REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEURE ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE MEDEA

FACULTE DES SCIENCES



Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de **Master**

En physique

Spécialité : Physique des matériaux

Par :

BOUREGAA NAOUAL
HAMIDI IMANE

Thème :

Simulation Monte Carlo de la transmission des ions lents à travers des matériaux amorphes

Soutenue publiquement le : 22/09/2020, Devant le jury composé de :

Dr. BOUKAOUD Abdelali	Grade : MCB	Université de Médéa	Président
Mme. DAHMANE Djamila	Grade : MAA	Université de Médéa	Examinatrice
Dr. RADJAI Missoum	Grade : MCB	Université de Médéa	Examinateur
Dr. MEKHTICHE Abdelhalim	Grade : MCB	Université de Médéa	Encadreur

Année universitaire : 2019/2020

Dédicaces

A mes très chers parents.

A mes chères sœurs et à mes chers frères.

A ma sœur Hafesa.

A toute ma famille.

A mon binôme.

A tous mes amis.

A tous les collègues de la même spécialité.

A toutes les personnes qui ont participé à la réalisation de ce travail.

A tous ceux qui aiment ce pays.

Je dédie ce modeste travail.

NAOUAL.B

Dédicaces

Je Dédie ce mémoire à mon père qui a été mon support durant toutes les années d'étude, qui a veillé tout au long de ma vie à m'encourager, à me donner de l'aide et à me protéger.

A ma mère qui a éclairé mon chemin et qui m'a encouragé et soutenue tout au long de mes études.

A mon frère Kamel.

A mes sœurs: Ratiba, Sarah, Hayet et Rania.

IMANE.H

Remerciement

Tout d'abord, nous remercions Dien, le tout puissant, de nous avoir donné la force, le courage, la patience, la volonté pour terminer ce travail.

Nous adressons toutes nos gratitudes et nos remerciements à monsieur Dr. MEKHTICHE Abdelhalim pour avoir accepté l'encadrement scientifique de ce travail, et de l'avoir suivi minutieusement jusqu'à sa fin, et aussi pour sa patience, sa disponibilité et surtout ses judicieux conseils, qui ont contribué à alimenter nos réflexions.

Mes remerciements s'adressent à l'ensemble des membres examinateurs du jury, monsieur Dr. BOUKAOUD. Abdelali, monsieur Dr. RADJAI Missoum et Mme DAHMANE Djamila pour l'intérêt qu'ils ont manifesté à l'égard de ce travail et par les critiques qu'ils ont apportés en tant que membres de jury.

Aussi nous remercions nos familles et nos enseignants pour leurs aides durant nos études et pour leurs soutiens.

Enfin, nous remercions toutes les personnes qui ont contribué de prés ou de loin à la réalisation de ce modeste travail.

ص خ ل م: لا تزال دراسة تفاعل الأيونات مع المادة موضوع الكثير من العمل العلمي. أصبحت المحاكاة العددية أداة ضرورية لتفسير النتائج التي تم الحصول عليها خلال تجارب انتقال الأيونات. حيث تعد طريقة مونت كارلو أداة فعالة لمحاكاة المسارات العشوائية للأيونات في قصف الأهداف الصلبة. يتكون هذا العمل من محاكاة مسار الأيونات داخل هدف صلب بطريقة مونت كارلو على تقريب الاصطدام الثنائي (BCA). وفي هذا العمل ,نحن مهتمون بحساب زاوية الانتشار والتوزيع الزاوي للأيونات المرسلة لكل من المواد التالية (الكربون والألمنيوم والفضة والنحاس والبلاديوم والذهب). سيتم إجراء مقارنة بين نتائجنا وتلك التي تم تحديدها تجريبيا ,وحصلنا على اتفاق جيد.

Résumé: L'étude de l'interaction des ions avec la matière fait encore l'objet de nombreux travaux scientifiques. La simulation numérique est devenue un outil nécessaire pour l'interprétation des résultats obtenus au cours des expériences de transmission. La méthode de Monte Carlo est un outil efficace pour la simulation des trajectoires aléatoires des ions dans bombardements de cible solide. Ce travail consiste à simuler la trajectoire des ions à l'intérieur d'une cible solide par la méthode Monte Carlo basée sur l'approximation des collisions binaire(BCA). Nous nous intéressons dans ce travail à calculés de l'angle de diffusion et Les distributions angulaires d'ions transmis pour chacun des matériaux suivants (carbone, aluminium et argent, cuivre et palladium, or).Une comparaison de nos résultats à celles déterminées expérimentalement sera effectuée nous avons obtenu un bon accord.

Abstract: The study of the interaction of ions with matter is still the subject of much scientific work. Numerical simulation has become a necessary tool for the interpretation of the results obtained during the experiments of ion transmission. The Monte Carlo method is an efficient tool for the simulation of random trajectories of ions in solid target bombardments. This work consists in simulating the trajectory of the ions inside a solid target by the Monte Carlo method based on the binary collision approximation (BCA). We are interested in this work in calculating the angle of diffusion and the angular distribution of the transmitted ions for each of the following materials (carbon, aluminum and silver, copper and palladium, gold). A comparison of our results with those determined experimentally will be made.We obtained a good agreement.

Table des matières :

Introduction générale 10

Chapitre 1 : Interaction des ions avec la matière 13

Introduction 14

1.1 Description classique de la diffusion 14

1.2 Collision élastique 14

1.3 L'intégrale de diffusion 16

1.4 Potentiel d'interaction 19

1.5 Section efficace de la diffusion élastique 21

1.6 Perte d'énergie 22

1.6.1 Perte d'énergie inélastique (électronique) 23

1.6.2 Perte d'énergie élastique (nucléaire) 23

1.6.3 Perte d'énergie totale 24

1.7 Transmission des ions dans la cible 25

1.8 Simulation numérique 26

1.8.1 La simulation Monte Carlo 26

1.8.2 La dynamique moléculaire 27

1.8.3 La théorie de transport 27

Chapitre 2 : Simulation Monte Carlo des ions transmis 28

Introduction 29

2.1 Bref historique de la méthode 29

2.2 Les nombres aléatoires 30

2.3 L'approximation de collision binaire 33

2.4 Transport des ions dans la matière par simulation Monte Carlo 34

2.4.1 Calcul de l'angle de diffusion (présentation de la méthode de Lobatto) 36

2.4.2 Méthode de simulation 39

2.5 Calcul de la distribution angulaire 42
Chapitre 3 : Résultats et discussions 43
Introduction 44
3.1 Calcul de l'angle de diffusion 44
3.2 Calcul de la section efficace différentielle de la diffusion 48
3.3 Calcul des distributions angulaires des particules transmises 49
3.4 Comparaison des distributions angulaires avec l'expérience 51
Conclusion 57
Conclusion générale 58
Références 60

Liste des figures :

Chapitre 1 :

Figure 1. 1: Représentation schématique de la collision élastique d'un ion de masse M1 avec un atome cible de la masse M2. 15

Figure 1. 2:Schéma représentant la diffusion de la particule fictive dans le cdm où p est le paramètre d'impact. 16

Figure 1. 3:Variation de en fonction du paramètre d'impact pour des énergies réduites entre 1et 10. 18

Figure 1. 4:Variation de la fonction d'écran en fonction de x=r/a pour les trois potentiels ZBL, TFM et LJ. 21

Figure 1. 5: Variation des valeurs de pouvoir d'arrêt électronique, nucléaire et total en fonction de l'énergie des ions H^+ dans une cible d'aluminium. 25

Figure 1. 6:Schéma représentant le processus des diffusions multiples. 26

Chapitre 2 :

Figure2. 1: La fonction Ran2 écrite en langage fortran 33

Figure2. 2:Vue schématique de la séquence des collisions dans l'approximation de la collision binaire 34

Figure2. 3:Schéma représentant les différentes situations rencontrées au cours de l'interaction des ions dans un solide. 35

Chapitre 3 :

Figure 3. 1:variation de la distance minimale x_0 en fonction du paramètre d'impact réduit β pour différentes valeurs de l'énergie réduite ε 45

Figure 3. 2:Variation de l'angle de diffusion dans le CDM en fonction de β. 46

Figure 3. 3:Variation de $\sin^2 \frac{\theta_c}{2}$ en fonction de β pour différentes valeurs de ε 47

Figure 3. 4:La section efficace différentiel le en fonction de l'angle de diffusion dans le système de centre de masse dans le cas de potentiel TFM. 48

Figure 3. 5:La section efficace différentiel le en fonction de l'angle de diffusion dans le système de centre de masse dans le cas de potentiel ZBL. 49

Figure 3. 6:Distributions angulaires calculées d'ions H+ de 9 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 200 Å. 50

Figure 3. 7:Distributions angulaires calculées d'ions H+ de 10 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 159 Å..... 50

Figure 3. 8:Distributions angulaires calculées d'ions H+ de 10 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 159 Å comparées aux résultats expérimentaux [ARC05]..... 51

Figure 3. 9:Distributions angulaires calculées d'ions H+ de 9 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 200 Å comparées aux résultats expérimentaux [FAM00]. 52

Figure 3. 10:Distributions angulaires d'ions H+ (6keV) transmis à travers une cible de carbone d'épaisseur 130 Å comparée aux résultats de [CAN11]. 53

Figure 3. 11:Distributions angulaires d'ions H+ (9 keV) transmis à travers une cible Ag d'épaisseur 250 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CAN10]. 54

Figure 3. 12:Distributions angulaires d'ions H+ (9 keV) transmis à travers une cible de Cu d'épaisseur 157 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CAN10]. 55

Figure 3. 13:Distributions angulaires d'ions H+ (9 keV) transmis à travers une cible de Pd d'épaisseur 170 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CEL13]. 56

Figure 3. 14:Distributions angulaires calculées d'ions H+ de 10 keV transmis à travers une cible Au d'épaisseur 153 Å comparées aux résultats expérimentaux [ARC05]..... 57

Liste des tableaux :

Chapitre 1

Tableau1. 1: Valeurs des constantes ajustées α_i et β_i pour les potentiels TFM, ZBL. 20

Chapitre 2

Tableau2. 1: Exemple des séquences des nombres aléatoires obtenus par la méthode du carré médian. 31

Tableau2. 2: Représente les variables x_i et ω_i , $\sin(\pi z/2)$ et $\cos(\pi z/2)$ 39

Chapitre 3

Tableau3. 1: Valeurs de la distances minimales d'approche et l'angle de diffusion dans le CDM pour différentes valeurs de ε et β. 47

Introduction générale

L'étude de l'interaction des rayonnements avec la matière représente un intérêt considérable dans toutes les domaines de la physique. Au domaine de la physique des matériaux, la compréhension de cette interaction est fondamentale lors de développement des différentes techniques d'analyses.

Les techniques d'analyses mettant en jeu les ions comme projectiles ont montré depuis longtemps leur fiabilité. Leur principe général est basé sur le bombardement ionique d'un matériau dans des conditions géométriques bien définies. La connaissance de l'état (masse, énergie, charge, direction….) des particules rétro-diffusées, éjectés ou transmises permettent d'avoir des informations sur le matériau (composition, état de surface, densité…..).

En parallèle, la simulation numérique des phénomènes physiques est une complémentarité nécessaire pour la compréhension des divers processus physiques. Elle sert également à prévoir les résultats d'une expérience dans le cas où le dispositif expérimental est très couteux ou inaccessible. Et la simulation numérique est devenue un outil nécessaire pour l'interprétation des résultats obtenus au cours des expériences de diffusion d'ions par une surface solide [ECK91].

Il existe trois principales techniques de simulation numérique des collisions atomiques des ions dans les solides : simulation Monte-Carlo, la dynamique moléculaire et la théorie de transport.

Les techniques de Monte Carlo sont couramment utilisées en physique des particules, physique des rayonnements, physique médicale et physique des matériaux où elles permettent d'estimer la forme d'un signal ou d'un spectre ayant des caractéristiques semblables à celle des caractéristique réalisées par des systèmes de mesure expérimentaux.

Le véritable développement des méthodes de Monte-Carlo s'est effectué lors de la seconde guerre mondiale au cours de la réalisation de la bombe atomique.

Dans le domaine de l'interaction ion-matière, le principe de cette méthode consiste à suivre en détail, la trajectoire et l'énergie d'un très grand nombre d'ions transmis à travers le matériau. La direction de l'ion après chaque diffusion et son parcours entre deux collisions successives sont choisis en utilisant les nombres aléatoires.

En effet, plusieurs méthodes Monte Carlo basées sur ce principe ont été rapportées. Elles se diffèrent selon la méthode de traitement des processus de collision ion-atome (potentiel

interatomique, diffusion multiple…), de calcul de la perte d'énergie ou dans le choix de l'état des matériaux (cristallins ou amorphes).

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.

Notre objectif dans cette étude est d'élaborer un code basé sur la méthode Monte Carlo afin de simuler les trajectoires des ions de basse énergie transmis à travers un matériau amorphe. Cette simulation va nous permettre de déterminer la distribution angulaire des ions transmis et de les comparer aux résultats expérimentaux [FAM00, ARC05, ARC06, CAN10, CAN11] obtenus par la technique de la transmission d'ions à basse énergie.

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

Dans le deuxième chapitre, nous donnons un rappel historique de la technique monte Carlo tout en présentant les détails de notre méthode de simulation.

Le troisième chapitre sera consacré aux résultats obtenus et qui concernent l'angle de diffusion, la section efficace de diffusion et les distributions angulaires d'ions. Une comparaison de nos résultats à ceux obtenus expérimentalement sera également présentée.

Chapitre 1 : Interaction des ions avec la matière

Introduction:

L'étude de l'interaction des ions avec un matériau, fait appel à la fois à l'expérience et à la simulation numérique. Cette dernière est liée à la compréhension de tous les processus fondamentaux d'interaction entre la particule incidente et le matériau.

En commençant par la validité du traitement classique, nous allons résumer les aspects fondamentaux qui gouvernent l'interaction ion-cible solide : cinématique de la collision, potentiel d'interaction et perte d'énergie. Nous présentons brièvement la théorie des diffusions multiples. Une description des modèles de simulation est fournie également.

1.1 Description classique de la diffusion:

Au cours de l'interaction d'ions lents avec une cible solide, il est possible d'effectuer les lois de la mécanique classique pour décrire le mécanisme de la collision. Le traitement classique est valable lorsque la longueur d'onde associée aux ions incidents, donnée par la relation de De Broglie $\lambda = h/\sqrt{2M_1E}$ est toujours plus petite devant les dimensions caractéristiques de l'interaction (espace interatomique, distance minimale d'approche et paramètre d'impact).

M_1 : La masse de l'ion incident.

E : C'est l'énergie de l'ion incident.

h : Est la constante de Planck.

1.2 Collision élastique:

Considérons la collision élastique entre un projectile de masse M_1 animée d'une vitesse $\vec{v_0}$ avec une cible au repos de masse M_2 . Après la collision, le projectile acquiert une vitesse $\vec{v_1}$ et la cible une vitesse $\vec{v_2}$.

θ Est l'angle de diffusion du projectile et φ est l'angle de recul de l'atome cible (voir figure 1.1). Ces grandeurs sont définies dans le référentiel du laboratoire.

