

**République Algérienne Démocratique et Populaire Ministère de
l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique**

Université Ferhat Abbas–SETIF

MEMOIRE

Présenté à la Faculté des Sciences
Département de Physique

Pour l'obtention du diplôme de

MAGISTER

Option : Physique du Solide

Présenté Par

Houcher Abdelhakim

THEME

***Calcul du coefficient de réflexion des
particules chargées dans les cibles solides***

Soutenue Publiquement le 13 / 02 /08

Devant la commission d'examen :

Président :	A.Haroun	Professeur	(UFAS – Sétif)
Rapporteur :	Z.Chaoui	Maître de conférences	(UFAS – Sétif)
Examineur :	K.Bencheikh	Professeur	(UFAS – Sétif)
Examineur :	N.Benouattas	Professeur	(UFAS – Sétif)
Examineur :	F. Ali Sahraoui	Maître de conférences	(UFAS – Sétif)

Remerciements

J'exprime ma profonde gratitude à Mr Dr. Z..Chaoui (Université Ferhat Abbas, Sétif), qui ma fait l'honneur d'avoir veillé et dirigé ce travail. Ses conseils pertinents m'ont permis de mener à terme ce travail.

Je remercie les membres de jury d'avoir bien voulu accepter de juger ce travail. Mes sincères remerciements vont également aux personnels du laboratoire d'optoélectronique et composants.

Je présente ici le témoignage de ma sincère gratitude pour leur aide, au enseignant Dr Kharoubi Makhlouf et l'étudiant Achheb Walid.

SOMMAIRES

Introduction	1
Chapitre I Interaction particule chargée - matière Notions du pouvoir d'arrêt et sections efficaces de transport	
I. Interaction particule- matière et la notion du pouvoir d'arrêt	4
I.1. Notion de pouvoir d'arrêt.....	4
I.2. rang des particules chargées	5
I.3 Section efficace de diffusion	6
I.4. Section efficace élastique de diffusion différentielle totale	6
I.5 Section efficace totale de transport	7
Chapitre II Phénomène de rétrodiffusion des particules chargées	
II Phénomène des particules chargées retrodiffusées.....	9
II-1 Géométrie du problème de l'interaction des particules chargées.....	9
II-2 Equation de transport des particules chargées léger	9
II.3. Réflexion des particules chargées.....	14
Chapitre III Coefficient de rétrodiffusion pour des cibles de dimension finies	
III Coefficient de rétrodiffusion pour des couches de dimension finies.....	19
III.1 l'énergie du projectile à l'intérieur de la cible.....	19
III.2 Coefficient de rétro diffusion (basse énergie)	21
III.3 Coefficient de réflexion dans le modèle a une collision (haute énergie)	23
III.4 Coefficient de rétrodiffusion pour les basses et hautes énergie pour une cible semi infinie.....	28

Chapitre IV Calcul du rang et du libre parcours moyen de transport LPMT des électrons et des positrons dans la matière solide

IV Calcul du rang R et du LPMT des électrons et des positrons dans	30
IV.1 Calcul du rang R	30
IV.2. Calcul du libre parcours moyen de transport des électrons et des positrons dans la matière solide	32
IV.3 Comparaison du rang et du LPMT pour des particules chargées.....	34

Chapitre V Calcul du coefficient de rétrodiffusion BCS

V : Calcul du coefficient de rétrodiffusion (BCS).....	35
V.1 Coefficients de rétrodiffusion pour une incidence normale	35
V.1.1 Cas des électrons.....	35
V.1.2 Cas des positrons	39
V.2 Coefficient de rétrodiffusion pour l'incidence oblique.....	42
Conclusion	44

Annexe

Annexe. A Calcul courant de diffusion $j(t)$:.....	46
Annexe.B Age de Fermi pour des cibles semi infinies	49
Annexe.C l'énergie du projectile à l'intérieur de la cible semi infinie	50
Annexe.D Coefficient de rétrodiffusion à basse énergie pour des cibles semi infinies.....	52
Annexe.E Coefficient de rétrodiffusion à haute énergie (seule collision) pour des cibles semi infinies.....	53
Références.....	56

Introduction

L'étude de l'interaction des particules chargées légères telles que les électrons, les positrons, les ions d'hydrogène et les ions d'hélium avec les solides, est d'une importance primordiale pour la compréhension des phénomènes physiques résultant des interactions avec les surfaces, et les interfaces [1,2].

L'utilisation des électrons, des positrons et des ions légers a donné la naissance à beaucoup de domaines et de techniques d'une grande importance dans le domaine de la recherche expérimentale telles que RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry) pour des ions légers, EPES (elastic peak electron spectroscopy), SEM (scanning electron microscopy), AES (Auger electron spectroscopy), XPS (X-ray photo-electron spectroscopy), LEED (Low energy electron diffusion) et ainsi que LVSEM (low voltage scanning electron microscopy) pour les basses énergies des électrons [3,4]. Pour les positrons on cite LEPB (low energy positron beam) [5,6]. La technique RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry), qui concerne les ions légers comme les ions hydrogène ou hélium ayant des énergies de quelques MeV, est utilisée comme sonde pour étudier les volumes [7]. Le LVSEM est largement utilisé dans l'industrie des semi-conducteurs et en science biologique [8,9]. Pour le LEPB, il est utilisé comme sonde pour étudier les surfaces, les défauts cristallins et comme outil d'analyse dans l'industrie [10,11].

L'utilisation de ces techniques ainsi que l'interprétation quantitative et qualitative des résultats obtenus repose sur la compréhension des interactions des particules chargées avec la matière. Ces interactions sont traduites par des collisions électroniques ou colombiennes, selon l'énergie des particules. On général, pour des énergies inférieures à 1 MeV, ces interactions sont élastiques ou inélastiques. Les interactions de type nucléaire produisant un spectre continu de rayons X par freinage concernent surtout les hautes énergies.

Cependant, ces interactions concernent un nombre important de particules chargées. En physique, ceci a permis la description de ces interactions de deux manières différentes. En utilisant l'outil théorique par le biais des équations de transport et où le faisceau de particules incidentes est considéré comme source. En utilisant l'outil statistique via les méthodes Monte Carlo où le faisceau de particules est simulé pour chaque particule. Pour les deux méthodes,

des modèles adéquats sont nécessaires. La modélisation basée sur l'outil quantique est primordiale.

La méthode de Monte Carlo est considérée comme l'outil d'excellence [12] pour traiter le transport des particules chargées cependant le coût du calcul est très cher. En effet, l'erreur statistique est inversement proportionnelle au nombre de particules simulées. Ceci a ouvert grand les portes pour le calcul théorique analytique [13, 14,15]. Les plus utilisées sont les méthodes appelées ' solutions approximatives de l'équation de Boltzmann'.

Actuellement, d'importantes quantités peuvent être calculées en utilisant des solutions approximées de l'équation de Boltzmann [1, 2, 13, 16] telles que celles qui concernent AES, XPS, EPES, la fraction de particules transmise, absorbé et rétrodiffusée (réfléchie).

L'étude de la fraction des particules rétrodiffusées dans le vide par la surface cible dépend de la nature des particules, de l'énergie du faisceau incident, de la nature de la cible (numéro atomique Z dans la cible) et de l'angle d'incidence.

La résolution de l'équation de Boltzmann, dont le résultat est exact, reste toujours incomplète, par conséquent peu de modèles existent pour le calcul de la fraction rétrodiffusée des particules chargées. A notre connaissance du calcul du coefficient de rétrodiffusion dans la littérature, il existe deux modèles de solutions de l'équation de transport pour des cibles semi infinies. Une cible semi infinie est une couche assez épaisse pour que la fraction transmise à travers elle soit nulle. Des théories pour des cibles de dimensions finies, de telle sorte que la fraction transmise n'est pas nulle, n'existent pas encore. Dans le premier modèle, connu de Tilinin [17,18], les sections efficaces élastiques sont approximées par les sections efficaces de transport. Le second modèle, connu de Vicanek [19], utilise la méthode des l'approximations par les polynômes de Legendre.

Dans le présent travail, on s'intéresse à calculer le coefficient de rétrodiffusion BCS (backscattered coefficient) , connu aussi par le coefficient de réflexion de particules chargées entrant en collision avec une cible (élément Z du tableau périodique) en utilisant l'équation de Boltzmann.

Donc on commencera le manuscrit par un rappel sur l'interaction des particules avec la matière, les notions de pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique dans les matériaux et

nous présenterons le calcul du rang et de la section efficace élastique de diffusion différentielle totale et de transport. Ceci constitue le premier chapitre.

Dans le deuxième chapitre, nous exposerons la géométrie du problème de l'interaction des particules chargées avec une cible. Nous montrerons comment décrire cette interaction théoriquement en utilisant l'équation de transport. On montrera en détail la résolution de l'équation de Boltzmann en utilisant la méthode approximée des polynômes de Legendre. On verra que la solution du problème retombe sur la résolution classique des équations de diffusions pour un courant de diffusion par les transformées de Laplace.

Dans le troisième chapitre on introduira pour la première fois un modèle analytique de résolution de l'équation de transport pour le problème des cibles de dimensions finies. On montrera quand une couche finie tend vers une couche semi infinie, notre modèle retombe exactement sur le modèle de Vicanek [19]. On verra de même, que dans les basses énergies ou la théorie d'âge est connue inadéquate, le modèle classique à une collision peut être un modèle complémentaire à la solution de l'équation de transport.

Comme le coefficient BCS doit être calculé, nous montrerons comment obtenir une expression très pratique pour BCS valable pour les basses, moyennes et hautes énergies. Cette expression est fonction du rang R (distance maximale linéaire parcourue par une particule avec une énergie donnée) et du libre parcours moyen de transport LPMT. Les modèles quantiques du calcul de R et du LPMT sont discutés dans le chapitre quatre. Des exemples pour différents éléments du tableau périodique sont donnés et aussi comparés.

Dans le cinquième chapitre, on s'intéresse aux calculs du BCS relatif à l'interaction des électrons et les positrons dans une large gamme d'énergie incidente \sim keV – 100 MeV. Nous discuterons la validité de l'outil théorique et statistique de Monte Carlo après avoir présenter des comparaisons détaillées pour différents éléments du tableau périodique ($Z=1-80$) et dans des rangs d'énergies variés. Nos comparaisons avec l'expérience nous ont permis de conclure sur les modèles du calcul de BCS et leurs différences.

I. Interaction particule chargée - matière et la notion du pouvoir d'arrêt :

L'un des facteurs principaux qui joue un rôle important dans les théories du ralentissement des particules chargées (ions légers) dans un matériau est la perte d'énergie par unité de distance, autrement dit le pouvoir d'arrêt (Stopping Power). La connaissance de la perte d'énergie est très importante pour l'analyse quantitative.

I.1. Notion de pouvoir d'arrêt

Quand la particule pénètre dans la matière, son énergie cinétique diminue c'est-à-dire qu'il y a une certaine quantité d'énergie perdue dE pendant son trajet dz . On définit le rapport $\varepsilon = \frac{dE}{dz}$ comme le pouvoir d'arrêt de la réaction. La section efficace d'arrêt est définie par [20]:

$$S(E) = -\frac{1}{N} \frac{dE}{dz} \quad (\text{I.1.1})$$

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

Deux types d'interactions physiques peuvent se produire, chacun d'eux étant dominant dans un domaine qui dépend des valeurs de l'énergie incidente de la particule incidente et de sa masse. Ces deux processus de pertes énergétiques sont: les collisions nucléaires (radiatives) et collisions électroniques.

La première se produit avec les noyaux, alors que la seconde concerne les électrons de la cible. La superposition des pouvoirs d'arrêts nucléaire et électroniques ε_n et ε_e donne le pouvoir d'arrêt total \mathcal{E} . Il est donc défini par la formule [21] :

$$\mathcal{E} = \varepsilon_n + \varepsilon_e \quad (\text{I.1.2})$$

Où ε_n : est le pouvoir d'arrêt nucléaire

ε_e : est le pouvoir d'arrêt électronique

Donc la section efficace totale d'arrêt se compose de deux termes [22] :

$$S(E) = S_n(E) + S_e(E) \quad (\text{I.1.3})$$

Où $S_n(E)$: est la section efficace d'arrêt nucléaire

$S_e(E)$: est la section efficace d'arrêt électronique

I.2. Rang des particules chargées :

Le rang d'une particule chargée dans un matériau donné est le trajet total nécessaire pour que cette particule perde complètement son énergie cinétique. Considérons un faisceau de particules chargées initialement monocinétiques d'énergie E_0 qui pénètre dans un matériau absorbant ; chaque particule incidente a un parcours individuel. Les parcours individuels diffèrent et fluctuent autour d'un parcours moyen R , qui est défini par la relation [21]:

$$R = \int_{E_0}^0 \frac{dE}{dE/dZ} \quad (\text{I.2.1})$$

Ou encore ;

$$R = \int_0^{E_0} \frac{dE}{NS(E)} \quad (\text{I.2.2})$$

Avec
$$S(E) = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{1-2m_1} S(E_0) \quad (\text{I.2.3})$$

De l'équation (I.2.3) et Eq. (I.2.2) on obtient :

$$R = \frac{E_0^{1-2m_1}}{NS(E_0)} \int_0^{E_0} E^{2m_1-1} dE \quad (\text{I.2.4})$$

En intégrant, on trouve :

$$R = \frac{E_0}{2m_1 NS(E_0)} \quad (\text{I.2.5})$$

I.3 Section efficace de diffusion :

La section efficace différentielle de diffusion notée $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ est définie comme étant la probabilité pour qu'une réaction particulière donnée se produise. Elle dépend du noyau, de la particule incidente et de son énergie et de l'angle de diffusion θ .

Où $d\Omega$: angle solide

I.4. Section efficace élastique de diffusion différentielle et totale:

La section efficace élastique totale est l'intégrale de la section efficace différentielle [13]:

$$\sigma_{ele} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (I.4.1)$$

La section efficace différentielle est donnée par le carré du module de l'amplitude de diffusion [1] :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (I.4.2)$$

$f(\theta)$: C'est l'amplitude de diffusion. Elle est donnée par [1] méthode des ondes partielles :

$$f(\theta) = \frac{1}{2iK} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos\theta) \quad (I.4.3)$$

δ_l : étant le déphasage entre l'onde incidente et diffusée.

K : vecteur d'onde.

En utilisant Eq (I.4.3) et Eq (I.4.2) on obtient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4K^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) (e^{2i\delta_l} - 1) (e^{-2i\delta_{l'}} - 1) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta)$$

⇔

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4K^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) \left[e^{2i(\delta_l - \delta_{l'})} + 1 - (e^{2i\delta_l} + e^{-2i\delta_{l'}}) \right] P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \quad (I.4.4)$$

En substituant l'équation (I.4.4) dans Eq (I.4.1) et en intégrant on trouve :

$$\sigma_{ele} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{4K^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) \left[e^{2i(\delta_l - \delta_{l'})} + 1 - (e^{2i\delta_l} + e^{-2i\delta_{l'}}) \right] P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta d\theta d\varphi$$

⇔

$$\sigma_{ele} = \frac{2\pi}{4K^2} \int_0^{\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) \left[e^{2i(\delta_l - \delta_{l'})} + 1 - (e^{2i\delta_l} + e^{-2i\delta_{l'}}) \right] P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta d\theta \quad (I.4.5)$$

Et utilisant la propriété d'orthogonalité des polynômes de Legendre [23]:

$$\int_0^{\pi} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta d\theta = \int_{-1}^{+1} P_l(x) P_{l'}(x) dx = \frac{2}{(2l+1)} \delta_{ll'} \quad (I.4.6)$$

Donc l'équation (I.4.5) devient :

$$\sigma_{ele} = \frac{2\pi}{4K^2} \int_0^{\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) \left[e^{2i(\delta_l - \delta_{l'})} + 1 - (e^{2i\delta_l} + e^{-2i\delta_{l'}}) \right] \frac{2}{(2l+1)} \delta_{ll'}$$

⇔

$$\sigma_{ele} = \frac{4\pi}{K^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (I.4.7)$$

I.5 Section efficace élastique de transport :

La section efficace de transport est définie comme [24]:

$$\sigma_{tr} = \int (1 - \cos\theta) \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (I.5.1)$$

En utilisant l'équation (I.4.4) dans Eq. (I.5.1) on obtient :

$$\sigma_{tr} = \frac{2\pi}{4K^2} \int_0^\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1)(1-\cos\theta) \left[e^{2i(\delta_l - \delta_{l'})} + 1 - (e^{2i\delta_l} + e^{-2i\delta_{l'}}) \right] P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta d\theta \quad (I.5.2)$$

En usant de Eq (I.4.6) on obtient :

$$\sigma_{tr} = \frac{2\pi}{4K^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1)(1-\cos\theta) \left[e^{2i(\delta_l - \delta_{l'})} + 1 - (e^{2i\delta_l} + e^{-2i\delta_{l'}}) \right] \frac{2}{(2l+1)} \delta_{ll'} \quad (I.5.3)$$

En utilisant la relation de récurrence des $P_l(\cos\theta)$ [25] donnée par:

$$(l+1)P_{l+1}(\cos\theta) - \cos\theta(2l+1)P_l(\cos\theta) + lP_{l-1}(\cos\theta) = 0 \quad (I.5.4)$$

On obtient :

$$\sigma_{tr} = \frac{4\pi}{K^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2 \Delta_l \quad (I.5.5)$$

Où $\Delta_l = \delta_{l+1} - \delta_l$

$\sigma_{tr}(E_0)$ est reliée au libre parcours moyen de transport par [19]:

$$\sigma_{tr}(E_0) = [N\lambda_{tr}(E_0)]^{-1} \quad (I.5.6)$$

λ_{tr} : libre parcours moyen de transport

II - Phénomène de rétrodiffusion des particules chargées :

II-1 Géométrie du problème de l'interaction des particules chargées

Quand on bombarde une cible solide avec un faisceau de particules chargées (électron, positron, ions légers..) faisant un angle incident θ_0 , une fraction est absorbée et l'autre est rétrodiffusée. On réfère les particules rétrodiffusées celles faisant un angle θ supérieur à 90° .

