وزارة التعليم العـــــــــــــالي و البحث العلمـــــــــي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

جـــــــامعة فرحـــات عبـــــاس – سطيف –

Université Ferhat Abbas – Sétif –

Faculté des Sciences de l'Ingénieur

Département : Optique et Mécanique de Précision

THESE DE DOCTORAT

Présentée par :

ROUABAH Zahir

Thème

ETUDE THEORIQUE DES PROPRIETES DE TRANSPORT DES ELECTRONS ET POSITRONS DANS LES SOLIDES

Soutenue le :

Devant la commission d'examen :

B. MERZOUG	Prof.	Université de Annaba	Président
N. BOUAOUADJA	Prof.	Université de Sétif	Rapporteur
N. BOUARISSA	Prof.	KKU, Saudi Arabia	Co-rapporteur
A. BELGACEM BOUZIDA	Prof.	Université de Batna	Examinateur
K. LOUCIF	Prof.	Université de Sétif	Examinateur
A. MANSOURI	MC	Université de Sétif	Examinateur
C. CHAMPION	MC	Université de Metz	Invité

Session 2009

Dedecation

I dedicate this modest work to the children of Gaza under the inhuman embargo.

Remerciement

Je tiens à remercier le Pr. N. BOUARISSA pour avoir proposé et dirigé ce sujet. Je tiens à lui exprimer également ma profonde gratitude pour m'avoir fais profiter de son expérience et pour les idées et conseils toujours pertinents et fructueux qu'il m'a fait tout au long de ce travail.

Je remercie vivement, le Pr. N. BOUAOUDJA pour son suivi, ses orientations et ses remarques toujours pertinentes. Qu'il trouve ici ma profonde reconnaissance pour avoir accepté d'être rapporteur et ce malgré ses importantes charges de travail.

La majeure partie des travaux faisant l'objet de cette thèse a été effectuée, dans le cadre de la bourse BAF, au laboratoire de physique moléculaire et des collisions (LPMC), de l'université de Paul Verlaine à Metz. Je remercie vivement Mr C. CHAMPION, MC à l'université de Metz, de m'avoir accueilli au sein de son laboratoire, pour son suivi rigoureux de l'avancement de mes travaux de recherche, ses conseils, ses discussions et correction du manuscrit.

Je remercie ainsi tout le personnel de ce laboratoire notamment le directeur A. BERAR, le vice directeur B. JOLAKIAN, la secrétaire Mme R. PAPPOTO et le technicien P. SENOT pour leurs aides et disponibilité.

Mes remerciements vont à Mr B. MERZOUG, Professeur à l'université de Annaba, pour sa disponibilité, sa modestie et pour avoir accepté de présider le jury de ma soutenance. Qu'il trouve ici l'expression de ma profonde considération.

Ma gratitude va également à Mr A. BELGACEM BOUZIDA, professeur à l'Université de Batna et à Mr A. MANSOURI, MC à l'université de Sétif, pour l'intérêt qu'ils

ont accordé à ce travail en acceptant de l'examiner et pour m'avoir honoré de leur participation au Jury.

Je veux exprimer ma reconnaissance profonde à mon ami Mr A. BOUZID, MC au centre universitaire de Bordj Bou Arréridj, pour la lecture et la correction scrupuleuse du manuscrit, pour ses critiques et remarques pertinentes et pour sa disponibilité.

Je n'aurai guère oublié tous mes amis notamment A. MANAA, A. IRATNI, D. BAHRI et A. Chemami pour leur aide et encouragements. Une reconnaissance particulière doit être exprimée à Mr BELAGRAA pour son attention, aide, encouragements et sa gentillesse sans limites.

Je tiens à exprimer mes sincères remerciements à ma grande famille. Que mes parents, mes frères et sœurs, trouvent ici toutes les marques de mon amour, reconnaissance et respect, pour leurs affection, encouragement, aides et soutien. Une attention particulière va à ma mère qui m'a toujours entouré de son amour et incité à suivre le chemin de la science.

Cette thèse n'aurait pas pu se dérouler dans de bonnes conditions sans le soutien moral de ma femme et de mes enfants. Ils ont accepté mes absences répétées et subit mes humeurs qui versent des fois dans l'abus. Ce travail est autant le fruit de leurs efforts que des miens.

Z. Rouabah

Sommaire

Liste des tables ……..……..3
Liste des figures……..4

Introduction générale…….…5

Chapitre I : Etude de la diffusion des électrons dans la matière
I.1. Introduction ……..…….……..9
I.2. Les différents types de potentiels intervenant dans la diffusion de particule……...9
I.2.1. Le potentiel coulombien ……...10
I.2.2. Le potentiel de Yukawa ……....10
I.2.3. Potentiel de Wentzel (potentiel coulombien écranté)…….…11
I.2.4. Autres potentiels……..……...11
I.3.Diffusion élastique et diffusion inélastique……12
I.3.1. Définition de la section efficace ……... 14
I.3.2. Collision élastique ……....….16
I.3.2.1. Calcul classique de la section efficace élastique de Rutherford ……....16
I.3.2.2. Calcule de la section efficace élastique par la première approximation de Born…….. 17
I.3.2.3 Sections efficaces élastiques obtenue empiriquement ……..……20
A - La section efficace de Kanaya et Okayama ……..20
B - La section efficace de diffusion de Browning *et al*.……*20*
I.3.2.4 Section efficace obtenue par le méthode des ondes partielles……..….21
I.3.3. Section efficace inélastique de Gryzinski ……..22
I.4. Ralentissement des électrons et parcours électronique……..……..…25
I.5. Conclusion……29

Chapitre II : Simulation de transport par la méthode Monte Carlo
II.1. Introduction…….……30
II.2. Générateurs des nombres pseudo aléatoires……..…31
II.2.1. Distribution rectangulaires (distribution uniforme)……...…32
I.1.1.1 Méthode de congruence (Modulo Generator)……..…....32
II.2.2. Générateurs non uniformes…….……33
A - Générateur congruent inverse……...33
B - Les variables aléatoires de la distribution gaussienne……....34
C - Les variables aléatoires de distribution de Poisson……....35
II.3. Modélisation du transport des particules par la méthode Monte Carlo…….....35
II.3.1. Description de la méthode Monte Carlo pour le transport des particules……..…....36
II.3.2. Calcul des trajectoires de l'électron…….. 40
II.3.3. Précision de la méthode Monte Carlo……...41
II.3.4. Efficacité de la méthode Monte Carlo…….42
II. 4. Conclusion……..43

Chapitre III : Sections efficaces de transport d'électrons

III.1. Introduction ……44
III.2. Sections efficaces de transport……...45
III.3. Section efficace analytique dérivée par Jablonski…… ….……...48
III.4. Méthode de calcul et résultats…….……50
III.5. Conclusion……55

Chapitre IV : Etude de transport des électrons dans les solides

IV.1. Introduction ……..56
IV.2. Théorie de la retrodiffusion ……57
IV.2.1. L'approche d'Everhart ……..57
IV.2.2. L'approche d'Archard ……...57
IV.2.3. Le modèle de Kanaya et Okayama…….58
IV.2.4. Le modèle de Dapor …….58
IV.2.5. Le modèle de Tilinin…….59
IV.2.6. Théories de Vicanek et Urbassek……. 60
IV.3. Nouvelle amélioration de section efficace d transport dérivée par Jablonski ….....60
IV.3.1. Résultats et discussion…….... 61
VI.3.2. Libre parcours moyen de transport……66
VI.4. Etude des coefficients de retrodiffusion dans les métaux massifs……..…. 70
VI.4.1. Coefficients de retrodiffusion en fonction de l'énergie…….. 71
VI.4.1. Coefficients de retrodiffusion en fonction de l'angle d'incidence……72
IV.5. Etude des coefficients de retrodiffusion dans les métaux en couche mince …….76
VI.5.1. Méthode de calcul et résultats…….77
VI.5.2. Discussion des résultats……..80
IV.6. Conclusion……..82

Conclusion générale …… ……83

Bibliographies ……..…… ..86

Liste des tables

1.1 *Energies de liaisons et le nombre d'électron de cœur et de valence pour Al et Cu……..23*

3.1 *Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour Hydrogène (H) et l'Aluminium(Al)…….....51*

3.2 *Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour le Cuivre (Cu) et l'Argent (Ag)…….....51*

3.3 *Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour le Niobium (Nb) et l'Or (Au)……...52*

3.5 *Déviations relative* $D = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{C}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *et* $D' = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{B}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *en fonction de l'énergi……53*

3.6 *Déviations relative* $D = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{C}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *et* $D' = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{B}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *en fonction de l'énergie……...53*

3.7 *Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour l'aluminium (Al) et l'Or (Au)……...54*

4.1 *Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour Hydrogène (H) et l'Aluminium (Al)…….62*

4.2 *Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour le Cuivre (Cu) et l'Argent (Ag)……..62*

4.3 *Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour le Niobium (Nb) et l'Or (Au)……..63*

4.4 *Erreurs relatives* $D_p = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{C}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$, $D = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{R}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *et* $D' = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{B}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *en fonction de l'énergie…….64*

4.5 *Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour l'Aluminium (Al)…… 65*

4.6 *Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour l'Or (Au)…… .65*

4.7 *Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour le Silicone (Si) et le Germanium (Ge)…….. ……...66*

4.8 *Distances maximale des parcours de l'électron en fonction de l'énergie de l'électron……71*

4.9 *Nombre moyen de collision aux grands angles en fonction de l'énergie de l'électron……...71*

4.10 *Coefficient de retrodiffusion en fonction de l'énergie de l'électron…….72*

Liste des figures

1.1 Schéma d'illustration du potentiel coulombien et du potentiel de Yukawa……11
1.2 Différents phénomènes manifestant lors de l'interaction électron matières……13
1.3 Schéma illustrant les collisions élastiques et inélastiques d'un électron incident dans un matériau……....14
1.4 Illustration géométrique de mesure de la définition de la section efficace……14
1.5 Schéma illustratif du collision de deux particules……16
1.6 Sections efficaces différentielles pour différentes énergies: les SEDs obtenues par la méthode des ondes partielles et les SEDs de Rutherford écrantées……...22
1.7 Les deux fonctions d'excitation utilisées dans l'approche de Valkealahti et al……...24
1.8 Pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie de l'électron……..…26

2.1 Schéma illustratif des trajectoires aléatoires des électrons dans la matière de Fe, à 10 keV (à gauche) et 20 keV (à droite)…….....35
2.2 Schéma illustrant les différents paramètres aléatoires manifestants lors de la pénétration des électrons incidents dans la matière……...39

3.1 Libres parcours moyens élastique, inélastique et de transport ainsi que la distance maximal de parcours l'électron (Werner 2001)……..47
3.2 Section efficace de transport en fonction de l'énergie. (a) Hydrogène ;(b) Hélium ;(c)Aluminium ; (d) Cuivre ; (e) Argent ; (d) Or……..….49
3.3 Erreurs relative $D = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{C}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *en fonction de l'énergie pour Al (carrés plein) et Au (carrés ouvert)……54*

4.1 Paramètre de diffusion σ *de neuf éléments en fonction de l'énergie de l'électron……59*
4.2 Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [eV] pour le Al……...68
4.3 Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [eV] pour le Cu…….….68
4.4 Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [eV] pour l' Ag…….…..69
4.5 Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [eV] pour l' Au……..69
4.6 Coefficient de retrodiffusion (Bsc) en fonction de l'angle d'incidence pour le Al ……73
4.7 Coefficient de retrodiffusion (Bsc) en fonction de l'angle d'incidence pour le Cu……73
4.8 Distance maximale du parcours de l'électron [Å] en fonction de l'angle d'incidence pour le Al…....74
4.9 Distance maximale du parcours d'électron [Å] en fonction de l'angle d'incidence pour le Cu……..74
4.10 Profondeur de pénétration moyenne de l'électron [Å] en fonction de l'angle d'incidence pour l'Al….75
4.11 Profondeur de pénétration moyenne de l'électron [Å] en fonction de l'angle d'incidence pour le Cu....75
4.12 Coefficients de retodiffusion (Bsc) en fonction de l'épaisseur de la couche(Al)……78
4.13 Coefficients de retodiffusion (Bsc) en fonction de l'épaisseur de la couche(Cu)…… ...78
4.14 Profondeur de pénétration moyenne en fonction de l'épaisseur de la couche(Al)…… 79
4.15 Profondeur de pénétration moyenne en fonction de l'épaisseur de la couche(Cu)……..……...79

Introduction générale

L'étude de l'interaction d'un faisceau d'électrons avec la matière, débutée dès la première partie du siècle, joue un rôle fondamentale dans plusieurs domaines tels que : la science des surfaces et interfaces, physique de l'état solide et la microélectronique *(Dapor 2003 ; Rouabah[b] et al. 2009 ; Shimizu and Ze-Jun 1992 ; Werner 2001)*.

Depuis les années soixante à nos jours, l'interaction électron-matière a connu une évolution galopante en raison de son importance indispensable dans des multitudes de techniques et méthodes liées aux différentes gammes d'énergie : basses, moyennes et hautes *(Kanaya et al. 1972 ; Dapor 1992,1995,2003)*. Parmi les techniques d'analyse basées sur le transport des électrons à basse énergie – objet de notre thèse - on peut citer : La spectroscopie d'électron Auger *(**AES** : Auger Electron Spectroscopy)*, diffraction des électrons à base énergie *(**LEED** : Low energy electron diffraction) ;* la spectroscopie de photon-électron X *(**XPS** : x-ray Photon Electron Spectroscpy)*, lithographie par faisceau d'électrons *(**EBL** : Electron Beam Lithography)*, la microanalyse par sonde électronique *(**EPMA** : Electron Prob Microanalysis)* et courant induit par faisceau d'électrons *(**EBIC** : Electron Beam Indueced current) (Dapor 1995,2003 ; Adesida et al.1980 ; Gergely 2002 ; Jablonski 1998,2000, ; Llovet et al. 2003 ; Najar 1992 ; Rouabah[a] et al. 2009 ; Rouabah[b] et al. 2009 ; Tilke et al. 1999)*.

En effet, ces techniques avaient recours aux études théoriques et expérimentales du transport des électrons à basse énergie dans les solides pour analyse, validation et interprétation des résultats *(Jablonski 1998 ; Dubus 2000 ; Llovet et al. 2003)*. Les spectres des rayons X émis par des échantillons irradiés par des faisceaux d'électrons de l'ordre de *keV*, sont très intéressants pour la microanalyse par sonde électronique ***(EPMA)***, particulièrement pour la géométrie complexe comme les milieux poreux et les surfaces rugueuses *(Liovet et al. 2003)*. La technique (**EBIC)** a été largement utilisée pour déterminer les propriétés des semi-conducteurs cristallins ou pour analyser les caractéristiques des dispositifs *(Najar 1992)*.

L'effet de la retrodiffusion des électrons a un intérêt dans plusieurs techniques expérimentales comme la diffraction des électrons à basse énergie ***(LEED)*** *(Dubus 2000)*.

Il est aussi utilisé pour obtenir des images des électrons retrodiffusés dans la microscopie électronique, et pour détecter les marques d'enregistrement en lithographie du faisceau d'électrons ***(EBL)*** *(Yusuda et al. 1995 ; Messina et al. 1994 ; Tilk et al. 1999).*

L'étude de la section efficace de transport des électrons (SETE) dans les solides pour un intervalle d'énergie allant de 50 à 2000 *eV*, est d'un intérêt majeur dans plusieurs domaines. En effet, les méthodes de la spectroscopie d'électrons Auger ***(AES)*** et la spectroscopie de photoélectron *X* ***(XPS)***, nécessitent des expressions analytiques pour fournir les données de la section efficace de transport des électrons dans l'intervalle d'énergie cité ci-dessus *(Jablonski 1995, 1996,1998, 2007 ; Chaoui and Bouarissa 2004, Rouabah[a] et al. 2009, Rouabah[b] et al. 2009).*

L'étude théorique du transport est devisée en trois catégories. La première catégorie, dominée par deux principales approches, La première est proposé par Everhart, ou il a développé des formulations sur la théorie de retrodiffusion, en se basant sur le modèle d'une seule diffusion *(single scattering)* en supposant que le flux des particules retrodiffusées due principalement aux diffusions par des petit paramètres d'impact (c'est-à-dire aux larges angles de diffusion) *(Everhart 1960 ; Tilinin et al. 1996 ; Adesida et al. 1980).* La deuxième approche est celle d'archard, qui a supposé que la particule parcours un chemin droit en profondeur jusqu'à la première diffusion et puis un mouvement équiprobable dans toute les direction *(Archard 1961 ; Dapor[b] 1990 ; Tilinin et al. 1996).* Dans cette même catégorie, d'autre modèles et théories peuvent être citer : Modèle de *Kanaya et Okayama (1992)* et de *Dapor[b] 1972* se basant sur le modèle sphérique, et la théorie de *Vikanek et Urbassek (1991).*

La deuxième catégorie est la théorie de transport qui se base sur l'équation de Boltzmann. Plusieurs chercheurs ont entrepris cette étude en utilisant plusieurs approches et approximations analytiques, semi-analytiques et numériques pour la résolution de l'équation de Boltzmann et ce, afin d'étudier les différents paramètres de transport notamment les coefficients de la retrodiffusion et de la transmission pour des matériaux massifs ou en couches minces *(Dubus et al. 2000 ; Jablonski[b] 1995 ; Jaccoboni and Regiani 1983 ; Lanteri et al. 1979 ; Rostaing et al. 1977 ; Sjostrand 1995 ; Tilinin et al. 1996 ; Werner et al. 1994).* L'équation de Boltzmann décrivant le phénomène de transport, n'offre pas une solution analytique simple sauf pour peu de cas, qui généralement ne sont pas applicables pour des systèmes réels. Néanmoins, avec la grande puissance des moyens informatiques

de simulation, on peut avoir des solutions exactes de l'équation de Boltzmann pour des modèles physiques microscopiques complexes *(Jaccoboni and Reggiani 1983)*.