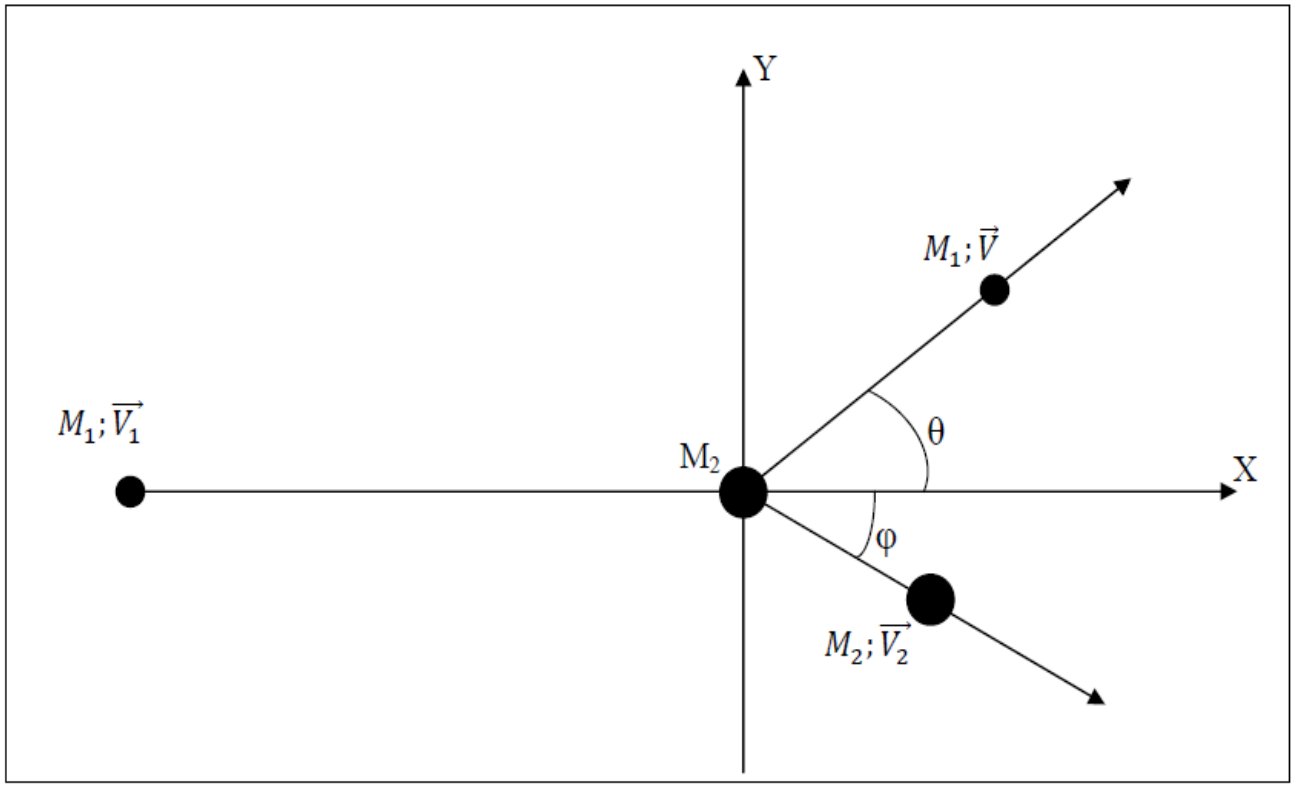


Figure 1. 1: Représentation schématique de la collision élastique d'un ion de masse M1 avec un atome cible de masse M2.

L'application des principes de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement, nous permet de calculer l'énergie du projectile après la diffusion E_1. Elle est donnée par :

$$E_1 = KE_0 \qquad (1.1)$$

E_0 est l'énergie initiale de la particule incidente et K est le facteur cinématique qui est défini par la relation suivante:

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

Où: $A = \frac{M_2}{M_1}$

Dans le cas des collisions pour lesquelles la masse du projectile est inférieure à la masse de l'atome cible A ⟩ 1, seul le signe (+) est possible et nous avons alors une énergie unique de la particule diffusée pour chaque angle de diffusion. Par contre, lorsque le projectile est plus

lourd que l'atome cible A ⟨ 1, les deux signes sont possibles et on observe dans ce cas, deux énergies finales pour chaque angle de diffusion.

1.3 L'intégrale de diffusion :

En utilisant les propriétés liées au passage du système de référentiel de laboratoire vers celui lié au centre de masse (cdm), le problème de deux corps est réduit à celui d'une seul corps de masse réduit $\mu = \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)}$ et soumis le potentiel d'interaction V(r) (figure 1.2)

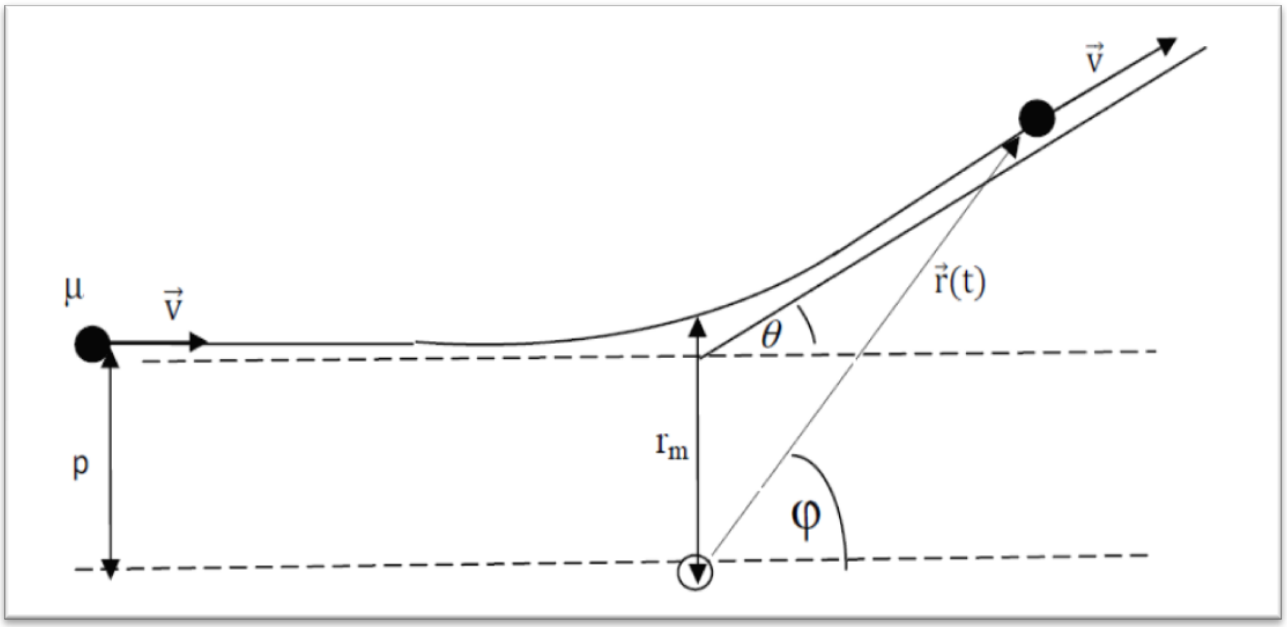


Figure 1. 2:Schéma représentant la diffusion de la particule fictive dans le cdm où p est le paramètre d'impact.

On considère une particule fictive de masse μ, de vitesse v et de position $\vec{r}(r,\varphi)$ (figure 1.2). Si cette particule est soumise à un potentiel central **V(r)**, et en raison de la conservation de la quantité de mouvement, le mouvement des atomes s'effectue dans un plan. L'énergie cinétique dans le système de centre de masse est [ECK91, GOL02]:

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

Cette énergie est donnée par la relation suivante:

$$E_{Cdm} = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_0 \qquad (1.4)$$

La conservation du moment cinétique L donne :

$$r^2 \frac{d\varphi}{dt} = vp \tag{1.5}$$

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

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

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

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

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

A partir des équations (1.5) et (1.6), on trouve :

$$d\varphi = \frac{p}{r^2\sqrt{1 - \frac{V(r_m)}{E_{Cdm}} - \frac{p^2}{r^2}}} dr \tag{1.8}$$

L'angle de diffusion θ dans le système lié au centre de masse, sera obtenu par l'intégration de l'équation (1.8) autour de toutes les toutes les trajectoires possibles. On trouve l'angle de diffusion en fonction du paramètre d'impact p donc :

$$\theta_c = \pi - 2p\int_{r_m}^{\infty} \frac{dr}{r^2\sqrt{1 - \frac{V(r_m)}{E_{Cdm}} - \frac{p^2}{r^2}}} \tag{1.9}$$

L'angle de diffusion dans le système du laboratoire Θ peut être exprimé en fonction de l'angle de diffusion dans le système de centre de masse θ_c comme suit

$$\tan\Theta = \frac{\sin\theta_c}{\frac{M_1}{M_2} + \cos\theta_c} \tag{1.10}$$

Pour déterminer la trajectoire des ions le solide, des méthodes numériques sont souvent utilisées pour le calculer l'intégral de diffusion (éqution1.9) comme dans le cas de la méthode de Robinson [ROB70]. Cependant, il existe des approximations analytiques qui permettent de calculer l'angle de diffusion en fonction du paramètre d'impact. C'est le cas de la méthode nommée ''la formule magique'' de Biersack et al [BIE80, ZIG85]. La variation de $\sin^2\left(\frac{\theta_c}{2}\right)$ en fonction de β calculée par les précédentes méthodes et pour deux valeurs de ε est représentée dans la figure 1.3. Les gradeurs β et ε qui seront définies dans les prochaines sections sont les paramètres réduites du paramètre d'impact et de l'énergie respectivement. Dans la même figure, la variation $\sin^2\left(\frac{\theta_c}{2}\right)$ en fonction de β dans le cas d'un potentiel purement coulombien (diffusion de Rutherford) est également présentée.

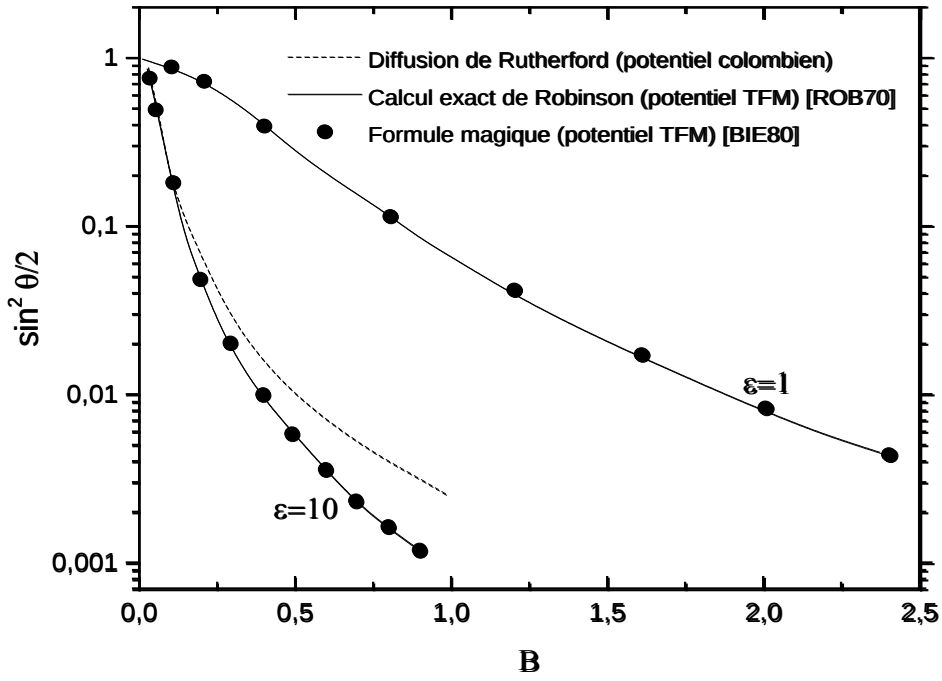


Figure 1. 3:Variation de $\sin^2\left(\frac{\theta_c}{2}\right)$ en fonction du paramètre d'impact réduit B pour des énergies réduites de 1 et 10 Kev.

1.4 Potentiel d'interaction :

L'interaction de deux atomes est décrite par un potentiel d'interaction qui ne dépend que des charges nucléaires et de la distance internucléaire. Ce potentiel n'est pas purement coulombien car les électrons des deux atomes vont diminuer cette interaction c'est l'effet d'écran.

L'interaction du projectile avec l'atome cible, de numéros atomiques respectifs Z_1 et Z_2, est décrite en utilisant un potentiel coulombien écranté par la présence d'électrons. Ce potentiel s'écrit sous la forme [RAB94]:

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

Z_1: numéro atomique de l'ion incident.

Z_2: numéro atomique de l'atome cible.

e: charge élémentaire.

r: distance ion-atome cible.

a: est le rayon d'écran.

$\Phi\left(\frac{r}{a}\right)$: Fonction qui tient compte l'effet d'écran appelée la fonction d'écran.

Plusieurs formes de la fonction d'écran ont été proposées [AIS06]. Les fonctions les plus utilisées dans le domaine de l'interaction d'ions avec des cibles solides sont les fonctions de LJ, de Thomas Fermi Molière (TFM) [MOL47], et de Ziegler Biersack et Littmark (ZBL) [ZIG85].

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \exp\left(-\beta_i \frac{r}{a}\right) \tag{1.12}$$

Avec

$$\sum \alpha_i = 1 \tag{1.13}$$

n, α_i et β_i sont des constantes ajustées de diverses façons. Elles sont données dans le tableau 1.1.

	n	α_1	α_2	α_3	α_4	β_1	β_2	β_3	β_4
LJ	3	0.7466	0.2433	0.01018	0	1.038	0.3876	0.206	0
TFM(Molière)	3	0.35	0.55	0.1	0	0.3	1.2	6	0
ZBL	4	0.1818	0.5099	0.2802	0.02817	3.2	0.9423	0.4028	0.2016

Tableau 1. 1: Valeurs des constantes α_i et β_i pour les potentiels LJ, TFM et ZBL.

Le rayon d'écran utilisé pour le potentiel ZBL est:

$$a_{ZBL} = \frac{0.8853 a_0}{\sqrt{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}}} \tag{1.14}$$

Pour le potentiel TFM (Molière), on utilise le rayon d'écran suivant:

$$a_{TFM} = \frac{0.8853 a_0}{\sqrt{\left(Z_1^{1/2} + Z_1^{1/2}\right)^{2/3}}} \tag{1.15}$$

a_0 Est le rayon de Bohr qui est donné par la relation :

$$a_0 = \frac{\hbar}{me^2} = 0.529\,\text{Å} \tag{1.16}$$

m est la masse de l'électron.

Dans la figure 1.4, la variation de la fonction d'écran est représentée en fonction du paramètre x=r/a pour les trois potentiels ZBL, TFM et LJ.