La profondeur z variable est positive dans le solide, l'angle solide $\vec{\Omega}$ est un vecteur donné par :

$$\vec{\Omega} = \cos \theta_0 \vec{k} \quad (\text{II.1.1})$$

\vec{k} : Vecteur unitaire suivant l'axe (z)

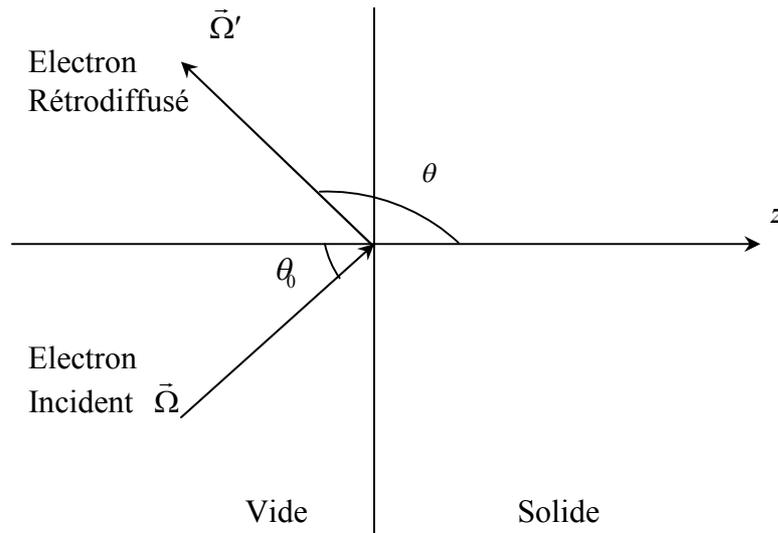


Figure1 : Schéma du processus des électrons rétrodiffusés dans un solide où l'axe z est normal à la surface

II-2 Equation de transport des particules chargées :

Considérons une particule chargée (électron, positron..) ralentie sur son trajet par une cible de densité atomique N , sa position étant \vec{r} dans l'intervalle d'énergie (E, dE) et l'angle solide $(\vec{\Omega}, d\vec{\Omega})$.

Quand la particule passe de l'énergie E' à l'énergie E et de la direction $\vec{\Omega}'$ à la direction $\vec{\Omega}$ par unité d'angle solide, l'équation du transport de Boltzmann pour le flux $\Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ de particule s'écrit [19] :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = N \int dE' d^2\Omega' \left[K(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega}) \Phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') - K(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right] + N \frac{\partial}{\partial E} \left[S_e(E) \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \right] + Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (\text{II.2.1})$$

$Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$: représente la source de particules

$S_e(E)$: Perte d'énergie électronique

$K(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') dE' d^2\Omega'$: La section efficace élastique de la particule d'énergie caractérisant les changement d'état (énergie -direction) lors de la diffusion [19] et représente aussi la densité de probabilité pour qu'une diffusion aura lieu quand la particule passe de l'énergie E à l'énergie E' et de la direction $\vec{\Omega}$ à la direction $\vec{\Omega}'$ avec la conservation de l'énergie [26]. Elle est donnée par [19] :

$$K(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') dE' d^2\Omega' = \sigma(E, T) dT \delta(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}' - \hat{\mu}) \frac{d^2\Omega}{2\pi} \quad (\text{II.2.2})$$

Où $T = E - E'$: est l'énergie de transfert

$\hat{\mu}$: Cosinus de l'angle de diffusion dans le système du laboratoire

$\sigma(E, T) dT$: Section efficace correspondante à T.

δ : Fonction de Dirac.

Dans l'équation de transport le flux angulaire $\Phi(z, E, \mu)$ ne dépend que de la direction z , de μ et de la direction $\vec{\Omega}$ ($\vec{\Omega} = \mu \vec{k}$) avec l'axe (oz).

Le flux peut être intégré sur l'espace (x, y) et l'espace de l'angle azimutal φ tel que :

$$\Phi(z, E, \mu) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy \int_0^{2\pi} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\varphi \quad (\text{II.2.3})$$

$\Phi(z, E, \mu)$: est le nombre moyen de particule passant par une surface plane à une distance z avec l'énergie (E, dE) dans le cône $(\mu, d\mu)$.

Le premier membre de l'équation (II.2.1) devient :

$$\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} \Phi(\vec{r}, E, \bar{\Omega}) = \bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy \int_0^{2\pi} \Phi(\vec{r}, E, \bar{\Omega}) d\varphi \quad (\text{II.2.4})$$

D'après Eq (II.2.3), l'équation (II.2.4) devient :

$$\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} \Phi(\vec{r}, E, \bar{\Omega}) = \bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} \Phi(z, E, \mu) \quad (\text{II.2.5})$$

Le flux $\Phi(z, E, \mu)$ ne dépend que de z et de μ et donc le gradient est suivant z .

Donc Eq (II.2.5) devient :

$$\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} \Phi(\vec{r}, E, \bar{\Omega}) = \mu \frac{\partial}{\partial z} \Phi(z, E, \mu) \quad (\text{II-2.6})$$

On introduisant les polynômes de Legendre $P_l(\mu)$ et intégrant suivant μ , on obtient :

$$\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} \Phi(\vec{r}, E, \bar{\Omega}) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} \int_{-1}^{+1} \mu P_l(\mu) \Phi(z, E, \mu) \quad (\text{II.2.7})$$

En substituant Eq (I.5.4) dans Eq (II.2.7) on obtient :

$$\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} \Phi(\vec{r}, E, \bar{\Omega}) = (2l+1)^{-1} \frac{\partial}{\partial z} \{ (l+1) \Phi_{l+1}(z, E) + l \Phi_{l-1}(z, E) \} \quad (\text{II.2.8})$$

Avec :

$$\Phi_l(z, E) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} P_l(\mu) \Phi(z, E, \mu) d\mu \quad (\text{II.2.9})$$

$\Phi_l(z, E)$: Flux des moments de Legendre

Procédant de la même manière avec le second membre de (II.2.1) ; on obtient :

$$(2l+1)^{-1} \frac{\partial}{\partial z} \{ (l+1)\Phi_{l+1}(z, E) + l\Phi_{l-1}(z, E) \} = \tag{II.2.10}$$

$$N \int \{ P_l(\hat{\mu}) \sigma(E+T, T) \Phi_l(z, E+T) - \sigma(E, T) \Phi_l(z, E) \} dT + N \frac{\partial}{\partial E} [S_e(E) \Phi_l(z, E)] + Q_l(z, E)$$

En développant dans Eq (II.2.10) le terme $\sigma(E+T, T) \Phi_l(z, E+T)$ en série de Taylor tel que :

$$\sigma(E+T, T) \Phi_l(z, E+T) = \sigma(E, T) \Phi_l(z, E) + T \frac{\partial}{\partial E} \sigma(E, T) \Phi_l(z, E) \tag{II.2.11}$$

Pour $l=0$ et $l=1$ Eq. (II.2.10) permet d'obtenir le système d'équation suivant [19] :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial z} \Phi_0(z, E) = N \frac{\partial}{\partial E} \left\{ \int T \sigma(E, T) dT + S_e(E) \right\} \Phi_0(z, E) + Q_0(z, E) \\ \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial z} \Phi_1(z, E) = -N \int (1 - \hat{\mu}) \sigma(E, T) \Phi_1(z, E) dT + Q_1(z, E) \end{cases} \tag{II.2.12}$$

$\Phi_0(z, E)$: représente le flux scalaire

$\Phi_1(z, E)$: représente Le courant de particule

Sachant que :

$$\sigma_w(E) = \int (1 - \hat{\mu}) \sigma(E, T) dT$$

Et
$$S_n(E) = \int T \sigma(E, T) dT$$

Tel que

$$S(E) = S_e(E) + S_n(E)$$

$S(E)$: Section efficace totale de ralentissement

$\sigma_{tr}(E)$: Section efficace de transport

Le système d'équations (II.2.12) devient :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial z} \Phi_1(z, E) = N \frac{\partial}{\partial E} S(E) \Phi_0(z, E) + Q_0(z, E) \\ \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial z} \Phi_0(z, E) = -N \sigma_{tr}(E) \Phi_1(z, E) + Q_1(z, E) \end{cases} \quad (\text{II.2.13})$$

$\sigma_{tr}(E)$ est reliée à la section efficace de transport $\sigma_{tr}(E_0)$ et à l'énergie incidente E_0 [19]:

$$\sigma_{tr}(E) = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{-2m} \sigma_{tr}(E_0) \quad (\text{II.2.14})$$

En introduisant x et t comme variables indépendantes, telles que

$$x = N \sigma_{tr}(E_0) z \quad (\text{II.2.15})$$

et
$$t = \frac{1}{3} \sigma_{tr}(E_0)^2 \int_E^{E_0} \frac{dE'}{S(E') \sigma_{tr}(E')} \quad (\text{II.2.16})$$

Où x est la profondeur de la pénétration mesurée en unité de libre parcours moyen de transport λ_{tr} avec une énergie incidente E_0 . On sait que :

$$\lambda_{tr}(E_0) = [N \sigma_{tr}(E_0)]^{-1}$$

La limite supérieure de t est donnée par la théorie connue comme l'âge de Fermi :

$$t_0 = \frac{1}{3} \sigma_{tr}(E_0)^2 \int_0^{E_0} \frac{dE}{S(E) \sigma_{tr}(E)} \quad (\text{II.2.17})$$

On introduisant premièrement la densité de ralentissement $\chi(x, t)$:

$$\chi(x, t) dx = 2NS(E) \Phi_0(z, E) dz \quad (\text{II.2.18})$$

et deuxièmement la densité du courant de particule $j(x, t)$:

$$j(x, t) dt = 2\Phi_1(z, E) dE \quad (\text{II.2.19})$$

On négligeant $Q_0(z, E)$ et $Q_1(z, E)$ dans Eq (II.2.13), i.e. loin de la source ; le système d'équation devient,

$$\frac{\partial}{\partial t} \chi(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0 \quad (\text{II.2.20})$$

Et
$$j(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \chi(x, t) \quad (\text{II.2.21})$$

Les équations (II.2.20) et (II.2.21) représentent simplement les équations de diffusion.

Elles sont connues sous le nom ' théorie d'âge '.

II.3.Réflexion des particules chargées

Considérons le bombardement d'une cible (surface plane) par un faisceau de particules chargées avec une énergie incidente E_0 et arrivant avec un angle incident $\theta_0 = \arccos \mu_0$. La probabilité pour que la particule subisse une collision dans l'épaisseur dz est donnée $-N\sigma_{tr}(E_0) dz / \mu_0$. La densité de ralentissement $\chi(x, t)$ s'écrit comme [19] :

$$\chi(x, t = 0) = \mu_0^{-1} e^{-\frac{x}{\mu_0}} \quad (\text{II.3.1})$$

Dans le formalisme de la diffusion, la surface de la cible agit comme une surface parfaitement absorbante, ainsi la densité de ralentissement doit vérifier la condition à la limite :

$$\chi(x=0, t) = 0 \quad (\text{II.3.2})$$

Dans la présente description du problème du bombardement d'une cible par des particules chargées, les équations (II.2.20), (II.2.21), (II.3.2) et (II.3.1) sont utilisées pour calculer l'expression du courant de diffusion. Le courant de diffusion représente la quantité importante pour déduire le coefficient de rétrodiffusion des particules chargées.

Cherchons maintenant des solutions pour $\chi(x, t)$ et du courant $j(x, t)$. Pour ce faire, on s'intéresse aux quantités à la surface. Ceci permet une évaluation directe.

La transformation de Laplace est adoptée aux deux équations (II.2.20) et (II.2.21) telles que ;

$$F(p) = \int_0^{+\infty} e^{-p't} f(t) dt \quad (\text{II.3.3})$$

La fonction $F(p)$ est appelée transformée de Laplace (image L) ou simplement l'image de $f(t)$ [27] telle que,

$$L\{f(t)\} = \int_0^{+\infty} e^{-p't} f(t) dt \quad (\text{II.3.4})$$

Donc les images des équations (II.2.20) et (II.2.21) sont respectivement données par ;

$$L\left[\frac{\partial}{\partial t} \chi(x, t)\right] + \frac{\partial}{\partial x} L[j(x, t)] = 0 \quad (\text{II.3.5})$$

$$L[j(x, t)] = -\frac{\partial}{\partial x} L[\chi(x, t)] \quad (\text{II.3.6})$$

On sait que l'image de la dérivée est [27]:

$$L\left\{\frac{\partial f(t)}{\partial t}\right\} = p \int_0^{+\infty} f(t) e^{-p't} dt - f(0) \quad (\text{II.3.7})$$

Donc les équations (II.3.5) et (II.3.6) deviennent :

$$\begin{cases} p \int_0^{+\infty} e^{-p t} \chi(x, t) dt - \chi(x, t=0) + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{+\infty} e^{-p t} j(x, t) dt = 0 \\ \int_0^{+\infty} e^{-p t} j(x, t) dt = -\frac{\partial}{\partial x} \int_0^{+\infty} e^{-p t} \chi(x, t) dt \end{cases} \quad (\text{II.3.8})$$

⇔

$$\begin{cases} p \bar{\chi}(x, p) - \chi(x, t=0) + \frac{\partial}{\partial x} \tilde{j}(x, p) = 0 \\ \tilde{j}(x, p) = \frac{\partial}{\partial x} \bar{\chi}(x, p) \end{cases} \quad (\text{II.3.9})$$

telle que ; $\tilde{j}(x, p) = \int_0^{+\infty} e^{-p t} j(x, t) dt$ et $\bar{\chi}(x, p) = \int_0^{+\infty} e^{-p t} \chi(x, t) dt$

La combinaison des deux équations du système d'équations (II.3.9) donne :

$$P \bar{\chi}(x, p) + \frac{\partial^2 \bar{\chi}(x, p)}{\partial x^2} = \chi(x, t=0) \quad (\text{II.3.10})$$

L'équation (II.3.10) est une équation différentielle non homogène du second ordre de la forme :

$$P y - y'' = \mu_0^{-1} e^{-\frac{x}{\mu_0}} \quad \text{Avec } y = \bar{\chi}(x, p)$$

Donc, la solution homogène est de la forme :

$$y_h = c_1 e^{\sqrt{p}x} + c_2 e^{-\sqrt{p}x} \quad (\text{II.3.11})$$

y_h : Solution homogène

c_1 et c_2 : sont deux constantes déterminées en utilisant les conditions aux limites ($x > 0$).

$c_1 = 0$ (car il n'a pas de source), i.e, quand $x \rightarrow +\infty$: y_h est fini.