La troisième catégorie est la méthode de simulation de Monte Carlo (MC), utilisée dans le présent travail. Cette méthode est un outil stochastique qui consiste en des simulations expérimentales des problèmes mathématiques et physiques utilisant des nombres aléatoires pour trouver des estimations statistique par moyennage. Elle est considérée comme un outil très performant dans l'étude du transport des particules dans les solides (*Adesida et al. 1980 ; Aydin 2000 ; Dapor 1992,1994 ; Shimizu and Ichimura 1983 ; Shimizu et al. 1976)*. Une variété remarquable des codes de simulation basant sur la méthode de MC se trouve dans la littérature *(Hirayama et al 2005; Jamil et al. 2008 ; Kawrakow2003, 2006 ; Mangiarotti et al. 2008 ; Mazurier 1999 ; Salvat et al 2002 ; Zhenyu and Hankai 1988)*.

Dans le code MC utilisé dans le présent travail, la simulation des trajectoires des électrons dans les solides, est basée sur la section efficace élastique écrantée de Rutherford. Cette dernière est utilisée pour simuler les collisions élastiques, alors que la fonction d'excitation de Gryzinski est utilisée pour simuler les collisions inélastiques. Ce choix est justifié par le fait que, les processus se manifestant lors de la pénétration des électrons, d'énergie de l'ordre de *keV,* sont les collisions élastiques et les collisions inélastiques *(Jensen 1993, Sorbier 2001)*.

L'objet de ce travail est donc d'étudier le transport des électrons à basse énergie dans les solides. Cette étude consiste essentiellement d'une part, en l'amélioration d'une expression analytique de la section efficace de transport des électrons permettant d'obtenir des valeurs plus précises pour tous les éléments du tableau périodique. D'autre part, l'étude et le calcul du coefficient de retrodiffusion des électrons dans l'Aluminium et le Cuivre, ainsi que d'autres paramètres de transport en utilisant la méthode de Monte Carlo

Le présent manuscrit est consigné en quatre chapitres. Dans le premier, nous allons présenter brièvement les bases théoriques nécessaires à la compréhension des mécanismes d'interaction des particules chargées notamment les électrons avec la matière. Nous aborderons également les diverses méthodes et approches décrivant les collisions élastiques et inélastiques des électrons incidents avec les électrons et les noyaux de l'atome cible.

Le second chapitre sera consacré à la description générale des méthodes de simulation Monte Carlo. L'accent sera mis sur le code MC utilisé dans ce travail, basé sur la section efficace écrantée de Rutherford pour simuler les collisions élastiques et la fonction d'excitation de Gryzinski pour simuler les collisions inélastiques.

Le troisième chapitre sera consacré à la présentation des résultats concernant la section efficace de transport. Nous résumerons les théories proposées dans la littérature, avant de présenter notre première correction introduite sur la section efficace de transport dérivée par *Jablonski (1998)* permettant de fournir des valeurs plus précises.

Dans le quatrième chapitre, et après avoir donner un bref rappel bibliographique sur la retrodiffusion des électrons, nous allons présenter une deuxième correction portée sur la section efficace de transport dérivée par *Jablonski (1998)*. Nous effectuerons Le calcul du coefficient de retrodiffusion *(Bsc)* des électrons à basse énergie pour l'Al et le Cu, en utilisant la méthode de MC couplée à la théorie de *Vikanek et Urbassek (1991)*. Des discussions serons présenter, concernant la variation du Bsc en fonction de l'angle d'incidence des électrons, et en fonction de l'épaisseur de la couche mince dans l'échelle nanométrique et au delà de celle-ci.

Enfin, dans la conclusion en retrace les principaux résultats obtenus par rapport aux objectifs consignés à ce présent travail.

Chapitre I

Etude de la diffusion des électrons dans la matière

I.1. Introduction

La diffusion de particules dans un champ de forces est définie comme étant la déviation de ces particules par suite d'interactions (collisions) avec le centre diffuseur *(Valkealahti and Nieminen 1983)*.

Les électrons pénétrant dans un matériau subissent des interactions coulombiennes de nature aléatoire induisant non seulement une déviation angulaire mais aussi un transfert d'énergie cinétique. Ces interactions ont lieu avec le noyau de l'atome mais impliquent également les électrons du cœur (fortement liés) et les électrons de valence. Par conséquent, l'histoire des particules dans la matière revêt une nature statistique et un caractère stochastique, tous deux fonctions de la nature et de l'énergie des particules incidentes ainsi que des caractéristiques du matériau cible. Pour mesurer la dynamique de l'interaction entre une particule projectile avec une particule cible. On peut dire que les sections efficaces sont les grandeurs qui caractérisent les fréquences des différents types de collisions.

Nous allons étudier dans ce chapitre les collisions élastiques et inélastiques induites par des électrons dans un matériau.

I.2. Les différents types de potentiels intervenant dans la diffusion des particules

Plusieurs expressions de potentiels de diffusion ont été proposées pour étudier les collisions des particules avec la matière. Nous allons donner dans cette partie un aperçu de ces différents potentiels, dont certains sont très utilisés en physique atomique et moléculaire.

I.2.1. Le potentiel coulombien

Le potentiel d'interaction entre deux particules chargées de charges Z_1 et Z_2 donné par la formule

$$V(r) = Z_1 Z_2 .e^2 / r \,, \tag{I.1}$$

est dit potentiel coulombien. Il est attractif si les deux charges sont de signes opposés et répulsif si elles sont du même signe.

I.2.2. Le potentiel de Yukawa

Le potentiel proposé par Yukawa en 1939 s'écrit sous la forme

$$V(r) = V_0 .e^{-\alpha r} / r \,, \tag{I.2}$$

où V_0 est une « constante réelle de couplage », avec $\alpha > 0$. Ce potentiel est attractif ou répulsif suivant le signe de V_0 et est d'autant plus intense que V_0 est grand. D'autre part sa portée est caractérisée par la longueur $r_0 = 1/\alpha$, où r_0 est la portée d'une force exprimée par la longueur d'onde de Compton $\hbar / mc^2$ de la particule de masse m échangée *(Basdevant, 2002)*. On observe que $V(r)$ est pratiquement nul dès que r dépasse la valeur $\approx 2r_0$ *(cf Figure 1.1)*.

Potentiel coulombien et potentiel de Yukawa:

D'après la *Figure 1.1* qui représente les potentiels coulombien V_0 / r et de Yukawa $V_0 .e^{-\alpha r} / r$, la présence du terme exponentiel fait que le potentiel de Yukawa s'annule beaucoup plus rapidement lorsque $r >> r_0 = 1/\alpha$ (portée du potentiel). Remarquons que, pour $\alpha = 0$, on retrouve le potentiel coulombien, qui apparaît ainsi comme un potentiel de Yukawa de portée finie *(Basedevant 2002; Tannoudji T2 1993; Tannoudji 1986)*.

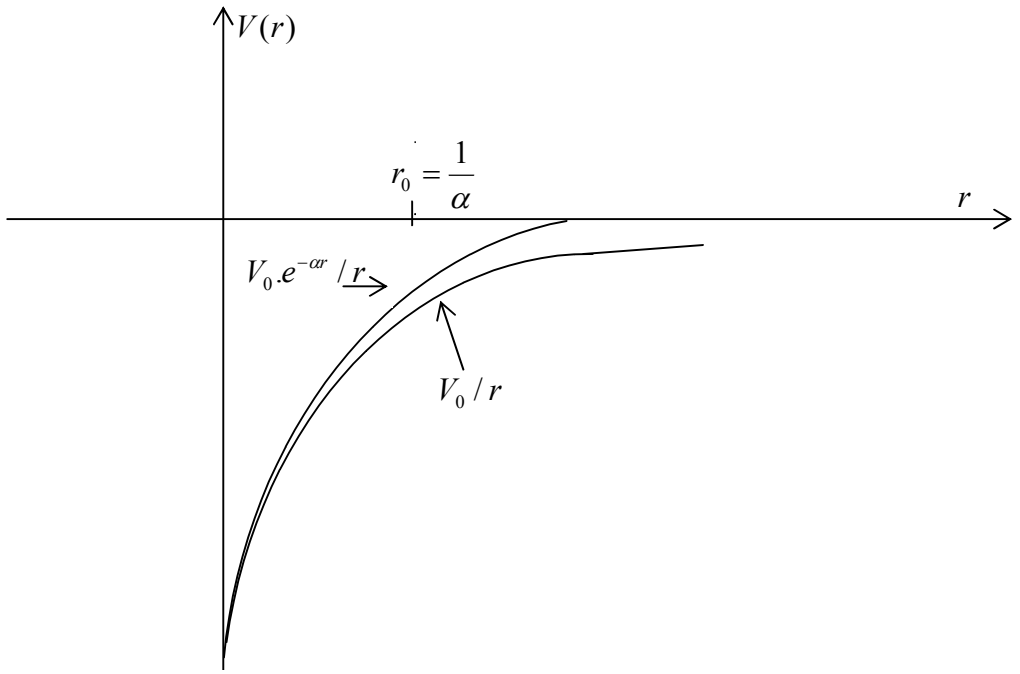

Figure 1.1: Schéma d'illustration du potentiel coulombien et du potentiel de Yukawa (Tanoudji T2 1993).

I.2.3. Potentiel de Wentzel (potentiel coulombien écranté)

Le potentiel de Wentzel ou potentiel coulombien écranté s'exprime sous la forme

$$V(r) = \frac{Z.e^2}{r}.\exp(-r/R), \tag{I.3}$$

où e est la charge de l'électron, Z le numéro atomique de l'atome cible et r la distance entre l'électron et le noyau. Le facteur exponentiel sert à réduire l'effet d'écrantage du paramètre R estimé dans le modèle d'atome de Thomas-Fermi, par $R = Z^{-1/3}a_0$ où $a_0 = \hbar / mc^2$ représente le rayon de Bohr *(Dapor 1992, 2003 P20, 2006; Miottelo and Dapor 1997; Wedephol 1968).*

I.2.4. Autres potentiels

En 2001, Benidetot *et al.,* proposent de combiner le potentiel coulombien au potentiel de Yukawa via un potentiel qui prend la forme d'une superposition de potentiels de type Yukawa, soit

$$V(r) = \frac{Z'Z^2e^2}{r}\sum_{i=1}^{3} A_i.\exp(-\alpha_i r/a_0), \tag{I.4}$$

où les paramètres A_i *et* α_i sont déterminés à partir d'ajustements aux éléments du domaine du champ cohérent (self-consistent) de Dirac-Hartree-Fock-Slater (DHFS)

(*Benidetot et al. 2001; Salvat et al. 87*). Ce potentiel donne pratiquement les mêmes sections efficaces différentielles que celles de DHFS.

Green, Sellin et Zachor ont utilisé le potentiel du module indépendant avec la forme analytique suivante

$$V(r) = -\frac{1}{r}[(Z-1)\Omega(r)+1], \tag{I.5}$$

où $\Omega(r)$ exprime la fonction d'écrantage, soit

$$\Omega(r) = [H(e^{r/d}-1)+1]^{-1}. \tag{I.6}$$

Les paramètres H et d sont obtenus par ajustement du potentiel (I.5) avec le potentiel Hartree-Fock-Slater de Herman and Skilman *(Salvat et al. 1987)*.

On trouve aussi le potentiel utilisé pour les collisions des électrons a la forme suivante

$$V(r) = (Z.e^2/r)(Z_p/Z) \tag{I.7}$$

Ce potentiel a la forme du potentiel de Wentzel, basé sur le principe de Hartree, et est considéré comme un potentiel coulombien modifié par la quantité $Z_p/Z = e^{-bx}$ obtenue par ajustement, où b est une constante à déterminer. Ce potentiel prend la forme du potentiel de Wentzel. Pour les éléments lourds, Ruark a proposé la représentation

$$Z_p/Z = \sum_n C_n e^{-b_n x}, \tag{I.8}$$

avec $\sum_n C_n = 1$ où C_n et b_n sont des paramètres ajustables *(Byatt 1956)*.

D'autres potentiels utilisés en mécanique quantique peuvent être cités comme le potentiel de Cox-Bonhan-Salvat *(Dapor 1995)*, le potentiel de Firsov *(Wedephol 1968)* ainsi que potentiel Hartree-Fock. Ce dernier donne de bons résultats pour les éléments de nombres atomiques inférieurs à 19 et celui de Dirac-Hartree-Fock pour les éléments de nombres atomiques supérieurs à 18 *(Dapor 1998; Mayol and Salvat 1997)*.

I.3. Diffusion élastique et diffusion inélastique

Le bombardement d'un matériau par un faisceau d'électrons donne naissance à divers phénomènes (collisions élastiques et/ou inélastiques) qui, *in fine*, se traduisent par l'existence d'électrons absorbés, d'électrons rétrodiffusés, d'électrons transmis, d'électrons

créés (appelés électrons secondaires), d'électrons Auger, d'émission Bremsstrahlung et de rayon X *(cf Figure 1.2) (Goodhew et al. 2001,P 32; Shimizu 1976, 1983).*

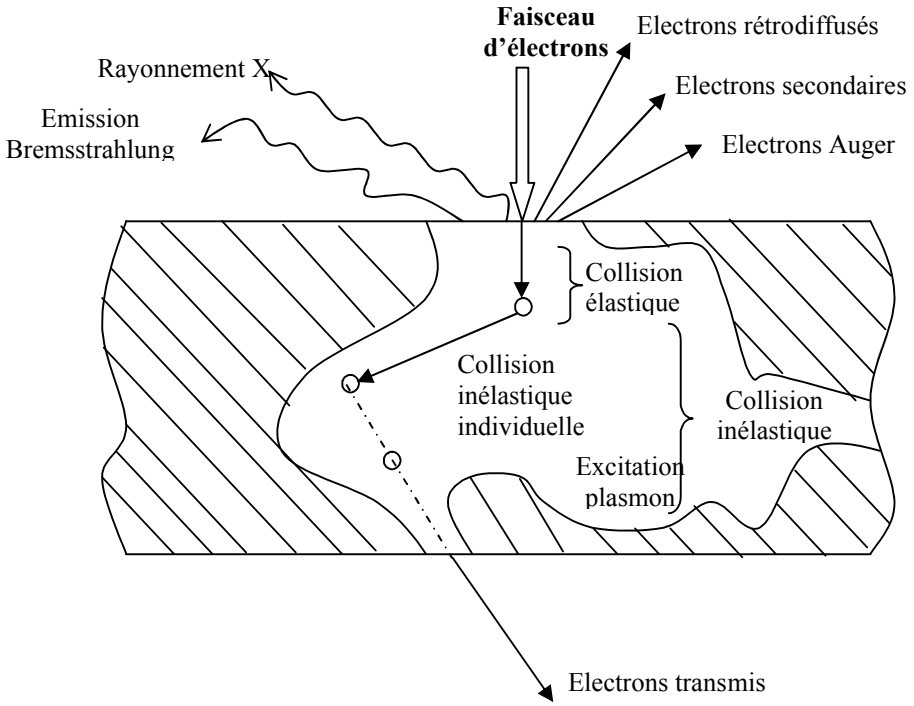

Figure 1.2 : Différents phénomènes manifestant lors de l'interaction électron matière

De même, l'échelle d'énergie de la microseconde correspond aux énergies des rayons X détectés et des électrons incidents, c'est-à-dire de 0.1 a 40 keV. A ces énergies, les processus de diffusion dominantes sont les diffusions élastiques et les diffusions inélastiques (Jensen 1993, *Sorbier 2001*) *(cf Figure 1.3).* Alors, aux énergies de l'ordre du *keV*, un électron est soumis principalement aux diffusions élastiques par les noyaux atomiques et aux diffusions inélastiques par les électrons atomiques et très rarement au rayonnement de freinage ou Bremsstrahlung *(Sorbier 2001).*

Avant d'étudier les collisions élastiques et les collisions inélastiques des électrons, nous allons donner la définition de la section efficace de diffusion.

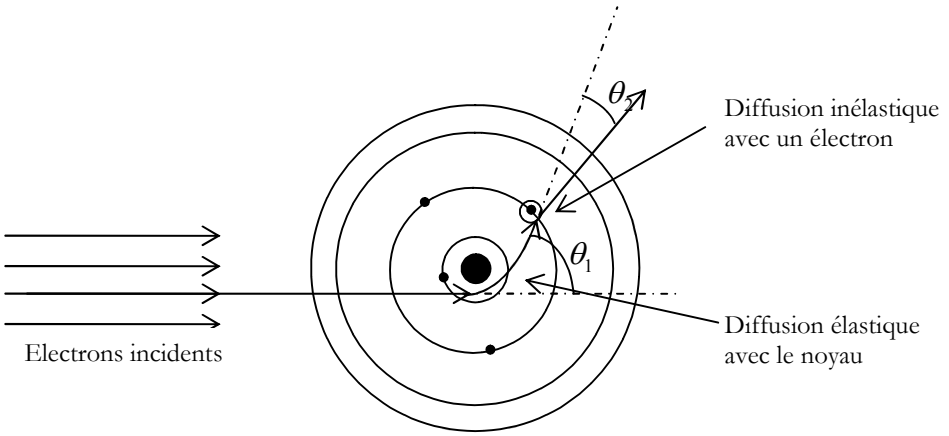

Figure 1.3: Schéma illustrant les collisions élastiques et inélastiques d'un électron incident dans un matériau.

I.3.1. Définition de la section efficace

La définition de la section efficace est avant tout expérimentale. Partons d'une expérience de collision typique. Soit Oz, la direction le long de laquelle arrive le faisceau des particules monoénergétiques *(cf Figure 1.4)*.