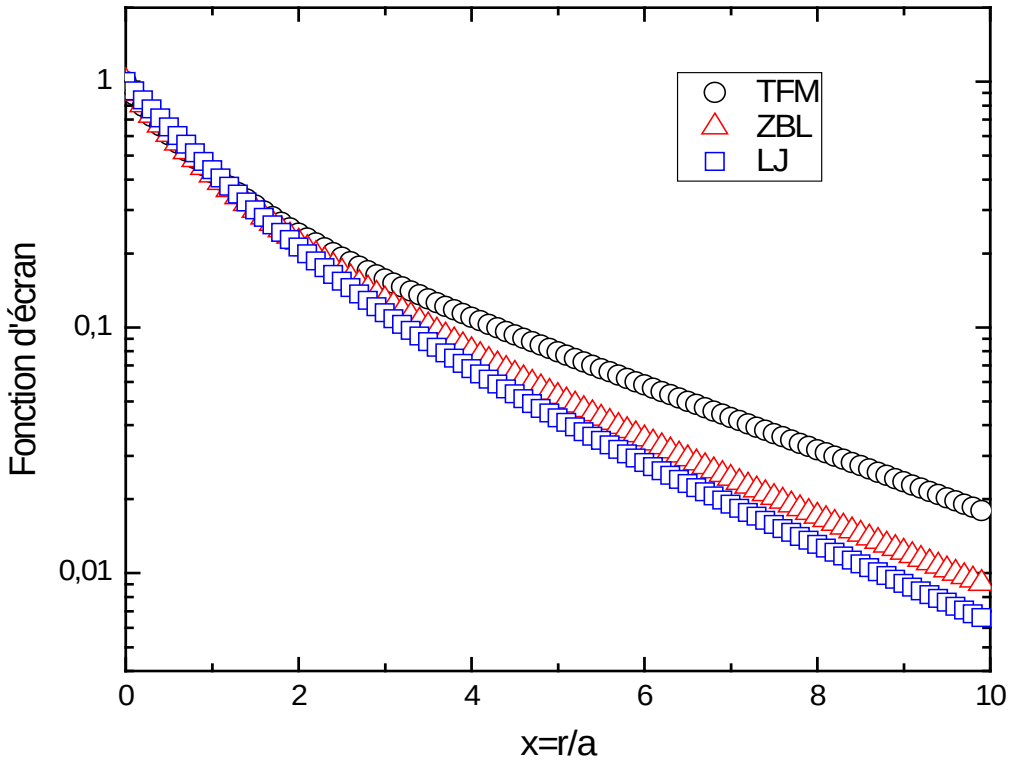


Figure 1. 4: Variation de la fonction d'écran en fonction de x=r/a pour les trois potentiels ZBL, TFM et LJ.

1.5 Section efficace de la diffusion élastique :

La section efficace de diffusion est définie par :

$$\sigma = \pi p^2 \quad \text{Ou} \quad d\sigma = 2\pi p dp \tag{1.17}$$

Où p est le paramètre d'impact

Pour un potentiel coulombien écranté, la section efficace différentielle est obtenue à partir de la dérivée de l'angle de diffusion dans le centre de masse (équation 1.9) par rapport au paramètre d'impact p, selon la relation suivante [MEN91] :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_c = \frac{\beta}{\sin(\theta_c)}\left|\frac{d\theta_c}{d\beta}\right|^{-1} \tag{1.18}$$

En utilisant les paramètres réduits, Lindhard et al [LIN63] ont donné une expression simplifiée de la section efficace différentielle, donnée par:

$$d\sigma\left(t^{1/2}\right)=\pi a^2\frac{dt}{2t^{3/2}}f\left(t^{1/2}\right) \tag{1.19}$$

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

$$t^{1/2}=\varepsilon\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{1.20}$$

θ : angle de diffusion dans le système du centre de masse

ε est l'énergie réduite donnée par :

$$\varepsilon=\frac{M_2E}{M_1+M_2}/\left[\frac{Z_1Z_2e^2}{a^2}\right] \tag{1.21}$$

E : énergie de particule incidente.

M_1: masse de l'ion incidente.

M2: masse de l'atome cible.

Z1 : numéro atomique de l'ion incident.

Z2 : numéro atomique de l'atome cible.

e : charge de l'électron

1.6 Perte d'énergie :

Au cours de son déplacement dans la cible, le projectile subit plusieurs chocs atomiques suivis par des pertes d'énergie qui vont le ralentir. On peut distinguer deux types de perte d'énergie : la perte d'énergie électronique (ou inélastique) et la perte d'énergie nucléaire (ou élastique).

1.6.1 Perte d'énergie inélastique (électronique) :

Les ions pénétrant à grande vitesse dans le matériau cible en transférant leur énergie aux électrons des atomes du matériau cible par les processus d'excitation ou d'ionisation de ces atomes. Ce sont des processus inélastiques de transfert d'énergie. Le pouvoir d'arrêt inélastique est défini à partir de la perte d'énergie inélastique par unité de longueur en tenant compte de la densité atomique du matériau N.

Le pouvoir d'arrêt électronique est proportionnel à la vitesse *v* de l'ion à basse énergie et il est peut être calculé dans le cadre de la théorie de Lindhard, Scharff et Schitt (théorie LSS)

[LIN63, LIN68]. Il est donné par:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = 8\pi\,\xi\, e^2 a_0 \frac{Z_1 Z_2}{\left(Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3}\right)^{3/2}} \frac{v}{v_B} \tag{1.22}$$

Ou : a_0 est le rayon de Bohr

v_B *:* vitesse de Bohr, donnée par $v_B = \frac{e^2}{\hbar}$

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

1.6.2 Perte d'énergie élastique (nucléaire) :

Il s'agit de la perte d'énergie qui se produit au cours des collisions élastiques des ions avec les noyaux des atomes du matériau cible. Ce processus dépend de la quantité d'énergie cédée aux noyaux par répulsion coulombienne pendant de la collision. La répulsion est plus ou moins écrantée par le cortège électronique. Cette perte d'énergie entraîne la déviation de la particule incidente de sa trajectoire initiale ainsi que la mise en mouvement des atomes heurtés.

On définit le pouvoir d'arrêt nucléaire comme étant égal à :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = -N\int_{\sigma(T=T_{\min})}^{\sigma(T=T_{\max})} T d\sigma(E) \tag{1.23}$$

Où T est l'énergie transférée durant la collision. Elle est comprise entre $T_{\min}$ et $T_{\max}$.

T_{max} Est donné par la relation suivant:

$$T_{max} = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}E \quad (1.24)$$

N : nombre d'atomes par unité de volume.

E : énergie de l'ion incident.

$d\sigma$: Section efficace de diffusion élastique, (équation 1.17)

En utilisant l'énergie réduite ε (équation 1.21) et la fonction universelle de diffusion, la distance réduite ρ s'écrit :

$$\rho = \frac{4\pi Ra^2 NM_1M_2}{(M_1+M_2)^2} \quad (1.25)$$

R : parcoure total de la particule incidente.

Lindhard et al [LIN63] ont introduit une expression plus commode du pouvoir d'arrêt dû au ralentissement nucléaire:

$$S_n(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon} \frac{1}{t^{3/2}} f\left(t^{1/2}\right)\frac{dt}{\varepsilon} \quad (1.26)$$

1.6.3 Perte d'énergie totale:

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

$$E(x) = E - \Delta E \quad (1.27)$$

ΔE : représente la perte d'énergie totale (électronique et nucléaire)

Elle s'exprime en fonction du pouvoir d'arrêt total $\left(\frac{dE}{dx}\right)_t$ selon l'expression :

$$\Delta E = \int_0^x \left(\frac{dE}{dx}\right) dx \quad (1.28)$$

Le pouvoir d'arrêt total s'écrit comme la somme du pouvoir d'arrêt nucléaire et électronique :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_t = \left(\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE}{dx}\right)_n \quad (1.29)$$

Un exemple de la variation du pouvoir d'arrêt électronique, nucléaire et totale dans le cas d'ions de H^+ sur une cible d'Al est représenté dans la figure1.5 dans la gamme d'énergie allant de 1 keV à 1MeV. Cette figure montre que pour les ions légers le ralentissement est dû principalement aux collisions inélastiques.

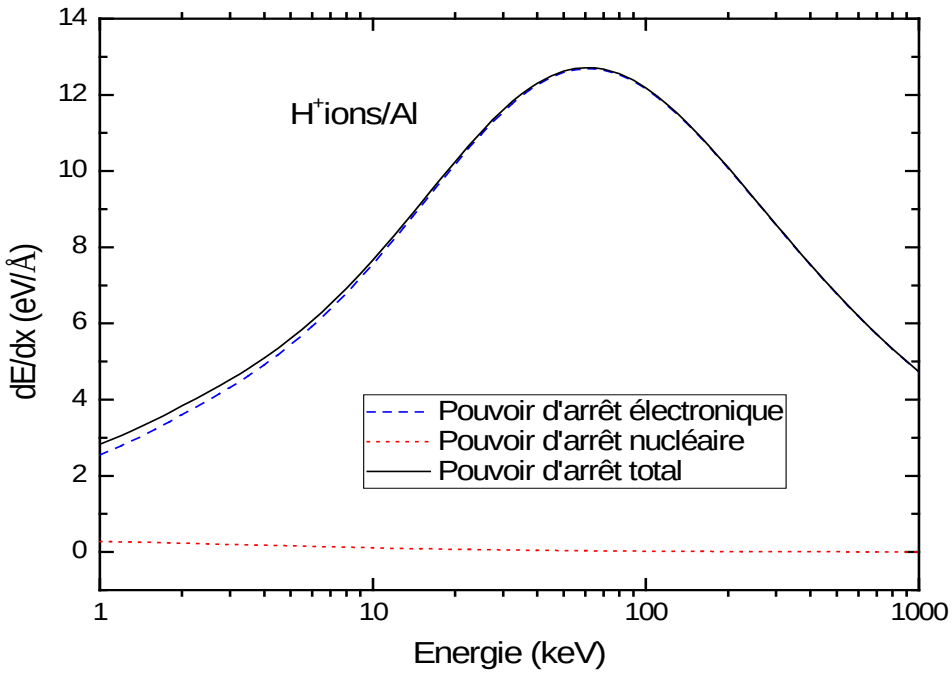


Figure 1. 5: Variation des valeurs de pouvoir d'arrêt électronique, nucléaire et total en fonction de l'énergie des ions H^+ dans une cible d'aluminium

1.7 Transmission des ions dans la cible:

Lorsque la transmission des ions à travers une cible solide, il subit plusieurs collisions successives diffusions multiples. La majorité des ions quittent la cible sans interaction significative ($\theta = 0$). La section efficace de diffusion diminue quand l'angle de diffusion augmente. De ce fait, la majorité des ions font des collisions avec de faibles angles de diffusion. Si la cible contient plusieurs centres diffuseurs, les ions vont subir de nombreuses collisions successives jusqu'à la sortie du solide. Chaque collision est caractérisée par un angle de déviation donné sachant qu'on a une forte probabilité pour que cet angle soit faible. Ceci nous permet d'avoir à la sortie de la cible une distribution angulaire d'ions qui se ressemble à une distribution gaussienne autour de θ=0 (Voir figure 1.6) [MEK16].

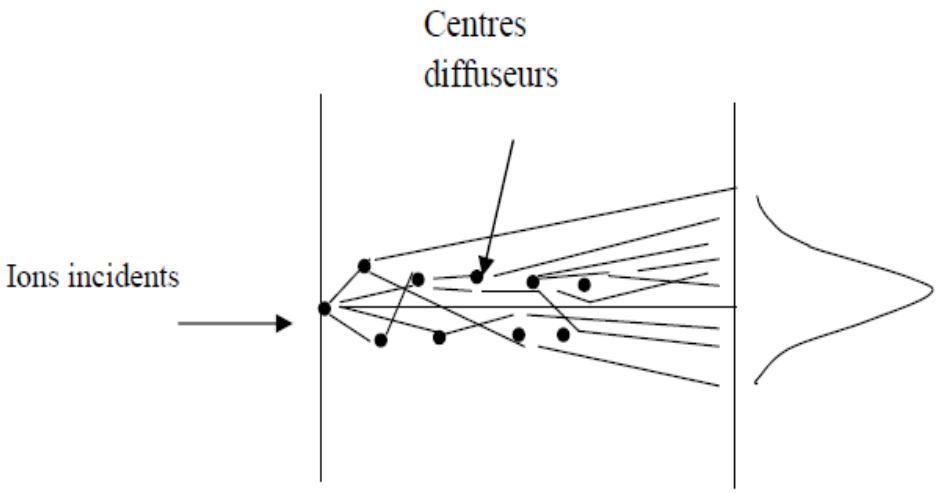


Figure 1. 6: Schéma représentant le processus des diffusions multiples.

1.8 Simulation numérique :

La simulation à l'ordinateur des phénomènes physiques constitue une approche complémentaire aux études théoriques et expérimentales. Elle repose sur la programmation de modèles théoriques ou mathématiques (d'équations différentielles, intégration des équations du mouvement, etc. ....).

Dans le domaine de l'interaction ion-matière, les méthodes de simulation ont été utilisées, 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 de faibles énergies.

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

1.8.1 La simulation Monte Carlo :

Le principe de cette méthode consiste à suivre en détail la trajectoire et l'énergie d'un très grand nombre d'ions transmis à travers le solide, elle est basée sur l'approximation des collisions binaire BCA (Binary Collision Approximation). La simulation Monte Carlo repose sur l'utilisation d'un générateur de nombres aléatoires qui doit fournir des nombres issus d'une distribution uniforme [ALE09]. Pour que ces nombres soient vraiment aléatoires, il est nécessaire de satisfaire un certain nombre de critères à la fois : la moyenne, la variance, mais aussi tous les moments de la distribution doivent être ceux d'une distribution uniforme [PAS09]. Cette simulation donne des résultats très satisfaisants et permet un grand gain de

temps de calcul. Ainsi l'histoire de chaque ion peut être suivie jusqu'a son arrêt ou sa sortie de la cible.

1.8.2 La dynamique moléculaire :

Dans la dynamique moléculaire, nous simulons les mouvements des atomes sur une échelle de temps en accord avec les équations du mouvement de Newton. Les techniques de simulation basées sur la dynamique moléculaire (DM) utilisées pour modéliser l'interaction ion-matière, sont plus appropriées pour les collisions à très faible énergie. Dance ce cas, l'approximation des collisions binaires n'est plus valable [MOR89].

1.8.3 La théorie de transport :

La simulation basée sur la théorie de transport a été principalement établie pour décrire le comportement de gaz dilués. Mais, cette méthode est largement utilisée pour l'étude des particules transmises à travers des cibles solides mais également pour l'étude des particules diffusées par une surface solide [MEK05, AIS06]. Les équations intégro-différentielles de transport reposées sur l'équation de Boltzmann sont des moyennes standards dans le traitement rigoureux de différentes collisions.

Cette équation étudiée l'évaluation temporelle de la fonction de distribution $F\left(\vec{r},\vec{V},t\right)$ d'ions, dont la position est $\vec{r}$ et la vitesse est $\vec{V}$ à l'instant t.

La forme générale de cette équation est la suivante :

$$\frac{\partial F\left(\vec{r},\vec{V},t\right)}{\partial t}+\vec{V}.\vec{\nabla}F\left(\vec{r},\vec{V},t\right)=\frac{\partial F\left(\vec{r},\vec{V},t\right)}{\partial t} \qquad (1.30)$$

Chapitre 2 : Simulation Monte Carlo des ions transmis

Introduction

Dans le présent chapitre nous présentons un bref historique de la technique Monte Carlo. Cette technique implique la génération des nombres pseudos-aléatoires qui sont générés selon un certaines fonctions de densités de probabilités que l'on associé à un modèle. Nous présentons également la méthode de calcul de l'angle de diffusion pour un potentiel écranté (la méthode de Lobatto). Nous définissons par la suite les différentes grandeurs qui interviennent au cours de la transmission des ions à travers des solides, notamment : la distance entre deux chocs successifs, le paramètre d'impact, l'angle azimutal, la position de l'ion après chaque collision et la distribution angulaire.

2.1 Bref historique de la méthode :

Les méthodes Monte-Carlo, nommées d'après un haut lieu monégasque des jeux de hasard, sont utilisées dans plusieurs domaines (des mathématiques aux finances) pour résoudre des problèmes très varies en utilisant des tirages aléatoires. Ce sont des techniques aléatoires en ce sens qu'elles explorent les différents états accessibles par le système étudié. Elles peuvent ainsi déterminer de façon stochastique ses différentes propriétés.

Historiquement, la première utilisation de la méthode de Monte Carlo est l'expérience de l'aiguille de Buffon en 1733 qui consiste à lancer plusieurs fois une aiguille sur un parquet afin de déterminer approximativement le nombre π. La seconde application connue de cette méthode est celle proposée par Laplace en 1786 en utilisant le tirage des nombres aléatoires afin de déterminer également le nombre π.