Comme le second membre de l'équation non homogène est de la forme $\mu_0^{-1} e^{-\frac{x}{\mu_0}}$, donc la solution particulière est de la forme :

$$y_p = \frac{\mu_0^{-1}}{p - \mu_0^{-2}} e^{-\frac{x}{\mu_0}} \quad (\text{II.3.12})$$

et la solution générale est :

$$\chi(x, p) = c_2 e^{-\sqrt{p}x} + \frac{\mu_0^{-1}}{p - \mu_0^{-2}} e^{-\frac{x}{\mu_0}} \quad (\text{II.3.13})$$

Avec $x = 0$, l'équation (II.3.13) donne :

$$c_2 = \frac{\mu_0^{-1}}{\mu_0^{-2} - p}; \quad c_2 = c(p) \quad (\text{II.3.14})$$

L'équation (II.3.13) devient finalement ;

$$\chi(x, p) = c(p) e^{-\sqrt{p}x} + \frac{\mu_0^{-1}}{p - \mu_0^{-2}} e^{-\frac{x}{\mu_0}} \quad (\text{II.3.15})$$

Pour obtenir la valeur de $\tilde{j}(x, p)$ on remplace l'équation (II.3.15) dans (II.3.9), on obtient :

$$\tilde{j}(x, p) = c(p) \sqrt{p} e^{-\sqrt{p}x} + \frac{\mu_0^{-2}}{p - \mu_0^{-2}} e^{-\frac{x}{\mu_0}} \quad (\text{II.3.16})$$

On s'intéresse à la surface ($x = 0$) et donc Eq (II.3.16) devient :

$$\tilde{j}(x=0, p) = -\frac{\mu_0^{-1}}{(\sqrt{p} + \mu_0^{-1})} \quad (\text{II.3.17})$$

Pour trouver l'image de cette fonction, on utilise l'inverse de la transformation de Laplace (voir Annexe .A, équation .A.7).

$$j(t) = -\mu_0^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi t}} - \mu_0^{-1} e^{\frac{t}{\mu_0^2}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{t}}{\mu_0} \right) \right] \quad (\text{II.3.18})$$

Où $\operatorname{erfc}z$: Fonction erreur complémentaire [44]

$$\operatorname{erfc}z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{+\infty} e^{-x^2} dx$$

Avec
$$z = \frac{\sqrt{t}}{\mu_0}$$

L'expression du courant $j(t)$ représente la quantité importante pour déduire le coefficient de rétrodiffusion des particules chargées.

III. Coefficient de rétrodiffusion pour des cibles de dimension finie :

Quand une cible de dimension finie est bombardée avec un faisceau de particules chargées, une fraction du faisceau incident est transmise, une autre absorbée et le reste de la fraction est réémis (réfléchi) dans le vide.

On s'intéresse au calcul de la fraction réfléchie qu'on représente par le coefficient de rétrodiffusion BCS. Si l'on considère la fraction de particules rétrodiffusées dans le vide, leur rémission dans le vide par la surface cible dépend de la nature des particules, de l'énergie du faisceau incident, de la nature de la cible (numéro atomique Z de la cible) et de l'angle d'incidence [28].

III.1 L'énergie du projectile à l'intérieur de la cible :

Considérons un solide de dimension finie " a ", l'énergie incidente de la particule chargée est E_0 , son énergie à une distance " a " est E_a . Son énergie à l'intérieur de la cible est E tel que $E_a < E < E_0$. D'après Eq. (I.1.1) et Eq. (I.2.3) ;

$$dE = -N \left(\frac{E}{E_0} \right)^{1-2m_1} S(E_0) dz$$

$$\Leftrightarrow \int_{E_a}^{E_0} E^{2m_1-1} dE = \int_0^a N E_0^{2m_1-1} S(E_0) dz \quad \text{(III.1.1)}$$

Après intégration, on obtient ;

$$E_a^{2m_1} = E_0^{2m_1} - 2m_1 N E_0^{2m_1-1} S(E_0) a \quad \text{(III.1.2)}$$

Donc l'équation (III.1.2) devient :

$$E_a = E_0 \left[1 - \frac{2m_1 N S(E_0)}{E_0} a \right]^{\frac{1}{2m_1}} \quad \text{(III.1.3)}$$

En usant de l'équation (I.2.5) on obtient aisément :

$$E_a = E_0 \left(1 - \frac{a}{R} \right)^{\frac{1}{2m_1}} \quad (\text{III.1.4})$$

L'équation (III.1.4) est l'énergie limite pour le courant de particule chargées à l'intérieur de la cible de dimension finie " a ". Quand l'énergie initiale E_0 diminue pour atteindre l'énergie E_a , la variable t dans l'équation (II.2.16), définie comme temps symbolique dans la théorie d'âge de Fermi, augmente. Sa limite supérieure est t_a . Elle est calculée comme suit ;

$$t_a = \frac{1}{3} \sigma_{tr} (E_0)^2 \int_{E_a}^{E_0} \frac{dE}{\sigma_{tr} (E) S(E)} \quad (\text{III.1.5})$$

En utilisant les équations (I.2.3) et (II.2.14) dans Eq (III.1.5) on obtient :

$$t_a = \frac{1}{3} \sigma_{tr} (E_0)^2 \int_{E_a}^{E_0} \frac{E_0^{1-2(m_1+m)} dE}{E^{1-2(m_1+m)} \sigma_{tr} (E_0) S(E_0)} \quad (\text{III.1.6})$$

Donc l'équation (III.1.6) devient :

$$t_a = \frac{\sigma_{tr} (E_0) E_0^{1-2(m_1+m)}}{6(m_1+m) S(E_0)} \left\{ E_0^{2(m_1+m)} - E_a^{2(m_1+m)} \right\} \quad (\text{III.1.7})$$

En utilisant l'équation (III.1.4) et (I.2.5) dans (III.1.7) on obtient :

$$t_a = \frac{N \sigma_{tr} (E_0) R}{3 \left(1 + \frac{m}{m_1} \right)} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{a}{R} \right)^{1 + \frac{m_1}{m}} \right\} \quad (\text{III.1.8})$$

De même, en substituant l'équation (B.4) dans (III.1.8) on obtient :

$$t_a = \frac{\nu}{3\left(1 + \frac{m}{m_1}\right)} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{a}{R}\right)^{1 + \frac{m_1}{m}} \right\} \quad (\text{III.1.9})$$

Avec $\nu = N\sigma_{tr}(E_0)R$. Il représente la valeur moyenne des collisions avec large angle que subit la particule avant son ralentissement final.

Pour des énergies de l'ordre des keV ($\nu \gg 1$) le processus de collision est gouverné [19] par $m \approx \frac{1}{2}$ et la perte d'énergie par $m_1 \approx \frac{1}{4}$. Donc l'équation (III.1.9) devient :

$$t_a = \frac{\nu}{9} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{a}{R}\right)^3 \right\} \quad (\text{III.1.10})$$

Lorsque $a \rightarrow R$ on retrouve la limite supérieure pour le cas d'une cible infinie [19].
(Voir Annexe. B ; Eq B.5)

$$t_a = t_0 = \frac{\nu}{9} \quad (\text{III.1.11})$$

Avec $\nu = N\sigma_{tr}(E_0)R$.

III.2 Coefficient de rétrodiffusion (basses énergies) :

Supposons un courant de particules chargée de densité $j(t)$ entrant en collision avec une cible de dimension finie " a ", le coefficient de rétrodiffusion BCS est donné par :

$$BCS(E_0, \mu_0) = - \int_0^{t_a} j(t) dt \quad (\text{III.2.1})$$

t_a : est la limite supérieur dans la théorie d'âge de Fermi défini dans (III.1.10).

Rappelons que le courant $j(t)$ a été calculé précédemment en utilisant l'équation de transport et est donné par l'équation (II.3.18) suivante ;

$$j(t) = -\mu_0^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi t}} - \mu_0^{-1} e^{\frac{t}{\mu_0^2}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{t}}{\mu_0} \right) \right]$$

Où $\mu_0 = \cos \theta_0$: est le cosinus de l'angle d'incidence des particules.

Le coefficient de rétrodiffusion est donc ;

$$BCS(E_0, \mu_0) = \int_0^{t_a} \mu_0^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi t}} - \mu_0^{-1} e^{\frac{t}{\mu_0^2}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{t}}{\mu_0} \right) \right] dt \quad (\text{III.2.2})$$

Le calcul de l'intégral de (III.2.2) est laborieux. Il est détaillé dans l'Annexe D, il consiste en une succession d'intégrations par parties. Le développement donne ;

$$BCS(E_0, \mu_0) \approx 1 - \frac{\mu_0}{\sqrt{\pi t_a}} + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{\mu_0^3}{t_a^{3/2}} - \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{\mu_0^5}{t_a^{5/2}} + \dots \quad (\text{III.2.3})$$

Pour le rang des basses énergies de l'ordre des eV jusqu'à des dizaines de keV ($\nu \gg 1$) le coefficient de rétrodiffusion, en usant de (III.1.10), est donc donné comme ;

$$BCS(E_0, \mu_0) \approx 1 - \frac{3\mu_0}{\sqrt{\pi\nu}} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{a}{R} \right)^3 \right\}^{-1/2} + \frac{3^3 \mu_0^3}{2\sqrt{\pi\nu^{3/2}}} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{a}{R} \right)^3 \right\}^{-3/2} - \frac{3^5 \mu_0^5}{4\sqrt{\pi\nu^{5/2}}} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{a}{R} \right)^3 \right\}^{-5/2} + \dots \quad (\text{III.2.4})$$

$\nu \gg 1$

Lorsque $a \rightarrow R$ on retrouve le coefficient de rétrodiffusion pour une cible semi infinie [19] montré comme Annexe D.10.

$$BCS(E_0, \mu_0) \approx 1 - \frac{3\mu_0}{\sqrt{\pi\nu}} + \frac{3^3 \mu_0^3}{2\sqrt{\pi\nu^{3/2}}} - \frac{3^5 \mu_0^5}{4\sqrt{\pi\nu^{5/2}}} + \dots \quad \nu \gg 1$$

A hautes énergies, l'équation (III.2.4) n'est plus valide. Comme alternative, le model à une collision [29] est utilisé.

III.3 Coefficient de rétrodiffusion dans le modèle à une collision (hautes énergies) :

Le modèle à une collision décrit classiquement le processus des collisions des particules chargées avec la matière. Dans ce modèle, la particule incidente d'énergie initiale E_0 pénètre dans la cible suivant une direction normale (perpendiculaire) à la surface. La particule subit une collision et sera diffusée suivant une trajectoire droite comme montré sur la figure 2.

On s'intéresse aux particules quittant la cible après collisions. Ces particules représentent la fraction rétrodiffusée. C'est aussi la probabilité pour que la particule quitte la cible qu'on calcul par intégration sur tous les événements possible pour avoir une diffusion vers la surface après la collision.

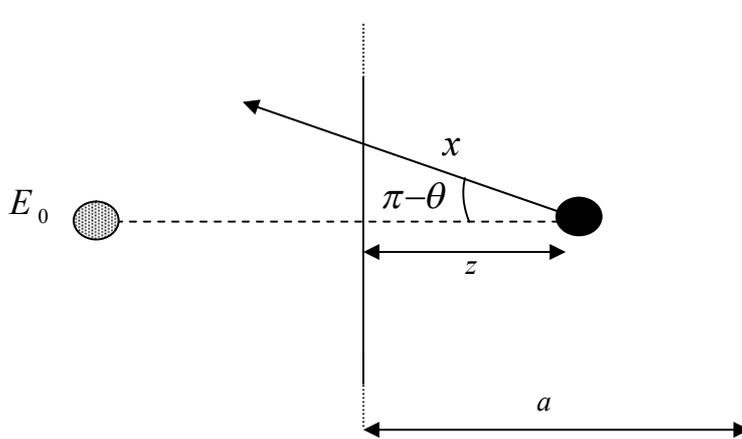


Figure 2: Géométrie du modèle à une seule collision

Alors la probabilité pour que la particule diffuse vers la surface de la cible de dimension finie " a " est déterminée comme suit ;

$$BCS(E_0, \mu_0 = 1) = N \int_0^{+\infty} dz \int_{-1}^0 \sigma(E, \hat{\mu}) d\hat{\mu} \Theta\left(a - z - \frac{z}{|\hat{\mu}|}\right) \quad (\text{III.3.1})$$

N : nombre d'atomes par unité de volume

$\Theta(x)$: Fonction de Heaviside

On utilise cette fonction pour s'assurer que le parcours total de la particule chargée qui quitte est inférieure à la dimension de la cible. Elle est définie ici à partir de :

$$\Theta\left(a-z-\frac{z}{|\hat{\mu}|}\right) = \begin{cases} 0 & \text{si } a-z-\frac{z}{|\hat{\mu}|} < 0 \\ 1 & \text{si } a-z-\frac{z}{|\hat{\mu}|} \geq 0 \end{cases} \quad (\text{III.3.2})$$

$\sigma(E, \hat{\mu}) d\hat{\mu}$: Section efficace du projectile avec l'énergie E de collision dans un cône $(\hat{\mu}, d\hat{\mu})$; $\hat{\mu}$ est le cosinus de l'angle de diffusion.

$\sigma(E, \hat{\mu}) d\hat{\mu}$ est définie [19, 29] en fonction de la section efficace de transport comme ;

$$\sigma(E, \hat{\mu}) d\hat{\mu} = \frac{1-m}{2^{1-m}} \sigma_{tr}(E_0) \left[\frac{E}{E_0}\right]^{-2m} \frac{d\hat{\mu}}{(1-\hat{\mu})^{1+m}} d\hat{\mu} \quad (\text{III.3.3})$$

D'après la figure .2, la particule quitte le solide avec un parcours total inférieur à la dimension de la cible " a " telle que ;

$$z + \frac{z}{|\hat{\mu}|} \leq a \quad (\text{III.3.4})$$

$$\Leftrightarrow \frac{z}{R} \leq \frac{a}{R} \frac{|\hat{\mu}|}{|\hat{\mu}|+1} \quad (\text{III.3.5})$$

Où R est le rang.

$$\text{On pose } \zeta = \frac{z}{R} \Rightarrow \zeta \leq \frac{a}{R} \frac{|\hat{\mu}|}{1+|\hat{\mu}|} \quad (\text{III.3.6})$$

Remarquons que si :

$$z = 0 \Rightarrow \zeta = 0 \quad (\text{III.3.7})$$

$$z \rightarrow +\infty \Rightarrow \zeta \rightarrow \frac{a}{R} \frac{|\hat{\mu}|}{1+|\hat{\mu}|}$$

Si on considère les équations (III.1.4), (III.3.2), (III.3.7) et (III.3.3) dans l'équation (III.3.1), on obtient :

$$BCS(E_0, \mu_0 = 1) = N \frac{1-m}{2^{1-m}} \sigma_{tr}(E_0) \int_{-1}^0 \frac{d\hat{\mu}}{(1-\hat{\mu})^{1+m}} \int_0^{\frac{a}{R} \frac{|\hat{\mu}|}{1+|\hat{\mu}|}} R d\zeta (1-\zeta)^{\frac{m}{m_1}} \quad (III.3.8)$$

Avec $m \approx \frac{1}{2}, m_1 \approx \frac{1}{4}$ on obtient donc :

$$BCS(E_0, \mu_0 = 1) = \frac{\nu}{2\sqrt{2}} \int_{-1}^0 \frac{d\hat{\mu}}{(1-\hat{\mu})^{\frac{3}{2}}} \int_0^{\frac{a}{R} \frac{|\hat{\mu}|}{1+|\hat{\mu}|}} \frac{1}{(1-\zeta)^2} d\zeta \quad (III.3.9)$$

Avec $\nu = N\sigma_{tr}(E_0)R$.

On met l'équation (III.3.9) sous la forme :

$$BCS(E_0, \mu_0 = 1) = \frac{\nu}{2\sqrt{2}} b \quad (III.3.10)$$

Avec :

$$b = \int_{-1}^0 \frac{d\hat{\mu}}{(1-\hat{\mu})^{\frac{3}{2}}} \int_0^{\frac{a}{R} \frac{|\hat{\mu}|}{1+|\hat{\mu}|}} \frac{1}{(1-\zeta)^2} d\zeta \quad (III.3.11)$$

L'intégration sur ζ de l'équation (III.3.11) donne:

$$b = \frac{a}{R} \int_{-1}^0 \frac{d\hat{\mu}}{(1-\hat{\mu})^{\frac{3}{2}}} \frac{|\hat{\mu}|}{1+|\hat{\mu}| \left(1 - \frac{a}{R}\right)} \quad (III.3.12)$$

En s'intéresse aux particules diffusant dans le deuxième cadran du cercle trigonométrique correspondant à $(\pi/2, \pi)$. Ceci correspond au courant de particules rétrodiffusées avec $\hat{\mu}(-1, 0)$.

