car les valeurs de ΔP_1 et ΔP_2 sont identiques ($\Delta p_1 = \Delta p_2$), il est possible donc d'avoir une faible correction pour les faibles parcours.

On constate alors que pour les deux systèmes (He^+/Ni et He^+/Si), si la longueur parcourue augmente la correction relative augmente.

Nous avons calculé la correction relative (τ_c) pour différents systèmes He^+/Ni et He^+/Si en fonction de l'énergie incidente.

Nous présentons ici quelques résultats :

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

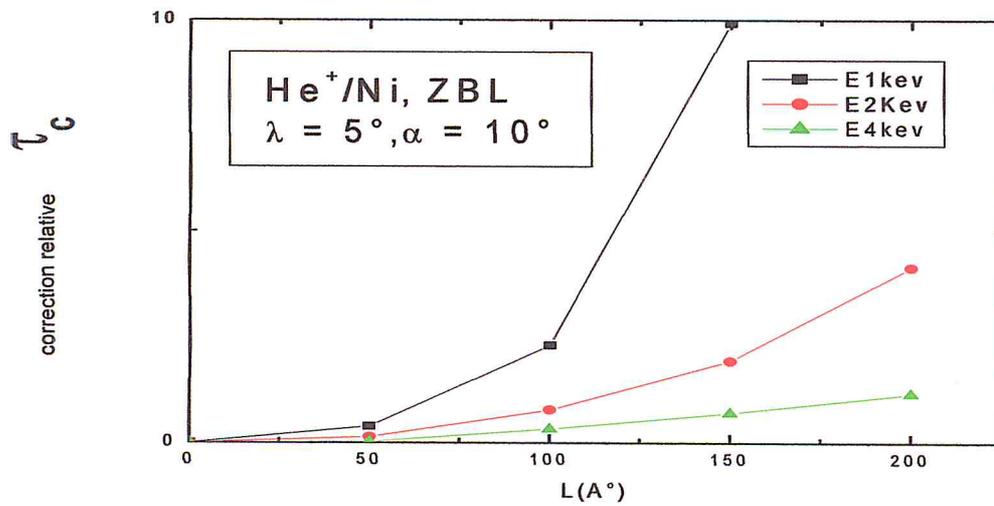


Figure 3.53 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de l'énergie incidente pour le système (He^+/Ni), pour $\alpha = 10^\circ$

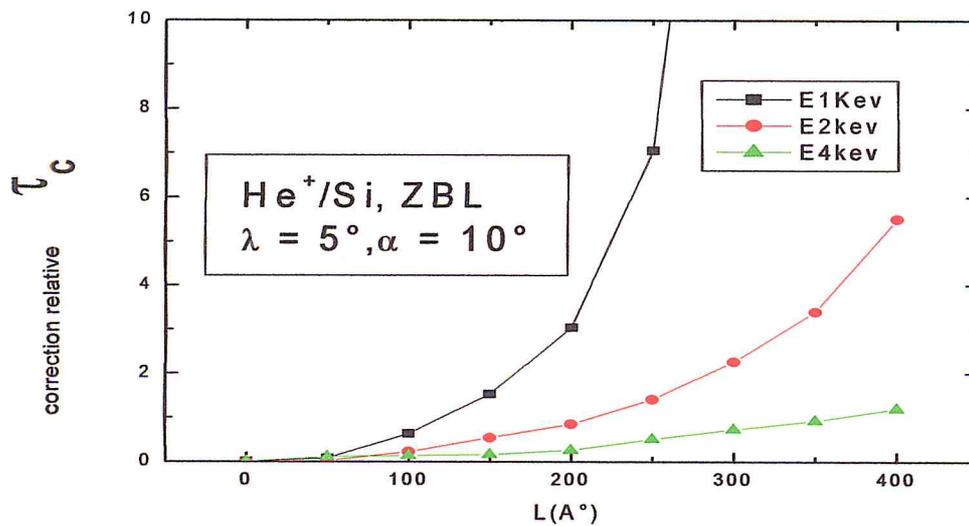


Figure 3.54: variation de la correction relative (τ_c) en fonction de l'énergie incidente pour le système (He^+/Si), pour $\alpha = 10^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

On remarque que pour les deux systèmes quand l'énergie incidente augmente, la correction relative diminue.