L'application moderne de cette méthode est principalement liée aux travaux de Fermi, Von Neumann et Ulam pendant la seconde guerre mondiale à Los Alamos pour simuler le transport des neutrons au cours de la réalisation de la bombe nucléaire.

Aujourd'hui, cette méthode est utilisée en physique dans quasiment tous les domaines, notamment dans le transport des particules dans les milieux, la détection et la radiothérapie.

Le grand avantage de la méthode est sa simplicité. Elle permet entre autres de visualiser l'effet de différents paramètres et de donner ainsi des orientations qui auraient été a priori écartées et de trouver facilement des structures que l'on n'aurait pas pu aussi bien optimiser par les méthodes analytiques.

Le recours aux simulations numériques est très important dans l'étude du transport des ions

dans la matière. Cela permet d'analyser une large gamme de dispositifs d'irradiation sans avoir à recourir à de très lourdes contraintes expérimentales.

2.2 Les nombres aléatoires

Pour appliquer la méthode Monte Carlo, on génère des nombres aléatoires de différentes manières :

– tables de nombres aléatoires établies à partir de certains phénomènes physiques.

– Générateurs de nombre aléatoires : cette méthode fait appel aux ordinateurs. Les nombres obtenus doivent constituer une série non reproductible, mais le test de non reproductibilité est difficile à réaliser. De plus, le stockage des résultats au cours du calcul, encombre la mémoire de l'ordinateur.

Pour contourner ces difficultés, on utilise actuellement des nombres pseudo aléatoires. Les nombres pseudo aléatoires différents des nombres aléatoires par le fait que lorsque le premier est arbitrairement choisi, toute la suite est complètement déterminée et reproductible. Par cet effet, on peut appliquer des tests de qualité et vérifier le programme dans lequel ils sont utilisés. Une des formules les plus utilisées pour engendrer des nombres pseudo aléatoires à distribution uniforme, est :

$$X_i = aX_{i-1} + b \qquad \mathrm{mod}\, m \tag{2.1}$$

Les nombres pseudo-aléatoires sont assimilés à une suite {Ri} de nombres qui sont uniformément distribués dans l'intervalle [0,1].

L'utilisation de cette suite permet de sélectionner un évènement à partir d'une loi de probabilité p(x), continue ou discrète, reliée au phénomène physique que l'on cherche à simuler. Il faut ainsi, dans le cas où cette loi de probabilité est continue, effectuer une transformation de la distribution uniforme sur l'intervalle [0 ,1] en un distribution quelconque sur un intervalle [a,b].[REV99]

Si p(x) est normalisée sur l'intervalle [a, b], c'est-à-dire si :

$$\int_a^b p(x)dx = 1 \qquad (2.2)$$

Il est alors possible de déterminer le nombre réel X_i tel que:

$$\int_a^{x_i} p(x)dx = \int_a^{R_i} u(x)dx = R_i \qquad (2.3)$$

Où u(x) est la distribution uniforme et égale à 1(dans le cas où l'intervalle est [0,1]) sur laquelle sont tirés les nombres Ri. Parce que la densité de probabilité p(x) est positive, à chaque nombre Ri correspond un nombre Xi unique.

Il existe plusieurs algorithmes de génération de nombre pseudo-aléatoires. On peut citer les deux méthodes suivantes :

2.2.1 Méthode du carrée médian :

C'est une méthode inventé par Jhon Von Neumann en 1949. Elle consiste à enlever le carrée d'un nombre X_0 constitué de n chiffres et de prendre par la suite de le nombre X_1 formé de k chiffres du milieu.

Le tableau suivant montre la séquence des nombres pseudo-aléatoires obtenue on prenant X_0 =1748 et k=3 :

n	X_n	X_{n+1}
0	1748	3055504
1	555	308025
2	802	643204
3	320	102400
4	240	57600
5	760	577600
……..	……	………..

Tableau2. 1: Exemple des séquences des nombres aléatoires obtenus par la méthode du carré médian.

Cette méthode est faible. Le nombre 0 est appelé un élément absorbant car il donne toujours la même séquence.

2.2.2 Méthode des congruentielles multiplicatives :

La fonction f d'un générateur congruentielle est définie par :

$$f(x) = ax + b \mod m \tag{2.4}$$

Où : a et b sont des entiers.

La notation $\mod m$ signifie qu'on devise le terme qui la procède par m et on retient le reste.

Pour obtenir la séquence des nombres aléatoires, on commence par un nombre aléatoire x_0 et la suite est obtenue par application de chaque fois la fonction f :

$$x_0 \to x_1 = f(x_0) \to x_2 = f(x_1) \to ..... \tag{2.5}$$

La fonction f est périodique de période T inferieure à m.

Au cours de notre étude, nous avons utilisé l'algorithme Ran2 [PRE86] qui est basé sur la technique de congruences multiplicatives. La figure 2.1 montre la structure de la fonction ran2 écrite en langage Fortran.

```
      FUNCTION ran2(idum)
      INTEGER idum,IM1,IM2,IMM1,IA1,IA2,IQ1,IQ2,IR1,IR2,NTAB,NDIV
      REAL*8 ran2,AM,EPS,RNMX
      PARAMETER (IM1=2147483563,IM2=2147483399,AM=1./IM1,IMM1=IM1-1,
     *IA1=40014,IA2=40692,IQ1=53668,IQ2=52774,IR1=12211,IR2=3791,
     *NTAB=32,NDIV=1+IMM1/NTAB,EPS=1.2e-7,RNMX=1.-EPS)
      INTEGER idum2,j,k,iv(NTAB),iy
      SAVE iv,iy,idum2
      DATA idum2/123456789/, iv/NTAB*0/, iy/0/
      if (idum.le.0) then
        idum=max(-idum,1)
        idum2=idum
        do 11 j=NTAB+8,1,-1
          k=idum/IQ1
          idum=IA1*(idum-k*IQ1)-k*IR1
          if (idum.lt.0) idum=idum+IM1
          if (j.le.NTAB) iv(j)=idum
11      continue
        iy=iv(1)
      endif
      k=idum/IQ1
      idum=IA1*(idum-k*IQ1)-k*IR1
      if (idum.lt.0) idum=idum+IM1
      k=idum2/IQ2
      idum2=IA2*(idum2-k*IQ2)-k*IR2
      if (idum2.lt.0) idum2=idum2+IM2
      j=1+iy/NDIV
      iy=iv(j)-idum2
      iv(j)=idum
      if(iy.lt.1)iy=iy+IMM1
      ran2=min(AM*iy,RNMX)
      return
      END
```

Figure 2. 1: La fonction Ran2 écrite en langage Fortran.

2.3 L'approximation de collision binaire

L'approximation des collisions binaires (BCA) est la base d'un très grand nombre codes de simulation dans le domaine de l'interaction ions-matière. Ces programmes traitent le mouvement d'un atome dans un solide comme étant une série de collisions binaires successives. Le code TRIM [ZIE85] (Transport des ions dans la Matière) est le premier code de simulation appliqué au bombardement ionique de solides de structure amorphe. Mais quelques années plus tôt, Robinson et Oen [ROB63] ont tenté d'étudier la canalisation des ions sur des cibles cristallines par simulation numérique basée sur l'approximation BCA.

Les principales différences des codes basé sur BCA sont liées à la structure cible. Cette structure peut être supposée amorphe (une structure aléatoire), où la position de chaque atome cible qui subit une interaction est choisie d'une manière aléatoire. A cause de ce processus de choix aléatoire qui est utilisé pour chaque collision tout au long du code de simulation, ces simulations sont appelées codes Monte Carlo.

Si la structure cible est cristalline, le processus de sélection aléatoire des positions des atomes ne doit pas être appliqué qu'au début. Ceci permet de trouver, par exemple, les points d'impact d'un projectile sur la surface de la cible. Après la première collision, la procédure suivante est complètement déterministe, car les postions des partenaires de collision possibles sont fixes et bien connues. [ECK91]

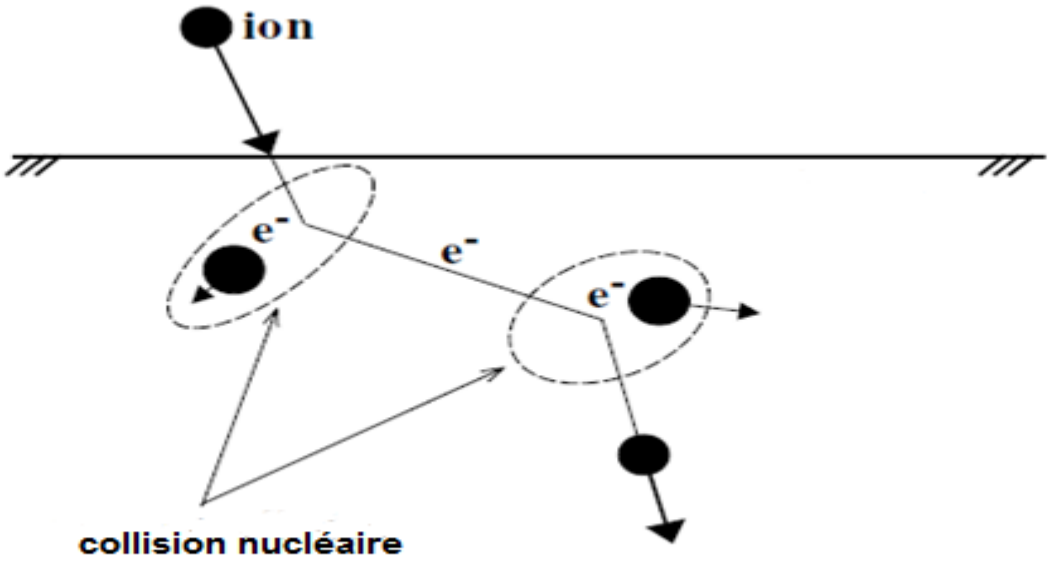


Figure 2.2: Vue schématique de la séquence des collisions dans l'approximation de la collision binaire.

2.4 Transport des ions dans la matière par simulation Monte Carlo

La simulation de Monte Carlo dans le domaine de l'interaction des ions avec la matière est basée sur l'approximation des collisions binaire (BCA). Le principe de cette méthode est d'étude l'histoire d'un très grand nombre de particules incidentes transmises à travers une cible solide [ECK91].

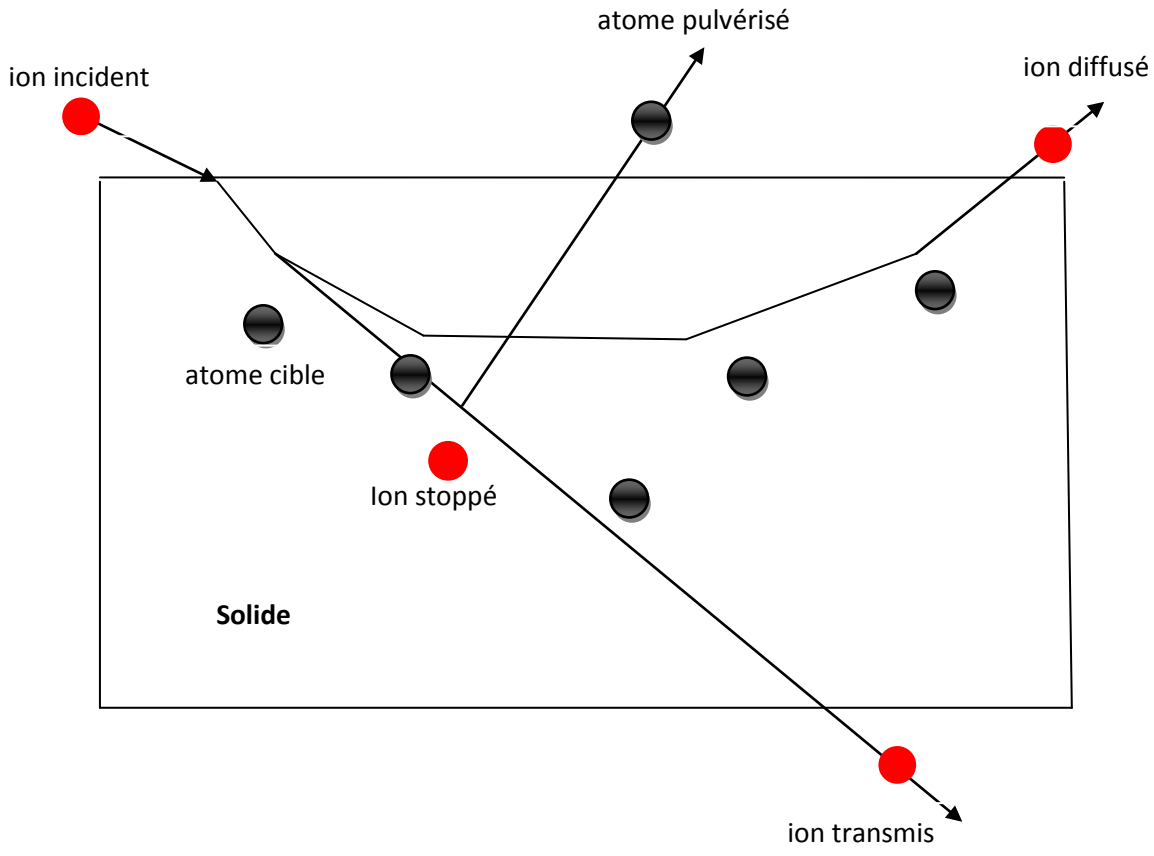
Au cours de son arrivé, l'ion incident rencontre le premier atome de la cible (supposé qu'il soit exactement sur la surface). Les paramètres de collision (paramètre d'impact et l'angle azimutal) seront choisis d'une manière aléatoire. L'angle de la diffusion et la nouvelle direction après l'interaction seront calculées par la suite. L'énergie de l'ion diminue après la déviation (perte d'énergie nucléaire). Par la suite, l'ion traverse une distance choisie aléatoirement (distance entre deux chocs successifs) afin d'effectuer une nouvelle collision. Il perd également une partie de sont énergie au cours de son déplacement (perte d'énergie

électronique) et le processus de collision se répète avec plusieurs atomes cibles. La même procédure est relancée avec un nombre très élevés d'ions (généralement des résultats satisfaisants sont observés pour un nombre d'ions qui dépasse 100000).

On distingue deux scénarios possibles :

- L'ion perd graduellement son énergie dans le solide jusqu'au son arrêt total (implantation). Ce processus entraine l'excitation et l'ionisation des atomes du milieu. Dans certaines conditions, un atome proche de la surface peut acquérir une partie de l'énergie de l'ion et quitter le solide (pulvérisation).
- L'ion traverse complètement la cible (transmission) ou il subit des déviations importantes jusqu'au il rebondit en arrière (diffusion en arrière).

La figure (2.3) schématise les différentes situations rencontrées au cours de l'interaction des ions dans un solide.



.

Figure 2. 3: Schéma représentant les différentes situations rencontrées au cours de l'interaction des ions dans un solide.

Au cours de notre simulation, on s'intéresse uniquement aux ions transmis à travers la cible. Pour cela, on utilise les approximations suivantes :

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

La première hypothèse spécifie le cas de la diffusion multiple incohérente qui exclut la diffusion dans les conditions de canalisation ou de diffraction. Cette hypothèse signifie que le fait de négliger les corrélations entre les centres diffuseurs, revient à remplacer le milieu diffuseur par un ensemble de points matériels. La deuxième hypothèse exclut la prise en compte de plusieurs cas, comme la diffusion par des phonons ou par des particules polarisées, qui sont négligées dans notre gamme d'énergie. La troisième hypothèse, qui implique des simplifications dans notre méthode de simulation, est justifiée dans le cas des faibles épaisseurs traversées.