Si on pose $c=1-\frac{a}{R}$, l'intégral (III.3.12) devient ;

$$b = \frac{a}{R} \int_0^1 \frac{\hat{\mu} d\hat{\mu}}{(1-\hat{\mu})^{\frac{3}{2}} [c\hat{\mu} - 1]} \quad (\text{III.3.13})$$

Dont la valeur est donnée par :

$$b = \frac{a}{R} \left\{ \frac{\sqrt{2}-2}{1-c} + \frac{2}{(1-c)\sqrt{(1-c)c}} \left[\arctan \sqrt{\frac{2c}{1-c}} - \arctan \sqrt{\frac{c}{1-c}} \right] \right\} \quad (\text{III.3.14})$$

⇔

$$b = (\sqrt{2}-2) + \frac{2}{\sqrt{\left(1-\frac{a}{R}\right)\frac{a}{R}}} \left[\arctan \sqrt{2\left(\frac{R}{a}-1\right)} - \arctan \sqrt{\left(\frac{R}{a}-1\right)} \right] \quad (\text{III.3.15})$$

En substituant l'équation (III.3.15) dans Eq. (III.3.10), on obtient :

$$BCS(E_0, \mu_0 = 1) = \frac{\nu}{2\sqrt{2}} \left\{ (\sqrt{2}-2) + \frac{2}{\sqrt{\left(1-\frac{a}{R}\right)\frac{a}{R}}} \left[\arctan \sqrt{2\left(\frac{R}{a}-1\right)} - \arctan \sqrt{\left(\frac{R}{a}-1\right)} \right] \right\} \quad (\text{III.3.16})$$

Pour une incidence oblique, le coefficient de rétrodiffusion peut être exprimé par [29] ;

$$BCS(E_0, \mu_0) = \frac{BCS(E_0, \mu_0 = 1)}{\mu_0^2} \quad (\text{III.3.17})$$

$BCS(E_0, \mu_0 = 1)$ est le coefficient de rétrodiffusion pour une incidence normale à la surface.

$\mu_0 = \cos \theta_0$, θ_0 est l'angle d'incidence.

Donc, le coefficient de rétrodiffusion pour les hautes énergies ($\nu \ll 1$) calculé via la théorie classique à une collision est donné par :

$$BCS(E_0, \mu_0) = \frac{\nu}{2\sqrt{2}\mu_0^2} \left\{ (\sqrt{2}-2) + \frac{a}{R} \frac{2}{\sqrt{\left(\frac{R}{a}-1\right)}} \left[\arctan \sqrt{2\left(\frac{R}{a}-1\right)} - \arctan \sqrt{\left(\frac{R}{a}-1\right)} \right] \right\} \quad (\text{III.3.18})$$

$\nu \ll 1$

Pour le cas limite ($a \rightarrow R$) où la cible est considéré semi infinie ;

$$\text{On pose } y = \sqrt{\frac{R}{a}-1} \quad \text{Si } a \rightarrow R \Rightarrow y \rightarrow 0$$

Donc l'équation (III.3.18) devient :

$$BCS(E_0, \mu_0) = \frac{\nu}{\mu_0^2} \left\{ \frac{(\sqrt{2}-2)}{2\sqrt{2}} + \frac{1}{(1+y^2)} \left[\frac{\arctan \sqrt{2}y}{\sqrt{2}y} - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\arctan y}{y} \right] \right\} \quad (\text{III.3.19})$$

$$a \rightarrow R \quad \text{Donc } y \rightarrow 0 \quad \text{avec } \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\arctan \sqrt{2}y}{\sqrt{2}y} = 1$$

$$\text{Et } \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\arctan y}{y} = 1$$

Donc l'équation (III.3.19) devient :

$$BCS(E_0, \mu_0) = \frac{\nu}{\mu_0^2} \left(\frac{3}{2} - \sqrt{2} \right) \quad (\text{III.3.20})$$

Lorsque $a \rightarrow R$ on retrouve le coefficient de rétrodiffusion pour une cible semi infinie [19] montré comme Annexe E.14.

III.4. Coefficient de rétrodiffusion pour les basses et hautes énergies pour une cible semi infinie.

L'équation (III.2.4) donnée par

$$BCS(E_0, \mu_0) \approx 1 - \frac{3\mu_0}{\sqrt{\pi\nu}} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{a}{R} \right)^3 \right\}^{-1/2} + \frac{3^3 \mu_0^3}{2\sqrt{\pi\nu}^{3/2}} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{a}{R} \right)^3 \right\}^{-3/2} - \frac{3^5 \mu_0^5}{4\sqrt{\pi\nu}^{3/2}} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{a}{R} \right)^3 \right\}^{-5/2} + \dots$$

et l'équation (III.3.18) donnée comme

$$BCS(E_0, \mu_0) = \frac{\nu}{2\sqrt{2}\mu_0^2} \left\{ (\sqrt{2} - 2) + \frac{a}{R} \frac{2}{\sqrt{\left(\frac{R}{a} - 1\right)}} \left[\arctan \sqrt{2\left(\frac{R}{a} - 1\right)} - \arctan \sqrt{\left(\frac{R}{a} - 1\right)} \right] \right\}$$

permettent d'obtenir une expression pratique liant les deux limites $\nu \ll 1$ (basses énergies) et $\nu \gg 1$ (hautes énergies) pour le cas limite $a \rightarrow R$.

La figure.3 montre l'expression du coefficient de rétrodiffusion pour toutes les énergies qu'on peut interpoler utilisant les équations (III.2.4) et (III.3.18). Elle est donnée par ;

$$BCS(E_0, \mu_0) = \left[1 + a_1 \frac{\mu_0}{\sqrt{\nu}} + a_2 \frac{\mu_0^2}{\nu} + a_3 \frac{\mu_0^3}{\nu^{3/2}} + a_4 \frac{\mu_0^4}{\nu^2} \right]^{-1/2} \quad (III.4.1)$$

Avec : $a_1 \approx 2.106$ $a_2 \approx 50.283$ $a_3 \approx -330.467$ $a_4 \approx 609.874$

$$\nu = N\sigma_{tr}(E_0)R \quad \mu_0 = \cos \theta_0$$

L'équation (III.4.1) est l'expression analytique du coefficient de rétrodiffusion (réflexion) des particules chargées calculée à partir de l'équation de transport.

Remarquons que pour une énergie donnée, BCS dépend de l'angle d'incidence de la particule chargée, de son rang R représentant la distance maximale de pénétration et de sa section

efficace élastique de transport σ_{tr} . Principalement, la validité du résultat du coefficient BCS dépend de la validité du calcul de R et de σ_{tr} . Par conséquent, il est important d'utiliser des modèles basés sur des approches quantiques.

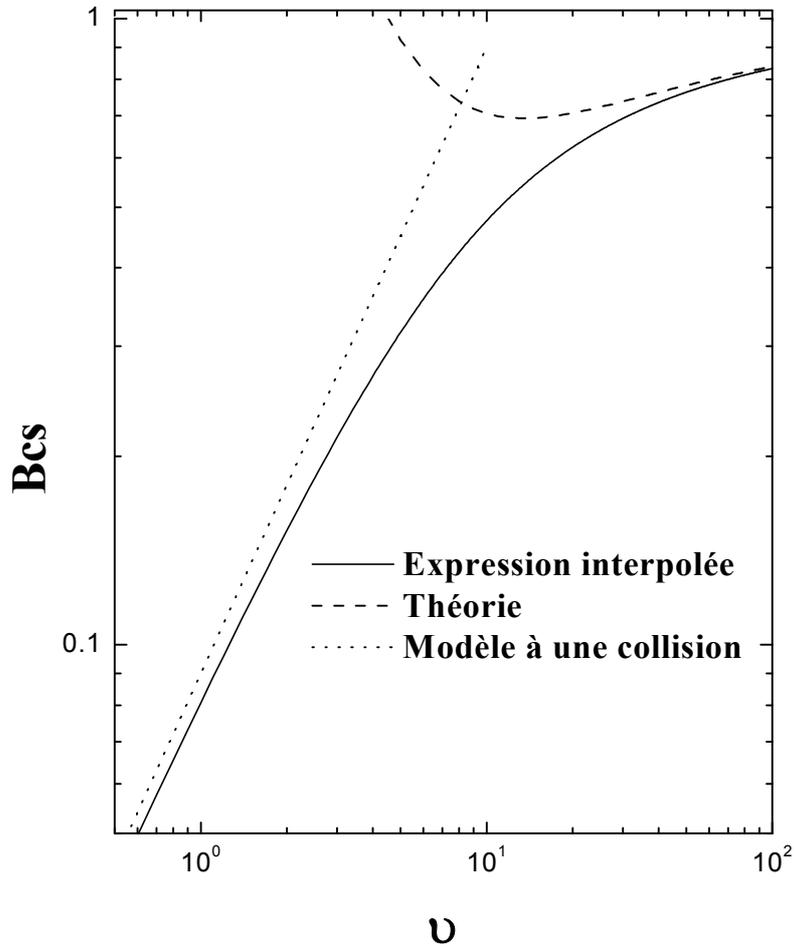


Figure 3 : *Cas limite du coefficient de rétrodiffusion*
Pour $\nu \gg 1$ et $\nu \ll 1$

IV. Calcul du rang R et du LPMT des électrons et des positrons

IV.1. Calcul du rang R

Rappelons que le rang des particules chargées R pour les électrons et les positrons et définie par l'équation (I.2.1) comme suit ;

$$R = \int_{E_0}^0 \frac{dE}{dE/dz}$$

$\frac{dE}{dz}$: Fonction perte d'énergie où encore pouvoir d'arrêt (stopping power) représentant la perte d'énergie par unité de distance.

Le rang R est en fait la distance maximale parcourue par la particule avec l'énergie E . La perte d'énergie $\frac{dE}{dz}$ est calculée à partir de l'intégrale suivante ;

$$\frac{dE}{dz} = \int \Delta E \frac{d\sigma}{dE} dE$$

ΔE est la perte d'énergie.

$\frac{d\sigma}{dE}$ est la section efficace différentielle inélastique.

Les sections efficaces inélastiques sont obtenues dans le model de Sternheimer-Liljequist utilisant les oscillateurs généralisés forcés (Generalised oscillator strength) [12].

Un exemple du rang des électrons et des positrons pour les éléments Al et Au est donné sur la figures 4.1.1 et figure 4.1.2, respectivement.

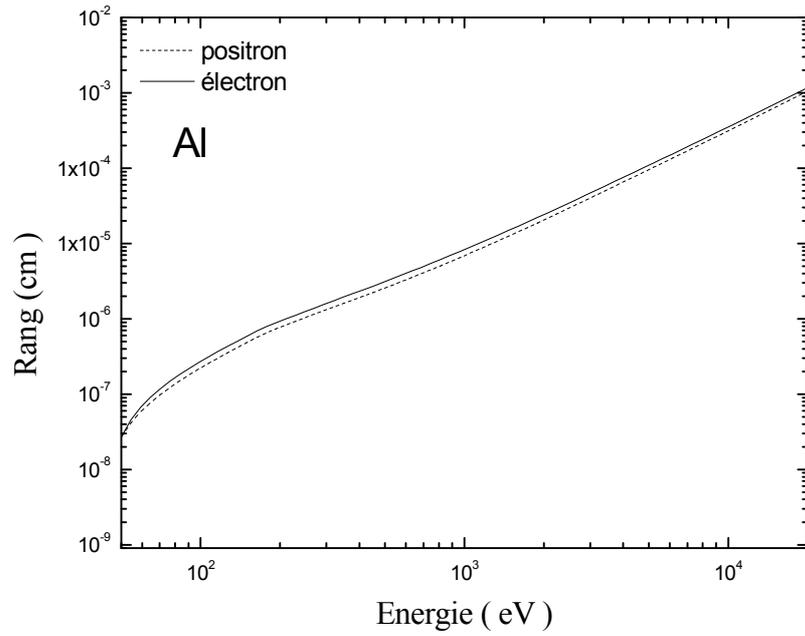


Figure 4.1.1 : Le rang des électrons et des positrons en fonction de l'énergie pour élément Al

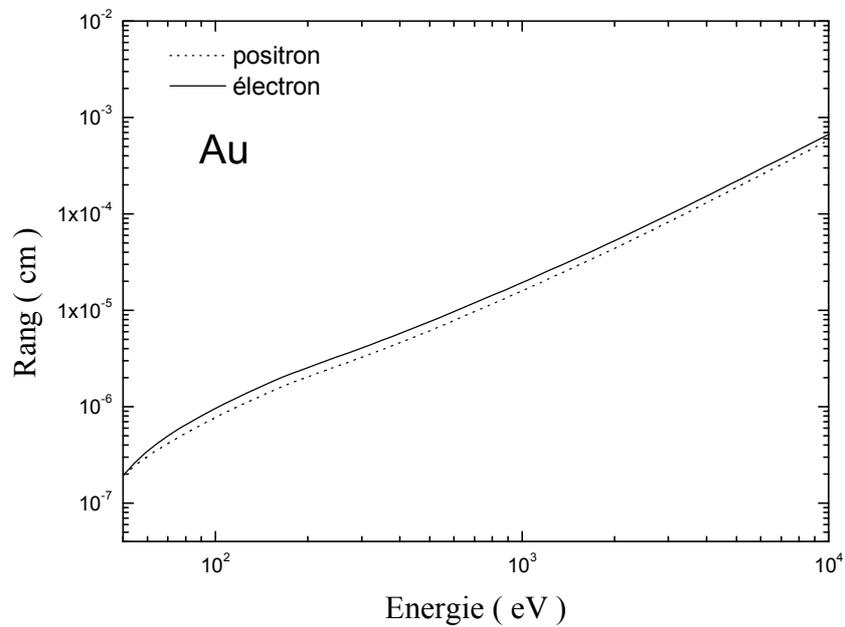


Figure 4.1.2 : Le rang des électrons et des positrons en fonction de l'énergie Pour élément Au

IV.2. Calcul du libre parcours moyen de transport (LPMT) des électrons et des positrons dans la matière solide :

Le libre parcours moyen de transport λ_{tr} (LPMT) est défini par l'équation (I.5.6)

$$\lambda_{tr} = \left(N \frac{4\pi}{K^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2 \Delta_l \right)^{-1}$$

Où $\Delta_l = \delta_{l+1} - \delta_l$ est la différence entre les déphasages des ondes partielles d'ordre l et $l+1$.

N : Nombre d'atome par unité de volume

Les valeurs du λ_{tr} (LPMT) sont calculées à partir du code ELSEPA [30] dont les sections efficaces différentielles des collisions élastiques sont calculées par la méthode des ondes partielles. Dans ce code, l'équation relativiste de Dirac décrivant l'interaction d'une particule chargée avec le potentiel de l'atome est résolue numériquement. Le potentiel de l'atome est considéré central et calculé à partir des densités électroniques de Dirac-Fock. Ces densités sont calculées à partir du code de Desclaux [desclaux code]. L'échange entre électrons est pris en compte en utilisant l'expression d'échange de Furness-MacCarthy [31]. Pour les positrons, l'effet de corrélation est pris en compte.

Les valeurs du libre parcours moyen de transport LPMT pour les électrons et les positrons sont montrées sur les figures 4.2.1 et 4.2.2 pour Al et Au comme éléments léger et lourd respectivement.

Il faut noter que sur les figures 4.2.1 et figure 4.2.2, on remarque que le libre parcours moyen des positrons est supérieur à celui des électrons. Pour les hautes énergies, la différence est presque nulle. De même, notons que le LPMT augmente avec l'augmentation de l'énergie.