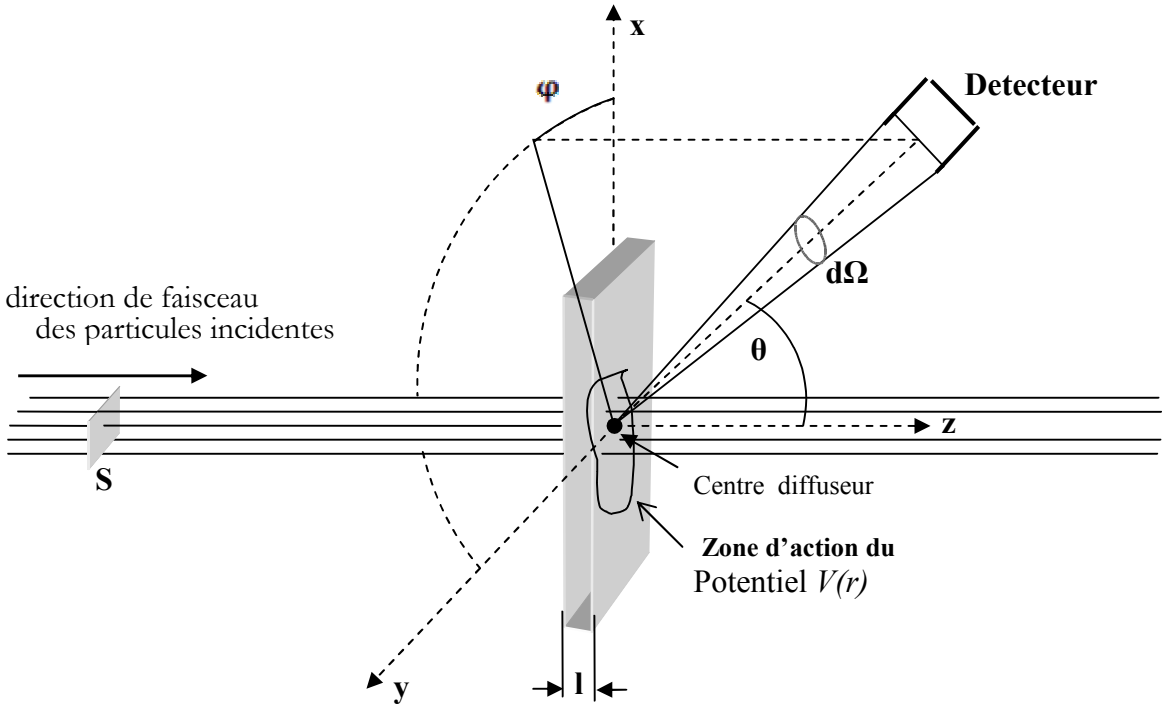

Figure 1.4: Illustration géométrique de mesure de la définition de la section efficace

Le potentiel $V(r)$ est localisé autour de l'origine O des coordonnées. Notons Φ, le flux que transporte le faisceau (le nombre de particules qui traversent un centimètre carré de section perpendiculaire à Oz par unité de temps). Supposons que ce faisceau rencontre une particule cible jouant le rôle d'un centre de diffusion fixe (autrement dit nous étudierons les phénomènes dans le système de centre de masse) sous l'influence du potentiel dans diverses directions (*Delacroix 1963; Tannoudj 1993*).

On dispose, loin de la région où règne le potentiel et dans la direction repérée par les angles polaires θ et φ, d'un détecteur dans l'ouverture est vue depuis O sous l'angle solide $d\Omega$. Si le flux incident est homogène, c'est-à-dire si les particules incidentes ont des paramètres d'impact répartis de façon uniforme autour de la particule cible, la distribution angulaire des particules diffusées est une caractéristique de la force entre les particules incidentes et particules cibles. On précise cette distribution au moyen de la notion de section efficace différentielle (*Delacroix 1963; Tannoudji 1993*). On compte ainsi le nombre dN de particules diffusées par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega$ autour de la direction (θ,φ). dN est évidemment proportionnel à Φ et à $d\Omega$.

Une description plus fine consiste à compter les collisions pour un angle donné, on écrit alors

$$dN = \Phi.\sigma_d.d\Omega \tag{I.9}$$

La quantité $\sigma_d(\theta,\varphi)$ a la dimension d'une surface: on l'appelle la section efficace différentielle de collision élastique.

Rappelons que dN est le nombre de diffusion comptées par un détecteur d'ouverture $d\Omega$ faisant la direction d'incidence ($d\Omega = 2.\pi.\sin\theta.d\theta$) *(cf Figure 1.5)*. Sachant que $\sigma_d(\theta,\varphi)$ est le coefficient de proportionnalité entre dN et $\Phi.d\Omega$, on peut écrire

$$\sigma_d(\theta) = \frac{\text{(Nombre de collision par unité de temps entre } \theta \text{ et } \theta+d\theta)}{\text{(Nombre de projectiles incidents par unité de surface et par unité de temps) * } d\Omega}$$

L'intégration sur toutes les directions donne le nombre total de collision, soit la section efficace totale de diffusion

$$\sigma_T = \int_{4\pi} \sigma_d(\theta,\varphi) d\Omega = \int_0^{2\pi} 2.\pi.\sin\theta.d\theta.\sigma_d(\theta)\,. \tag{I.10}$$

I.3.2. Collision élastique

I.3.2.1. Calcul classique de la section efficace élastique de Rutherford

Une particule de charge $Z_1 e$ et d'énergie cinétique $E_c = mv^2/2$ diffuse sur un centre fixe de charge $Z_e e$ situé à l'origine (potentiel coulombien $V(r) = Z_1 Z_2 e^2 / r$) *(cf Figure 1.5)*. La relation entre le paramètre d'impact b et l'angle de diffusion θ est donnée par *(Basdevant et al. 2002)*

$$b = (Z_1 Z_2 e^2 / 2E_c)\,\mathrm{cotg}(\theta/2) \tag{I.11}$$

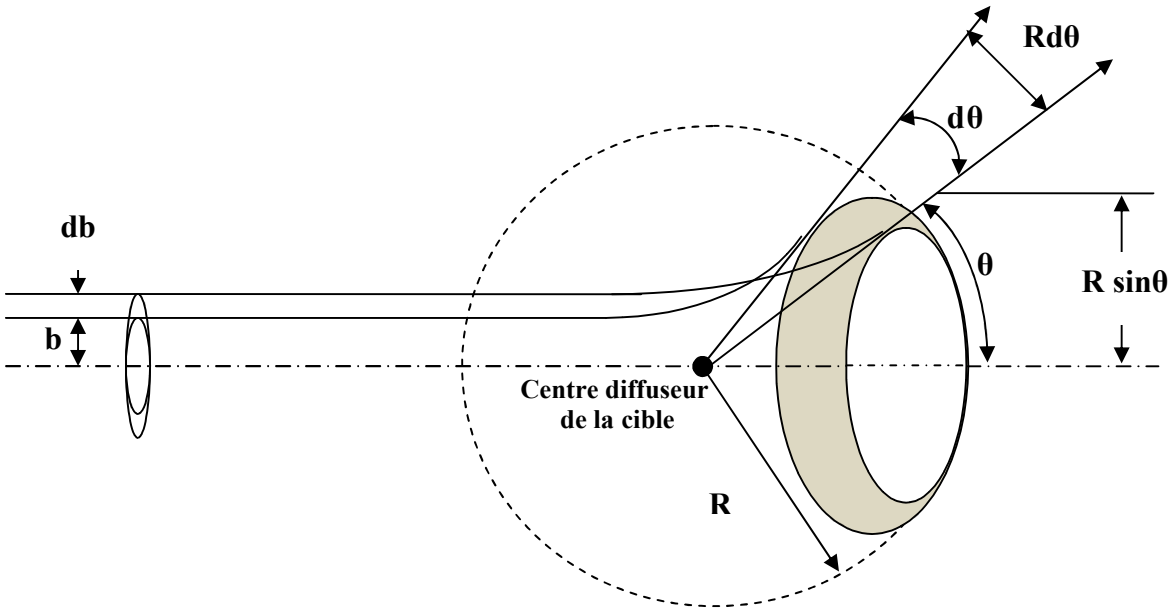

Figure 1.5: Schéma illustratif du collision de deux particules

D'après la *Figure 1.5*, et par définition, la quantité $d\Omega/4\pi$ est la surface ombrée par l'ensemble de la surface sphérique. La surface ombrée est égale à $2\pi(R\sin\theta)(R.d\theta)$. Alors $d\Omega/4\pi = 2\pi R^2 \sin\theta.d\theta/R^2$, et par conséquent $d\Omega = 2\pi\sin\theta\, d\theta$ *(Nastazi and Mayer 2006)*.

Prenons la direction incidente pour axe polaire. θ et φ sont les angles polaires de la direction de propagation de la particule diffusée. θ est précisément l'angle de déflection introduit plus haut, lié au paramètre d'impact *b* par la relation (I.11).

L'angle solide $d\Omega$ situé dans la direction (θ, φ) peut s'écrire

$$d\Omega = \sin\theta . d\theta . d\varphi \,, \tag{I.12}$$

où $d\sigma$ est le nombre de particules diffusées par unité de temps selon cet angle solide: il est égal au nombre de particules incidentes traversant la surface $b\, db\, d\varphi$ par unité de temps, puisque le flux incident est égal à 1 *(Messiah 1995; Nastazi and Mayer 2006)*

$$d\sigma = b\, db\, d\varphi = b \frac{db}{d\theta} . d\theta . d\varphi = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| d\Omega \,. \tag{I.13}$$

En remplaçant dans cette équation les quantités *b* et $db/d\theta$ par leurs expressions en fonction de θ calculée au moyen de l'expression (I.11), on obtient l'expression de la section efficace élastique différentielle de Rutherford

$$\frac{d\sigma_e(\theta)}{d\Omega} = \frac{a^2}{4\sin^4(\theta/2)} = \frac{e^4 {Z_1}^2 Z_2^2}{16 E^2 \sin^4(\theta/2)} . \tag{I.14}$$

Remarquons que la section efficace ne dépend pas du signe du potentiel et qu'elle diverge fortement lorsque l'angle de diffusion tend vers zéro $(\theta \to 0)$. On obtient des résultats semblables, mais analytiquement différents, pour tout potentiel à variation assez lente, du même genre que le potentiel coulombien. On note de plus que la section efficace $(\approx 1/E^2)$ décroît lorsque l'énergie augmente, et ce pour un angle donné (*Messiah 1995 P360 ; Friedrich 1991 P201*).

I.3.2.2. Calcul de la section efficace élastique par la première approximation de Born

Le calcul de la section efficace se fait à l'aide des principes de la mécanique quantique et la plupart du temps dans la première approximation de Born. Cette approximation consiste à prendre en compte une seule diffusion de l'onde plane incidente par le potentiel d'interaction *(Sorbier 2001)*. Dans ce cas, l'amplitude de diffusion coulombien est donnée par

$$f_k^{(B)}(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}.\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\int d^3r\, e^{-iK.r.\frac{e^{-\alpha r}}{r}} \tag{I.15}$$

où μ est la masse réduite du système définie par $1/\mu = 1/m_1 + 1/m_2$ et K l'impulsion transférée dans la direction (θ,φ).

L'expression (I.15) fait intervenir la transformée de Fourier du potentiel de Yukawa. Comme ce potentiel ne dépend que de la variable r, on peut effectuer les intégrations angulaires, d'où l'amplitude de diffusion coulombienne suivante *(Tannoudji T2 1993)*

$$f_k^{(B)}(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}.\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}.\frac{4\pi}{|K|}\int_0^{\infty} r.dr.\sin|K|.r.\frac{e^{-\alpha r}}{r} \tag{I.16}$$

Apres calcul on trouve

$$f_k^{(B)}(\theta,\varphi) = -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}.\frac{1}{\alpha^2+|K|^2} \tag{I.17}$$

On peut alors facilement montrer que $|K| = 2.k.\sin(\theta/2)$ où k est le module du vecteur d'onde incidente et θ l'angle de diffusion.

La section efficace différentielle s'écrit donc dans la première approximation de Born

$$\sigma_d^B(\theta) = \frac{2\mu^2 V_0^2}{\hbar^4}.\frac{1}{(\alpha^2+4k^2\sin^2(\theta/2))^2}. \tag{I.18}$$

Il est clair que la section efficace différentielle ne dépend pas de l'angle azimutal φ, ceci est évident car on suppose que les centres diffuseurs (potentiel) possèdent la symétrie de révolution cylindrique autour du faisceau incident *(Tanoudji 1993)*. Ainsi la formule de Rutherford écrantée n'est pas valable pour les électrons de faibles énergies *(Sorbier 2001 P39; Valkealahti and Nieminen 1984)*.

Enfin, la section efficace totale est donnée par intégration, soit

$$\sigma_T = \int d\Omega\,\sigma_d^{(B)} = \frac{4\mu^2 V_0^{\,2}}{\hbar^4}.\frac{1}{\alpha^2(\alpha^2+4k^2)}. \tag{I.19}$$

Posons $B_N = (\alpha / 2q)^2$ défini comme le cœfficient d'écrantage atomique proposé par *Nigam et al. (1980)* et modifié par *Adesida et al.* (*1980).* Ce coefficient est obtenu par voie empirique et est donné par

$$B_N = \frac{\mu_N . Z^{2/3}}{E}, \tag{I.20}$$

où μ_N est une constante égale à 5.43 selon *Nigam et al.* (*1959)* et obtenue par un ajustement de la section efficace de Rutherford à celle obtenue par la méthode des ondes partielles dans le cas de l'Aluminium *(Adesida et al. 1980, Nigam et al. 1959, Valkealahti and Nieminen 1983)*. La constante μ_N a aussi été modifiée par *(Adesida et al. 1980),* où ils ont multiplié μ_N par un facteur $\mu_A = 0.48$. Enfin, *Chaoui et Bouarissa (1992) et Bouarissa et al. (2002)* ont suggéré pour leur part que μ_N n'était pas une constante mais qu'elle dépendait plutôt de l'énergie de l'électron *E*.

En tenant compte de la formule (I.20), la section efficace différentielle devient

$$\sigma_d(\theta) = \frac{Z^2 e^2}{(4\pi\varepsilon_0)^2 . 4 . E^2 (1 - \cos(\theta) + 2B_N)^2}. \tag{I.21}$$

Par conséquent, la section efficace totale s'écrit

$$\sigma_T = \frac{\pi Z^2 e^2}{(4\pi\varepsilon_0)^2 . 4 . E^2 B_N (B_N + 1)}. \tag{I.22}$$

Comme mentionné au début de ce chapitre, le potentiel de Yukawa tend vers un potentiel coulombien lorsque α tend vers zéro. Dans ces conditions, pour obtenir le potentiel coulombien entre deux charges respectives $Z_1 q$ et $Z_2 q$ (avec q la charge de l'électron), nous poserons, $\alpha = 0$ (pas d'effet d'écran), $V_0 = Z_1 Z_2 e^2$ avec $e^2 = q^2 / 4\pi\varepsilon_0$. Si en remplace *k* par sa valeur en fonction de l'énergie $k = p / \hbar$, la formule (I.18) devient

$$\frac{d\sigma_e(\theta)}{d\Omega} = \frac{4\mu^2 V_0^{\,2}}{\hbar^4} \frac{e^4 Z_1^{\,2} Z_2^2}{16 k^4 \sin^4(\theta/2)} = \frac{e^4 Z_1^{\,2} Z_2^2}{16 E^2 \sin^4(\theta/2)}. \tag{I.23}$$

On voit clairement que la section efficace différentielle obtenue par la première approximation de Born dans un champ coulombien pur est identique à l'expression de Rutherford (I.14) obtenue en mécanique classique. En outre, l'utilisation de la première approximation de Born avec le potentiel de Wentzel ainsi que la mécanique quantique

mènent à la même expression de Rutherford dans un champ coulombien pur c'est-à-dire avec un facteur d'impact tendant vers zéro *(Dapor 2003 P20, Fernandez-Varea et al 1993, Messiah 1995 p360).* Par ailleurs, il est à noter que la section efficace basée sur le potentiel de Wentzel, est largement utilisée en simulations par Monte Carlo. Malheureusement cette section efficace n'est valide que pour des énergies d'électron $E \geq 10\,keV$ *(Dapor 1992 ; Miotello and Dapor 1997).*

I.3.2.3 Sections efficaces élastiques obtenues empiriquement

A - La section efficace de Kanaya et Okayama

Kanaya et Okayama ont proposé une section efficace élastique totale semi-empirique souvent utilisée dans le domaine de diffusion des particules (*Dapor 1991 ; Kanayaya and Okayama 1972*). Cette dernière prend la forme suivante

$$\sigma_n = \frac{K_n Z^{14/9}}{E^{5/3}}, \tag{I.24}$$

où E est l'énergie de l'électron et Z le nombre atomique. Si E est exprimée en eV et σ_n en cm^2, $K_e = 1.12 \times 10^{-14} eV^{5/3} cm^2$.

B - La section efficace de diffusion de Browning *et al.*

L'expression de la section efficace totale empirique de Browning *et al.* est donnée sous la forme d'une fraction (σ_R / σ_I) entre l'expression mathématique de la section efficace écrantée de Rutherford (σ_R) et la distribution isotropique (σ_I). Les deux quantités sont obtenues par un ajustement aux valeurs de la section efficace différentielle de Mott dans l'intervalle d'énergie 0.1 to 30 *keV*, soit

$$\frac{\sigma_R}{\sigma_I} = \frac{300\,E^{1-Z/2000}}{Z} + \frac{Z^3}{3 \times 10^5 \times E} \tag{I.25}$$

Les coefficients de rétrodiffusion obtenus par cette expression sont en bon accord avec ceux de Mott (*Browning et al. 1994*).