2.4.1 Calcul de l'angle de diffusion (présentation de la méthode de Lobatto)

Nous définissons dans le système centre du système de masse l'énergie du projectile E_c , le paramètre d'impact *p* et l'angle de diffusion θ_c .

Nous introduisons les variables réduites, ε, β et x respectivement proportionnelles à l'énergie E_c , au paramètre d'impact p et à la distance interatomique r :

$$\varepsilon = \frac{E_c}{Z_1 Z_2 e^2 / a}, \qquad \beta = p/a \quad \text{et} \qquad r = ax \tag{2.6}$$

Où a est le rayon d'écran.

En définissant la fonction f par :

$$f(x) = \left(1 - \frac{\Phi(x)}{x\varepsilon} - \left(\frac{\beta}{x}\right)^2\right)^{-1/2} \tag{2.7}$$

L'intégral de diffusion (équation 1.9 du chapitre 1) devient:

$$\theta_c = \pi - 2\beta \int_{x_0}^{\infty} f(z)\,dz / z^2 \tag{2.8}$$

Où $x_0 = r_0 / a$ et r_0 la distance minimale d'approche.

Il n'existe pas une solution analytique de cette intégrale. Les codes de simulations font appel au calcul numérique pour la résoudre. Cependant, cette intégrale présente des difficultés mathématiques car elle est impropre (elle présente une singularité à x_0 et la limite supérieure est infinie).

Le traitement mathématique pour résoudre le problème de la singularité et la limite infinie est d'effectuer un changement de variable.

Robinson [ROB70] a suggéré de remplacer x par z suivant l'expression suivante :

$$x = \frac{x_0}{[1 - z^2]} \tag{2.9}$$

Nous avons utilisé le changement de variable proposé par Mendenhall [MEN91]:

$$x = \frac{x_0}{\cos\left(\pi z / 2\right)} \tag{2.10}$$

Ce changement donne une intégrale quasiment indépendante de z dans la région de ε proche de 1. L'intégrale devient:

$$\theta_c = \pi\left(1 - \frac{\beta\,\alpha(\varepsilon,\beta)}{x_0}\right) \tag{2.11}$$

Où la fonction $\alpha(\varepsilon,\beta)$ est définie par:

$$\alpha(\varepsilon,\beta) = \int_0^1 \sin(\pi z/2) f\left(\frac{x_0}{\cos(\pi z/2)}\right). \tag{2.12}$$

Pour calculer cette intégrale, on a utilisé la méthode de quadrature de Lobatto [ABR65] d'ordre 10 qui est une variation de la méthode quadrature de Gauss :

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \omega_i f(x_i) \tag{2.13}$$

Où w_i et x_i sont les poids et les points de la méthode respictivement.

Nous avons choisie cette méthode par ce qu'elle nous permet d'avoir un gain important dans le temps de calcul. En fait, la plupart des précédents algorithmes ayant calculé cette intégrale ont utilisé les méthodes quadratures de Gauss d'ordre élevé. Par exemple, les résultats Robinson ont été calculés en utilisant 96 points du tableau de Gauss Mehler et 100 point du tableau de Gauss Legendre.

La distance minimale d'approche x_0 est donnée par la solution de l'équation :

$$\left[f(x_0)\right]^{-1} = 0$$

Qui correspond à :

$$x_0 - \frac{\Phi(x_0)}{\varepsilon} - \frac{\beta^2}{x_0} = 0 \tag{2.14}$$

L'équation (2.11) devient :

$$\alpha = \frac{1}{2}\left\{\begin{array}{l}\omega_1(\lambda_0+1)+\omega_2\left(\alpha_3 f\left(\frac{x_0}{\alpha_4}\right)+\alpha_4 f\left(\frac{x_0}{\alpha_3}\right)\right)+\omega_3\left(\alpha_5 f\left(\frac{x_0}{\alpha_6}\right)+\alpha_6 f\left(\frac{x_0}{\alpha_5}\right)\right)+ \\ \omega_4\left(\alpha_7 f\left(\frac{x_0}{\alpha_8}\right)+\alpha_8 f\left(\frac{x_0}{\alpha_7}\right)\right)+\omega_5\left(\alpha_9 f\left(\frac{x_0}{\alpha_{10}}\right)+\alpha_{10} f\left(\frac{x_0}{\alpha_9}\right)\right)\end{array}\right\} \tag{2.15}$$

Les valeurs de $x_i = \frac{x_0}{\alpha_i}$ et ω_i sont représentées dans le tableau 2.2.

Avec :

$$\lambda_0 = \lim_{z\to 0}\sin\left(\frac{\pi z}{2}\right) f\left(\frac{x_0}{\cos\left(\frac{\pi z}{2}\right)}\right) = \left(\frac{1}{2}+\frac{\beta^2}{2x_0^2}-\frac{\Phi'(x_0)}{2\varepsilon}\right)^{-1/2} \tag{2.16}$$

Et $\Phi'(x_0)$ est la dérivée de la fonction d'écran.

Dans le cadre de notre travail, nous avons utilisé les fonctions d'écran Thomas-Fermi-Molière TFM) et de Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL).

x_i	ω_i	$\sin\left(\pi\left(\frac{x_i+1}{4}\right)\right)$	$\cos\left(\pi\left(\frac{x_i+1}{4}\right)\right)$
1	0.0222222222222	α_2 =0	α_1 =1
-1		α_1 =1	α_2 =0
0.9195339081	0.1333059908510	α_4 =0.998003675975	α_3 =0.063155860685
-0.9195339081		α_3 =0.063155860685	α_4 =0.998003675975
0.73877386510	0.2248893420631	α_6 =0.97902707160	α_5 =0.203730196760
-0.73877386510		α_5 =0.203730196760	α_6 =0.97902707160
0.477924949810	0.2920426836796	α_8 =0.917106159122	α_7 =0.398643064531
-0.477924949810		α_7 =0.398643064531	α_8 =0.917106159122
0.165278957666	0.3275397611838	α_{10} =0.792689377636	α_9 =0.609625746325
-0.165278957666		α_9 =0.609625746325	α_{10} =0.792689377636

Tableau 2. 2: Valeurs des paramètres x_i et ω_i, $\sin(\pi z/2)$ et $\cos(\pi z/2)$ utilisés pour le calcul de l'intégrale (2.15)

2.4.2 Méthode de simulation :

Considérons une particule chargée de masse M_1, de numéro atomique Z_1, et d'énergie E_0, et de l'angle d'incidence α, qui arrive avec une direction donnée sur une cible de densité atomique N. M_2 et Z_2 sont respectivement la masse et le numéro atomique de l'atome cible.

Nous avons choisis trois grandeurs qui varient aléatoirement: 1) la distance entre les collisions successives, 2) le paramètre d'impact et 3) l'angle de diffusion azimutale.

2.4.2.1 La distance entre deux chocs successifs

La première collision entre la particule et un atome cible, aura lieu après un parcours λ traversé par cette particule. Il est défini soit par le modèle liquide ou par le modèle gazeux [ECK91] :

Le modèle liquide :

$$\lambda = \lambda_0 \text{ où } \lambda_0 = N^{-1/3} \tag{2.17}$$

Le modèle gazeux

$$\lambda = -\lambda_0 \ln(1 - R_1) \tag{2.18}$$

λ_0 est la distance maximale entre deux chocs successifs.

Où : R_1 est un nombre aléatoire entre 0 et 1.

Les codes de calculs se distinguent non seulement par le choix entre le modèle liquide ou gazeux mais aussi par le choix de λ_0 .

Dans cette étude nous avons utilisé le modèle liquide qui correspond à $\lambda_0 = N^{-\frac{1}{3}}$.

Où N est la densité des atomes cibles en $atomes / cm^3$

2.4.2.2 Le paramètre d'impact, le paramètre d'impact maximal

La direction de la particule après la première collision est déterminée par le tirage de deux autres nombres aléatoires R_2, R_3 compris entre les valeurs 0 et 1. Le premier permet de calculer le paramètre d'impact par :

$$p = p_{\max}\sqrt{R_2} \tag{2.19}$$

Plusieurs possibilités existent pour déterminer $p_{\max}$:

Dans le cas tridimensionnel d'une sphère de rayon $p_{\max}$ on obtient :

$$\frac{4}{3}\pi p_{\max}^3 = N^{-1} \text{ Alors } p_{\max} = \left(\frac{4}{3}\pi N\right)^{-1/3} = 0.6204 N^{-1/3} \tag{2.20}$$

Pour un volume cylindrique de rayon $p_{\max}$, de longueur λ_0 , On obtient :

$$\pi p_{\max}^2 \lambda_0 = N^{-1}. \tag{2.21}$$

On trouve :

$$p_{\max} = (\pi\lambda_0 N)^{-1/2} \tag{2.22}$$

Avec : $\lambda_0 = N^{-1/3}$

Le cas bidimensionnel conduit à :

$$\pi p_{\max}^2 = N^{-2/3} \Rightarrow p_{\max} = \pi^{-1/2} N^{-1/3} = 0.5642 N^{-1/3} \tag{2.23}$$

Et pour le cas unidimensionnel, on trouve :

$$2 p_{\max} = N^{-1/3} \Rightarrow p_{\max} = \frac{1}{2} N^{-1/3} \tag{2.24}$$

Dans notre travail, nous avons utilisé le cas tridimensionnel d'une sphère.

2.4.2.3 Angle azimutal :

L'angle azimutal φ étant choisi aléatoirement entre 0 et 2π par le nombre aléatoire R_3. :

$$\varphi = 2\pi R_3 \tag{2.25}$$

L'angle de diffusion θ et l'énergie de la particule après la diffusion sont calculés.

2.4.2.4 La position de l'ion après chaque collision :

La nouvelle direction après chaque collision est alors déterminée par les grandeurs $\alpha_1', \alpha_2', \alpha_3'$ qui représentent les angles dans le système de laboratoire entre l'ion est les trois axes d'un repère orthonormé. $\alpha_1, \alpha_2 \, et \, \alpha_3$ sont les angles correspondants avant la collision. Ils sont reliés par les relations suivantes :

$$\cos\alpha_1^{'} = \cos\Theta\cos\alpha_1 + \sin\Theta\cos\phi\sin\alpha_1 \tag{2.26}$$

$$\cos\alpha_2^{'} = \cos\Theta\cos\alpha_2 - \frac{\sin\Theta}{\sin\alpha_1}\left(\cos\phi\cos\alpha_1\cos\alpha_2 - \sin\phi\cos\alpha_3\right) \tag{2.27}$$

$$\cos\alpha_3^{'} = \cos\Theta\cos\alpha_3 - \frac{\sin\Theta}{\sin\alpha_1}\left(\cos\phi\cos\alpha_1\cos\alpha_3 - \sin\phi\cos\alpha_2\right) \tag{2.28}$$

Θ Est l'angle de diffusion dans le système de laboratoire, il est relié à l'angle de diffusion θ_c par la relation (1.10) du chapitre 1.

φ Est l'angle azimutal.

2.5 Calcul de la distribution angulaire :

Une fois la nouvelle direction est déterminée, La même procédure est répétée pour d'autres collisions. Les situations suivantes peuvent être rencontrées :

- La particule atteint une énergie E_f (définie par l'utilisateur), pour laquelle la particule est considérée comme à l'arrêt.

- la particule quitte complètement la cible (transmission ou réflexion)

L'opération est relancée pour un très grand nombre de particules. L'histoire de chacune (l'énergie, le parcours dans la cible et la direction) est stockée sous forme des données.
Les distributions angulaires peuvent être déduites par la suite en analysant ces données.

Chapitre 3 : Résultats et discussions

Introduction :

Dans ce chapitre, nous présenterons l'ensemble des résultats obtenus par simulation Monte Carlo dans le cas de la transmission des ions d'hydrogène sur différentes cibles solides. Nous donnerons d'abord les résultats de calcul de la distance minimale d'approche et de l'angle de la diffusion dans le cas de deux potentiels écrantés (potentiel TFM et potentiel ZBL).

Nous étudierons par la suite les distributions angulaires des particules transmises. Une comparaison à l'expérience à celles déterminées expérimentalement pour différentes cibles sera effectuée et une discussion de tous ces résultats sera présentée.

3.1 Calcul de l'angle de diffusion :

Pour la détermination de la l'angle de diffusion (équation 2.8 de chapitre 2), nous avons calculé d'abord la distance minimale d'approche x_0 (en unité réduite) en fonction des variables réduites de l'énergie et du paramètres d'impact ε et β par la méthode de bissection. Un exemple de ce calcul est illustré dans le graphe 3.1 où on présente la variation de $\mathbf{x_0}$ en fonction de β pour différentes valeurs de l'énergie réduite ε. On peut remarquer que pour une valeur fixe de β ($\beta \leq 20$), x_0 diminue lorsque l'énergie augmente. Cependant, pour une valeur seuil de β, x_0 devient indépendant de l'énergie et $\mathbf{x_0}$ et on obtient l'équation $x_0 = \beta$. Ceci signifie que l'ion incident passe sans aucune interaction avec l'atome cible. Ce qui correspond à un potentiel interatomique nul. Cette valeur seille de β est $\beta_{seuil} \approx 54$ pour le potentiel ZBL et $\beta_{seuil} \approx 61$ pour le potentiel TFM.

Les valeurs numériques de la distance minimale d'approche $\mathbf{x_0}$ **(**en unité réduite), l'angle de diffusion θ_c (en degré) en fonction de différentes combinaisons de ε et β et ce pour la fonction d'écran de TFM sont représentées sur le tableau 3.1.

Nous avons calculé, par la suite, l'intégrale de diffusion (équation 2.11 de chapitre 2) par la méthode de Lobatto. En comparant les résultats obtenus avec les résultats de la formule magique [BIE80], une bonne précision a été obtenue en choisissant l'ordre 10 à cette méthode (voir figure3.3).

L'avantage de la méthode de Lobatto par rapport à celle de la formule magique qu'elle nécessite un temps de calcul plus moins. Ceci peut réduire largement le temps d'exécution de notre modèle de simulation qui calcule l'intégrale de diffusion à chaque passage de l'ion au voisinage d'un atome cible. Si par exemple, le nombre des ions incidents soit 10^6 et que

chaque ion recentre au cours de sont passage à l'intérieur de la cible dix atomes, l'intégrale de diffusion se calcule 10^7 fois ce qui rend notre code de calcul plus rapide.

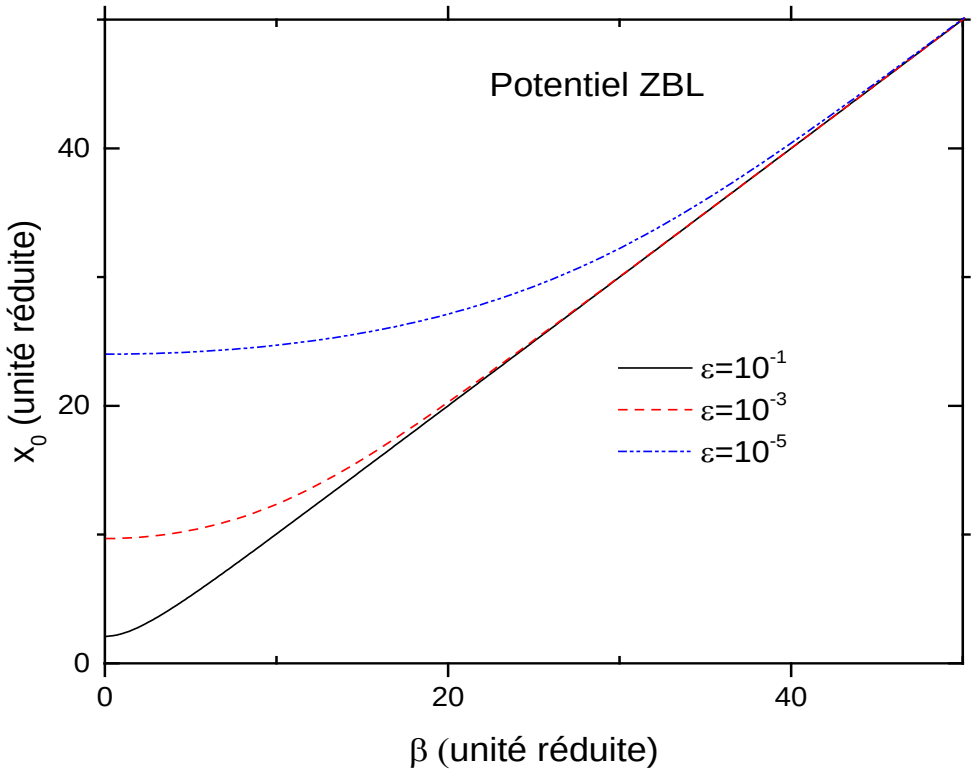


Figure 3. 1: variation de la distance minimale x_0 en fonction du paramètre d'impact réduit β pour différentes valeurs de l'énergie réduite ε .