Nous avons calculé la correction relative (τ_c) pour les deux systèmes He⁺/Ni et He⁺/Si en fonction de l'angle de diffusion.

Nous présentons ici quelques résultats :

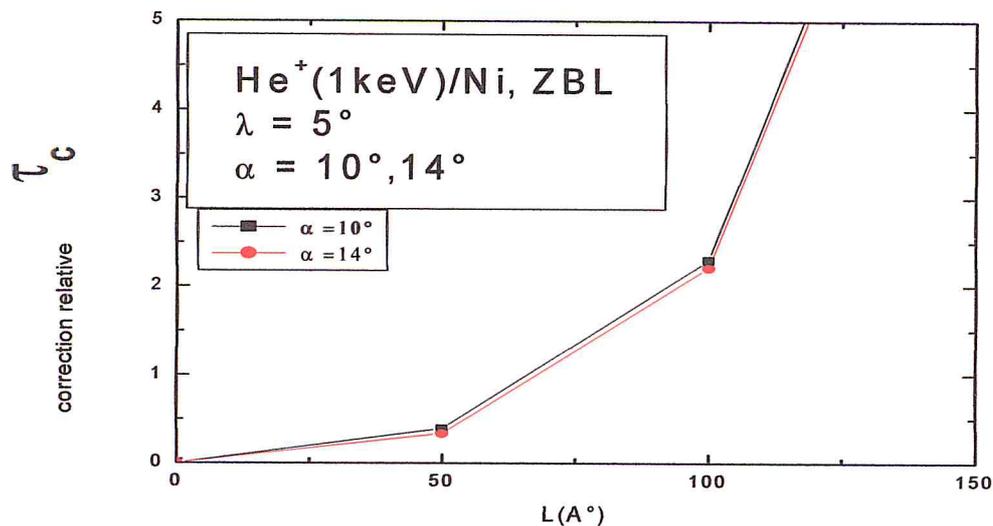


Figure 3.55: variation de la correction relative (τ_c) en fonction de l'angle de diffusion, pour le système (He⁺/Ni), pour $\alpha = 10^\circ, 14^\circ$

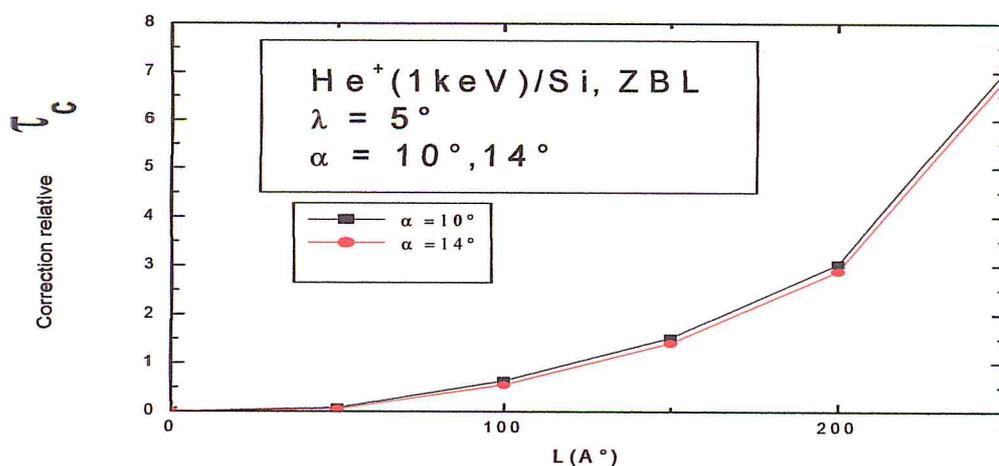


Figure 3.56: variation de la correction relative (τ_c) en fonction de l'angle de diffusion, pour système (He⁺/Si), pour $\alpha = 10^\circ, 14^\circ$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

Pour les deux systèmes on remarque :

Si l'angle de diffusion augmente l'effet de la perte d'énergie diminue.