I.3.2.4 Section efficace obtenue par le méthode des ondes partielles

La méthode des ondes partielles (PWA) appelée aussi méthode des déphasages, consiste à caractériser la diffusion des ondes sphériques par un potentiel. L'onde sphérique sortante est modifiée d'un déphasage par rapport à l'onde sphérique entrante. En tenant compte, du fait que lorsque le potentiel est central, l'équation de Dirac est séparée en deux fonctions (une fonction radiale et une fonction angulaire). La section efficace différentielle s'écrit

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2, \tag{I.26}$$

où $f(\theta)$ et $g(\theta)$ sont les amplitudes respectivement directe et avec inversion du spin, données par

$$\begin{cases} f(\theta) = \dfrac{1}{2iK}\sum_{l=0}^{\infty}\{(l+1)[\exp(2i\delta_l^-)-1] + l[\exp(2i\delta_l^+)-1]\}P_l(\cos\theta) \\ g(\theta) = \dfrac{1}{2iK}\sum_{l=1}^{\infty}\{\exp(2i\delta_l^-) + \exp(2i\delta_l^+)\}P_l^1(\cos\theta) \end{cases} \tag{I.27}$$

Dans ces deux équations (I.27), $K = (E^2 - m^2c^2)/\hbar^2c^2$ est le vecteur d'onde de l'électron, E l'énergie totale, c la vitesse de la lumière, P_l les polynômes de Legendre, P_l^1 les fonctions de Legendre associées et $\delta_l^{\pm}$ les déphasages. Pour chaque valeur propre l du moment angulaire orbital, il y a deux valeurs possibles du moment angulaire total j (correspond à l'addition du spin) qui sont $j = l \pm 1/2$. Les déphasages δ_l^+ et δ_l^- sont déterminés par l'équation *(Dapor 1995 ; Salvat et al. 2005 ; Sorbier 2001 ; Wong et al. 2008 P89 ; Zhenyu 1998)*

$$\tan\delta_l^{\pm} = \frac{Kj_{l+1}(Kr) - j_l(Kr)[\varsigma\tan\phi_l^{\pm} + (1+l+k^{\pm})/r]}{Kn_{l+1}(Kr) - n_l(Kl)[\varsigma\tan\phi_l^{\pm} + (1+l+k^{\pm})/r]} \tag{I.28}$$

La *Figure 1.6* montre que la différence du comportement des sections efficaces différentielles obtenues par la méthode des ondes partielles par rapport à celles obtenues par l'expression de Rutherford écranté pour des énergies plus faibles et pour des angles de diffusion plus larges. Cependant, ces dernières présentent un bon accord aux énergies

relativement élevées et pour des angles de diffusion plus faibles (c'est-à-dire à larges paramètres d'impact).

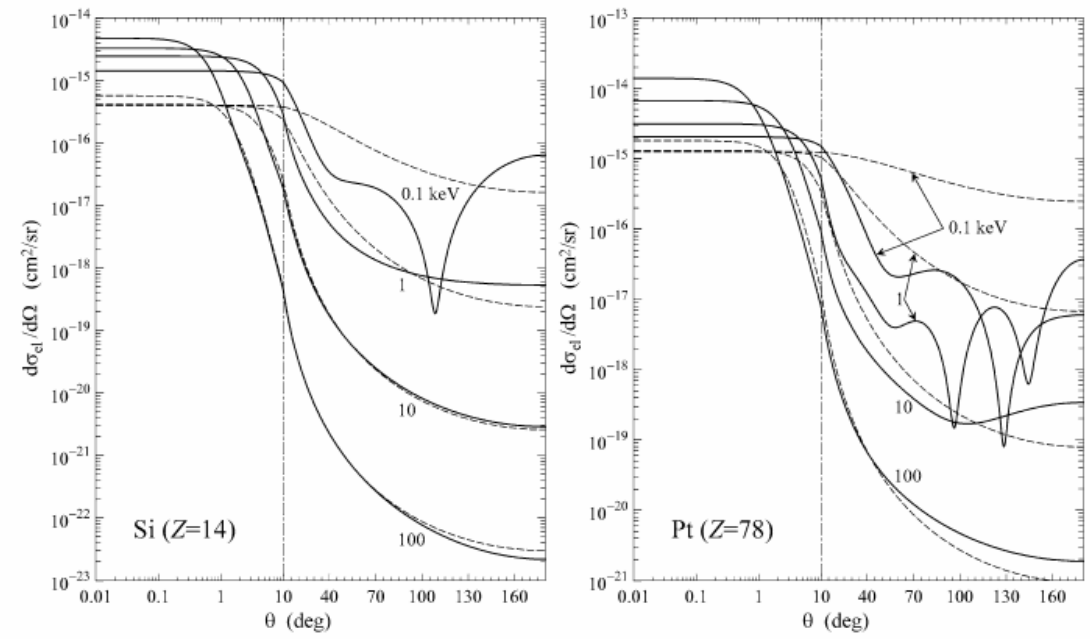

Figure 1.6: Sections efficaces différentielles pour différentes énergies: les courbes continues représentent les SEDs obtenues par la méthode des ondes partielles en utilisant le potentiel d'échange statique, les courbes discontinues représentent les SEDs de Rutherford écrantées (Salvat et al. 2004).

I.3.3. Section efficace inélastique de Gryzinski

Lorsqu'un électron interagit de manière inélastique, l'atome avec lequel a lieu l'échange absorbe une certaine quantité d'énergie et passe donc à un état excité. Contrairement aux diffusions élastiques avec les noyaux, les diffusions inélastiques se font avec les électrons de l'atome cible. Par conséquent la perte d'énergie cinétique ΔE est importante.. Toutes les contributions de l'excitation des électrons du cœur et de valence sont exprimées par la fonction d'excitation de Gryzinski *(Gryzinski[a] 1965 ; Gryzinski[b] 1965 ; Valkealahti and Nieminen 1983, 1984; Adesisida et al. 1980; Tilinin et al. 1996), soit*

$$\frac{d\sigma_{inel}(\Delta E)}{d(\Delta E)} = \pi \frac{(e^{\pm})^4}{(\Delta E)^3}\frac{E_B}{E_0}\left(\frac{E_0}{E_0+E_B}\right)^{3/2}\left(1-\frac{\Delta E}{E}\right)^{[E_B/(E_B+\Delta E)]} \times\left\{\frac{\Delta E}{E_B}\left(1-\frac{E_B}{E_0}\right)+\frac{4}{3}\ln\left[2.7+\left(\frac{E_0-\Delta E}{E_B}\right)^{1/2}\right]\right\}, \tag{I.29}$$

où $\Delta E, E_b$ *et* E sont respectivement, la perte d'énergie, l'énergie de liaison des électrons du cœur ou de valence et l'énergie incidente (initiale). Les constantes physico-chimiques

des deux éléments étudiés dans le présent travail sont données dans la table (1.1) suivante (*Vakealahti and Nieminen 1983 ; Adesida et al. 1980).*

Matériaux	AL	Cu
Cœur		
Energie de liaison [eV]	84	80
Electrons/atome	8	18
Valence		
Energie de liaison [eV]	6	5
Electrons/atome	4	1

Table 1.1: Energies de liaisons et le nombre d'électron de cœur et de valence pour Al et Cu

La section efficace inélastique totale d'ionisation est donnée par

$$\sigma_{inel} = \frac{\pi e^4 N_s}{E_0 E_B}\left(\frac{E_0 - E_B}{E_0 + E_B}\right)^{3/2}\left\{1 + \frac{2}{3}\left(1 - \frac{E_B}{2E_0}\right)\ln\left[2.7 + \left(\frac{E_0}{E_B} - 1\right)^{1/2}\right]\right\} \quad \text{(I.30)}$$

Cette expression est utilisée dans plusieurs travaux *(Adesida et al. 1980 ; Aydõn 2001 ; Vakealahti and Nieminen 1983,1984 ; Bakri et al. 1975 ; Samoto et al. 1983 ; Shimizu and Ichimura 1983 ; Bouarissa et al. 2002 ; Rouabah[b] et al.2009 ; Rouabah[c] et al. 2009).*

N_s est le nombre d'électrons contribuant à un type déterminé de choc inélastique de collision (valence ou cœur). Cependant, il faut distinguer les électrons de cœur (les électrons des couches internes) des électrons de valence (électrons des couches externes). Les électrons de cœur sont très liés au noyau et leur excitation met en jeu une énergie inférieure à leur énergie de liaison *(Najar 1992).* L'angle de diffusion de collision inélastique électron-électron, peut être facilement calculé à partir de la mécanique classique (collision entre deux particules) et est donné par

$$\sin\theta = (\Delta E / E)^{1/2}. \quad \text{(I.31)}$$

Cette équation donne des résultats exacts lorsque la perte d'énergie ΔE est beaucoup plus petite que l'énergie primaire. Pour les petites énergies incidentes (primaires) cette équation perd de son exactitude mais ceci n'influe pas vraiment sur les résultats *(Vakealahti and Nieminen 1983).*

Approches de *Vakealahti et Nieminen*

L'éxpression (I.30) ne tient pas en compte des collisions inélastique des électrons pour lesquels leurs pertes d'énergie est inférieure à l'énergie de liaison de l'électron comme par exemple l'excitation des électrons du cœur entre deux niveaux atomiques. Ces processus ont également leurs influences sur le ralentissement des électrons et devraient être pris en compte. Partant de ces données, *Vakealahti et Nieminen* ont proposés une approximation dans laquelle la fonction d'excitation (I.29) est constante pour les petites énergies, et s'écrit

$$\left.\frac{d\sigma(\Delta E)}{d\Delta E}\right|_{\Delta E \le E_B} = \left.\frac{d\sigma(\Delta E)}{d\Delta E}\right|_{\Delta E = E_B} . \tag{I.32}$$

Ils ont ainsi calculé la section efficace inélastique totale de diffusion comme

$$\sigma_{ine} = \int \frac{d\sigma(\Delta E')}{d\Delta E'} d\Delta E' \tag{I.33}$$

La *Figure 1.7* montre les deux sections efficaces utilisées par *Vakealahti et Nieminen* dans leur simulation, où MC_1 désigne la simulation Monte Carlo utilisant l'expression (I.30) et MC_2 celle utilisant l'expression (I.33).

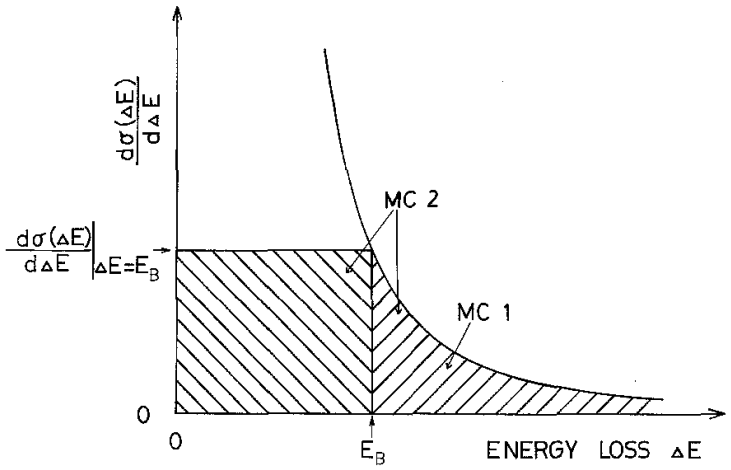

Figure 1.7: Les deux fonctions d'excitation utilisées dans l'approche de Vakealahti et Nieminen. La zone ombrée sous la courbe à droite de E_B est la section efficace inélastique utilisée dans MC_1 et la zone totalement ombrée est utilisée dans MC_2 (Vakealahti and Nieminen 1983).

Dans les résultats obtenus par MC_2, certains paramètres comme la profondeur de pénétration, la transmission et le facteur de rétrodiffusion sont améliorés par rapport à MC_1 .

Plus tard et afin d'améliorer beaucoup plus les résultats, *Vakealahti et Nieminen* ont proposé une autre approche qui considère que les collisions inélastiques se font avec tous les électrons de l'atome et pas seulement avec les électrons de cœur et de valence. Par conséquent, la section efficace inélastique devient une série de sections efficaces *(Vakealahti and Nieminen 1984)*.

D'autres auteurs ont proposé des modèles exprimant les collisions inélastiques, comme par exemple la célèbre formulation de Bethe exprimant la section efficace inélastique sous forme relativiste ou non-relativiste *(Tanuma et al. 1988)*, le modèle inélastique de Penn basé sur la fonction optique diélectrique obtenue par la modification de l'approximation statistique *(Penn 1976, 1986)* et enfin, le modèle inélastique basé sur la fonction diélectrique de Lindhard *(Jensen and Walker 1993)*.

I.4. Ralentissement des électrons et parcours électronique

Pour étudier le ralentissement des particules chargées dans un matériau qui est dû essentiellement aux pertes d'énergie lors de leurs interactions inélastiques, on introduit la notion de pouvoir d'arrêt (transfert linéique d'énergie, TLE). Ce dernier exprime la perte d'énergie (par unité de longueur de trajectoire des particules incidentes) consécutive aux collisions inélastiques avec les électrons atomiques qu'ils excitent ou éjectent.

Expérimentalement, on peut seulement déterminer l'épaisseur de matière susceptible d'arrêter tout ou une partie d'un faisceau de particules. C'est cette épaisseur que l'on désigne habituellement sous le nom de « distance maximale de parcours ». Cette dernière est déterminée en se basant soit sur le flux des électrons transmis (nombres d'électrons transmis), soit sur l'énergie de ces électrons *(Najar 1992)*.

Dans la littérature, il existe plusieurs formulations exprimant le pouvoir d'arrêt et la distance maximale de parcours, dont on va mettre en relief quelques unes.

La formule générale du TLE est donnée par

$$TLE = \left|\frac{dE}{ds}\right|, \tag{I.34}$$

où $\frac{dE}{ds}$ est le pouvoir d'arrêt qui désigne la perte d'énergie par unité de distance parcourue *(cf Figure 1.8)*.

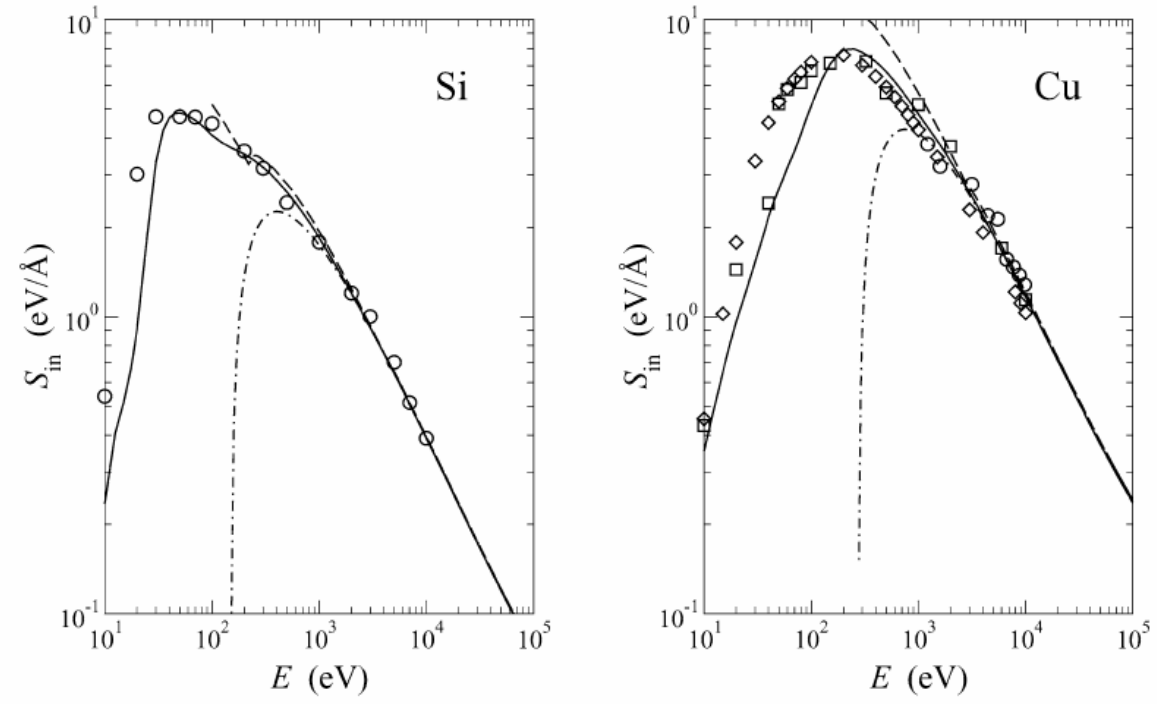

Figure 1.8 : Pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie de l'électron (Salvat et al. 2004).

Si l'énergie initiale de la particule est E, la distance parcourue par la particule est donnée par

$$s = \int_{E_0}^{E} \frac{dE}{dE/ds}, \tag{I.35}$$

avec E l'énergie initiale de la particule incidente.

On peut aussi définir la distance maximale de parcours d'une particule d'énergie initiale E dans un matériau (appelée aussi la portée maximale des particules ou le rang de pénétration des particules dans un matériau). Elle est donnée en fonction du pouvoir d'arrêt correspondant à l'énergie $E \approx 0$, comme suit

$$R = \int_{E_0}^{0} \frac{dE}{dE/ds} \tag{I.36}$$

La première expression théorique exprimant le pouvoir d'arrêt de l'électron a été élaborée par Bethe (1933) avec la théorie quantique classique. Par laquelle la contribution de tous les processus d'excitation de perte d'énergie est représentée par un facteur appelé « énergie d'ionisation moyenne ». Cette expression de Bethe a été généralement utilisée afin de déterminer l'énergie moyenne de la pénétration de l'électron pour une longueur

parcourue dans un milieu ralentissant *(Shimizu et al. 1976)*, l'expression du pouvoir d'arrêt est donnée par

$$\left|\frac{dE}{ds}\right|_B = \frac{2\pi e^4 N_a Z}{E}.\ln(1.166E/I), \tag{I.37}$$

où e est la charge d'électron, N_a le nombre d'Avogadro et I est le potentiel d'ionisation moyen qui est estimé à partir de

$$\begin{cases} I = 9.76Z + 58.8Z^{-1.19}\ eV & pour \quad Z \geq 10 \\ I = 13.6Z\ eV & pour \quad Z < 10 \end{cases}. \tag{I.38}$$

L'expression (I.37) donne des résultats précis pour des énergie E supérieures à *1keV* (*Werner 2001 ; Dapor 2001 ; Yu and Lin 1989*). Afin d'élargir l'application de l'expression de Bethe au-dessous de l'énergie moyenne d'ionisation, Joy and Luo ont modifié l'expression de Beth par la formulation suivante

$$\left|\frac{dE}{ds}\right|_B = \frac{2\pi e^4 N_a Z}{E}.\ln(1.166(E+0.85I)/I). \tag{I.39}$$

Cette expression qui est appelée « expression de Bethe modifiée » est valide pour des énergies $E > 50\ eV$ *(Wong and Menguç 2008)*.