Sur la figure 3.2, on présente la variation de l'angle de diffusion obtenu par la méthode de Lobatto d'ordre 10 en fonction du paramètre d'impact réduit β et ce pour différentes valeurs de l'énergie réduite ε. Lorsque β tend vers 0, l'angle θ_c tend vers π ce qui correspond au choc frontal. Au fur et à mesure que β augmente, l'angle de diffusion tend vers 0 ce qui correspond à l'absence de l'interaction entre l'ion et l'atome cible.

Notons que pour une valeur de β fixe, l'angle de diffusion augmente si l'énergie de l'ion incident diminue.

Une comparaison entre les valeurs de $\sin^2\frac{\theta_c}{2}$ en fonction de β obtenues par les notre méthode et à celles obtenues par la méthode de la formule magique [BIE80] est présentée dans la figure3.3 On peut bien remarquer l'excellent accord entre les deux méthodes. Ceci confirme la validité du choix de la méthode de Lobatto.

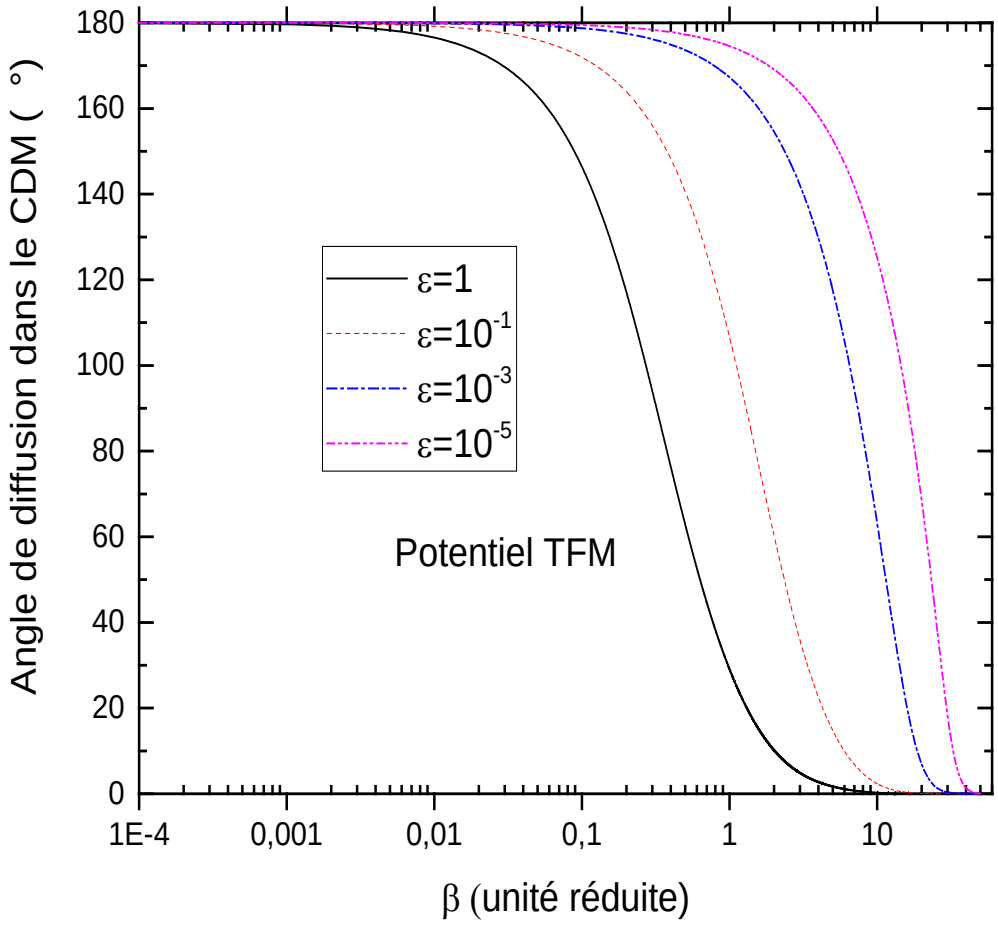


Figure 3. 2: Variation de l'angle de diffusion dans le CDM en fonction de β.

ε	B	x_0	θ_c(10th)
1.0 E-03	5.0 E-01	11.416235	173.628137
1.0 E-03	2.0 E+01	20.389642	6.896088
1.0 E-01	2.0 E-01	2.209735	163.901545
1.0 E-01	8.0 E+00	8.153214	4.745268
1.0 E+01	2.5 E-02	0.09527252	123.518533
1.0 E+01	1.0 E+00	1.02118537	3.413800

Tableau3. 1: Valeurs de la distances minimales d'approche et l'angle de diffusion dans le CDM pour différentes valeurs de ε et β.

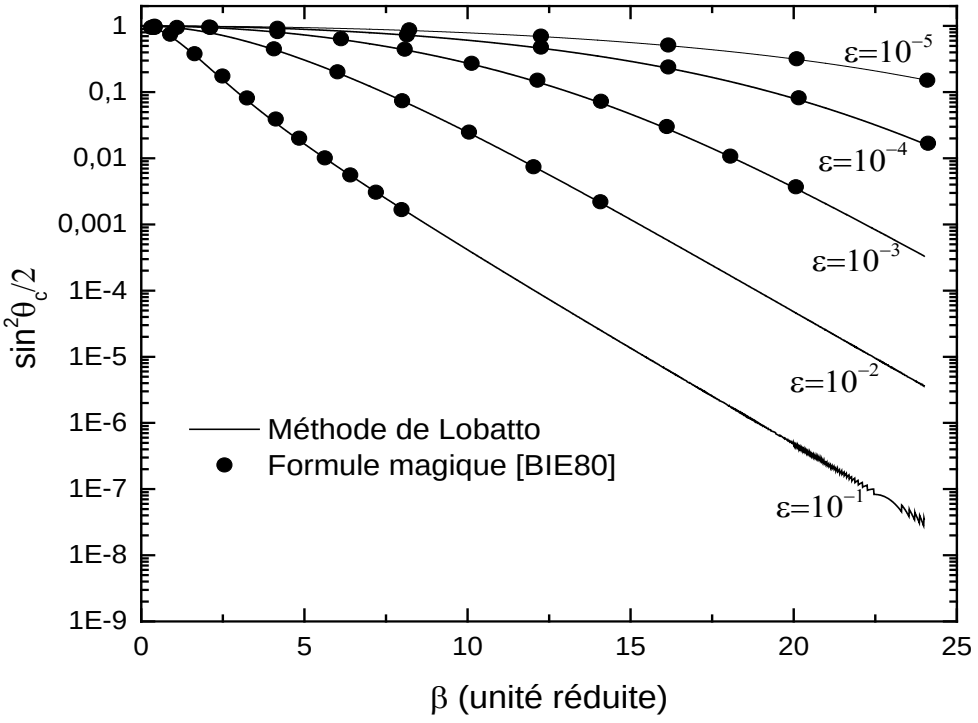


Figure 3. 3: Variation de $\sin^2\frac{\theta_c}{2}$ en fonction de β pour différentes valeurs de ε .

3.2 Calcul de la section efficace différentielle de la diffusion :

Pour le calcul de la section efficace différentielle, nous avons utilisé l'équation (2.18) du chapitre 1. Les figures 3.4 et 3.5 montrent les valeurs obtenues de la section efficace différentielles dans le système de CDM en fonction de l'angle de diffusion dans le CDM pour des valeurs de l'énergie réduite allant de 10^{-1} à 10^{-5}. Pour chaque valeur de ε, la section efficace différentielle augmente considérablement dans la région où l'angle de diffusion est proche de zéro. Pour une valeur fixe de θ_c, la section efficace différentielle augmente lorsque l'énergie diminue.

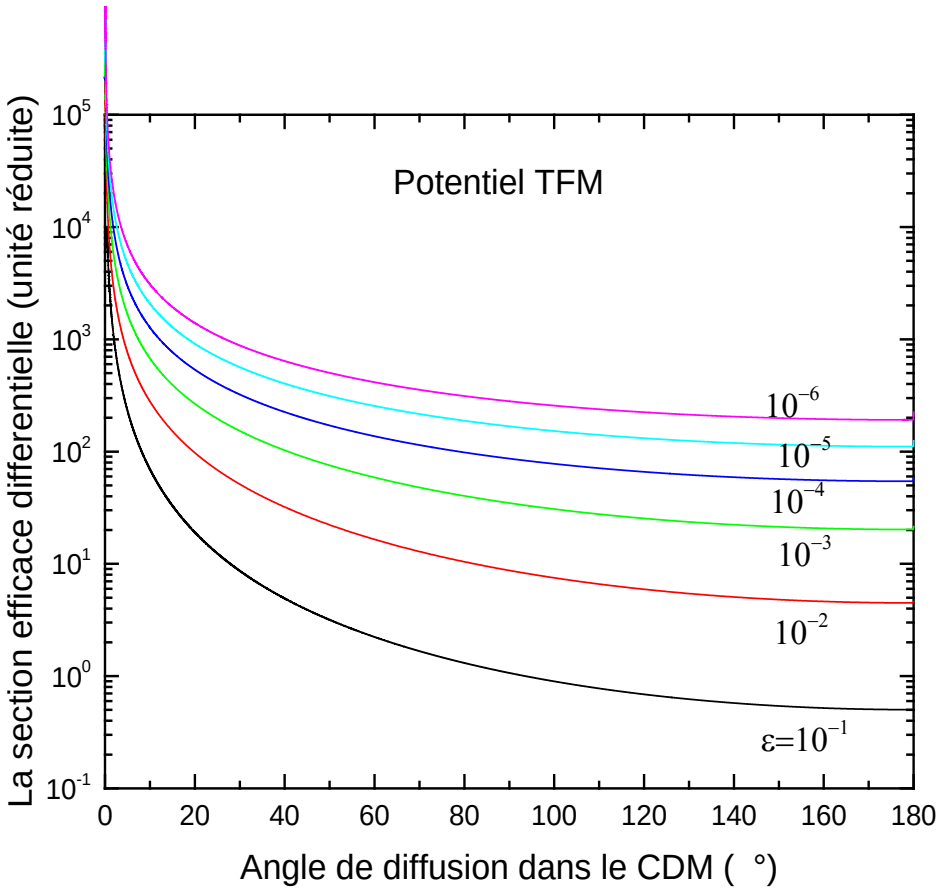


Figure 3. 4: La section efficace différentiel le en fonction de l'angle de diffusion dans le système de centre de masse dans le cas de potentiel TFM.

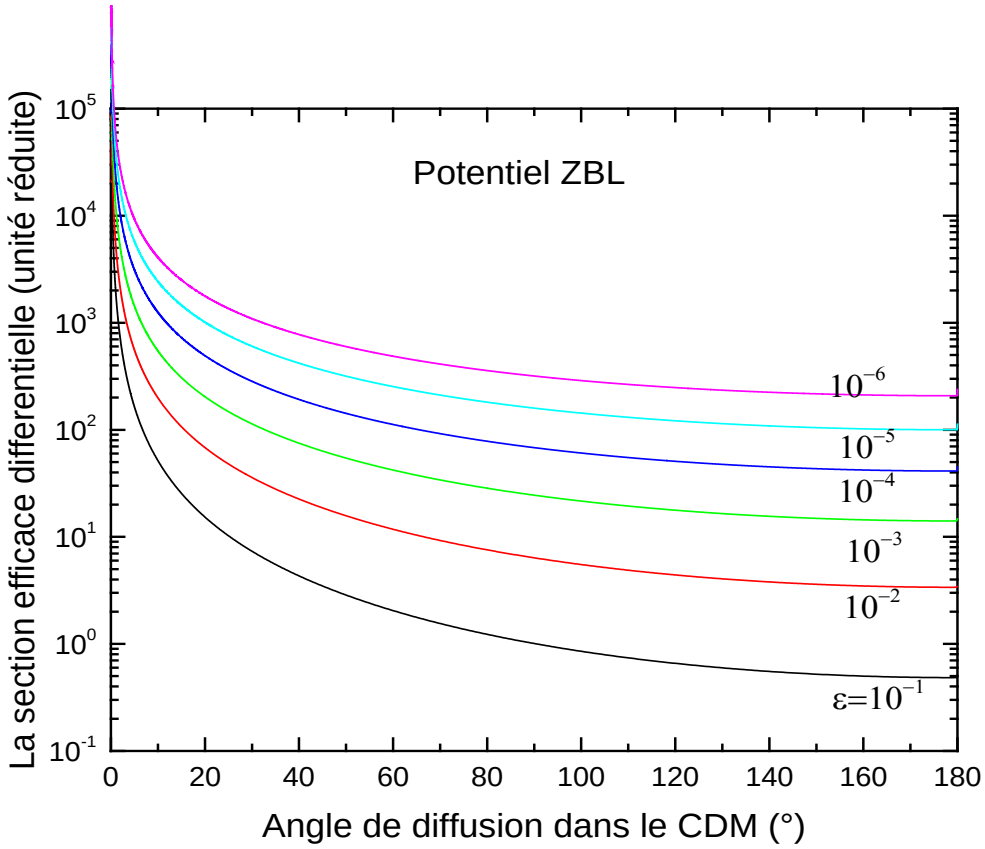


Figure 3. 5: La section efficace différentiel le en fonction de l'angle de diffusion dans le système de centre de masse dans le cas de potentiel ZBL.

3.3 Calcul des distributions angulaires des particules transmises :

La figure 3.6 et le figure 3.7 représentent la forme de la distribution angulaire en fonction l'angle total de diffusion obtenue par simulation Monte Carlo dans le cas de la diffusion d'ions H^+ (9 KeV) et H^+ (10 KeV) par une surface d'aluminium amorphe en utilisant le potentiel d'interaction ZBL.