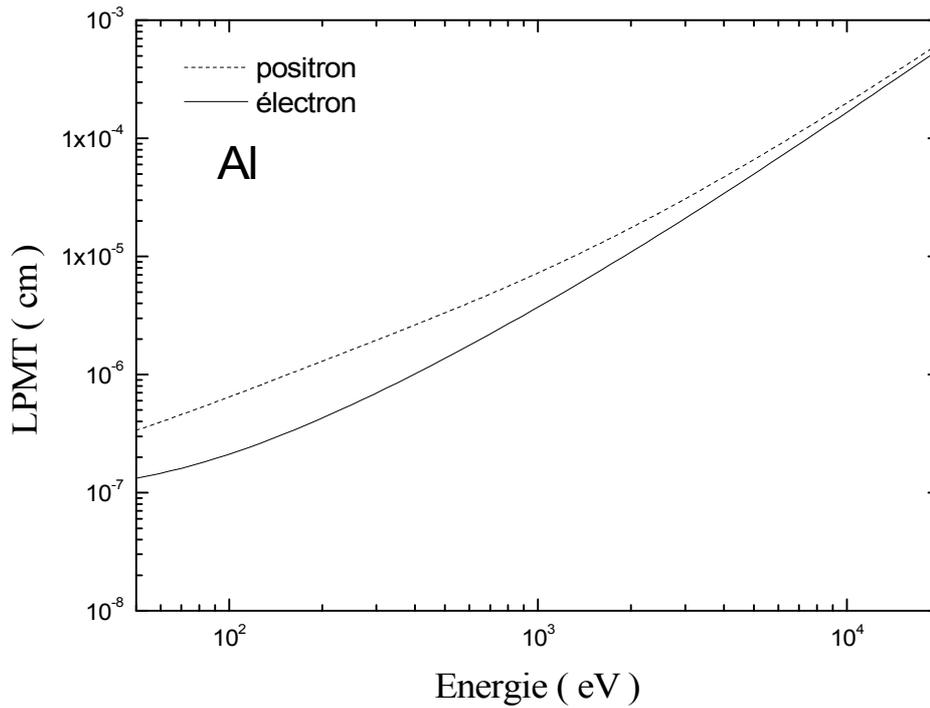


Figure 4.2.1 : Libre parcours moyen de transport des électrons et des positrons en fonction de l'énergie pour élément Al

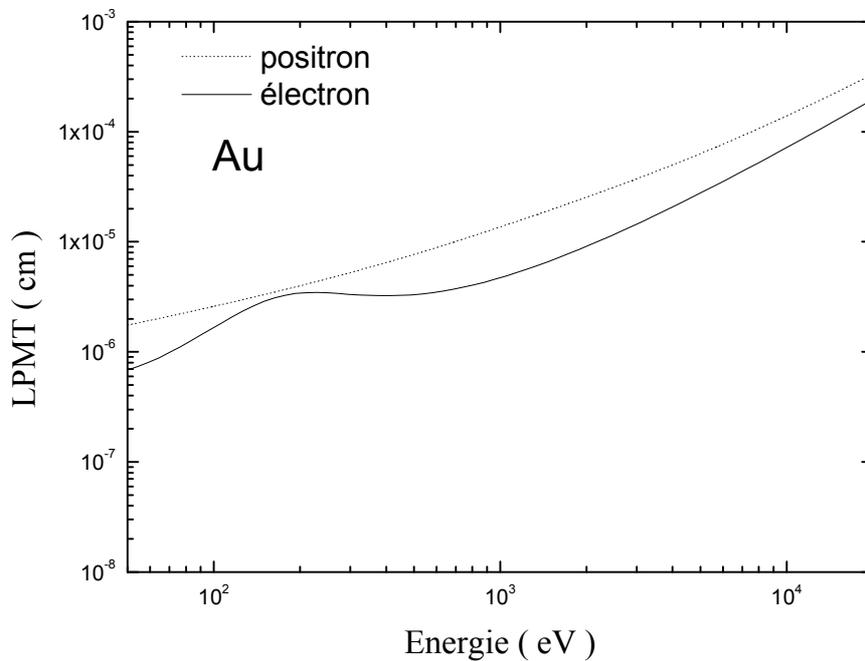


Figure 4.2.2 : Libre parcours moyen de transport des électrons et des positrons en fonction de l'énergie pour élément Au

IV.3. Comparaison du rang et du LPMT pour des particules chargées

Les figures 4.3.1 et la figure 4.3.2 présentent une comparaison entre le libre parcours moyen λ_{tr} (LPMT) et le rang R pour toutes gammes de basses et hautes énergies. La figure 4.3.1 concerne les positrons dans Ag alors que la figure 4.3.2 concerne les électrons. Pour les électrons et les positrons de très basses et très hautes énergies, le LPMT est supérieur au rang.

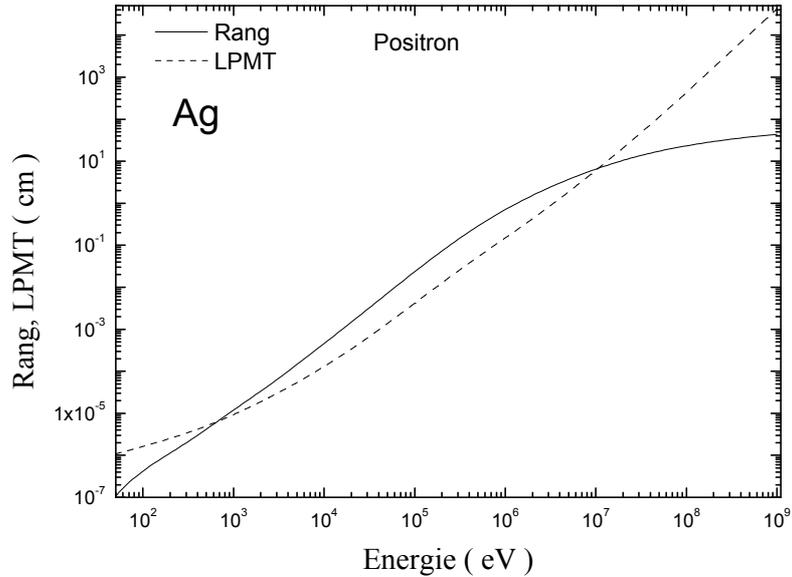


Figure 4.3.1: Rang et libre parcours moyen en fonction de l'énergie pour élément Ag

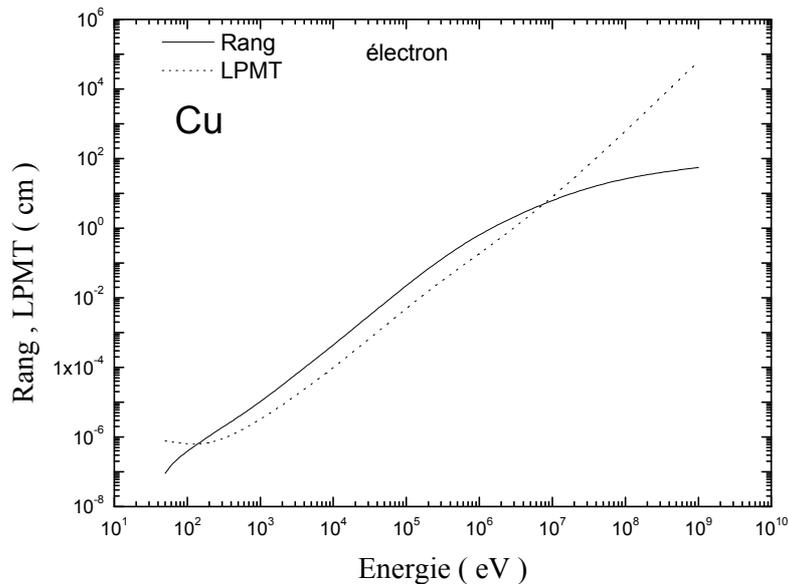


Figure 4.3.2 : Rang et libre parcours moyen en fonction de l'énergie pour élément Cu

V. Calcul du coefficient de rétrodiffusion (BCS)

Connaissant le rang R et le libre parcours moyen de transport λ_r , on peut calculer le coefficient de rétrodiffusion BCS des particules chargées pour tout élément du tableau périodique.

Un simple programme écrit en fortran 77 permet de calculer BCS en fonction de l'angle d'incidence μ_0 , de l'énergie de la particule chargée incidente E_0 et la nature de la cible (numéro atomique Z).

D'après l'équation (III.4.1), BCS est donné par ;

$$BCS(E_0, \mu_0) = \left[1 + a_1 \frac{\mu_0}{\sqrt{\nu}} + a_2 \frac{\mu_0^2}{\nu} + a_3 \frac{\mu_0^3}{\nu^{3/2}} + a_4 \frac{\mu_0^4}{\nu^2} \right]^{-1/2}$$

Avec : $a_1 \approx 2.106$ $a_2 \approx 50.283$ $a_3 \approx -330.467$ $a_4 \approx 609.874$

$$\nu = NR\sigma_{tr} = R / \lambda_r \quad , \quad \mu_0 = \cos \theta_0$$

μ_0 : Cosinus de l'angle d'incidence des particules

V.1 Coefficients de rétrodiffusion pour une incidence normale

V.1.1 Cas des électrons :

Dans cette partie sont reportés nos résultats du coefficient de rétrodiffusion des électrons avec incidence normale (BCS^-) pour une variété d'éléments (Be, Al, Cu et Au) dans le rang d'énergie 1 keV – 10MeV. Le choix de ces éléments représente une généralisation de la variation de BCS^- avec le nombre atomique Z ($Z_{Be} = 4 - Z_{Au} = 79$).

La figure 5.1.1.a présente notre calcul de BCS^- dans la gamme des basses énergies inférieures à 10keV. La figure 5.1.1.b concerne la gamme des énergies moyennes entre 10 keV et 100 keV. Pour les hautes énergies entre 0.1 MeV et 100 MeV, le résultat du BCS^- est montré figure 5.1.1.c.

D'après ces figures, il est clair que pour les éléments légers, BCS^- décroît avec l'énergie. Pour les hautes énergies, il est presque nul. Quand Z devient important, pour les basses et moyennes énergies, BCS^- croît avec Z . A hautes énergies, à commencer à partir de 0.5 MeV, BCS^- décroît rapidement avec Z . Ceci est bien justifié dans la théorie de la diffusion classique. En fait, quand l'énergie de la particule incidente est importante, alors la particule est diffusée avec de petits angles et donc la probabilité d'être rétrodiffusée est petite. Dans ce cas la particule chargée a plus de chance de gagner en profondeur que d'être réfléchi.

Pour les intervalles d'énergies citées ci-dessus, on compare nos résultats avec l'expérience comme montrés sur les figures 5.1.1.a-c. En générale, l'accord est bon. En particulier, pour le cas de Cu et Al, l'accord est excellent.

Pour le cas de Au, une variété de résultats expérimentaux existe. On a choisi ceux les plus utilisés. On note qu'une différence existe pour les basses énergies.

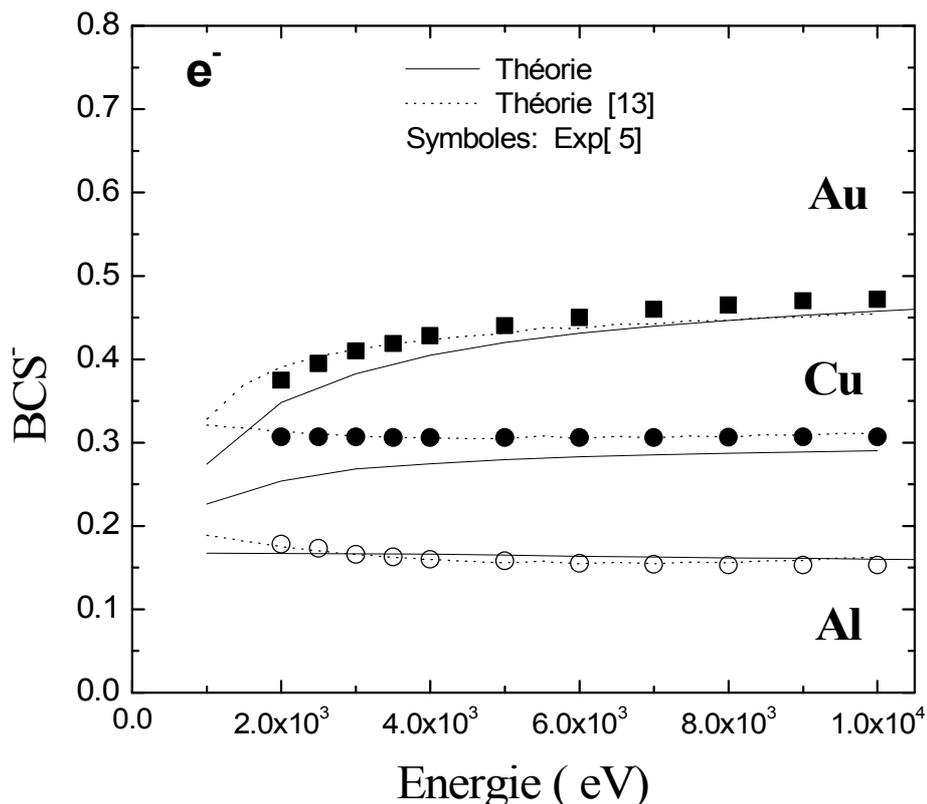


Figure 5.1.1.a : Coefficient de rétrodiffusion BCS^- en fonction de l'énergie des électrons dans Al, Cu et Au. Les courbes en continue (présent travail)

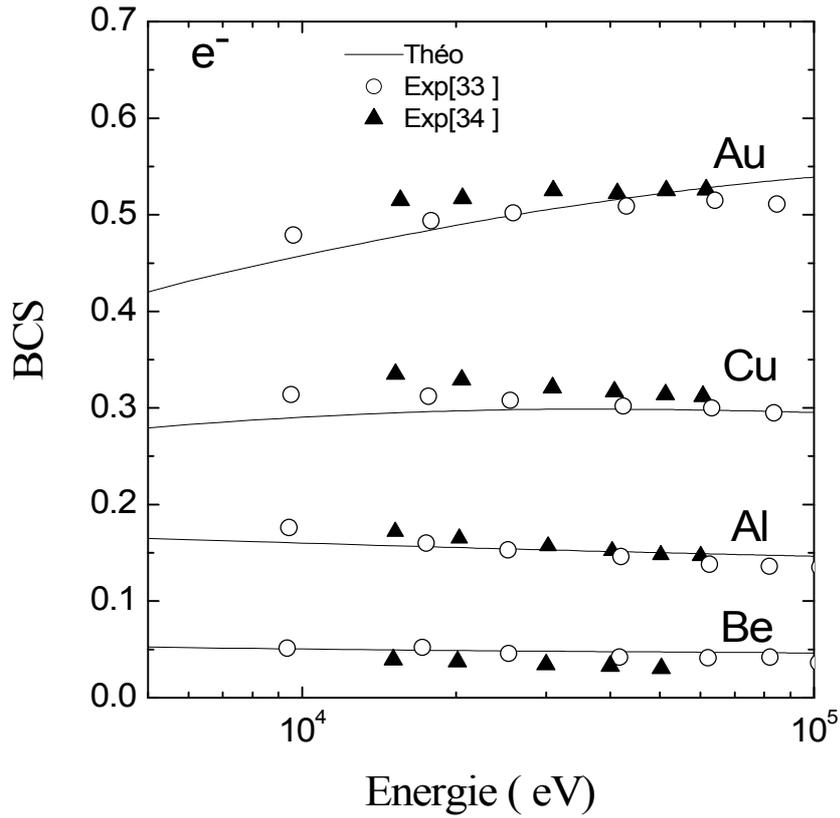


Figure 5.1.1.b : Coefficient de rétrodiffusion BCS en fonction de l'énergie des électrons dans Be, Al, Cu et Au. Les courbes en continue (présent travail)

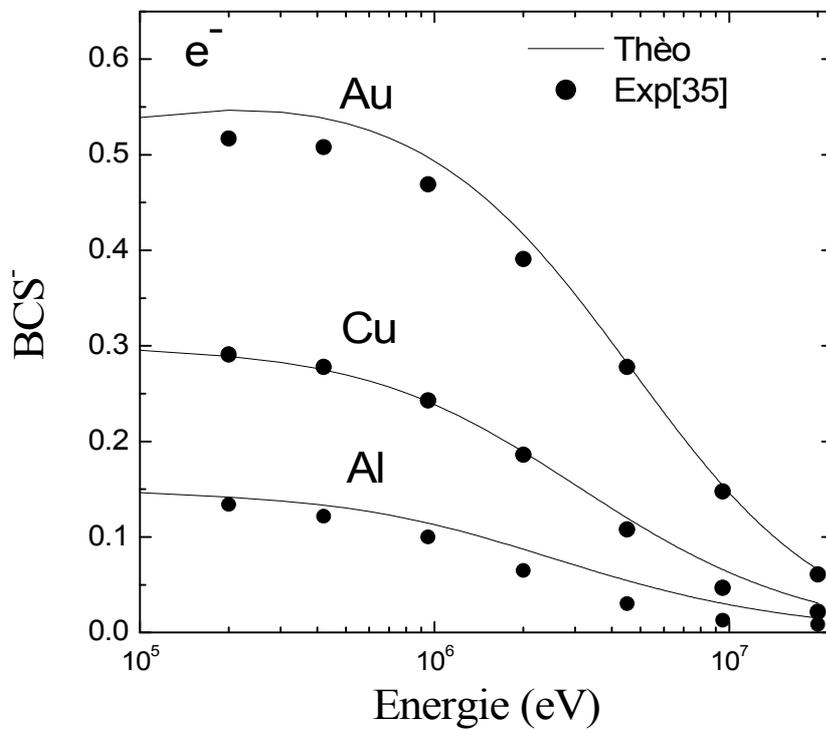


Figure 5.1.1.c: Coefficient de rétrodiffusion BCS en fonction de l'énergie des électrons dans Al, Cu et Au. Les courbes en continue (présent travail)

Sur la figure 5.1.1.d, on présente une comparaison détaillée de nos résultats avec d'autres simulations basées sur le calcul statistique Monte Carlo pour les basses et moyennes énergies; Ainsi qu'une comparaison avec la théorie de Tilinin [17]. La comparaison concerne Al et Au comme cible légère et lourde, respectivement. Pour illustration, les résultats expérimentaux sont aussi présentés.