La distance maximale de parcours dans le modèle de Bethe est alors donnée par

$$R_B = \int_E^0 \frac{dE}{dE/ds} = E^2/4\pi e^4 N_a Z \ln(1.166E/I). \tag{I.40}$$

Cette dernière est généralement plus grande que la distance maximale de parcours obtenue expérimentalement en raison des mouvements des diffusions multiples des électrons *(Najar 1992 P49)*.

Kanaya et Okayama ont proposé une expression semi-empirique concernant l'atténuation de l'électron dans un solide *(Dapor 1991, 1992)*

$$\left|\frac{dE}{ds}\right|_{K-O} = \frac{K_e N Z^{8/9}}{E^{2/3}}, \tag{I.41}$$

où N est le nombre d'atomes par unité de volume, dE/ds est exprimé en eV/cm, et $K_e = 3.60\times10^{-14} eV^{5/3} cm^2$. A partir de cette expression, la distance parcourue s'écrit sous la forme

$$S_{K-O} = \int_{E_0}^{E} \frac{dE}{dE/ds} = \frac{3(E_0^{5/3} - E^{5/3})}{5K_e N Z^{8/9}}, \tag{I.42}$$

et la distance maximale de parcours sous la forme

$$R_{K-O}=\frac{3E_0^{5/3}}{5K_eN\,Z^{8/9}}. \tag{I.43}$$

On peut aussi écrire la dernière formule comme suit

$$R_{K-O}=\frac{0.0276\times A\times E_0^{5/3}}{Z^{8/9}}, \tag{I.44}$$

où R est exprimé en μm, E_0 $en\ keV$, A le poids atomique exprimé en g/mol et la densité atomique ρ en g/cm^3. Les résultats de la distance maximale de parcours obtenus par l'expression de Kanaya et Okayama sont en bon accord avec les résultats expérimentaux de Casslet-Thomas (*Dapor 1991*).

Partant des résultats expérimentaux, Gruen a développe en 1957 une expression semi-empirique donnée par

$$R_G=45.7\frac{E_b^{1.75}}{\rho}. \tag{I.45}$$

où R_G est en nm, E_b en keV et la densité ρ en g/cm^3. Cette expression est valide uniquement dans l'intervalle $5\,keV<E_b<25\,keV$. Plus tard, *Everhert et Hoff* ont corrigé la formule de Gruen exprimant la distance maximale de parcours en proposant l'expression suivante

$$R_G=40\frac{E_b^{1.75}}{\rho}. \tag{I.46}$$

Cette expression est valide dans le même intervalle d'énergie, mais elle donne des résultats plus précis que celle de l'expression de Gruen (*Kurniawan et al. 2007*).

Ashley a proposé pour sa part, un modèle décrivant le pouvoir d'arrêt de l'électron en tenant compte de l'effet d'échange entre électron incident et l'électron cible

$$\left|\frac{dE}{ds}\right|_A\approx\frac{1}{\pi E}\int_0^{E/2}dw'w'\,\mathrm{Im}\left[-\frac{1}{\varepsilon(0,w')}\right]G_e(\frac{w'}{E}), \tag{I.47}$$

où E est l'énergie incidente, w' l'énergie de transfert et $\varepsilon(0,w')$ la fonction diélectrique complexe. La fonction G_e est déterminée par approximation. Dans une large limite de E, l'expression (I.47) recouvre la formule non-relativiste de Bethe *(Ashley 1988,1990)*.

I.5. Conclusion

Comme mentionné précédemment, dans un champ coulombien pur, la première approximation de Born et la théorie quantique mènent à la même section efficace de Rutherford obtenue par la mécanique classique. Cependant les résultats de la section efficace obtenus par la méthode des ondes partielles avec le potentiel de Hartree-Fock ou Dirac-Hartree-Fock sont considérés comme des résultats exacts *(Dapor 1998; Mayol and Salvat 1997)*. Ces résultats diffèrent par rapport à ceux obtenus par l'expression de Rutherford à larges angles, notamment pour les éléments de nombres atomiques plus élevés. Aux faibles angles de diffusion (c'est-à-dire aux larges paramètres d'impact) et pour les grandes énergies, l'expression de la section efficace différentielle écrantée de Rutherford donne de bons résultats (cf *figure 1.6*). Il est à noter que dans notre simulation de Monte Carlo utilisée dans le présent travail, l'expression de la section efficace élastique écrantée et modifiée de Rutherford est utilisée pour simuler les collisions élastiques alors que pour les collisions inélastiques nous avons utilisé la fonction de Gryzinski.

Chapitre II

Simulation de transport par la méthode Monte Carlo

II.1. Introduction

Les méthodes dites Monte Carlo (que l'on va désigner brièvement par MC) consistent en des simulations expérimentales de problèmes mathématiques et physiques dans lesquelles des nombres aléatoires ou pseudo-aléatoires sont utilisés pour trouver des solutions qui peuvent ne pas être aléatoires.

La méthode de simulation Monte Carlo doit son nom à Métropolis et Ulam. Dans les années 1940, ces auteurs sont les premiers à avoir décrit cette méthode pour des applications militaires concernant le projet de Los Alamos pour la fabrication des premières bombes atomiques, et ce pour désigner la classe de méthodes numériques basées sur l'utilisation de nombres aléatoires. En effet la diffusion aléatoire de neutrons dans un matériau fissile était un problème majeur qui allait être soumis avec succès à l'expérimentation numérique *(Nacheb 2003 ; Mazurier 1999)*.

A la fin des années 50 et grâce aux développements de nouveaux moyens informatiques, les méthodes MC sont introduites dans de nombreux champs d'applications et sont perçues comme un outil crucial et déterminant dans les modélisations de certains problèmes. Elles impliquent la génération de nombres pseudo-aléatoires qui sont mis en forme selon certaines fonctions de densité de probabilité que l'on associe à un modèle. Ce dernier est souvent un système physique réel, mais peut être par exemple un système mathématique, ou un monde imaginaire quelconque gouverné par des lois qu'il est possible d'exprimer en des termes discrets utilisables sur une machine de calcul pour trouver une solution qui, dans certains cas, n'est pas aléatoire *(Fishman 1996 ; Nougier 1987)*

De nombreux problèmes mathématiques *a priori* sans aucun rapport avec les phénomènes aléatoires (évaluation d'intégrales, résolution de systèmes linéaires ou d'équations aux dérivées partielles) peuvent être résolus d'une manière numérique, en les

traduisant en termes de modèles stochastiques : la portée des méthodes MC dépasse donc très largement le cadre de la modélisation des phénomènes aléatoires.

Les méthodes MC représentent un outil très performant dans l'étude du transport des particules dans les solides *(Adesida et al. 1980 ; Aydin 2000 ; Dapor 1992 ; Shimizu and Ichimura 1983 ; Shimizu et al. 1976)*. En effet, tous les problèmes de diffusion sont liés à des trajectoires de particules subissant des collisions entre elles ou avec d'autres particules. Pour simuler l'histoire de particules par la méthode MC, il est nécessaire de posséder un modèle de diffusion constitué principalement d'un ensemble de sections efficaces différentielles (SED) qui déterminent les distributions de probabilité des variables aléatoires représentant une trajectoire. Une fois que ces distributions de probabilité sont connues, les histoires peuvent être générées en utilisant des méthodes d'échantillonnage adaptées. Après la simulation d'un grand nombre d'histoires, l'information voulue est alors obtenue par une moyenne statistique des grandeurs obtenues *(Mazurier 1999 ; Nacheb 2003 ; Nougier 1987)*.

II.2. Générateurs des nombres pseudo aléatoires

Les méthodes de simulation comme la méthode de dynamique brownienne ou la méthode MC exigent, de part leur nature, la génération de nombres aléatoires c'est à dire pris au hasard. Ces nombres sont obtenus soit par l'utilisation de tables établies à partir de certains phénomènes physiques aléatoire tels que le jet de dès, la rotation de la roulette, ...etc, soit à partir de formules de génération de nombres pseudo-aléatoires (RNG : Random Number Generator). Il est à noter que les nombres pseudo-aléatoires diffèrent des nombres aléatoires par le fait que lorsque le premier est arbitrairement choisi, toute la suite des nombres est complètement déterminée et reproductible. Par ailleurs, la qualité des résultats obtenus dépend du choix de la génération de nombres aléatoires *(Fishmann 1996 ; Heermann 1989 ;* Greenspan et al. 1965*)*.

L'utilisation des tables citées ci-dessus est évidemment fastidieuse. Les chercheurs utilisant la simulation préfèrent la génération de nombres pseudo-aléatoires qui ont recours à des formules adaptées à des calculs informatiques plus simples et plus efficaces. Ces formules suivent différentes distributions qui vont être expliquées ci-dessous.

II.2.1. Distribution rectangulaires (distribution uniforme)

L'une des formules les plus utilisées pour engendrer une suite de nombres pseudo-aléatoires à distribution uniforme est la méthode de congruence.

I.1.1.1 Méthode de congruence (Modulo Generator)

Les nombres *m* (le module), *a* (le multiplicateur) et *c* (l'incrément) sont des constantes entières avec $m>a$ et $x_0>0$, $a>0$, $c>0$. Les nombres pseudo-aléatoires x_i de la séquence (x_i) sont obtenus depuis le prédécesseur x_{i-1}. Le générateur congruent linéaire est défini par la relation de récurrence suivante *(Nacheb 2003 ; Heermann 1989)*

$$x_i = a * x_{i-1} + c \pmod{m}, \tag{II.1}$$

Ce qui signifie que le nombre x_i est égal au reste de la division $a * x_{i-1} + c$ par *m*. On a alors intérêt à ce que la période soit la plus longue possible. Le cas le plus fréquent est $c=0$, $m=2^N$ (car un calculateur travail facilement en binaire), *N* étant généralement voisin de 30 ou 40, on obtient alors une période de 2^{N-2} à condition que *a* soit impair et supérieur à 5 (on le prend en générale élevé) et que x_0 soit impair *(Nougier 1987)*.

Ainsi (II.1) devient

$$x_i = a * x_{i-1} + c \pmod{m = 2^N}. \tag{II.2}$$

Les nombres obtenus par la séquence (II.2) ont une distribution uniforme (dite aussi « *rectangulaire* »). Les calculateurs génèrent des nombres aléatoires à distribution rectangulaire sur [0,1], en divisant x_i par $m-1$ où le reste d'une division est inférieur au diviseur.

Par conséquent, on a

$$r_i = x_i/(m-1) \qquad r_i \in [0,1] \tag{II.3}$$

On a souvent besoin d'engendrer des nombres aléatoires à distribution uniforme dans [a, b] : à tout point aléatoire de distribution uniforme dans [0,1] on associe ξ défini par

$$\xi = a + (b-a)r \tag{II.4}$$

Lehmer a proposé les paramètres suivants *(Heermann 1989)*

$$\begin{cases} a = 23 \\ c = 0 \\ m = 10^8 - 1 \end{cases}$$

Sedgewick a proposé les choix suivant *(Lapeyer et al. 1998)* :

$$\begin{cases} a = 31415821 \\ c = 1 \\ m = 10^8 \end{cases}$$

Ce générateur fournit des résultats acceptables dans les cas courants. Cependant sa période (ici $m = 10^8$) peut se révéler parfois insuffisante. Pour y remédier, on peut avoir des générateurs de nombres aléatoires de période arbitrairement longue, en augmentant *m*.

II.2.2. Générateurs non uniformes

Parfois la simulation exige la génération de variables aléatoires non-uniformes. Généralement les algorithmes de génération des variables non-uniformes sont produits en convertissant les variables uniformes. Dans cette partie, nous allons nous limiter à certains générateurs de nombres aléatoires non uniformes qui sont les variables générées par les méthodes d'inversement et les variables aléatoires gaussiennes et poissonniennes.

A - Générateur congruent inverse

La méthode de la transformée inverse est une méthode informatique pour générer une suite de nombres aléatoires de distribution donnée, à partir de l'expression de sa fonction de répartition.

Soit la variable aléatoire continue X ayant une fonction de répartition $F(x)$. Soit $F^{-1}(x)$ la fonction inverse de la fonction $F(x)$.

La méthode de la transformation inverse d'échantillonnage de la variable x effectue les deux opérations suivantes :

1. un nombre U est tiré à partir de la distribution uniforme sur [0,1]
2. la valeur $x = F^{-1}(U)$ est calculée.

En utilisant la transformée inverse, la simulation de la loi exponentielle du paramètre λ de densité $f(x) = \lambda.e^{-\lambda x}$ se fait comme suit:

1. Sa fonction de répartition est

$$F(x) = P(X \le x) = \int_0^x \lambda . e^{-\lambda x} dx = 1 - e^{-\lambda x} \tag{II.5}$$

2. On calcule l'inverse de F

$$F^{-1}(U) = -\frac{\ln(1-U)}{\lambda} \qquad u \in [0,1[\tag{II.6}$$

3. Soit U une variable aléatoire de loi uniforme sur [0,1].

On génère **n** réalisations de *U* à partir d'un des générateurs déjà présentés, puis on pose

$$X = -\frac{\ln(1-U)}{\lambda} \tag{II.7}$$

On obtient un échantillon de *n* valeurs de *X*.

La méthode de la transformée inverse permet aussi de simuler plusieurs lois comme la loi Beta, la loi de Cauchy standard, la loi logistique standard, la loi de Laplace …etc. *(Fishman 1997).*

B - Les variables aléatoires de la distribution gaussienne

Souvent, nous avons besoin de générer des valeurs aléatoires de la distribution gaussienne (ou normale) :

$$p_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2/2) \tag{II.8}$$

La fonction de distribution gaussienne n'accepte pas une inversion analytique afin de générer des nombres aléatoires *(Salvat et al. 2001)*. On a donc recours à la génération de deux variables aléatoires indépendantes x_1 et x_2 suivant les lois gaussiennes centrées et réduites (c'est-à-dire de moyenne nulle et de variance 1), et qui sont données par

$$x_1 = \sqrt{-2\ln\xi_1}\cos(2\pi\xi_2), \tag{II.9}$$

$$x_2 = \sqrt{-2\ln\xi_1}\sin(2\pi\xi_2), \tag{II.10}$$

où ξ_1 et ξ_2 sont deux nombres aléatoires indépendants tous deux distribués uniformément dans l'intervalle [0,1]. Cette procédure est connue sous le nom de « méthode Box-Muller ». Elle a l'avantage d'être précise et facile à utiliser *(Lapeyre et al. 1998 ; Salvat et al. 2001).*

C - Les variables aléatoires de distribution de Poisson

La distribution de Poisson est une autre distribution importante en simulation Monte Carlo. Cette distribution est définie par la densité de probabilité suivante *(Dapor 2003 P 73 ; Salvat et al. 2001)*

$$P_{\chi}(x) = \frac{1}{\lambda}\exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right), \tag{II.11}$$

Où λ est une constante. Un nombre aléatoire variable χ défini dans l'intervalle $[0,\infty]$ où la densité de probabilité est la distribution de Poisson, obtenue par la solution de l'équation

$$\mu = \int_0^{\chi} \frac{1}{\lambda}\exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right)dx\,. \tag{II.12}$$

II.3. Modélisation du transport des particules par la méthode Monte Carlo

Quand l'électron pénètre dans le solide il suit pendant un court intervalle de temps une trajectoire déterministe, éventuellement dans un champ de force. Le mouvement de l'électron est soudainement interrompu par une collision qui fait passer sa vitesse $\vec{v}$ à une valeur aléatoire $\vec{v'}$ et ainsi de suite jusqu'à sa thermalisation dans le solide. De plus, la trajectoire (direction) d'une particule et les pertes d'énergie lors des collisions inélastiques révèlent également un caractère fortement aléatoire. En signalant qu'un électron d'énergie 10 *keV* peut subir un millier de collisions *(cf Figure 2.1),* le caractère aléatoire de tous ces différents paramètres de collision fait recours aux méthodes MC *(Chibani 1994 ; Nougier 1987 ; Valkealahti and Nieminen 1983).*

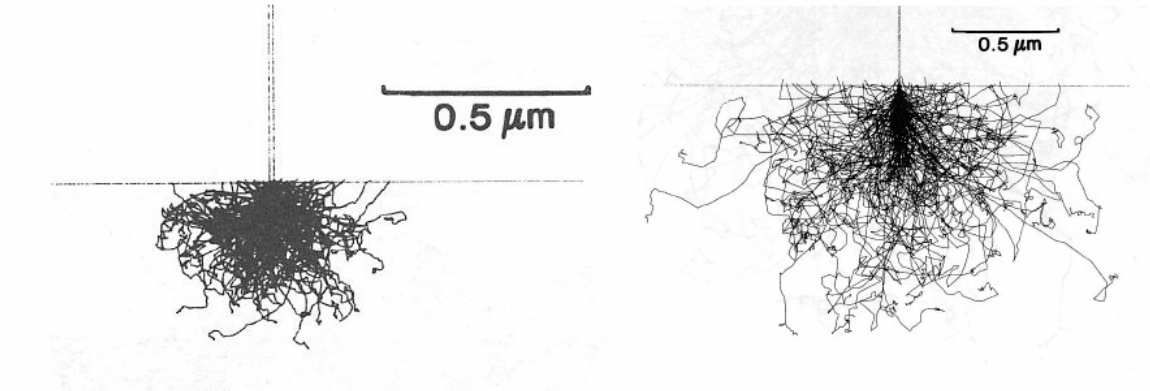

Figure 2.1 : Schéma illustratif des trajectoires aléatoires des électrons dans le Fe, à 10 keV (à gauche) et 20 keV (à droite). (Goldstein et al. 2003)

II.3.1. Description de la méthode Monte Carlo pour le transport des particules

Dans la littérature on trouve plusieurs codes de simulations MC traitant des problèmes de transport et de diffusion des particules chargées ou non chargées dans les matériaux, où on peut citer : Pénétration et la perte d'énergie des positrons et des électrons *(PENELOPE : Penetration and Energy Loss of Positrons and Electrons)*, le code MC GEANT, Le code MC à basse énergie *(LEEPS : low energy Monte Carlo code),* Le code MC pour N particules *(MCNPX : MC N Particules transport code system for multiparticule and Hight energy)*, le code MC EGS5 et enfin le code MC pour le transport des électrons et photons (EGSnmr : *MC simulation of électron and photon transport) (Hirayama et al 2005; Jamil et al. 2008 ; Kawrakow 2003, 2006 ; Mangiarotti et al. 2008 ; Mazurier 1999 ; Salvat et al 2002 ; Zhenyu and Hankai 1988).*

Dans cette partie nous allons donner une description détaillée de la méthode MC de transport des électrons dans les solides qui sera utilisée dans le présent travail. Dans notre simulation, on considère que l'incidence du faisceau d'électron sur la cible est oblique et on prend l'incidence perpendiculaire (normale) comme cas particulier. Et l'axe *Z* est pris suivant la direction des électrons incidents.