Nous avons calculé la correction relative (τ_c) en fonction de Z (cible) numéro atomique de la cible .

Nous présentons ici quelques résultats :

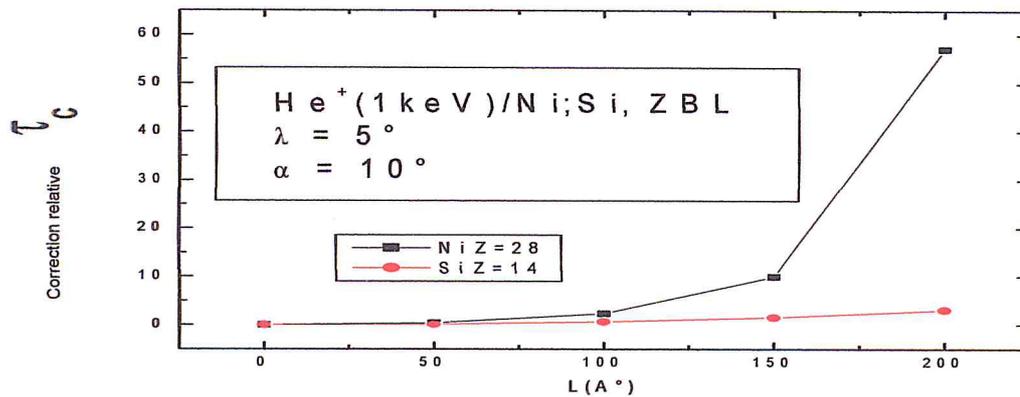


Figure 3.57: variation de la correction relative (τ_c) en fonction de Z (cible) , pour le système ($\text{He}^+/\text{Ni},\text{Si}$) , pour $\alpha = 10^\circ$ et $E=1\text{keV}$

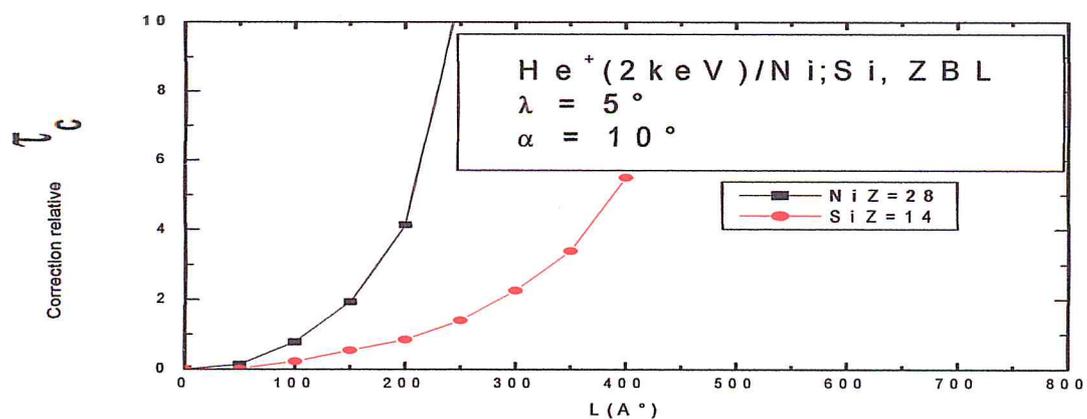


Figure 3.58 : variation de la correction relative (τ_c) en fonction de Z (cible) , pour le système ($\text{He}^+/\text{Ni},\text{Si}$) , pour $\alpha = 10^\circ$ et $E=2\text{keV}$