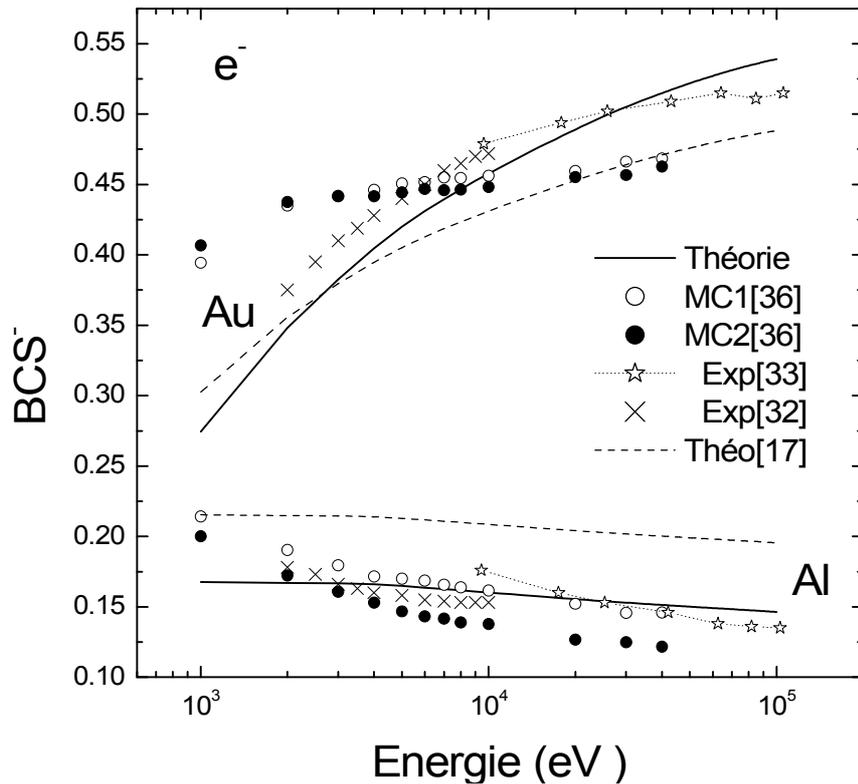


Figure 5.1.1.d: Coefficient de rétrodiffusion BCS en fonction de l'énergie des électrons dans Al et Au. les courbes en continue (présent travail).

Les résultats de la simulation MC1 et MC2 [36] sont calculés à partir des modèles de collisions élastiques et inélastiques. Les collisions élastiques sont modélisées par la méthode des ondes partielles où un calcul non relativiste est utilisé. Pour MC1, les collisions inélastiques sont décrites par le model diélectrique de Penn [37]. La perte d'énergie est calculée à partir des sections efficaces de collisions inélastiques. Pour MC2, la perte d'énergie est calculée dans le même model de Penn mais en utilisant la fonction perte d'énergie (stopping power). Dans MC2 les collisions sont toutes élastiques mais les électrons perdent leurs énergies d'une manière continue tout au long du trajet entre

collisions (CSDA : continuous slowing down approximation). Dans la théorie de Tilinin, BCS^- est calculé analytiquement [17] en utilisant l'équation de transport avec des conditions aux limites appropriées. Tilinin utilise une méthode approximée dans l'équation de transport où les sections élastiques efficaces différentielles sont remplacées par des sections efficaces équivalentes au LPMT. La perte d'énergie est prise en compte en introduisant le rang R calculé dans la théorie des collisions inélastique de Lindhard et Scharff [18]. L'expression de Tilinin est donnée comme ;

$$BCS^- = \frac{\sqrt{1+\nu} - 1}{\sqrt{1+\nu} + 1.908} \quad (V.1.1)$$

Où $\nu = R/\lambda_{tr}$.

Le résultat du calcul de BCS^- est présenté en ligne discontinue. Une différence significative existe par comparaison avec nos résultats. Rappelons que dans notre model, la résolution de l'équation de transport utilise l'approximation P_l (des polynômes de Legendre) avec la théorie dite d'âge.

Notre calcul théorique est en accord avec l'expérience qu'avec MC1 et MC2, en particulier pour Au. Pour Al, le résultat de MC1 est meilleur que MC2. La différence entre le calcul MC1 et l'expérience pour Au et le bon accord pour Al est justifié par le fait que les constantes diélectriques utilisées dans le model de Penn, calculées à partir de modèles empiriques, sont plus exactes pour Al que pour Au.

V.1.2 Cas des positrons

Dans cette seconde section, on reporte nos résultats du coefficient de rétrodiffusion des positrons BCS^+ avec une incidence normale pour une variété d'éléments du tableau périodique (Al, Cu, Ag et Au) dans le rang des basses et moyennes énergies \sim keV – 0.1 MeV. Pour les hautes énergies, les résultats expérimentaux sont presque inexistant. Comme pour les électrons, le choix de ces éléments représente une généralisation de la variation de BCS^+ avec le nombre atomique Z ($Z_{Be} = 4 - Z_{Au} = 79$).

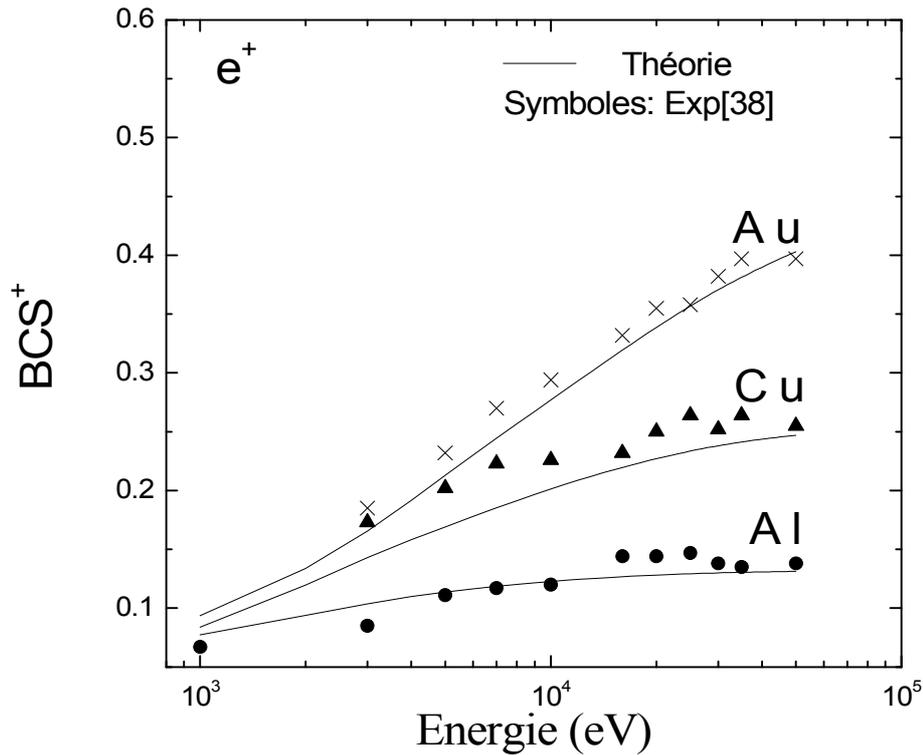


Figure 5.1.2.a : Coefficient de rétrodiffusion BCS en fonction de l'énergie des positrons dans Al, Cu et Au. Les courbes en continue (présent travail)

La figure 5.1.2.a montre nos résultats de BCS^+ dans la gamme des moyennes énergies jusqu'à 50 keV. Contrairement aux électrons à basse énergie, on remarque que BCS^+ augmente quand le nombre Z augmente. C'est une des plus importantes différences entre le comportement des électrons et des positrons dans les solides.

Sur la même figure, on compare nos résultats avec les valeurs expérimentales [38]. En général, l'accord est acceptable sauf pour le cas de Cu dans les basses énergies.

L'étude et l'utilisation des positrons concernent surtout les basses énergies. Le positron est utilisé comme sonde dans la physique des surfaces et interface [39] ou le coefficient de rétrodiffusion BCS^+ joue un rôle important. Par conséquent son calcul est très utile dans ce rang d'énergie. Notre calcul est présenté ci-dessous.

Sur le tableau 1, on reporte nos résultats (théorique) du BCS^+ dans le gamme des basses énergies 1 keV – 10 keV pour les éléments (Al, Cu, Ag et Au). On compare nos résultats avec l'expérience [38], la théorie [40, 42] et la simulation Monte Carlo [37, 41].

E (keV)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Z										
13 Theo	0.0771	0.0940	0.103	0.109	0.113	0.116	0.118	0.120	0.121	0.122
Theo[40]	0.0864	0.0987	0.104	0.107	0.111	0.113	0.116	0.118	0.120	0.123
Exp [38]	0.069	-	0.086	-	0.112	-	0.122	-	-	0.123
MC [37]	0.109	-	0.115	-	0.126	-	0.125	-	-	0.128
MC [41]	0.0954	0.978	0.0981	0.960	0.0989	0.0992	0.100	0.104	0.105	0.109
29 Theo	0.083	0.119	0.142	0.158	0.169	0.177	0.185	0.191	0.196	0.201
Theo[40]	0.117	0.146	0.163	0.175	0.185	0.193	0.200	0.205	0.210	0.215
Exp [38]	0.135	-	0.177	-	0.205	-	0.226	-	-	0.229
MC [37]	0.156	-	0.194	-	0.205	-	0.231	-	-	0.235
MC [41]	0.148	0.169	0.178	0.188	0.194	0.199	0.208	0.210	0.214	0.218
47 Theo	0.101	0.136	0.160	0.179	0.195	0.209	0.220	0.229	0.237	0.244
Theo[40]	0.109	0.146	0.173	0.194	0.212	0.228	0.242	0.254	0.266	0.277
Exp [38]	0.106	-	0.168	-	0.227	-	0.243	-	-	0.277
MC [37]	0.126	-	0.182	-	0.216	-	0.236	-	-	0.245
MC [41]	0.131	0.154	0.177	0.198	0.215	0.230	0.241	0.255	0.264	0.278
79 Theo	0.093	0.133	0.165	0.191	0.212	0.230	0.244	0.256	0.267	0.277
Theo[40]	0.112	0.153	0.182	0.205	0.223	0.239	0.252	0.264	0.275	0.285
Exp [38]	0.123	-	0.186	-	0.232	-	0.273	-	-	0.294
MC [37]	0.168	-	0.242	-	0.290	-	0.316	-	-	0.340
MC [41]	0.128	0.161	0.189	0.207	0.226	0.240	0.251	0.263	0.273	0.276

Tableau 1. Coefficient de rétrodiffusion des positrons dans le rang $E = 1\text{keV} - 10\text{keV}$
 Dans Al, Cu, Ag et Au. Comparaison avec l'expérience et la simulation.

Les résultats théoriques [40, 42] utilisent le même model mais les approches quantiques utilisées pour le calcul du rang des particules chargées et le LPMT sont différentes. En fait, le LPMT est calculé dans la méthode des ondes partielles à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger non relativiste. Le potentiel central est calculé dans l'approximation de la densité du spin locale (LSDA) [42]. Le rang est calculé à partir des fonctions pertes d'énergies du modèle d'Ashley [42]. Les résultats de la simulation MC [37] sont basés sur les sections efficaces élastiques non relativistes pour les collisions élastiques et la perte d'énergie est calculée dans l'approximation de la perte d'énergie continue (CSDA) utilisant les fonctions d'Ashley. Le calcul de la simulation MC [41] utilise le même model pour les collisions élastiques [37] mais les collisions inélastiques sont décrites par le model diélectrique de Penn. La comparaison permet de conclure qu'on

général le calcul théorique est plus proche de l'expérience que la simulation MC. Concernant l'inclusion de l'effet relativiste dans le calcul du LPMT on ne peut conclure. S'ajoute le fait que les deux résultats théoriques utilisent des rangs R calculés dans des modèles différents.

V.2 Coefficient de rétrodiffusion pour l'incidence oblique

La figure.5.2.1 et figure.5.2.2, montrent la dépendance de BCS^- et BCS^+ avec l'angle d'incidence θ_0 ($0^\circ \leq \theta_0 \leq 80^\circ$) dans Al, Ag, Cu et Au dans le rang d'énergie 1keV-10keV. Le but de ce calcul est de montrer l'effet des modèles de calcul du LPMT et du rang R sur notre modèle du calcul de BCS^- et BCS^+ (voir aussi tableau 2).

On a remarqué que pour tous les éléments, BCS^- et BCS^+ ont le même comportement quand l'angle d'incidence varie comme θ_0 ($0^\circ \leq \theta_0 \leq 80^\circ$). Les variations de BCS^- et BCS^+ sont très sensibles quand au choix de l'angle d'incidence pour le faisceau incident d'électrons ou de positrons.

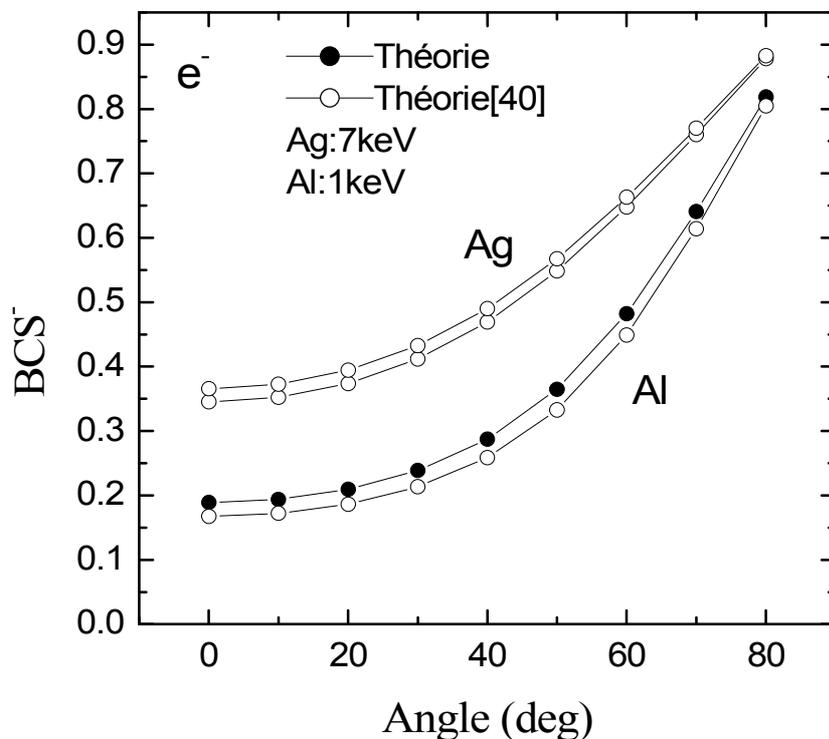


Figure 5.2.1 : BCS^- en fonction de θ_0 (deg) pour différente énergie dans Al et Ag.

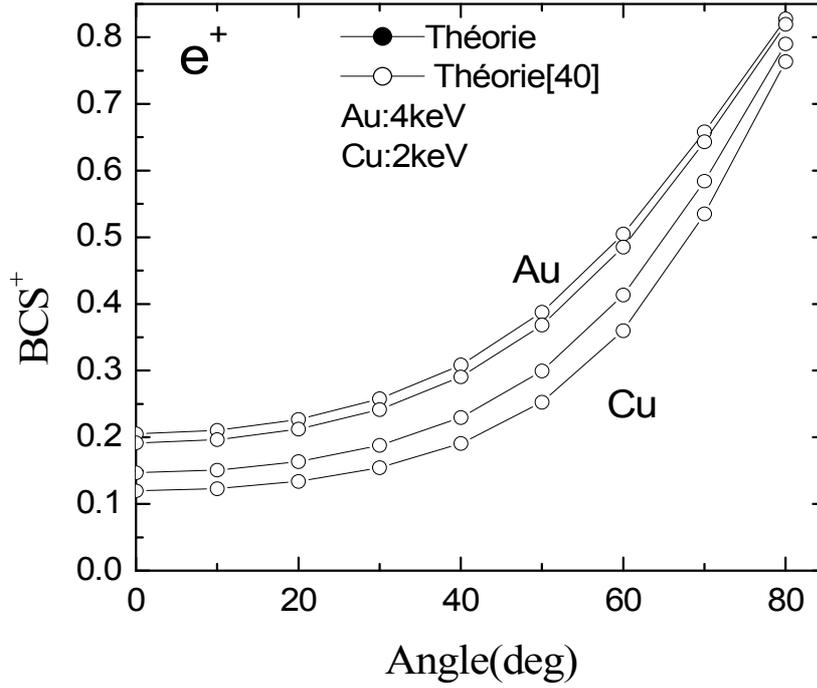


Figure 5.2.2 : BCS^+ en fonction de θ_0 (deg) pour différent énergie dans Cu et Au.