Comme mentionné plus haut (section I.3), les processus de diffusions élastiques et inélastiques dominent aux énergies inférieures à 50 *keV*. *Alors, t*ous abord, on rappelle que dans notre travail, la simulation MC utilise, la section efficace élastique écrantée de Rutherford pour simuler les collisions élastiques, et la fonction de Gryzinski pour simuler les collisions inélastiques. La présente méthode MC associe chaque nombre aléatoire aux cinq événements aléatoires appartenant à l'intervalle [0,1] et qui sont *(cf Figure 2.2)*:

(i) la distance entre deux chocs successifs notée "S".

(ii) la probabilité du type de collision.

(iii) l'angle de diffusion après chaque choc élastique "θ".

(iv) la perte d'énergie après chaque choc inélastique notée X .

(v) l'angle azimutal "φ" après chaque collision.

Le nombre aléatoire doit être tiré de l'intervalle [0,1] selon une distribution uniforme, pour parcourir tous les cas possibles. Le nombre d'histoires doit être grand

pour avoir une meilleure moyenne statistique. Dans la méthode Monte Carlo utilisée dans notre travail, les événements aléatoires sont associés aux nombres aléatoires comme suit *(Adesida et al. 1979; Bouarissa et al. 2002; Dapor 2003, Valkealahti and Nieminen 1983)*

1. La distance parcourue par l'électron sans subir une collision est supposée suivre une loi type Poisson, selon laquelle *S* est donnée par

$$S = -\lambda_T . \ln(R(5)), \tag{II.14}$$

Où R(5) est un nombre aléatoire appartenant à l'intervalle [0,1].

2. Soient $\lambda_{el}, \lambda_c, \lambda_v$ *et* λ_T les libres parcours moyens respectivement : élastique, inélastique du cœur, inélastique de valence et totale, où λ_T est donné par

$$\lambda_T = \left(1/\lambda_{el} + 1/\lambda_c + 1/\lambda_v\right)^{-1} \tag{II.15}$$

La probabilité pour que le type de collision soit élastique ou inélastique (soit avec les électrons du cœur ou de valence) est un nombre aléatoire uniforme appartenant à l'intervalle [0,1], que l'on notera $R(1)$. Il est à noter que les libres parcours moyens élastiques sont obtenus à partir de la section efficace élastique écrantée de Rutherford (I.22) alors que les libres parcours moyens inélastiques du cœur et de valence sont obtenus à partir de la section efficace inélastique de Gryzinski (I.30).

Posons $P_1 = \dfrac{1/\lambda_{el}}{1/\lambda_T}$ et $P_2 = \dfrac{1/\lambda_{el} + 1/\lambda_c}{1/\lambda_T}$

Si $R(1) \le P_1$: la collision est élastique.

Si $P_1 < R(1) \le P_2$: la collision est inélastique avec les électrons de cœur

Si $P_2 < R(1) \le 1$: la collision est inélastique avec les électrons de valence.

3. Pour calculer l'angle de diffusion θ après chaque collision élastique, nous avons le nombre aléatoire $R(2) \in [0,1]$ qui est exprimé par la relation suivante

$$R(2) = \frac{\int_0^{\theta} \dfrac{d\sigma_{el}(\theta)}{d\Omega} d\Omega}{\sigma_{el}}, \tag{II.16}$$

où $\dfrac{d\sigma_{el}(\theta)}{d\Omega}$ est la section efficace différentielle.

En substituant l'expression de la section efficace écrantée de Rutherford (I.22) dans l'équation (II.16), l'angle de diffusion sera donné par la formule

$$\theta = \arccos\left(\frac{1 + B_N - R(2) - 2.R(2).B_N}{1 + B_N - R(2)}\right) \tag{II.17}$$

4. La perte d'énergie X est calculée pour chaque événement inélastique à partir de la relation (II.18) qui exprime $R(3)$ en fonction X

$$R(3) = \frac{\int_X^E \frac{d\sigma_{ine}(\Delta E)}{d(\Delta E)} d(\Delta E)}{\sigma_{ine}}, \tag{II.18}$$

Où $R(3)$ est un nombre aléatoire appartenant à l'intervalle [0,1].

L'angle de diffusion est alors donné par

$$\theta = \arccos\left((X / E)^{1/2}\right). \tag{II.19}$$

5. La diffusion autour de la direction du faisceau incident est symétrique. En effet, l'angle "φ" est supposé uniforme et appartenant à l'intervalle [0,2π]. Nous pouvons donc écrire

$$R(4) = \varphi / 2\pi, \tag{II.20}$$

Où $R(4)$ est un nombre aléatoire appartenant à l'intervalle [0,1].

φ est alors calculé à partir de la relation

$$\varphi = R(4).(2\pi). \tag{II.21}$$

L'histoire des électrons dans les solides par la méthode Monte Carlo suit les étapes suivantes :

1- Génération de nombres aléatoires *rdom* qui détermine le premier parcours (S_1) de l'électron avant la première collision. Ce parcours est déterminé selon des formules déterministes correspondant aux lois de la mécanique classique.

2- Un nombre aléatoire $R(1)$ doit être généré pour déterminer le type de collision parmi les trois types : (i) Collision élastique, (ii) collision inélastique de cœur (iii) inélastique de valence.

3- Une fois la collision est sélectionnée, La particule projectile va diffuser par un angle θ , dépendant du type de collision, et un angle φ , qui est supposé uniforme. Par conséquent, si la collision est élastique, on génère les nombres aléatoires $R(2)$ afin de calculer l'angle de diffusion θ. Sinon si la collision est inélastique alors on génère un nombre $R(3)$ pour évaluer la perte d'énergie et on calcule θ .Puis la génération de nombre aléatoire $R(4)$ pour le calcul de l'angle azimutale φ pour les collisions élastiques

et inélastiques. Et enfin la génération du nombre aléatoire $R(5)$ pour l'évaluation du deuxième parcours S_2.

Ces trois étapes constituent l'histoire du schéma de Monte-Carlo. Dans nos calculs, cette histoire se répète 10^4 à l'intérieur du solide avec de nouvelles valeurs décrites par des nombres aléatoires, et les résultats finaux sont obtenus par moyennage.

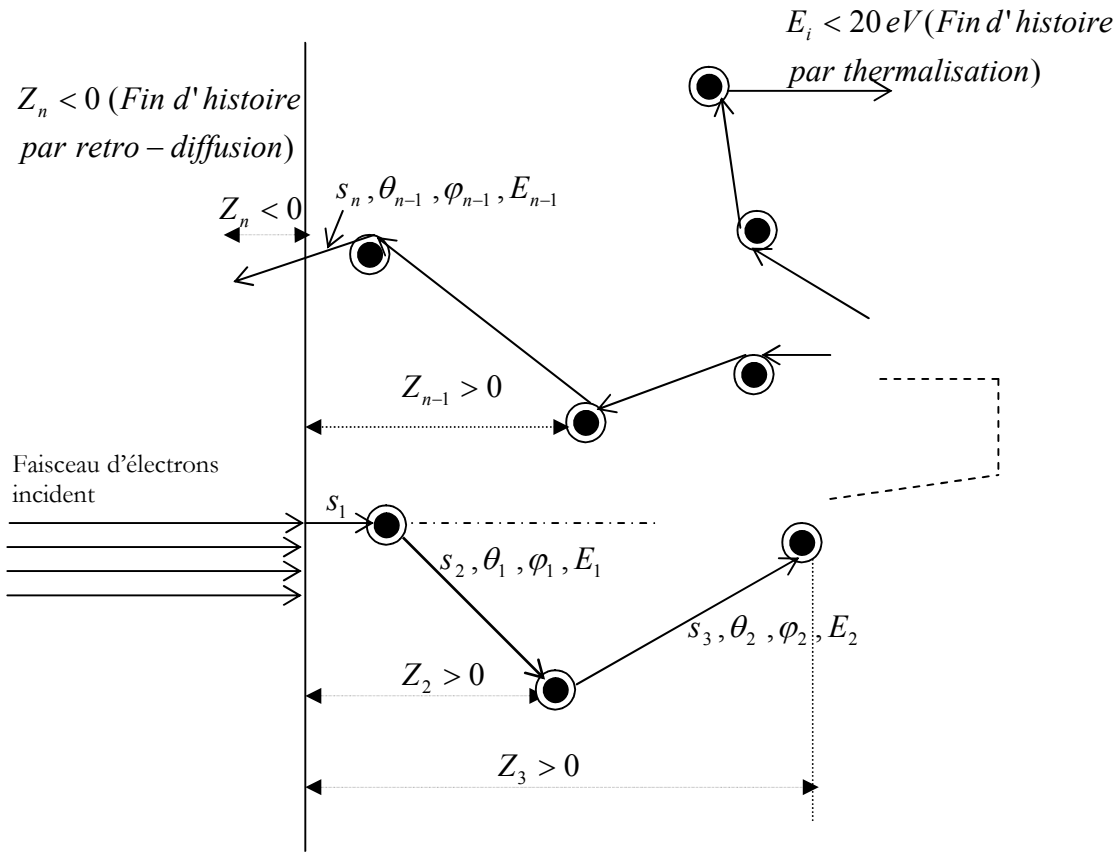

Figure 2.2 : Schéma illustrant les différents paramètres aléatoires manifestants lors de la pénétration des électrons incidents dans la matière.

Dans notre simulation, la fin de ces histoires est déterminée lorsque l'un des deux critères suivants est réalisé :

1- l'énergie de l'électron dans les solides soit inférieure de 20 eV : en effet le critère d'arrêt sur l'énergie $E_{arret} = 20\,eV$ est justifié par le fait que l'électron va parcourir une

profondeur de pénétration moyenne variant entre 1 Å et 2 Å pour une énergie allant de 100 *eV* à 20 *eV*. C'est la même condition d'arrêt utilisée par d'autres simulations (*Valkealahti and Nieminen 1983 ; Adesida et al 1980).*

2- $Z < 0$, où Z est la distance normale séparant la particule projectile de la surface délimitant le cristal. Cela veut dire que la particule rétrodiffusée est à l'extérieur du solide.

Dans la méthode Monte Carlo, le coefficient de rétrodiffusion *(Bsc : Backscattering coefficient)* est déterminé à partir de

$$Bsc = \frac{Le\,nombre\,des\;particules\;\;retrodiffusées\;(Z<0)}{Le\,nombre\,des\;particules\;\;incidentes} \tag{II.22}$$

alors que la profondeur de pénétration moyenne $Z_{1/2}$ est donnée par

$$Z_{1/2} = \frac{\sum_{i=1}^{N_i} Z_i}{N}, \tag{II.23}$$

où N est le nombre des particules implantées dans le cristal (ont une énergie $E \le E_{arret}$ et une coordonnée $Z > 0$), l'indice i indiquant la particule implantée dans le cristal.

La profondeur de pénétration moyenne $Z_{1/2}$ est la distance moyenne parcourue par la particule incidente avant de perdre totalement son énergie cinétique E au cours de processus inélastiques.

Théoriquement la profondeur de pénétration moyenne peut être représentée selon plusieurs auteurs par la relation suivante :

$$Z_{1/2}(E) = \alpha\, E^n, \tag{II.24}$$

Où $Z_{1/2}$ est en Å, E est *keV*, α et n sont des constantes déterminées expérimentalement *(Valkealahti and Nieminen 1983, 1994).*

II.3.2. Calcul des trajectoires de l'électron

Les méthodes MC se basent sur une modélisation microscopique aboutissant à une simulation en trois dimensions. Les trajectoires des particules sont simulées individuellement à partir d'une série de nombres aléatoires et de sections efficaces chargées de reproduire le phénomène physique. Elle consiste à décomposer la trajectoire

d'une particule en un grand nombre de séquences, chaque séquence comprenant un choc élastique et/ou un choc inélastique avec les électrons de valence et les électrons du cœur.

Une méthode rapide pour l'obtention de la nouvelle direction de parcours de la particule après la diffusion (vecteur unité $\hat{k}_f$) consiste à écrire $\hat{k}_f$ en fonction de la direction avant la diffusion (vecteur unité $\hat{k}_i$) comme suit *(Jensen and Walker 1993)*

$$\hat{k}_f = \cos\theta(1-\cos\varphi)\hat{k}_i + \cos\varphi\,\hat{k}_0 + \sin\varphi\,\hat{k}_0\cdot\hat{k}_i, \tag{II.25}$$

où $\hat{k}_0$ est un vecteur unité lié dans le plan normal au plan (x,y) qui contient $\hat{k}_i$ et sur le cône de semi-angle θ ou sont axe est $\hat{k}_i$. Les vecteurs $\hat{k}_i$, $\hat{k}_0$ et $\hat{k}_i\cdot\hat{k}_0$ peuvent s'écrire en terme d'angle que fait $\hat{k}_i$ avec les axes z *et* x . θ_1 *et* φ_1 : respectivement, l'angle θ et les vecteurs unités $\hat{x}$, $\hat{y}$ *and* $\hat{z}$ le long des axes x, y *and* z

$$\hat{k}_i = \sin\theta_1\cos\varphi_1\hat{x} + \sin\theta_1\sin\varphi_1\hat{y} + \cos\theta_1\hat{z} \tag{II.26}$$

$$\hat{k}_0 = \sin(\theta+\theta_1)\cos\varphi_1\hat{x} + \sin(\theta+\theta_1)\sin\varphi_1\hat{y} + \cos(\theta+\theta_1)\hat{z} \tag{II.27}$$

$$\hat{k}_i\cdot\hat{k}_0 = \sin\theta\sin\varphi_1\,\hat{x} - \sin\theta\cos\varphi_1\hat{y} \tag{II.28}$$

II.3.3. Précision de la méthode Monte Carlo

Considérons n nombres de répétition des variables aléatoires indépendantes $X_1, X_2, \ldots X_n$ ayant des distributions identiques que la variable aléatoire X. Supposons qu'on cherche à calculer une quantité inconnue m. Nous allons tenter de trouver une variable aléatoire X avec $E(X)=m$. Alors pour presque tout ω, on a

$$E(X) = \frac{1}{n}(X_1(\omega)+\ldots+X_n(\omega)). \tag{II.29}$$

Dans la méthode MC, l'utilisation de la limite centrale donne l'évaluation de l'erreur comme suit

$$\varepsilon_n = E(X) - \frac{1}{n}(X_1+X_2+\ldots+X_n). \tag{II.30}$$

On présente souvent l'erreur de la méthode MC soit en donnant l'écart type de ε_n, c'est-à-dire $\sigma_V/\sqrt{n}$ (on postulant que σ_V^2 est la variance de X), soit en donnant un intervalle de confiance à 95% pour les résultats. Ceci signifie que le résultat se trouve avec 95% de chance dans l'intervalle donné (et avec 5% de chance en dehors).

Evidemment, la valeur de 95% peut être remplacée par n'importe quelle autre valeur proche de 1.

L'intervalle de confiance est donnée par

$$\left[m - 1.96\frac{\sigma_V}{\sqrt{n}} \ , m + 1.96\frac{\sigma_V}{\sqrt{n}} \right] \tag{II.31}$$

En fait, nous devons trouver N valeurs d'une variable aléatoire X, en sélectionnant une valeur pour chacune des variables $X_1, X_2, \ldots X_n$ ce qui équivaut à sélectionner n valeurs de X puisque toutes ces variables sont identiquement distribuées.

De l'équation précédente, il apparaît que la moyenne arithmétique de ces valeurs sera approximativement égale à m. Selon toute vraisemblance, l'erreur d'estimation n'excédera pas $1/\sqrt{n}$ et approchera zéro lorsque n est très grand *(Lapeyre et al. 1998 ; Mazurier 199ç ; Rouabahᶜ 2009*). Dans notre simulation MC et en tenant en compte du fait que le nombre d'histoires se répètent (10^4), l'erreur est alors estimée à 10^{-2}.

II.3.4. Efficacité de la méthode Monte Carlo

Afin d'étudier le rendement de la simulation MC, il est d'usage d'utiliser la notion d'efficacité, s'écrivant:

$$E_f = \frac{1}{T \times \sigma_V^2}, \tag{II.32}$$

avec σ_V^2 la variance des estimations de la simulation Monte Carlo et T le temps de calcul (d'exécution).

La méthode MC est d'autant plus efficace que la dispersion σ_V est petite. Mais il est bien évident que la dispersion diminue si le nombre d'épreuves croit, c'est-à-dire si le temps de calcul (d'exécution) T croît. Ceci dit, la méthode Monte Carlo est d'autant plus efficace que T est petit pour σ_V^2 donnée *(Mazurier 1999)*.

II. 4. Conclusion

Compte tenu du comportement aléatoire des électrons dans la matière, la méthode Monte Carlo représente un outil pertinent et très efficace pour l'étude de la diffusion des électrons dans la matière. Cette méthode exige une génération de nombres pseudo-aléatoires uniformes et parfois non uniformément associés à chaque événement de caractère aléatoire. En effet, nul ne peut prédire où, quand et comment va interagir une particule donnée avec les électrons et les noyaux dans la matière. Les informations globales d'interaction sont traduites en terme de sections efficaces, donc de probabilités. Par ailleurs, dans la présente simulation de MC, l'expression de la section efficace écrantée de Rutherford est utilisée pour simuler les collisions élastiques alors que les collisions inélastiques sont décrites via la fonction de Gryzinski.