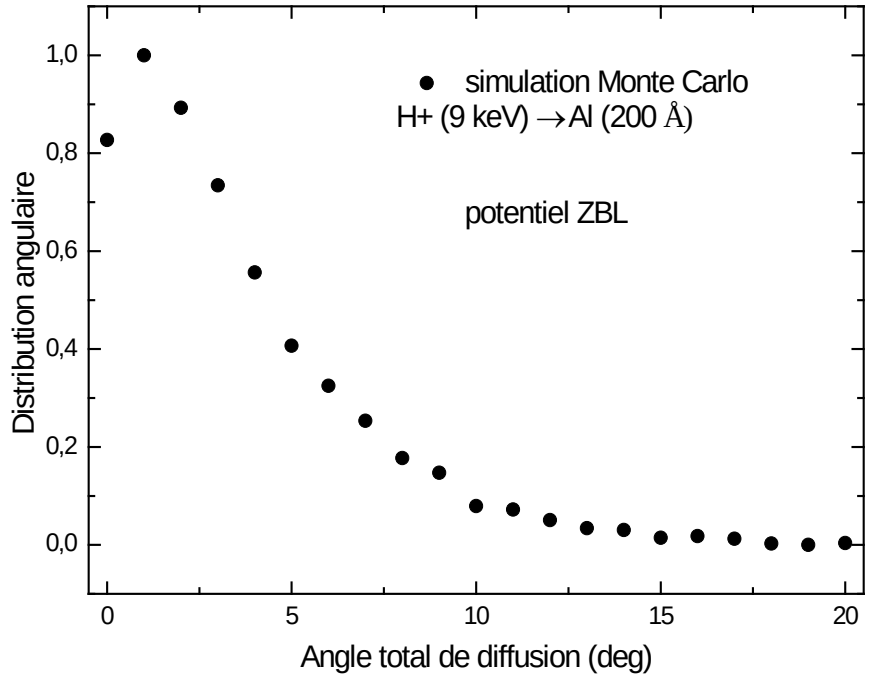


Figure 3. 6: Distributions angulaires calculées d'ions H+ de 9 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 200 Å.

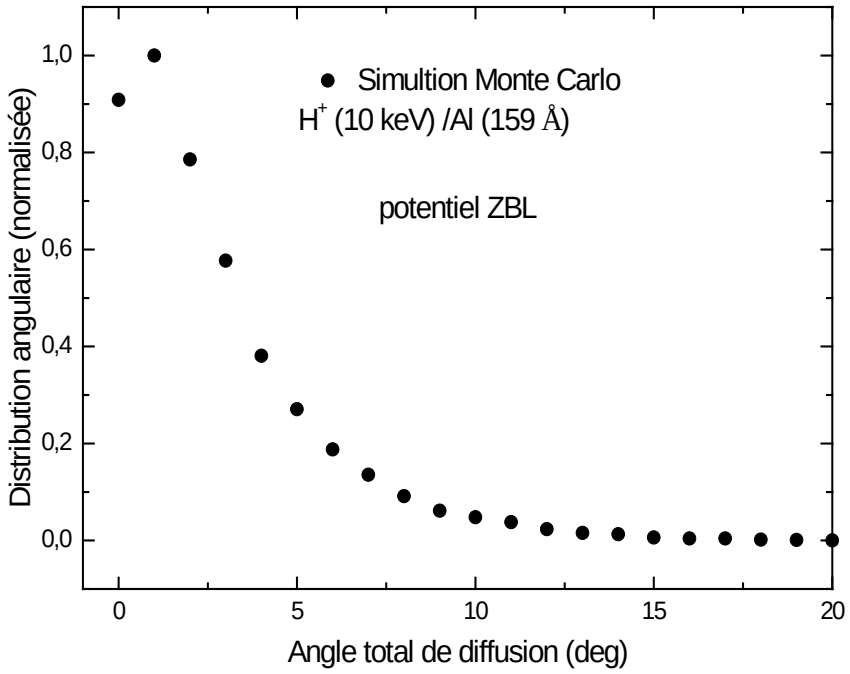


Figure 3. 7: Distributions angulaires calculées d'ions H+ de 10 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 159 Å.

3.4 Comparaison des distributions angulaires avec l'expérience :

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

a) Cas d'une cible d'aluminium :

Nous présentons la distribution angulaire d'ions d'hydrogène transmis à travers une cible d'aluminium d'épaisseur 159 Å (figure 3. 8). Nous avons comparé nos résultats à ceux obtenus expérimentalement [ARC05].

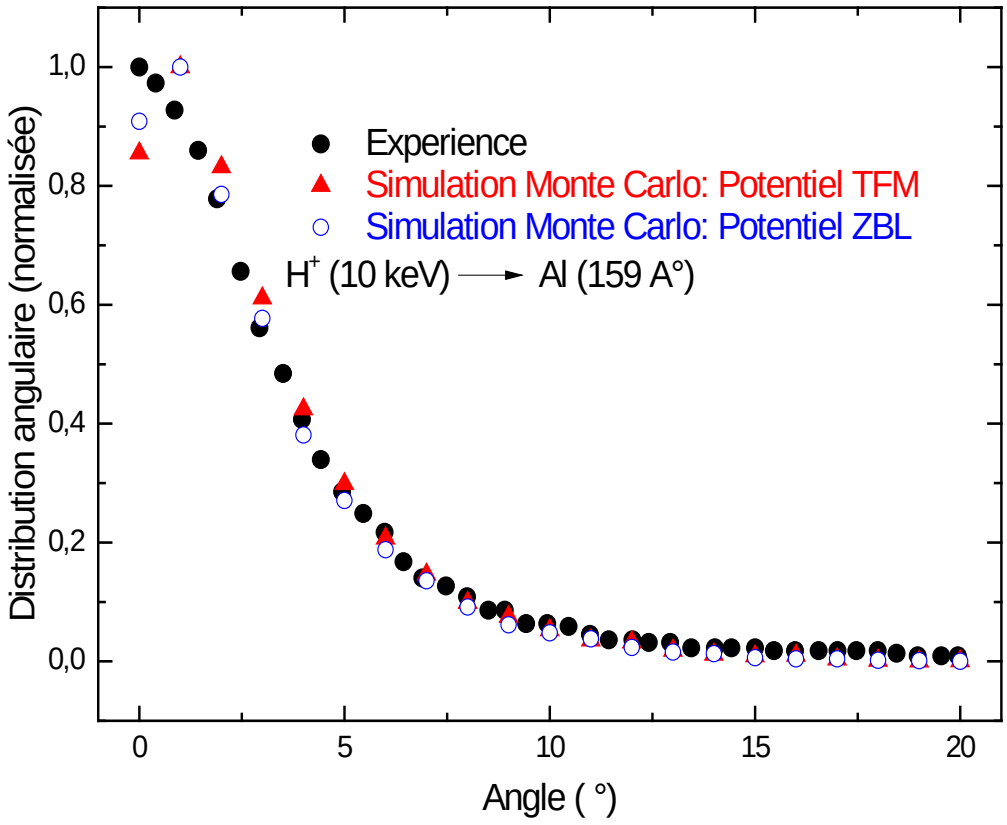


Figure 3. 8: Distributions angulaires calculées d'ions H+ de 10 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 159 Å comparées aux résultats expérimentaux [ARC05].

L'accord entre nos résultats (dans le deux cas du potentiel Molière et potentiel ZBL) est excellent avec les résultats expérimentaux [ARC05].

Sur la figure 3. 9, on présente nos distributions angulaires calculées dans le cas d'ions H^+ de 9 keV transmis à travers une cible d'aluminium d'épaisseur 200 Å. Ces résultats ont été comparés aux distributions expérimentales [FAM00].

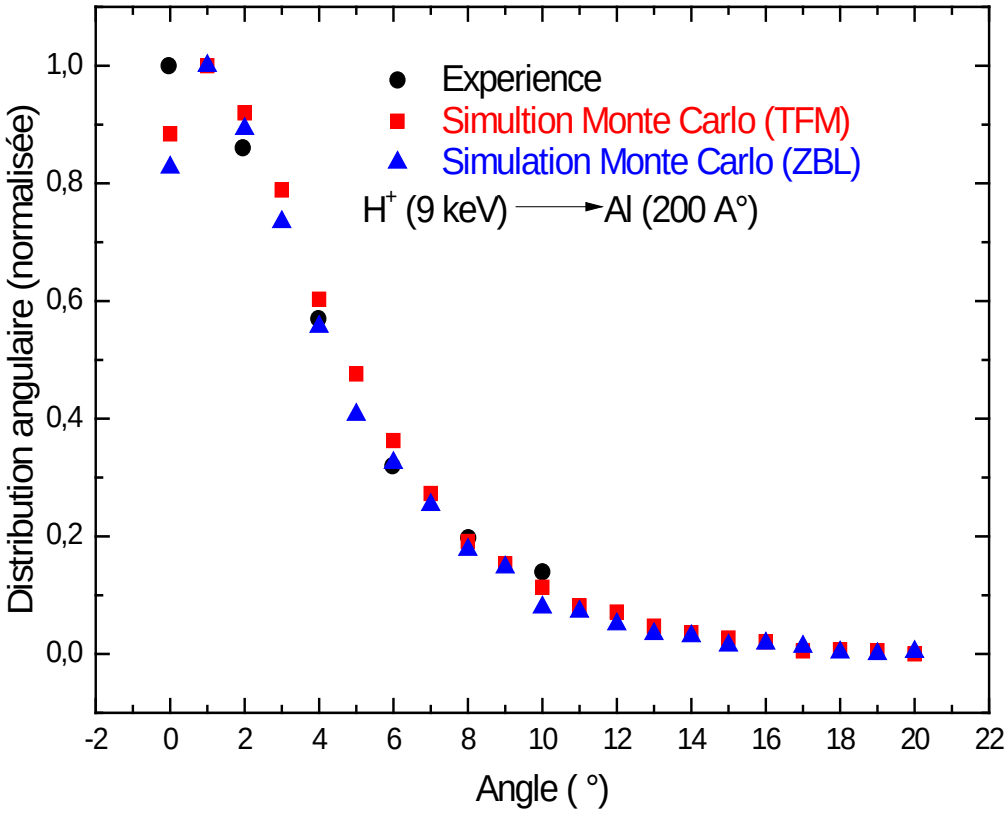


Figure 3. 9: Distributions angulaires calculées d'ions H^+ de 9 keV transmis à travers une cible Al d'épaisseur 200 Å comparées aux résultats expérimentaux [FAM00].

L'accord entre nos résultats dans le deux cas des potentiels TFM (Molière) et ZBL est excellent avec les résultats expérimentaux [FAM00].

b) Cas d'une cible de carbone :

Sur la figure 3. 10, nous présentons la distribution angulaire d'ions d'hydrogène transmis à travers une cible de carbone d'épaisseur 130 Å. Nous avons comparé nos résultats à ceux obtenus expérimentalement [CAN11].

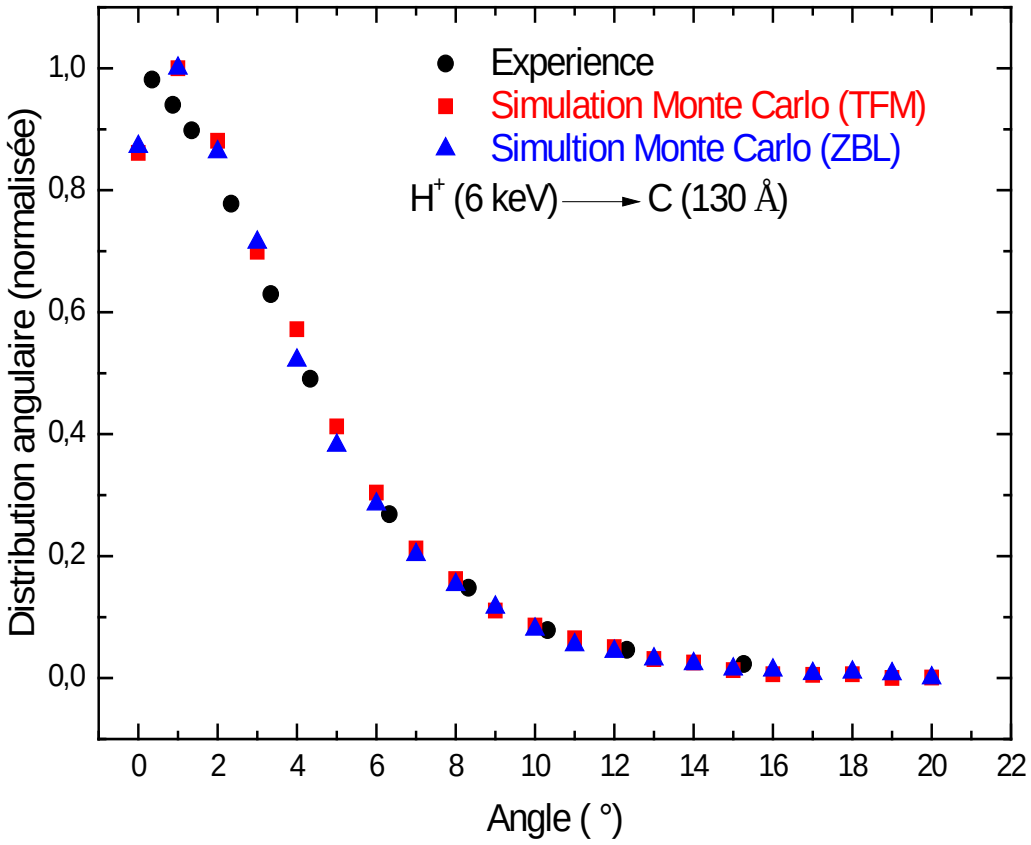


Figure 3. 10: Distributions angulaires d'ions H^+ (6keV) transmis à travers une cible de carbone d'épaisseur 130 Å comparée aux résultats de [CAN11].

Nous pouvons observer sur cette figure que nos résultats sont en excellent accord avec les résultats de [CAN11].

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

Nous présentons maintenant les distributions angulaires d'ions d'hydrogène de 9 keV transmis à travers une cible d'argent d'épaisseur 250 Å (figures 3.11) et à travers une cible de cuivre de 157 Å (figure 3.12). Nous avons comparé nos résultats avec les résultats expérimentaux de [CAN10].

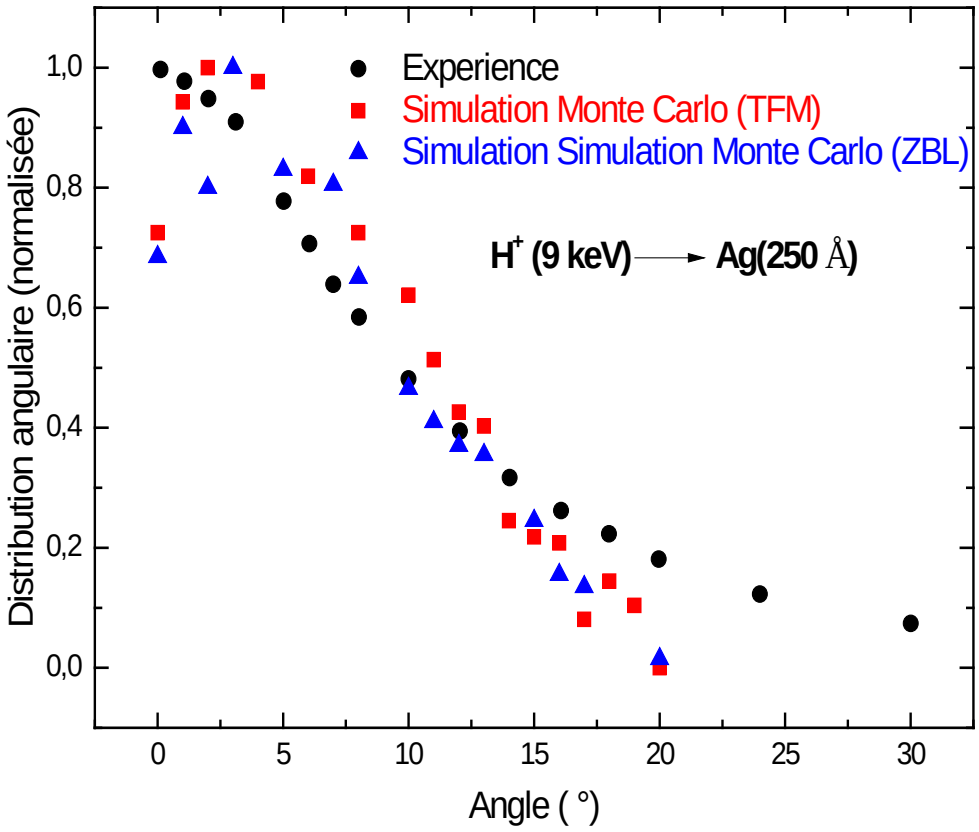


Figure 3. 11: Distributions angulaires d'ions H^+ (9 keV) transmis à travers une cible d'Ag d'épaisseur 250 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CAN10].