Afin de montrer l'accord de nos résultats avec l'expérimental, sur le tableau 2 on compare la variation du BCS^+ des positrons de 5 keV sur des cibles d'or et d'aluminium. On a aussi reporté les résultats théorique [40] et de la simulation calculés dans [37] et reportés dans [38].

θ (deg)	0	1	10	20	30	40	50	55	60	65	70	80
Al 5keV												
Théo	0.113	0.116	0.127	0.147	0.181	0.242	-	0.347	-	0.522	0.756	
Theo[40]	0.111	0.114	0.124	0.143	0.177	0.237	0.281	0.341	0.419	0.517	0.754	
Exp [38]	0.112	0.113	0.110	0.116	0.141	0.166	-	0.240	-	-	-	
MC [38]	0.126	0.134	0.143	0.167	0.203	0.254	-	0.334	-	0.443	0.568	
Au 5keV												
Théo	0.212	0.218	0.235	0.266	0.318	0.398	-	0.514	-	0.665	0.830	
Theo [40]	0.223	0.230	0.246	0.278	0.331	0.412	0.465	0.528	0.599	0.676	0.836	
Exp [38]	0.232	0.256	0.247	0.256	0.326	0.426	0.468	-	0.553	-	-	
MC [38]	0.290	0.295	0.301	0.336	0.369	0.422	-	0.478	-	0.552	0.673	

Tableau 2. Coefficient de rétrodiffusion des positrons pour $E = 5$ keV en fonction de θ_0 ($0^\circ \leq \theta_0 \leq 80^\circ$) dans Al et Au. Comparaison avec l'expérience et la simulation

Conclusion

Le présent travail traite le problème du calcul de la fraction réfléchie (backscattering coefficient) BCS de faisceaux de particules chargées d'énergie incidente de quelques centaines de eV jusqu'à des centaines de MeV entrant en interaction avec des cibles solides de nombre atomique Z variant entre $Z=1-80$.

Principalement, comme déjà introduit, la motivation de ce sujet de recherche repose sur le fait que le calcul théorique est exact et le coût du temps du calcul est presque négligeable par rapport au calcul statistique.

Le problème du calcul de BCS a été traité d'une manière théorique décrite par l'équation de transport dont la résolution a été approximée en utilisant la méthode des polynômes de Legendre pour aboutir aux équations de diffusions. Ensuite par l'introduction de la théorie d'âge de Fermi pour calculer le courant de diffusion. Pour les hautes énergies, nous avons vu que le modèle à une collision est considéré comme le modèle complémentaire de la théorie du calcul du courant de rétrodiffusion BCS par l'équation de transport.

Rappelons que le modèle théorique du calcul du BCS n'existe que pour des cibles considérées semi infinies. Comme solution approchée, on a présenté un modèle théorique de résolution du problème du calcul du coefficient de rétrodiffusion BCS pour des cibles finies. Nous avons vu que notre modèle coïncide parfaitement avec le modèle semi infini de Vicanek quand on tend la dimension de la cible finie à celle de dimension infinie. Cependant, le modèle doit être testé en détail en future et des programmes de Monte Carlo adéquats doivent être montés pour faire des comparaisons.

Dans la deuxième partie du travail a été traité le calcul direct du BCS. Nous avons étudié et montré la dépendance de BCS en fonction de la charge des particules, de l'énergie du faisceau incident, de la nature de la cible (numéro atomique Z dans la cible) et de l'angle d'incidence. On a aussi montré que la validité du calcul du BCS dépend de la validité d'une part, des fonctions pertes d'énergies utilisées pour le calcul du rang, de l'autre des sections efficaces élastiques utilisées pour le calcul du libre parcours moyen de transport. Notons de même, que leur effet a été clairement montré en comparons nos résultats théoriquement avec différents modèles de calcul du rang et du libre parcours de transport. Les modèles qu'on a utilisés, à

savoir le traitement quantique relativiste pour le calcul des sections efficaces des collisions élastique et les fonctions perte d'énergie, ont l'avantage d'être valide dans une large gamme d'énergie tout en conservant le bon accord avec l'expérience. La comparaison avec les résultats Monte Carlo a été importante pour différencier entre le calcul théorique et statistique. En fait, on a vu que le calcul statistique de Monte Carlo est très affecté par le choix des modèles utilisés.

Notre comparaison avec l'expérience était en général satisfaisante. On a vu que la comparaison concerne les basses, moyennes et hautes énergies utilisant des résultats expérimentaux de différentes sources. Notre calcul théorique est plus proche de l'expérience que du calcul Monte Carlo pour les deux cas de figures, incidence normale et oblique.

Il est aussi important de noter que dans la littérature, ce modèle n'a pas encore été montré valide pour toutes les gammes d'énergies. Donc d'après nos comparaisons, on pense qu'il est possible d'inclure notre modèle comme outil de calcul du BCS pour une large gamme d'énergie des particules chargées en incidence normale ou oblique sur n'importe quelle cible (semi infinie) du tableau périodique. Que deuxièmement, l'idée de calculer BCS par la méthode Monte Carlo peut être abandonné.

Comme suggestion, on pense utile de continuer l'étude du modèle pour des cibles finies qu'on a élaboré vu qu'une théorie correspondante n'existe pas.

Annexe A : Calcul du courant de la diffusion $j(t)$

Pour trouver le courant de diffusion on utilise l'inverse de la transformation de Laplace qui s'effectue par le moyen d'une intégrale dans le plan complexe [43]

$$j(t) = L^{-1} \{ \tilde{j}(p) \} = \frac{1}{2i\pi} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} \tilde{j}(p) e^{pt} dp \quad ; \quad \alpha > 0$$

Déterminons l'inverse de la fonction $\tilde{j}(p) = -\frac{\mu_0^{-1}}{(\sqrt{p} + \mu_0^{-1})}$, i.e. Calculons l'intégrale

$$\Leftrightarrow j(t) = -\frac{1}{2i\pi} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} \frac{\mu_0^{-1}}{(\sqrt{p} + \mu_0^{-1})} e^{pt} dp \quad (\text{A.1})$$

Pour calculer cette intégrale on utilise le théorème des résidus, nous considérons maintenant le contour Γ formé du cercle de rayon R , des deux bords de la coupure joignant le point $(0,0)$ au point G et cercle c_ε du petit rayon $\varepsilon > 0$.

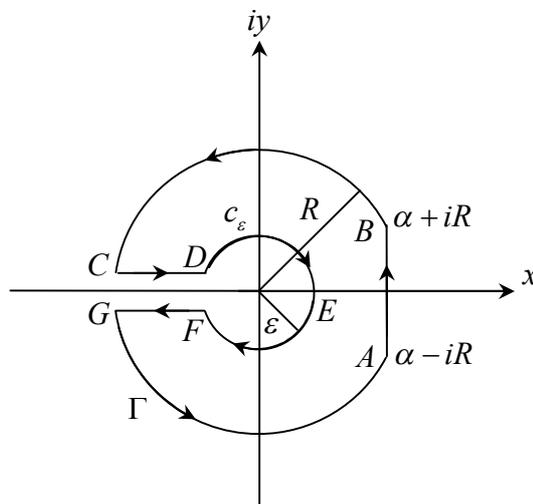


Figure.8

La fonction à intégrer possède un pôle simple : $\sqrt{p} = i^2 \mu_0^{-1}$ intérieur à Γ , et $\sqrt{p} = 0$

$\Leftrightarrow p = 0$; est un point de branchement Figure .8.

Les résidus en $z=\mu_0^{-2}$ sont : $\lim_{z \rightarrow \mu_0^{-2}} (z - \mu_0^{-2}) \frac{e^{zt}}{\sqrt{z} + \mu_0^{-1}} = 0$ d'où

$$I = \oint_{\Gamma} \frac{e^{zt}}{(\sqrt{z} + \mu_0^{-1})} dz = 2\pi i \operatorname{Res} \sum (f, \mu_0^{-2}) = 0$$

L'intégration sur le contour de la figure .8 ce qui donne,

$$\oint_{\Gamma} \frac{e^{zt}}{(\sqrt{z} + \mu_0^{-1})} dz = \int_{AB} + \int_{BC} + \int_{CD} + \int_{DEF} + \int_{FG} + \int_{GA} = 0 \quad (\text{A.2})$$

Les intégrales \int_{BC} , \int_{DEF} et \int_{GA} tendent vers zéro lorsque $R \rightarrow +\infty$ et $\varepsilon \rightarrow 0$

Donc l'équation (A.2) devient :

$$\Leftrightarrow \lim_{\substack{R \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \left\{ \int_{\alpha-iR}^{\alpha+iR} \frac{e^{zt}}{\sqrt{z} + \mu_0^{-1}} dz + \int_R^{\varepsilon} \frac{e^{zt}}{\sqrt{z} + \mu_0^{-1}} dz + \int_{\varepsilon}^R \frac{e^{zt}}{\sqrt{z} + \mu_0^{-1}} dz \right\} = 0 \quad (\text{A.3})$$

suivant \overline{CD} on a $z = ue^{i\pi} = -u \rightarrow \sqrt{z} = i\sqrt{u} \Leftrightarrow dz = -du$

et sur \overline{FG} $z = ue^{-i\pi} = -u \rightarrow \sqrt{z} = -i\sqrt{u} \Leftrightarrow dz = -du$

$$\Leftrightarrow \int_{\alpha-iR}^{\alpha+iR} \frac{e^{zt}}{\sqrt{z} + \mu_0^{-1}} dz - \int_{+\infty}^0 \frac{e^{-ut}}{i\sqrt{u} + \mu_0^{-1}} du - \int_0^{+\infty} \frac{e^{-ut}}{-i\sqrt{u} + \mu_0^{-1}} du = 0$$

$$\Leftrightarrow \int_{c-iR}^{c+iR} \frac{e^{zt}}{\sqrt{z} + \mu_0^{-1}} dz = 2i \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{u}}{u + \mu_0^{-2}} e^{-ut} du \quad (\text{A.4})$$

en substituant l'équation (A.4) dans Eq (A.1) on obtient :

$$j(t) = -\frac{\mu_0^{-1}}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{u}}{u + \mu_0^{-2}} e^{-ut} du \quad (\text{A.5})$$

En faisant le changement de variable :

$$x = \sqrt{u} \quad \Leftrightarrow \quad dx = \frac{du}{2\sqrt{u}}$$

$$\Leftrightarrow \quad j(t) = -\frac{2\mu_0^{-1}}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{x^2}{x^2 + \mu_0^{-2}} e^{-x^2 t} dx \quad (\text{A.6})$$

On ajoute $+\mu_0^{-2}$ et $-\mu_0^{-2}$ au numérateur de l'équation (A.6) on obtient :

$$j(t) = -\frac{2\mu_0^{-1}}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{x^2 + \mu_0^{-2} - \mu_0^{-2}}{x^2 + \mu_0^{-2}} e^{-x^2 t} dx$$

$$\Leftrightarrow \quad j(t) = -\frac{2\mu_0^{-1}}{\pi} \left\{ \int_0^{+\infty} e^{-x^2 t} dx - \mu_0^{-2} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-x^2 t}}{x^2 + \mu_0^{-2}} dx \right\}$$

Avec
$$\int_0^{+\infty} e^{-x^2 t} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{t}}$$

et
$$\int_0^{+\infty} \frac{e^{-x^2 t}}{x^2 + \mu_0^{-2}} dx = \frac{\pi}{2\mu_0^{-1}} e^{\frac{t}{\mu_0^2}} \operatorname{erfc} \frac{\sqrt{t}}{\mu_0}$$

$$\Leftrightarrow \quad j(t) = -\mu_0^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi t}} - \mu_0^{-1} e^{\frac{t}{\mu_0^2}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{t}}{\mu_0} \right) \right] \quad (\text{A.7})$$

Où
$$\operatorname{erfc} z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{+\infty} e^{-x^2} dx \quad (\text{A.8})$$

$\operatorname{erfc} z$: Fonction erreur complémentaire [44]

avec
$$z = \frac{\sqrt{t}}{\mu_0}$$

Annexe B : Age de Fermi pour le calcul de BCS pour des cibles semi infinies

C'est le symbole du temps la limite supérieure de t et t_0 d'après (II-2.22) on a:

$$t_0 = \frac{1}{3} \sigma_{tr}(E_0)^2 \int_0^{E_0} \frac{dE}{S(E) \sigma_{tr}(E)} \quad (\text{B.1})$$

Prenant compte de Eq (I.2.3) et Eq (II.2.20) dans Eq (B.1) on intègre sur les bornes de intégration on obtient :

$$t_0 = \frac{\sigma_{tr}(E_0) E_0}{6S(E_0)(m_1 + m)} \quad (\text{B.2})$$

en utilisant les équations (I.2.7) ; (I.5.7) dans Eq (B.2) on obtient :

$$t_0 = \frac{\nu}{3 \left(1 + \frac{m}{m_1} \right)} \quad (\text{B.3})$$

Avec :

$$\nu = N \sigma_{tr}(E_0) R = \frac{R}{\lambda_{tr}(E_0)} \quad (\text{B.4})$$

Avec $m \approx \frac{1}{2}$ $m_1 \approx \frac{1}{4}$, donc (B.4) l'équation devient :

$$t_0 = \frac{\nu}{9} \quad (\text{B.5})$$

Annexe C : l'énergie du projectile à l'intérieur de la cible semi infinie

L'énergie du projectile E à l'intérieur de la cible est plus petite que l'énergie de bombardement E_0

On remplace Eq (I.2.3) dans Eq (I.1.1) on obtient :

$$dE = -N \left(\frac{E}{E_0} \right)^{1-2m_1} S(E_0) dz$$

$$\Leftrightarrow E^{2m_1-1} dE = -NE_0^{2m_1-1} S(E_0) dz \quad (C.1)$$

On intègre on obtient :

$$\int_0^E E^{2m_1-1} dE = \int_0^z NE_0^{2m_1-1} S(E_0) dz \quad (C.2)$$

$$E = E_0 \left[1 - \frac{2m_1 NS(E_0)}{E_0} z \right]^{\frac{1}{2m_1}} \quad (C.3)$$

En substituant équation (I.2.7) dans Eq (C.3) on obtient :

$$E = \left(1 - \frac{z}{R} \right)^{\frac{1}{2m_1}} E_0 \quad (C.4)$$

Annexe D : Coefficient de rétrodiffusion à basse énergie pour des cibles semi infinies

On considère un courant de particule chargée $j(t)$ en collision avec une cible semi infinie. Le coefficient de rétrodiffusion est donné par :

$$BCS(E_0, \mu_0) = -\int_0^{t_0} j(t) dt \quad (D.1)$$

En utilisant l'équation (A.8) dans Eq (D.1) on obtient :

$$BCS(E_0, \mu_0) = \int_0^{t_0} \mu_0^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi t}} - \mu_0^{-1} e^{\frac{t}{\mu_0^2}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{t}}{\mu_0} \right) \right] dt \quad (D.2)$$

$$\Leftrightarrow BCS(E_0, \mu_0) = \mu_0^{-1} \frac{2\sqrt{t_0}}{\sqrt{\pi}} - \mu_0^{-2} \int_0^{t_0} e^{\frac{t}{\mu_0^2}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{t}}{\mu_0} \right) dt \quad (D.3)$$

On a donc l'intégrale de la fonction erreur :

$$\int_0^{t_0} e^{\frac{t}{\mu_0^2}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{t}}{\mu_0} \right) dt = -\mu_0^2 + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \mu_0 \sqrt{t_0} + \mu_0^2 e^{\frac{t_0}{\mu_0^2}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{t_0}}{\mu_0} \right) \quad (D.4)$$

On substituant Eq (D.4) dans Eq (D.3) on obtient :

$$\Leftrightarrow BCS(E_0, \mu_0) = 1 - \mu_0^2 e^{\frac{t_0}{\mu_0^2}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{t_0}}{\mu_0} \right)$$