Chapitre III

Sections efficaces de transport d'électrons

III.1. Introduction

Comme mentionné plus haut, le transport d'électrons de basse énergie dans les solides joue un rôle très important dans plusieurs domaines. En effet, les méthodes de spectroscopie d'électrons Auger *(AES: Auger Electron Spectroscopy)* ou encore de spectroscopie de photoélectron *X (XPS: X-ray Photoélectron Spectroscopy)* ont souvent recours à des expressions analytiques de sections efficaces de transport des électrons (SETE) dans l'intervalle 50-2000 *eV(Jablonski 1995, 1996,1998, 2007; Chaoui and Bouarissa 200 ; Rouabah et al. 2009 ; Rouabah et al. 2009).*

A cet effet, on peut trouver dans la littérature plusieurs travaux théoriques de calcul de SETE : citons par exemple les travaux de *Riley et al. (1975)* dédiés au calcul de SETE pour 24 matériaux dans l'intervalle 1-256 *keV*, et ce en utilisant des fonctions d'onde non relativistes pour décrire les matériaux de nombre atomique $Z < 36$ et des fonctions d'onde relativistes pour les matériaux de nombre atomique $Z > 36$. En se basant sur la section efficace de Mott, *Dapor (1995,1996)* a également calculé les SETE pour des électrons d'énergie comprise entre 500 et 4000 *eV*. Plus récemment, *Mayol et Salvat (1997)* ont calculé des SETE dans le formalisme des ondes partielles de Dirac en introduisant un potentiel écranté obtenu à partir de la densité électronique de *Dirac-Hartree-Fock*. Les résultats obtenus sont considérés comme des résultats précis. Par ailleurs, *Liljequist et Ismail (1990)* ont introduit un facteur de correction à la section efficace écranté de Rutherford afin de calculer le libre parcours moyen de transport et la SETE dans l'intervalle d'énergie 100 à 20 MeV. Plus récemment, *Chaoui et Bouarissa (2002)* ont obtenu les SETE en modifiant la section efficace de Rutherford en introduisant un paramètre d'écrantage dépendant de l'énergie E. Une formulation très simplifiée a été proposée par *Tilinin et al. (1998, 1996)*. Cependant l'exactitude de cette formule,

particulièrement à basse énergie, est plutôt limitée. *Bentabet et Bouarissa (2007)* ont également proposé une nouvelle approximation de la section efficace différentielle élastique. Finalement, une expression analytique améliorée par *Jablonski (1998)* a été proposée afin de fournir des valeurs plus précises de SETE dans la gamme d'énergie 50-2000 *eV*. Très récemment *Jablonski et Powell (2007)* ont proposé un nouvel algorithme amélioré pour le calcul des SETE dans un intervalle d'énergie entre 50 *eV* et 30 *keV*. Les résultats obtenus sont presque confondus avec les résultats précis.

Dans le présent chapitre, et après avoir donné un bref résumé bibliographique sur la section efficace de transport des électrons, nous présenterons notre correction simplifiée de l'expression analytique des SETE proposée par *Jablonski* [PRB 58, 24(1998)]. Cette dernière ayant été essentiellement validée pour des énergies comprises entre 50 *eV* et 2000 *eV* et ce pour tous les éléments du tableau périodique. Cependant, les résultats obtenus restent en général très décalés par rapport aux résultats précis.

III.2. Sections efficaces de transport

La section efficace de transport σ_{tr}, appelée aussi section efficace du vecteur d'onde (momentum transfer cross section décrit la perte fractionnelle due à la diffusion élastique. En effet, soit k le vecteur d'onde après la collision élastique et k' la projection du vecteur d'onde après la collision élastique dans la direction initiale. La perte du vecteur fractionnel s'écrit alors

$$\Delta k = \frac{\left|k - k'\right|}{\left|k\right|}. \tag{III.1}$$

La section efficace de transport est le produit de la perte du vecteur d'onde fractionnel et de la section élastique efficace de collision *(Jablonski and Powell 2000)*, soit

$$\sigma_{tr} = \sigma_{el}\left\langle \Delta k \right\rangle = \sigma_{el} \frac{\int_{4\pi} \Delta k.(d\sigma / d\Omega).d\Omega}{\int_{4\pi} (d\sigma / d\Omega).d\Omega}. \tag{III.2}$$

Cette dernière expression devient

$$\sigma_{tr} = \int_{4\pi} P_l(\cos\theta) \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \tag{III.3}$$

Où θ est l'angle de diffusion et P_l le polynôme de Legendre de premier ordre.

Pour l'ordre $l = 1$ et 2 on peut écrire

$$\sigma_{tr}^{1} = \int_{4\pi} (1 - \cos\theta) \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega, \tag{III.4}$$

$$\sigma_{tr}^{2} = \int_{4\pi} \frac{3}{2} [1 - (\cos\theta)^2] \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega, \tag{III.5}$$

Où σ_{tr}^{1} est la première section efficace de transport ou section efficace de transport et σ_{tr}^{2} la seconde section efficace de transport.

Ces deux expressions sont largement utilisées dans le domaine de transport des électrons *(Chaoui 2006; Dapor 1995,1997; Liljequist 1990; Mayol and Salvat 1997; Reley et al. 1975).*

Le libre parcours moyen de transport (LPMT) est la distance caractéristique du processus de relaxation *(Werner 2001)*. Il est relié à la section efficace élastique de transport par la relation *(Jablonski and Powell 2007)*

$$\lambda_{tr} = \frac{1}{N.\sigma_{tr}}, \tag{III.6}$$

Où N est le nombre d'atome par unité de volume, soit

$$N = \frac{N_A \rho}{A}, \tag{III.7}$$

Avec N_A le nombre d'Avogadro, ρ la densité de masse du matériau et A le numéro atomique. La figure 3.1 montre le comportement des libres parcours moyens d'électron dans le Si, Cu et l'Au, dans la gamme d'énergie entre 10 et 1000 eV où $\lambda_e, \lambda_i, \lambda_{tr}$ *et* R sont respectivement les libres parcours moyens élastique, inélastique, de transport et la distance maximale parcourue *(Werner 2001)*.

Pour les alliages constitués de n éléments, le LPMT est lié aux SETE des atomes constitutifs par la relation

$$\lambda_{tr} = \left(N \sum_{k=1}^{n} x_k \sigma_{tr,k} \right)^{-1}, \tag{III.8}$$

Où x_k est la fraction d'atome de la $k^{ième}$ espèce atomique *(Jablonski and Powell 2007; Jablonski 1998).*

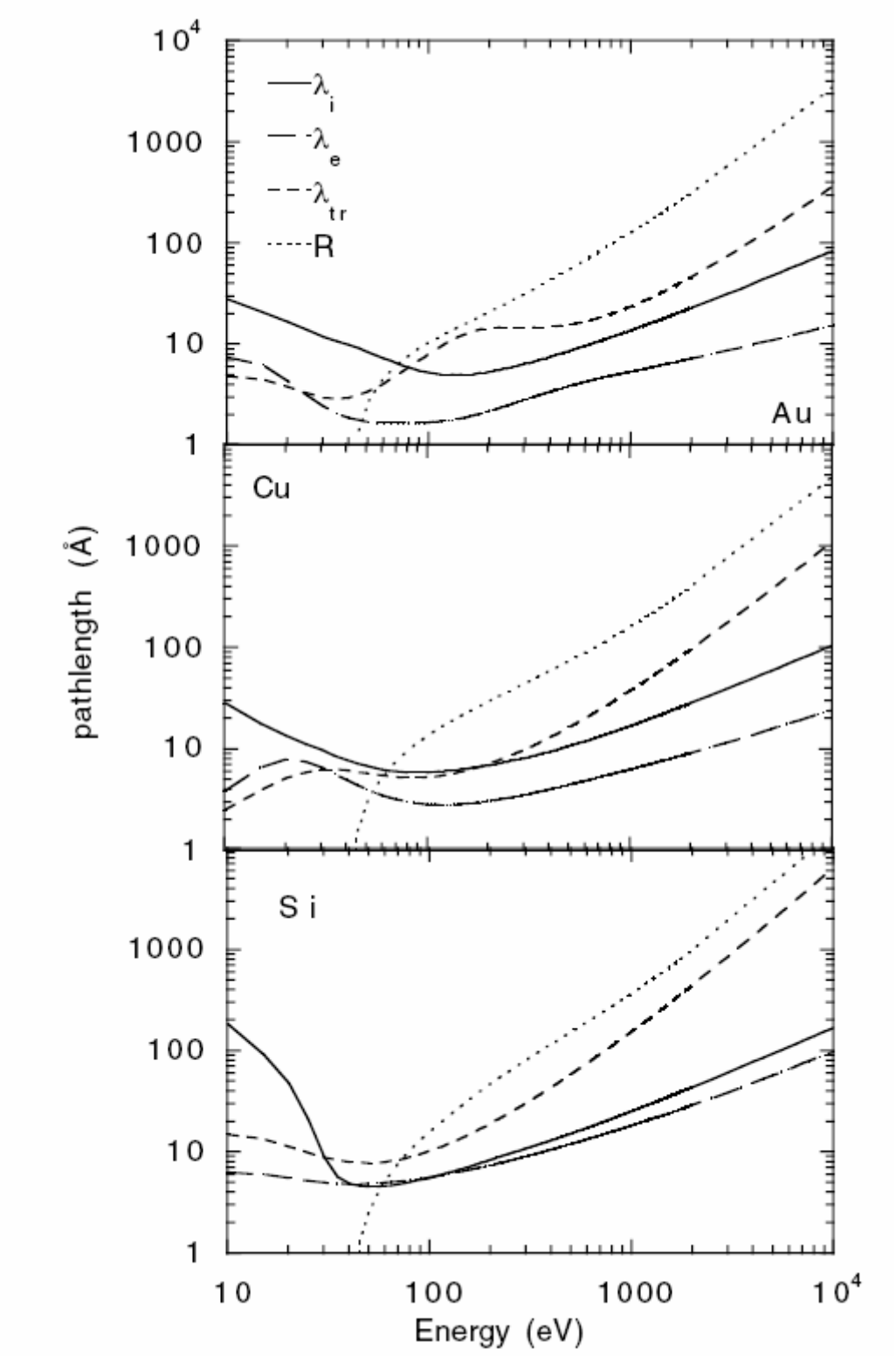

Figure 3.1 : Libres parcours moyens élastique, inélastique et de transport ainsi que la distance maximale de parcours de l'électron (Werner 2001).

III.3. Section efficace analytique dérivée par Jablonski

Jablonski (1998) a dérivé une expression analytique approximative de la SETE. Dans cette dérivation, la SETE est calculée à partir de la première approximation de Born avec un potentiel coulombien écranté.

Cette expression est donnée par

$$\sigma_{tr}^{B} = \frac{32\pi \cdot Z^{2/3} \cdot C_F^4 \cdot a_0^2}{\left(\mu^{\infty}\right)^4} \cdot \frac{1}{\varepsilon_0^2}\left[\ln\left(1+\varepsilon_0\right) - \frac{\varepsilon_0}{1+\varepsilon_0}\right], \tag{III.9}$$

où C_F représente la constante de Thomas-Fermi, soit $C_F = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right) = 0.8853414$, et où l'énergie réduite ε_0 s'écrit sous la forme

$$\varepsilon_0 = \frac{8\,m\,C_F^2\,a_0}{\hbar^2}\frac{E}{(\mu^{\infty})^2 Z^{2/3}} = 0.23044\frac{E}{(\mu^{\infty})^2 Z^{2/3}}, \tag{III.10}$$

avec m : masse de l'électron au repos, a_0 : rayon Bohr et où la constante μ^{∞} a été estimée par *Nigam et al.*

Pour le potentiel de Thomas-Fermi, Nigam et al. (1959) ont trouvé $\mu^{\infty} = 1.12$. Cette valeur a été utilisée dans plusieurs simulations de transport d'électrons pour des énergies concernant la microanalyse par sonde électronique (EPMA : Electron Prob Microanalysis) c'est-à-dire pour des énergies supérieures à 15 *keV*. Plus tard, *Jablonski (1981,1982)* a recommandé une valeur relativement plus grande $\mu^{\infty} = 1.22$. Il a également estimé le seuil d'énergie maximum au-delà duquel le paramètre μ^{∞} devient indépendant de l'énergie via l'inégalité $\frac{2k}{R} \geq 4$ où R représente le paramètre d'écrantage. Par conséquent, l'énergie d'électron devrait dépasser 229.2 *eV* pour le Carbone ou 1277.7 *eV* pour l'Or. Cependant, le seuil d'énergie dépend de l'expression utilisée pour décrire l'écrantage de Thomas-Fermi et le seuil d'énergie peut alors atteindre 5000 *eV* pour l'Or. La comparaison des résultats obtenus par cette expression avec les résultats précis est illustrée sur la *figure 3.2 (Jablonski 1998)*. Cette figure montre que la SETE calculée à partir de l'expression σ_{tr}^{B} présente un décalage par rapport à celle obtenue par la méthode des ondes partielles avec le potentiel de Thomas-Fermi-Dirac.

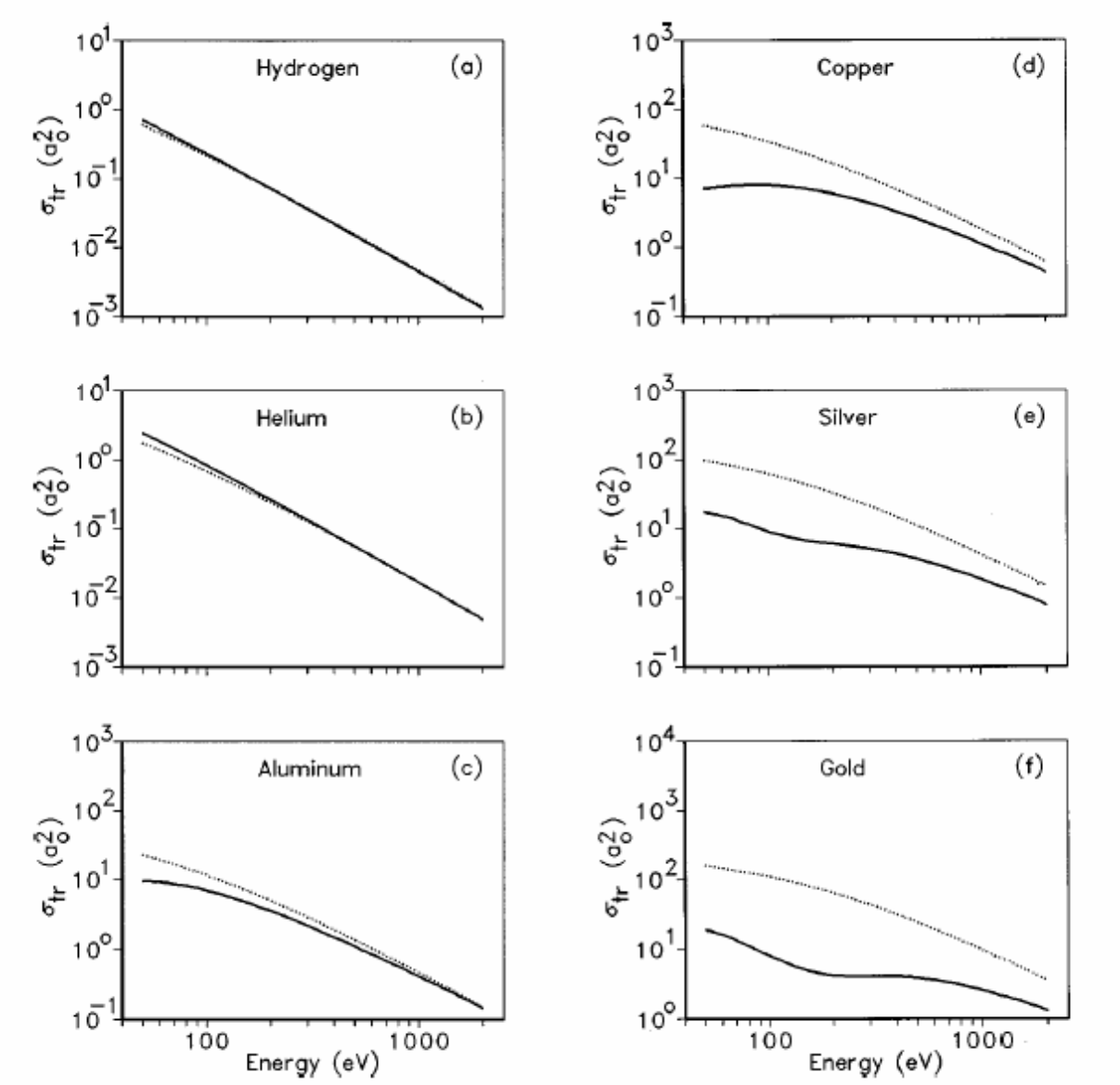

Figure 3.2: Sections efficaces de transport en fonction de l'énergie: la ligne continue représente les valeurs précises, la ligne discontinue représente les valeurs σ_{tr}^{B} *pour: (a) Hydrogène; (b) Hélium; (c) Aluminium; (d) Cuivre; (e) Argent et (d) Or (Jablonski 1998).*

Afin de remédier à ce décalage, *Jablonski (1998)* a introduit une correction à cette expression en utilisant un ajustement par rapport aux résultats précis de la section efficace de transport calculé par *Mayol et Salvat (1997),* en utilisant la méthode des ondes partielles de Dirac. D'où

$$\sigma_{tr} = \sigma_{tr}^{B}\, G(\varepsilon_0)\,. \tag{III.11}$$

La fonction arbitraire $G(\varepsilon_0)$ est élaborée par une bonne description de la déviation entre les SETE calculées à partir du potentiel de Thomas-Fermi-Dirac (TFD) et par σ_{tr}^{B}

$$G(\varepsilon) = \varepsilon_0 \exp\left\{\sum_{i=0}^{4} A_i [\ln(10\varepsilon_0)]^{i/2}\right\}, \qquad \text{(III.12)}$$

où les coefficients A_i $(i = 0,1,2,...,4)$ ont été ajustés pour chaque matériau par rapport aux SETE obtenues à partir du potentiel DHF. Les coefficients pour 96 matériaux ont été listés dans *(Jablonski 1998,2007)*.