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

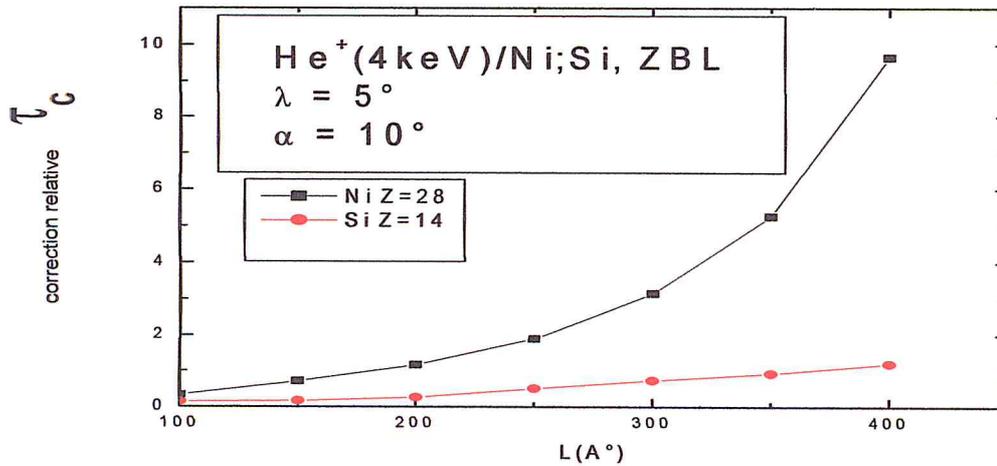


Figure 3.59: variation de la correction relative (τ_C) en fonction de Z (cible), pour le système ($\text{He}^+/\text{Ni}, \text{Si}$), pour $\alpha = 10^\circ$ et $E=4\text{keV}$

Si le Numéro atomique de l'atome cible (Z) augmente l'effet de la perte d'énergie augmente.

3.3.3 conclusion :

Pour un faisceau d'ion de faible énergie entre 1 à 4 Kev, Nous remarquons, dans les deux cas (Ni et Si) et pour les faibles parcours, que les valeurs calculées de ΔP_1 et ΔP_2 sont pratiquement identiques. Ceci s'explique par le fait que pour ces parcours, la perte d'énergie est faible et peut par conséquent être négligée. Cependant, pour des valeurs plus élevées de L , la perte d'énergie devient plus importante et nous obtenons ainsi des valeurs de ΔP_2 plus faibles que celles de ΔP_1 .

Pour confirmer l'influence de la perte d'énergie sur la probabilité de diffusion on a calculé la correction relative τ_C on remarqué pour les faibles parcours elle est (nulle) car les valeurs de ΔP_1 et ΔP_2 sont identiques, mais pour des parcours plus grands, elle devient plus importantes et dans ce cas on ne peut plus négliger l'effet de la perte d'énergie.

CHAPITRE 3 : Résultats et discussions

On a remarqué que la correction relative est inversement proportionnelle à l'angle de diffusion et l'énergie incidente de faisceau d'ions est proportionnelle au numéro atomique de la cible et a la distance parcourue.

Conclusion générale

Ce travail porte 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 l'équation de transport, 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 probabilités de diffusion des ions en fonction de leur parcours, en première étape nous avons négligé la perte d'énergie, la probabilité obtenu notée ΔP_1 , après, nous avons introduit la perte d'énergie dans le calcul de la probabilité et nous avons obtenu de nouvelles valeurs de la probabilité notées ΔP_2 . Pour les faibles valeurs du parcours L , les valeurs de ΔP_1 et ΔP_2 sont pratiquement identiques, car dans cette région, la perte d'énergie est faible et peut donc être négligée. Pour des parcours plus grands, les valeurs de ΔP_2 deviennent plus faibles que celles de ΔP_1 . Pour affirmer l'influence de la perte d'énergie sur la probabilité de diffusion on a calculé la correction relative τ_c nous avons remarqué que pour les faibles parcours elle est nulle car les valeurs de ΔP_1 et ΔP_2 sont identiques, mais Pour des parcours plus grands, elle devient importantes on ne peut pas négliger l'effet de la perte d'énergie.