On pose $z = \frac{\sqrt{t_0}}{\mu_0} \Rightarrow z = \frac{\sqrt{v}}{3\mu_0}$ avec $t_0 = \frac{v}{9}$

$$\Leftrightarrow BCS(E_0, \mu_0) = 1 - e^{z^2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{+\infty} e^{-x^2} dx \quad (D.5)$$

Avec $\operatorname{erfc} z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{+\infty} e^{-x^2} dx$

Où $erfcz$: Fonction erreur complémentaire

Pour calculer l'équation (D.5) posons $y = x - z$ alors $x = z + y$, $y = 0$

et quand $x \rightarrow +\infty$ alors $y \rightarrow +\infty$

Donc l'intégrale dans l'équation (D.5) devient :

$$BCS(E_0, \mu_0) = 1 - \frac{2e^{z^2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} e^{-(y+z)^2} dy \quad (D.6)$$

On développe l'exposant de l'exponentiel on obtient :

$$BCS(E_0, \mu_0) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} e^{-y^2 - 2yz} dy \quad (D.7)$$

Pour évaluer l'équation (D.7), on utilise une succession d'intégration par partie, et on considère z comme paramètre, pour la première intégration par partie on prend :

$$U = e^{-y^2} \text{ et } dV = e^{-2yz} dy \text{ ainsi } dU = -2ye^{-y^2} dy ; V = -\frac{e^{-2yz}}{2z} \text{ et } dV = \frac{d}{dz} \left[-\frac{e^{-2yz}}{2} \right] dy$$

On trouve :

$$BCS(E_0, \mu_0) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left\{ \frac{1}{2z} - \frac{1}{z} \int_0^{+\infty} ye^{-y^2} e^{-2yz} dy \right\} \quad (D.8)$$

et on fait de même pour les autres intégrations par parties on trouve ;

$$BCS(E_0, \mu_0) \approx 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left\{ \frac{1}{2z} - \frac{1}{4z^3} + \frac{1}{8z^5} - \dots \right\} \quad (D.9)$$

$$\Leftrightarrow BCS(E_0, \mu_0) \approx 1 - \frac{3\mu_0}{\sqrt{\pi v}} + \frac{3^3 \mu_0^3}{2\sqrt{\pi v}^{3/2}} - \frac{3^5 \mu_0^5}{4\sqrt{\pi v}^{3/2}} + \dots \quad (D.10)$$

$$v \gg 1$$

Avec
$$z = \frac{\sqrt{v}}{3\mu_0}$$

Annexe E : Coefficient de rétrodiffusion à haute énergie (une collision) pour des cibles semi infinies

On laisse une particule chargée collisionner la surface d'un matériau semi infini avec une énergie incidente E_0 , la pénétration est suivant z qui est normale à la surface de la cible figure .8.

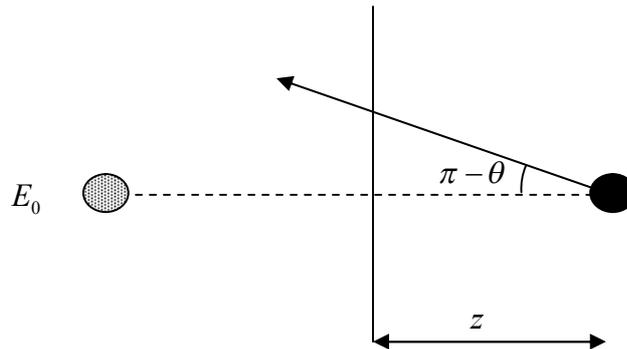


Figure 8: Géométrie du modèle à une seule collision

Alors la probabilité pour que la particule quitte le trajet est obtenue par l'intégration sur tout l'évènement possible.

$$BCS(E_0, \mu_0 = 1) = N \int_0^{+\infty} dz \int_{-1}^0 \sigma(E, \hat{\mu}) d\hat{\mu} \Theta\left(R - z - \frac{z}{|\hat{\mu}|}\right) \quad (\text{E.1})$$

$\Theta(x)$: Fonction de Heaviside

$$\Theta\left(R - z - \frac{z}{|\hat{\mu}|}\right) = \begin{cases} 0 & \text{si } R - z - \frac{z}{|\hat{\mu}|} < 0 \\ 1 & \text{si } R - z - \frac{z}{|\hat{\mu}|} \geq 0 \end{cases} \quad (\text{E.2})$$

$\sigma(E, \hat{\mu}) d\hat{\mu}$: Section efficace pour projectile à l'énergie E est définie par:

$$\sigma(E, \hat{\mu}) d\hat{\mu} = \frac{1-m}{2^{1-m}} \sigma_{tr}(E_0) \left[\frac{E}{E_0}\right]^{-2m} \frac{d\hat{\mu}}{(1-\hat{\mu})^{1+m}} d\hat{\mu} \quad (\text{E.3})$$

D'après figure .8 la particule quitte le solide avec un parcours total inférieur à R

$$z + \frac{z}{|\hat{\mu}|} \leq R \quad \Leftrightarrow \quad \frac{z}{R} \leq \frac{|\hat{\mu}|}{|\hat{\mu}| + 1} \quad (\text{E.4})$$

$$\text{On pose :} \quad \zeta = \frac{z}{R} \quad \Leftrightarrow \quad \zeta \leq \frac{|\hat{\mu}|}{1 + |\hat{\mu}|} \quad (\text{E.5})$$

$$\text{Si } z = 0 \text{ donc } \zeta = 0 \text{ et si } z \rightarrow +\infty \text{ donc } \zeta \rightarrow \frac{|\hat{\mu}|}{1 + |\hat{\mu}|} \quad (\text{E.6})$$

On utilise les équations (E.2), (E.3), (E.6) et (C.4) dans l'équation (E.1) on obtient :

$$BCS(E_0, \mu_0 = 1) = N \frac{1-m}{2^{1-m}} \sigma_{tr}(E_0) \int_{-1}^0 \frac{d\hat{\mu}}{(1-\hat{\mu})^{1+m}} \int_0^{\frac{|\hat{\mu}|}{1+|\hat{\mu}|}} R d\zeta (1-\zeta)^{\frac{m}{m_1}} \quad (\text{E.7})$$

Avec $m \approx \frac{1}{2}$, $m_1 \approx \frac{1}{4}$ on obtient donc :

$$\Leftrightarrow \quad BCS(E_0, \mu_0 = 1) = \frac{\nu}{2\sqrt{2}} \int_{-1}^0 \frac{d\hat{\mu}}{(1-\hat{\mu})^{\frac{3}{2}}} \int_0^{\frac{|\hat{\mu}|}{1+|\hat{\mu}|}} \frac{1}{(1-\zeta)^2} d\zeta \quad (\text{E.8})$$

$$\text{Avec} \quad \nu = N\sigma_{tr}R$$

On met l'équation (E.8) sous la forme :

$$BCS(E_0, \mu_0 = 1) = \frac{\nu}{2\sqrt{2}} b \quad (\text{E.9})$$

$$\text{Avec} \quad b = \int_{-1}^0 \frac{d\hat{\mu}}{(1-\hat{\mu})^{\frac{3}{2}}} \int_0^{\frac{|\hat{\mu}|}{1+|\hat{\mu}|}} \frac{1}{(1-\zeta)^2} d\zeta \quad (\text{E.10})$$

On calcule l'intégrale suivant ζ de l'équation (E.10) on obtient :

$$b = \int_{-1}^0 \frac{|\hat{\mu}|}{(1-\hat{\mu})^{3/2}} d\hat{\mu} \quad (\text{E.11})$$

Dans l'équation (E.11) $\hat{\mu}$ est le cosinus d'angle de la particule de réflexion

$$\cos(\pi - \theta) = -\cos\theta \quad \Leftrightarrow \quad |\hat{\mu}| = -\hat{\mu}$$

$$\Leftrightarrow \quad b = - \int_{-1}^0 \frac{\hat{\mu} d\hat{\mu}}{(1-\hat{\mu})^{3/2}}$$

$$\Leftrightarrow b = 3\sqrt{2} - 4 \quad (\text{E.12})$$

En substituant l'équation (E.12) dans Eq (E.9) on obtient :

$$BCS(E_0, \mu_0 = 1) = v \left(\frac{3}{2} - \sqrt{2} \right) \quad (\text{E.13})$$

Pour une incidence oblique, le coefficient de rétrodiffusion peut être exprimée par :

$$BCS(E_0, \mu_0) = \frac{BCS(E_0, \mu_0 = 1)}{\mu_0^2}$$

$BCS(E_0, \mu_0 = 1)$ est le coefficient de rétrodiffusion pour une incidence normale à la surface.

$\mu_0 = \cos \theta_0$, θ_0 est l'angle d'incidence

Donc l'équation (E.13) devient :

$$BCS(E_0, \mu_0) = \frac{v}{\mu_0^2} \left(\frac{3}{2} - \sqrt{2} \right) \quad (\text{E.14})$$

Références

- [1] W. S. M. Werner, Surf. Interf. Anal. 31(2001) 141-176
- [2] G. Gergely, Prog. Surf. Science. 71 (2002) 31
- [3] R. Böngeler, U. Golla, M. Kässens, L. Reimer, B. Schindler, R. Senkel and M. Spranck, Scanning 15 (1993) 1-18
- [4] D. C. Joy, J. Microsc. 14 (1985) 283
- [5] A. P. Mills, Jr. Science 218 (1982) 335
- [6] S. Valkealahti, R. M. Nieminen, Appl. Phys. A 32 (1983) 95
- [7] X. Chu, W. Mayer, M. A. Nicolet, Backscattering Spectrometry, Academic Press (1978)
- [8] D. D. Perovic, M. R. Castell, A. Houvie, C. Lavoie, T. Tiedje and J. S. W. Cole, Ultramicroscopy 58 (1995) 104
- [9] D. Venables and D. M. Maher, J. Vac. Science. Technol. B14 (1996) 421
- [10] P. G. Coleman, Appl. Surf. Science 194 (2002) 264
- [11] A. Zecca, Appl. Surf. Science 194 (2002) 4
- [12] F. Salvat, J. M. Fernandez-Varea, E. Acosta and J. Simpau, PENELOPE- A Code system for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, Nuclear Energy Agency OECD/NEA, Issy-les-Moulineaux, France, (2003). <http://www.nea.fr>
- [13] A. Jablonski, A. Dubus and S. Tougaard, Prog. Surf. Science. 63 (2000) 135-175
- [14] R. Oswald, E. Kasper and K. H. Gaukler, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 61 (1993) 251
- [15] V. M. Dwyer, Surf. Interf. Anal. 20 (1993) 513
- [16] W. S. M. Werner, I. S. Tilinin, Appl. Surf. Science 70/71 (2000) 2934
- [17] I. S. Tilinin, G. Betz, Nucl. Instr. and Meth. B115 (1996) 565-568
- [18] J. Lindhard, M. Scharaff, Phys. Rev. 124 (1961) 128
- [19] H. M. Urbassek and M. Vicanek, Phys. Rev. B 44 (1991) 14
- [20] B. M. Latta and P. J. Scanlon, Phys. Rev. A 12 (1975) 1
- [21] L. Valantin. Physique Subatomique Noyau et Particules, I. Approche Élémentaire. P165
- [22] E. Balanfaat et S. Bouffard, Physique du Dépôt D'énergie Aspect Fondamentaux. P2
- [23] G. Zeep, Mécanique Quantique Exercices Avec Solution, Deuxième Cycle Universitaire et Ecoles D'ingénieurs. P62
- [24] J. C. Ashley and R. H. Ritchie, Phys. Rev. A 33 (1986) 2

- [25] G. Zeep, Mécanique Quantique Exercices Avec Solution, Deuxième Cycle Universitaire et Ecoles D'ingénieurs. P67
- [26] J.Claud Nimal Génie Nucléaire B3076-1. Techniques d'ingénieurs
- [27] N. Piskonov, Calcul Différentiel et Intégrale. T2.11^e édition. P454
- [28] H. Niedrig and E. I. Rau, Nucl.Instr. and Meth. B142 (1998) 523
- [29] J. V. Vukanic, R. K. Janev and D. Heifetz, Nucl.Instr. and Meth. B18 (1987) 131
- [30] F. Salvat, A. Jablonski and C. J. Powell, Comput.Phys.Commun.165 (2005) 157
- [31] J. B. Furness and I. E. MacCarthy, Jr.Phys.B. At.Mol.Phys.6 (1973) 2280
- [32] K. L. Hunter, I. K. Snook and H. K. Wagenfeld, Phys.Rev.B 54(1996) 4507
- [33] H. Dcescher, L. Reimer, H. Seidel and Z. Angew, Phys. 29(1970) 331
- [34] G. Neubert, S. Rogashewski, Phys.stat.sol (a) 59(1980) 35.
- [35] J. Sempau, J. M. Fernandez- Verea, E. Costa and F. Salvat, Nucl.Instr.and Meth.B207 (2003) 107-123
- [36] Z. Chaoui, Appl. Surf. Science. 252 (2006) 3362–3367
- [37] K. O. Jensen, A. B. Walker, Surf.Science.292 (1993)83
- [38] P. G. Coleman, L. Albrecht, K. O. Jensen and A. B. Walker, Jr. Phys.; Condens .Matter 4 (1992) 10311
- [39] P. J. Shultz and K. G. Lynn, Rev.Mod.Phys.60 (1988) 701
- [40] Z. Chaoui, and N. Bouarissa, J.Phys. : Condens.Matter 16(2004) 799-808
- [41] Z. Chaoui, J.Phys. :Cond.Matter 18(2006) 10303
- [42] Z. Chaoui, These d'état Université de Sétif (2004)
- [43] Abramowitz and Stegun, Hand Book of Mathematical Functions Dover Publications, Inc, New York. P 297 (1970)
- [44] Abramowitz and Stegun, Hand Book of Mathematical Functions Dover Publications, Inc, New York.P1020 (1970)

ملخص

تهدف هذه الدراسة إلى حساب معاملات الإرتداد للإلكترونات و البوزيترونات والأيونات الخفيفة (أيون الهيدروجين وأيون الهيليوم). و لقد تم الإعتماد في ذلك على معادلة النقل لبولتزمان المطبقة على الأجسام الصلبة(المعادن) في مختلف مجالات الطاقة وضمن مجال زاو يتراوح بين 0° و 80° . لقد تم دراسة نموذج حساب معاملات الإرتداد بالنسبة للأجسام شبه المنتهية(Vicanek) حيث أن هذه المعاملات تتعلق بدالة ضياع الطاقة وبقطع الفعال المرن مما يمكننا على التوالي من حساب المدى ومسار الحر الوسطي للنقل.في دراستنا هذه قمنا بحساب معاملات الإرتداد بالنسبة للأجسام المنتهية.كنتيجة أولية وجدنا هذا النموذج مطابقا لنموذج حساب معاملات الإرتداد بالنسبة للأجسام شبه المنتهية وهذا عندما يزول البعد للأجسام المنتهية إلى البعد للأجسام شبه المنتهية, بينت النتائج المتحصل عليها أنها الأقرب إلى النتائج التجريبية مقارنة بنتائج محاكاة لمونتي كار لو.

Résumé

Le but de cette étude est de calculer le coefficient de rétrodiffusion BCS des électrons, des positrons et des ions légers (ion d'hydrogène et d'hélium) en utilisant l'équation de transport de Boltzmann pour une large gamme d'énergies avec une incidence variant entre 0° - 80° . La première partie du travail concerne l'élaboration d'un model de calcul de BCS pour des couches finies. Comme résultat, la limite de ce model tend vers le model semi infini connu de Vicanek. BCS dépend du rang des particules et du libre parcours moyen de transport. Leur validité a été montré en comparant nos résultats aux résultats expérimentaux et de la simulation de Monte Carlo. En général, un bon accord a été noté.

Cependant nos résultats sont plus proches de l'expérience que ceux de la simulation Monte Carlo.

Abstract

The aim of the subject is to use analytical calculations (transport equation) to calculate the backscattered fraction BCS of charged particles in a energy range of few tens eV to tens of MeV and with incidence angle between 0° and 80° . The calculations concern solid targets with $Z=1-80$. In the first part of the manuscript, it is shown a model for thin targets. As first results, our model coincides exactly with Vicanek model for semi infinite targets when we tend the thickness of the thin film to the semi infinite one. The second part concerns the calculations of BCS for semi infinite targets. The results depend strongly on accuracy of the range and the transport mean free path of the particle. Extensive comparison with experiment and Monte Carlo simulations has shown that it is possible to use the present model to calculate BCS for any material and for any energy. Thus, Monte Carlo calculations used as a tool for calculating BCS can be abandoned.