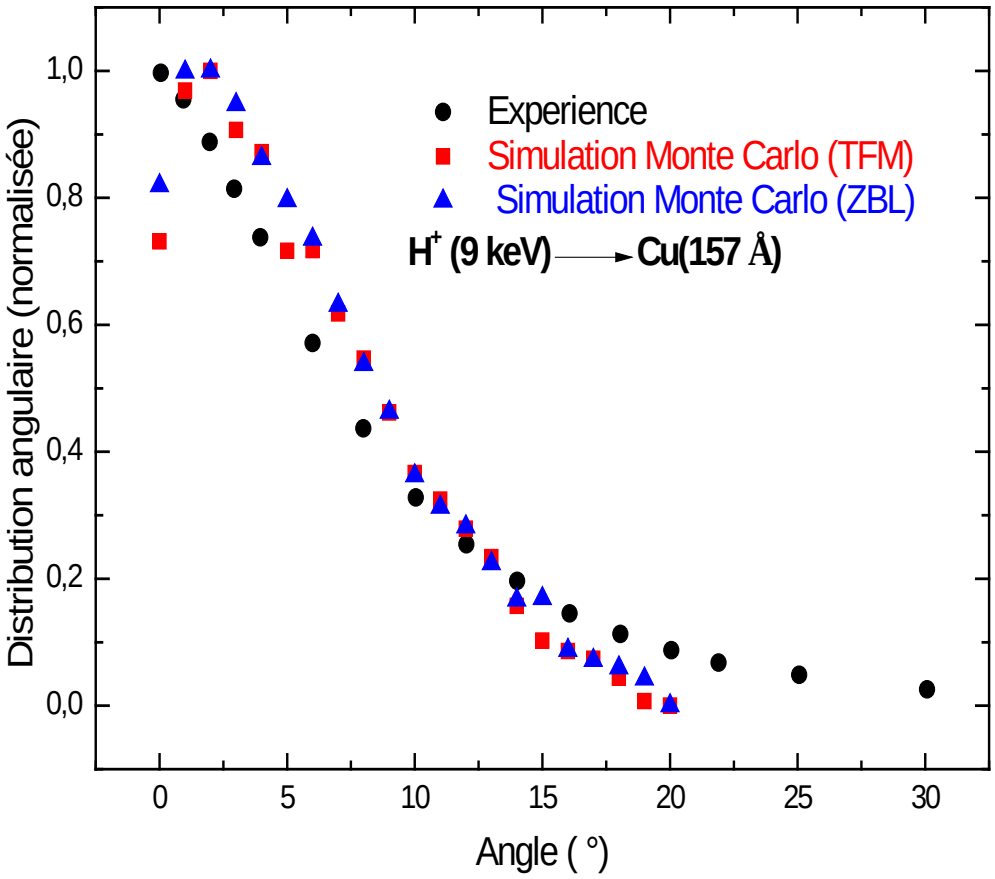


Figure 3. 12: Distributions angulaires d'ions H^+ (9 keV) transmis à travers une cible de Cu d'épaisseur 157 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CAN10].

Dans les deux cas, nous n'avons pas obtenu un bon accord.

d) Cas d'une cible de palladium :

Une autre comparaison dans le cas d'ions H^+ transmis à travers une cible de palladium d'épaisseur 170 Å (figure 3. 13) est présentée. Les valeurs expérimentales sont celles de [CEL13]. Dans ce cas, un grand désaccord a été observé entre nos calculs et l'expérience.

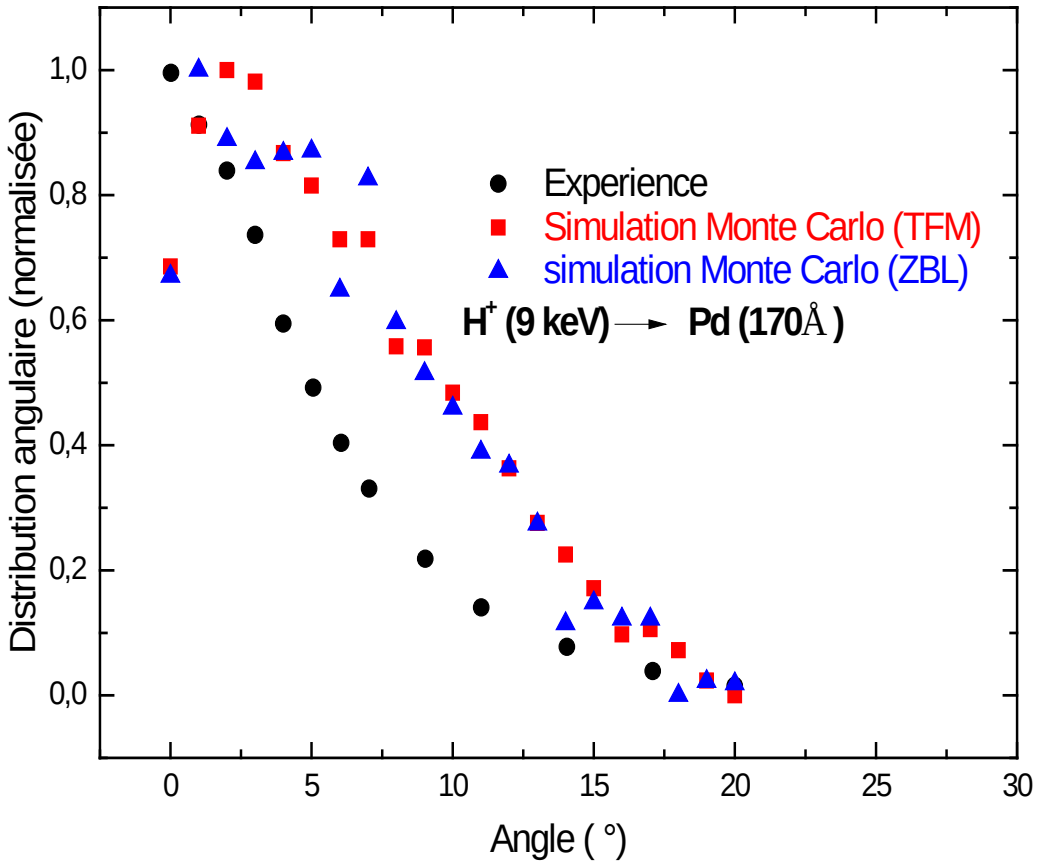


Figure 3. 13: Distributions angulaires d'ions H^+ (9 keV) transmis à travers une cible de Pd d'épaisseur 170 Å, comparées aux résultats expérimentaux de [CEL13].

f) Cas d'une cible d'Or

Nous présentons maintenant les distributions angulaires d'ions d'hydrogène de 10 keV transmis à travers une cible d'Aluminium d'épaisseur 153 Å (figures 3. 14). Les valeurs expérimentales sont celles de [ARC05]. Dans ce cas, un grand désaccord a été observé entre nos calculs et l'expérience.

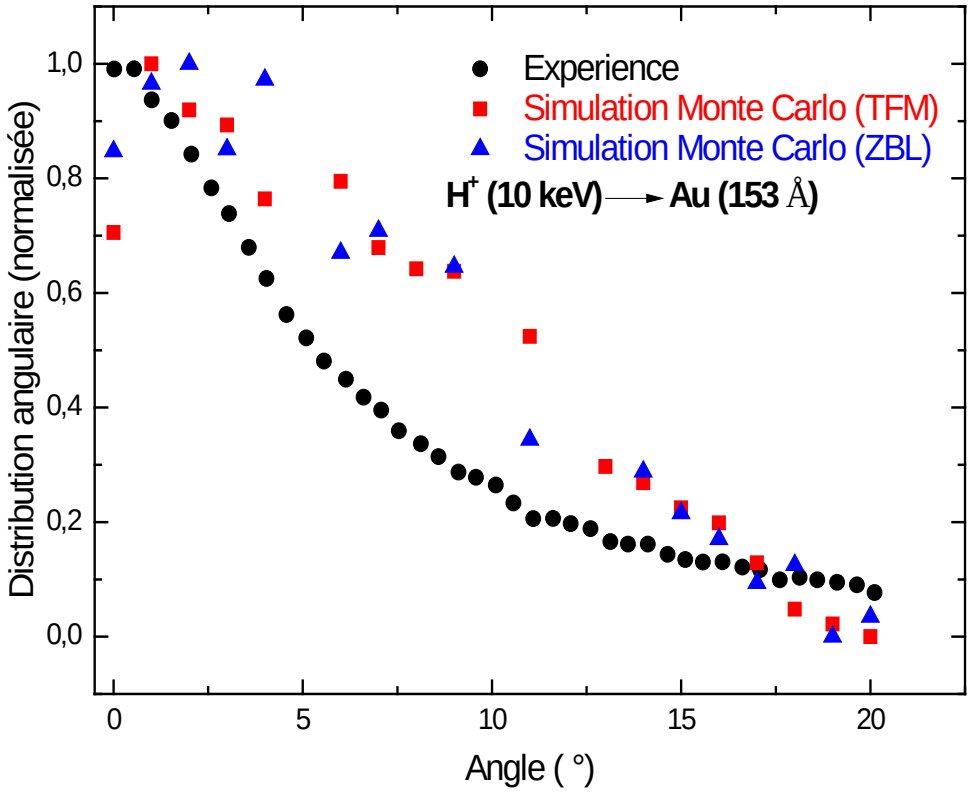


Figure 3. 14: Distributions angulaires calculées d'ions H+ de 10 keV transmis à travers une cible Au d'épaisseur 153 Å comparées aux résultats expérimentaux [ARC05].

Conclusion

Dans ce chapitre, un modèle basé sur la simulation Mont Carlo a été utilisé pour calculer les distributions angulaires d'ions d'hydrogène transmis à travers différentes cibles solides. La comparaison de nos résultats à ceux obtenus expérimentalement montre un accord obtenu dans le cas des cibles de C et d'Al qui valide le choix du potentiel ZBL et du potentiel Molière. Pour des cibles de Cu, Ag, Au et de Pd, le modèle utilisé ne reproduit pas les résultats expérimentaux. Le désaccord est lié probablement à la structure de ces cibles qui n'est pas purement amorphe (la présence des micro-cristaux dans cette structure).

Conclusion générale

Dans ce mémoire, nous avons présenté une étude la transmission d'ions de faible énergie de (quelques keV), à travers des matériaux amorphes. Nous avons élaboré un code de calcul basé sur la méthode Monte Carlo afin de mieux comprendre les processus physique impliqués dans l'interaction d'ions avec une cible solide. Dans cette simulation, nous avons utilisé l'approximation des collisions binaires qui est justifiée dans notre gamme d'énergie. L'interaction inter-atomique a été décrite par deux différents potentiels écrantés : le potentiel TFM et ZBL. Nous avons supposé que la perte d'énergie des ions à l'intérieur du matériau et négligeable. Cette approximation est justifiée dans le cas des faibles épaisseurs traversées. L'angle de diffusion a été calculé, par la suite, en utilisant la méthode quadrature de Lobatto. C'est une méthode qui nous permet d'avoir un gain dans le temps de calcul.

Dans notre simulation, le paramètre d'impact p et l'angle azimutal φ et la distance entre deux chocs successifs λ on été choisis aléatoirement en utilisant un générateur des nombre pseudo-aléatoires R_i. Les informations collectées en suivant l'historique d'un très grand nombre d'ions ont permet de déterminer la distribution angulaire des ions transmis.

Les résultats obtenus par notre simulation montrent que les distributions angulaires des particules transmises sont peu sensibles à la variation du potentiel.

L'accord observé entre nos résultats et ceux obtenus expérimentalement pour les cibles Al et C, confirme la validité de notre méthode simulation. Pour les métaux de transition (Ag, Cu, Pd, Au), nous n'avons pas obtenu un bon accord. Ceci est probablement attribué à l'état de la cible qui n'est pas complètement amorphe. Les effets de canalisation influencent les distributions angulaires qui deviennent étroites.

Il sera intéressant d'incorporer dans le présent code de simulation un algorithme qui tient compte le ralentissement des ions dans le solide.

Références

[ABR65] M. Abramowtiz and I. Stegun (eds).Handbook of Mathematical Functions (Dover,New Yourk, 1965) p.888.

[AIS06] B. Aissous. Thèse de magister. USTHB. Alger 2006.

[ALM09] A .Alem, Mémoire de Magister, USTHB, Faculté de physique, Alger 2009.

[ARC05] C.D. Archubi, C.D. Denton, J.C. Eckardt, G.H. Lantschner, N.R. Arista, J.E. Valdés, J. Ferron. Nucl. Instr. and Meth. B 230 (2005) 53.

[BIR80] J.P. Biersack and L.G. Haggmark, Nucl. Instr. Meth. 174 (1980) 257.

[CAN10] E. D. Cantero, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, F. C. Lovey, and N. R. Arista, Phys. Rev. A 81 (2010) 042902.

[CAN11] E.D. Cantero, G.H. Lantschner and N.R. Arista, Eur. Phys. J. D 65 (2011) 397.

[CEL13] C. Celedon, E. A. Sanchez, M. S. Moreno, N. R. Arista, J. D. Uribe, M. Mery, J. E. Valdés, and P. Vargas, Phys. Rev. A 88, 012903 (2013).

[ECK91] W. Eckstein. Computer simulation of ion-solid interactions, Springer Verlag Series in Materials Science. Vol10, 1991.

[FAM00] M. Fama, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, C. D. Denton, and N. R. Arista, Nucl. Instr. and Meth. B 164-165 (2000) 241.

[GOL02] H. Goldstein, C. Pole, and J. Sakfo. Classical Mechanics Addison-Wesley, San fransisco, 3rd edition, 2002.

[LIN63] J. Lindhard, M. Scharff and H.E. Schiott, Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd vol 33 n°14 (1963) 1.

[LIN68] J. Lindhard, V. Nielsen and M. Scharff, Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd. vol 36, n°10 (1968) 1.

[MEK05] H. Mekhtiche, Thèse de Magister, USTHB, Alger (2005).

[MEK16] H. Mekhtiche, Thèse de Doctorat, USTHB, Alger (2016).

[MEN91] M. H. Mendenhall and Robert A.Weller, Nucl. Instr. Meth. **B58** (1991) 11-17.

[MOL47] G. Moliere, Z. Naturforsch. 2a (1947) 133.

[MOR89] W.L. Morgan. Appl. Phys. Lett. 55 (2) (1989) 106.

[PAS09] V.Pascal, .Simulation numérique en physique statistique. Paris. 2009.

[PRE86] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky et W. T. Vetterling, *Numerical Recipes* (Cambridge University Press, Cambridge, 1986).

[RAB94] J.W.Rabalais Low Energy Ion-Surface Interactions USA (Wiley series Chemistry and Physics) 1994.

[REV99] I. Revel, Thèse de doctorat, Universite Paul Sabatier **(**1999).

[ROB63] M.T. Robinson, O.S. Oen: Phys. Rev. 132, 2385 (1963).

[ROB70] M.T. Robinson, puplication of the Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge , Tennessee, USA, Report ORNL-4556 (1970) (unpublished) .

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