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

Différentes application et perspectives :

Le problème majeur de cette méthode réside dans le calcul de probabilité de diffusion ΔP pour les faibles parcours. Le temps de calcul (d'exécution) devient important pour des parcours de l'ordre de quelques dizaines d'angström.(concernant le programme qui calcule la probabilité de diffusion).

Nous signalons finalement qu'il serait intéressant de calculer le coefficient de réflexion en utilisant ce modèle et de comparer les spectres en énergie ainsi calculés à des spectres expérimentaux. Nous signalons finalement qu'il serait intéressant de trouver un moyen pour calculer la probabilité ΔP plus rapidement pour les faibles distances parcourues.

Il est possible d'étudier l'effet de la perte d'énergie sur la probabilité de diffusion non seulement pour le potentiel ZBL.

REFERENCES

- [1]: H. Niehus, W. Heiland and E. Taglaurer. Surf. Sci. Rep. 17(1993) 213.
- [2]: W. Eckstein, V.A. Molchanov and H. Verbeek. Nuc. Instr. Meth 149 (1978) 599.
- [3]: D.C. Paine, T. Whitson, D. Janiac, R. Beresford and C.O. Yang, J. Appl. Phys., 85 (1999) 12.
- [4] : M.Benroukia Thèse de Magister, I.P, U.S.T.H.B. Alger (2012).
- [5] : J. P. Biersack and L. G. Haggemark, Nucl. Instrum. Methods 174, 257 (1980).
- [6]: P. Sigmund and K. B. Winterbon, Nucl. Instr. Meth. 119 (1974) 541.
- [7]: J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark. The stopping and ranges of ions in Solids Interaction. Pergamon Press. New York 1985.
- [8] : B. Arezki. Thèse de Magister, I.P, U.S.T.H.B. Alger (1997).
- [9] : H. Goldstein. Classical Mechanics. Addison-Wesley, Cambridge, 1950.
- [10]: J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schiott, Mat. Fys. Medd.Dan. Vid. Sels. 33 (1963) 14.
- [11]: J. Lindhard M. Scharff, 1961, Phys. Rev. 124, 128.
- [12]: j. Lindhard, V. Nielsen and M. Scharff. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk 36, no 10. (1968).
- [13]: M T Robinson and I M Torens , phys.Rev B9, 5008 (1974).
- [14]: P. Sigmund .physica scripta. 28(1982) 257.
- [15]: k .B. Winterbon , P. Sigmund and J.B. Sanders . Mat.fys . Medd Dan Vid .selsk. 37,no14 (1970).
- [16]: Z. Luo, Q.Hou. J.Appl.Phys. , Vol 74 . no 10 (1993) 6007.
- [17]: T.J . Hoffman , H. L Dodds , M . T Robinson and D.K. Holmes Nuc . Sci and Eng 68 (1978) 204.
- [18]: R.Smith ,M . Jakas , D.Ashworth , B. Oven , M . Bowyer , I . chakarov et RWebb, Atomic and ion collision in solids and at surfaces (1995) Ed .R .Smith .
- [19]: W.L.Morgan , Appl .Phys . Lett .55(2) (1989)106.
- [20]: A. D. Marwick and P. Sigmund, Nucl. Instr. Meth. 128 (1975) 271.
- [21]: L. Meyer; Phys. Stat. Sol. 44 (1971) 253.
- [22]: K. Khalal-Kouache. thèse de doctorat. Alger 2002.
- [23] : A. Mekhtiche. Thèse de Magister, USTHB, Alger (2005).
- [24] : K. Khalal-Kouache, A.C. Chami, M. Boudjema, P. Benoit-Cattin, C. Benazeth, Y.Boudouma, Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. B 183 (2001) 279.
- [25] : J.A. Yarmoff, Y. Yang, G.F. Lui, X. Chen, Z. Roubek, Vaccum 73 (2004) 25.
- [26]: J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark. The stopping and ranges of ions in Solids Interaction. Pergamon Press. New York 2010 .