III.4. Méthode de calcul et résultats

Dans le présent travail, une correction à la section efficace de transport dérivée par Jablonski est proposée. L'idée de correction est basée sur l'observation des deux graphes *(cf Figure 3.2)* des sections efficaces de transport σ_{tr}^{B} dérivées par Jablonski (1998), et les valeurs précises des sections efficaces σ_{tr} de *Mayol et Salvat (1997)*. Nous avons en effet constaté que plus le nombre atomique Z était important plus l'écart entre eux est croissant, notamment pour l'Or, l'Argent et le Cuivre. Notons cependant que cet écart diminue lorsque l'énergie des électrons augmente. Par ailleurs, il est à noter que les valeurs précises σ_{tr} sont presque toujours plus basses que les valeurs σ_{tr}^{B}. Aussi, en introduisant dans l'expression σ_{tr}^{B} un facteur de correction sous la forme d'une fonction $(f(x) = 1/x)$, il devient possible d'améliorer les valeurs des sections efficaces de transport σ_{tr}^{B} et par conséquent de fournir des valeurs plus précises de SETE. Dans ces conditions, nous avons proposé de remplacer le terme $1/(\mu^{\infty})^4$ de l'équation (III.9) par le terme correcteur $1/(\mu^{\infty})^k$ dans lequel le facteur k dépend du nombre atomique Z. Par conséquent, l'équation (III.9) devient

$$\sigma_{tr}^{C} = \frac{32\pi \cdot Z^{2/3} \cdot C_F^4 \cdot a_0^2}{\left(\mu^{\infty}\right)^k} \cdot \frac{1}{\varepsilon_0^2}\left[\ln\left(1+\varepsilon_0\right) - \frac{\varepsilon_0}{1+\varepsilon_0}\right], \qquad \text{(III.13)}$$

où σ_{tr}^{C} représente la section efficace de transport corrigée.

Le paramètre k a été ajusté à partir des valeurs précises des SETE de *Mayol et Salvat (1997)* pour tous les éléments de nombre atomique se situant entre 1 à 96. L'expression ainsi trouvée par interpolation se met sous la forme

$$k = 2.03002 \times 10^{-6} \times Z^3 - 5.0665 \times 10^{-4} \times Z^2 + 0.10296 \times Z + 2.93033. \qquad \text{(III.14)}$$

En utilisant les deux expressions (III.13) et (III.14), nous avons alors calculé les sections efficaces de transport σ_{tr}^{C} pour six éléments (H, Al, Cu, Ag, Nb et Au) dans l'intervalle d'énergie 50-2000 *eV*. Les résultats obtenus sont comparés ci-dessous aux SETE σ_{tr}^{B} obtenues à partir de l'expression (III.9) et dérivées par *Jablonski (1998)* et aux SETE σ_{tr}^{M-S} obtenues par *Mayol et Salvat (1997).*

E*(eV)*	H (Z=1)			Al (Z=13)		
	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}
50	0.20240	0.1670	-	6.1949	6.430	-
250	0.01710	0.01410	0.01767	1.0215	1.060	0.8048
500	0.00533	0.00440	0.005168	0.3763	0.391	0.3265
750	0.00265	0.00218	-	0.2013	0.2090	-
1000	0.00160	0.00132	0.001494	0.1273	0.1320	0.1205
1250	0.00108	0.00089	0.000999	0.0886	0.09196	0.08593
1500	0.00078	0.00065	0.0007188	0.0656	0.0681	0.06483
1750	0.00059	0.00049	0.0005437	0.0508	0.0527	0.05089
2000	0.00047	0.00039	0.0004267	0.0406	0.0421	0.04115

Table 3.1 : Sections efficaces de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour Hydrogène (H) et l'Aluminium (Al).

E(eV)	Cu (Z=29)			Ag (Z=47)		
	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}
50	11.96	16.244	-	15.259	26.953	-
250	2.6624	3.616	1.351	4.11	7.261	1.661
500	1.071	1.4548	0.7411	1.762	3.112	1.056
750	0.596	0.8095	-	1.0097	1.784	-
1000	0.386	0.5241	0.3258	0.6650	1.175	0.5262
1250	0.2728	0.3706	0.2428	0.4760	0.8410	0.4057
1500	0.204	0.2777	0.1895	0.3598	0.6360	0.3247
1750	0.1596	0.217	0.1528	0.2830	0.4997	0.2673
2000	0.1285	0.1746	0.1265	0.2290	0.4050	0.2249

Table 3.2 : Sections efficaces de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour le Cuivre (Cu) et l'Argent (Ag).

E(eV)	Nb (Z=60)			Au (Z=79)		
	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}
50	16.385	34.349	-	16.855	44.68	-
250	4.863	10.195	1.77	5.573	14.78	0.95
500	2.159	4.526	1.25	2.5803	6.84	0.99
750	1.258	2.637	-	1.5338	4.07	-
1000	0.837	1.7547	0.663	1.0331	2.74	0.69
1250	0.6030	1.2643	0.52	0.7506	1.98	0.58
1500	0.4582	0.9606	0.42	0.5738	1.52	0.49
1750	0.3616	0.758	0.35	0.4551	1.21	0.42
2000	0.2937	0.6157	0.29	0.371	0.98	0.36

Table 3.3 : Sections efficaces de transport [Å^2] en fonction de l'énergie de l'électron pour le Niobium (Nb) et l'Or (Au).

A partir des tables 3.1-3.3, on constate que les résultats obtenus sont meilleurs que ceux de *Jablonski (1998)* en les comparants à ceux de *Mayol et Salvat (1997)*, particulièrement quand l'énergie de l'électron augmente.

Pour mettre en exergue clairement le bon accord de nos résultats par rapport aux résultats de *Mayol et Salvat (1997),* nous avons reporté dans les tables 3.5 et 3.6 les erreurs relatives $D = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{C}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ de nos résultats par rapport a ceux de *Mayol et Salvat (1997)* ainsi que les erreurs relatives $D' = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{B}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ de *Jablonski (1998)* par rapport a ceux de *Mayol et Salvat (1997)*. On observe que l'erreur relative *D* apparaît petite (s'étendant de 0.032 à 4.62 de l'Hydrogène à l'Or), tandis que l'erreur relative D' apparaît plus grande à savoir de 0.202 à 14,56 (de l'Hydrogène à l'Or). On constate également que notre correction présente une validité remarquable particulièrement dans le calcul des SETE pour les éléments de nombre atomique plus élevé.

	H(Z=1)		*Al(Z=13)*		*Cu(Z=29)*	
E(*eV*)	*D*	*D'*	*D*	*D'*	*D*	*D'*
250	0.03	0.20	0.27	0.32	0.97	1.68
500	0.03	0.15	0.15	0.20	0.45	0.96
1000	0.07	0.12	0.06	0.09	0.18	0.61
1250	0.08	0.11	0.03	0.07	0.12	0.53
1500	0.08	0.09	0.01	0.05	0.08	0.47
1750	0.08	0.10	≈0	0.04	0.05	0.42
2000	0.10	0.09	0.01	0.02	0.02	0.38

Table 3.5 : Déviations relatives $D = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{C}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *et* $D' = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{B}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *en fonction de l'énergie.*

	Ag(Z=47)		*Nb(Z=60)*		*Au(Z=79)*	
E(*eV*)	*D*	*D'*	*D*	*D'*	*D*	*D'*
250	1.47	3.37	1.75	4.76	4.62	14.56
500	0.67	1.95	0.73	2.62	1.61	5.90
1000	0.26	1.23	0.26	1.65	0.49	2.97
1250	0.17	1.07	0.16	1.43	0.29	2.41
1500	0.11	0.96	0.09	1.28	0.16	2.10
1750	0.06	0.87	0.03	1.17	0.095	1.88
2000	0.02	0.80	0.01	1.12	0.028	1.72

Table 3.6 : Déviations relatives $D = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{C}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *et* $D' = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{B}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *en fonction de l'énergie.*

Finalement pour illustrer le bon accord de nos résultats avec les résultats de *Mayol et Salvat (1997)* nous avons reporté sur la *figure 3.3* la déviation entre nos résultats avec ceux de *Mayol et Salvat (1997)* pour des éléments particuliers, à savoir l'Al (matériau léger) et l'Or (matériau lourd). On peut constater que plus l'énergie de l'électron augmente plus la déviation relative devient petite.

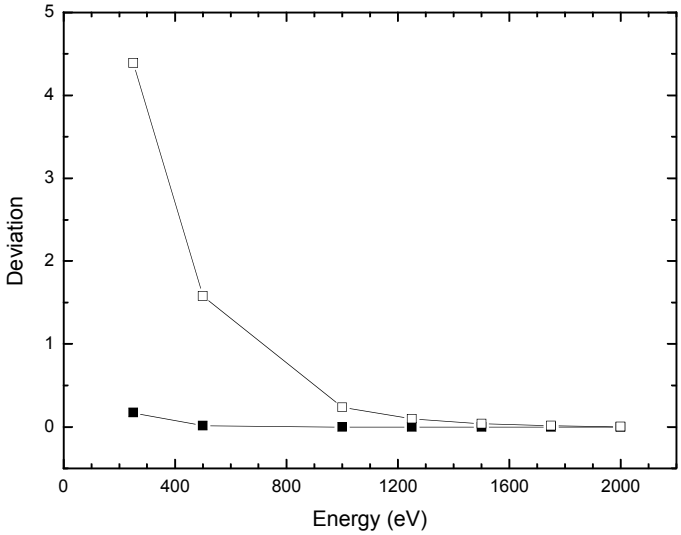

Figure 3.3 : Déviation relative $D = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{C}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *en fonction de l'énergie pour Al (carrés pleins) et Au (carrés vides).*

Dans *la table 3.7,* nous avons comparé nos résultats à ceux de *Dapor (1996)* obtenus par la méthode des ondes partielles (σ_{tr}^{Dapor}) et à ceux de *Chaoui and Bouarissa (2002)* obtenus à partir d'une correction portée sur la section efficace de Rutherford (σ_{tr}^{C-B}), et ce dans la gamme d'énergies 500-4000 *eV*. On constate clairement que nos résultats sont en bon accord avec ceux de *Dapor* et meilleurs que ceux de *Chaoui et Bouarissa.*

E(eV)	Al (Z=13)			Au (Z=79)		
	σ_{tr}^{c}	$\sigma_{tr}^{C_B}$	σ_{tr}^{Dapor}	σ_{tr}^{c}	$\sigma_{tr}^{C_B}$	σ_{tr}^{Dapor}
500	0.3763	0.320	0.306	2.580	1.64	1.01
1000	0.1273	0.110	0.115	1.033	0.810	0.709
1500	0.0656	0.0568	0.0623	0.574	0.478	0.489
2000	0.0406	0.0351	0.0397	0.371	0.318	0.359
2500	0.0278	0.0240	0.0278	0.262	0.229	0.278
3000	0.0204	0.0170	0.0206	0.196	0.174	0.223
3500	0.0156	0.0135	0.0160	0.153	0.137	0.183
4000	0.0124	0.0107	0.0128	0.123	0.112	0.155

Table 3.7 : Sections efficaces de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour Al et Au.

III.5. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté une correction simplifiée de l'expression analytique de la section efficace de transport dérivée par Jablonski. En se basant sur cette correction, nous avons ainsi calculé la section efficace de transport pour six éléments particuliers, repartis le long du tableau périodique, et ce pour des énergies d'électrons allant de 50 à 4000 *eV*. Nous avons ainsi constaté que nos résultats étaient en bon accord avec les résultats précis de *Mayol et Salvat (1997)* et ceux de *Dapor (1996)* et même meilleurs que ceux de *Jablonski (1998)* et de *Chaoui et Bouarissa (2002)*. En outre, notre correction simple présente une grande efficacité et une validité remarquable de calcul des sections efficaces de transport en particulièrement quand l'énergie de l'électron incident augmente.

Chapitre IV

Etude de transport des électrons dans les solides

IV.1. Introduction

Quand le faisceau d'électron pénètre dans le solide massif, une partie sera absorbée par ce dernier, et l'autre sera retrodiffusé vers l'extérieur. Dans le cas ou le solide est en couches minces il y aura aussi une partie qui sera transmise. Les électrons ne sont pas retrodiffusé sans dissipation d'énergie, en raison de leurs pénétrations en surface et la perte de petite quantité d'énergie par ionisation, les électrons d'excitation et les émissions de plasmons *(Dapor 2003 P2)*.

L'effet de la retrodiffusion élastique des électrons joue un rôle très important dans plusieurs techniques expérimentales. Ce phénomène est en effet fondamental dans la diffraction des électrons à basse énergie *(LEED : Low energy electron diffraction) (Dubus 2000)*. Il est aussi utilisé pour obtenir des images des électrons retrodiffusé dans la microscopie électronique, et pour détecté les marques d'enregistrement en lithographie de faisceau d'électron *(Yusuda et al. 1995 ; Messina et al. 1994 ; Tilk et al. 1999)*.

Le calcul du coefficient de retrodiffusion a été entrepris par plusieurs chercheurs utilisant différente méthodes : soit par la simulation de la trajectoire de l'électron par la méthode de MC, soit par des calculs a partir des formulations analytique ou semi-empirique de la théorie de transport.

Une description succincte de la théorie de la retrodiffusion est illustrée dans le début de ce chapitre. Ensuite nous allons présenter en premier lieu notre nouvelle correction de la section efficace de transport dérivée par *Jablonski (1998)*, permettent d'obtenir des résultats plus précis. Nous allons calculer par la suite le coefficient de la retrodiffusion en utilisant une combinaison entre la théorie de *Vikanek-Urbasek (1991)* et la méthode de MC dans la gamme d'énergie 0.5-4 *keV*, et ce en se basant sur les valeurs obtenues par la nouvelle correction de la section efficace de transport.

IV.2. Théorie de la retrodiffusion

Plusieurs modèles et approches ont été proposé pour le calcul de la fraction d'électron retrodiffusé. La méthode de MC que nous avons détaillé dans le deuxième chapitre est considérée parmi les méthodes les plus utilisées dans ce calcul. Néanmoins, ils existent d'autres méthodes qui se basent sur des formulations semi-empirique et analytique dont on va cité quelques une.

IV.2.1. L'approche d'Everhart

Everhart a proposé en 1960, une expression semi-empirique du coefficient de retrodiffusion de l'électron a une incidence normale. En se basant sur le modèle d'une seul diffusion et en supposant que le flux des particules retrodiffusés résulte principalement des diffusions par petits paramètres d'impacts. Cette expression est donnée par :

$$Bsc = \frac{a - 1 + 0.5^{a}}{a + 1}, \tag{IV.1}$$

Ou $a = 0.045\, Z$ avec Z le nombre atomique de la cible.

Cette expression a été évaluée à partir de la section efficace de Rutherford combinée avec la relation de la perte d'énergie de Thomson-Whiddington $(E_0^2 - E^2 = k\,\rho\, z)$ où E est l'énergie probable dans une profondeur **z**, ρ est la densité de la cible et k est une constante. Cependant elle est valide seulement pour des énergies supérieures à 10 keV et pour des éléments de nombre atomique inférieur à $(\approx 40 - 45)$ *(Adesida et al. 1980 ; Dapor 2003 P53 ; Everhart 1960 ; 1990[b] ; Tilinin et al. 1996)*

IV.2.2. L'approche d'Archard

Archard (1961) a proposé l'expression,

$$Bsc = \frac{7Z - 80}{14Z - 80}, \tag{IV.2}$$

Cette expression est déduite en supposant que la particule parcours un chemin suivant une ligne droite en profondeur jusqu'à la première diffusion, puis elle suit un mouvement de probabilité égale dans toutes les directions c'est à dire elle fait des

diffusion multiples à des angles arbitraires. L'expression *(IV.2)* donne des résultats précis seulement pour les éléments lourds *(Archard 1961 ; Dapor[b] 1990; Tilinin et al. 1996)*.

IV.2.3. Le modèle de Kanaya et Okayama

En se basant sur le modèle sphérique *Kanaya et Okayama* (*1972)* ont proposé l'expression de retrodiffusion suivante,

$$Bsc = \frac{1}{4\pi}\int_0^{\theta_0} 2\pi \sin\theta \, d\theta = \frac{1}{2}(1-\cos\theta_0), \tag{IV.3}$$

Avec,

$$\tan\theta_0 = \frac{2.2\gamma(1+\gamma)}{1+2\gamma-0.21\gamma^2}, \tag{IV.4}$$

où γ est un paramètre lié au nombre atomique de la cible selon l'équation,

$$\gamma = \frac{2.97}{5\times 2^{5/3}} Z^{2/3} = 0.187\ Z^{2/3}, \tag{IV.5}$$

Cette approche a donnée des résultats en bon accord avec plusieurs études théoriques et expérimentales.

IV.2.4. Le modèle de Dapor

En se basant sur le modèle sphérique de la pénétration des électron dans le solide, *Dapor[b]* (*1990*) a dérivé l'expression du facteur de retrodiffusion qui est exprimée comme suit :

$$Bsc(Z,E_0) = 1 - \frac{1+3p(E_0)\sqrt{Z-1}}{\left[1+p(E_0)\sqrt{Z-1}\right]^3}, \tag{IV.6}$$

Avec E_0 est l'énergie incidente primaire et $p(E_0)$ est un paramètre empirique déterminé à partir d'un ajustement linéaire par rapport a des données expérimentales *(Dapor[b] 1990, 1991)*.

$$\text{Où } \begin{cases} p(E_0) = 0.0811 + 0.0037E_0, & pour\ 2 \le E_0 < 6.7\ keV \\ p(E_0) = 0.1051 + 1.078\times 10^{-4} E_0, & pour\ 6.7 \le E_0 \le 45\ keV \end{cases} \tag{IV.7}$$

Bien que l'expression (IV.7) soit valide dans l'intervalle d'énergie $2 \le E_0 \le 45keV$, mais elle est recommandée particulièrement pour des énergies comprises $6.7 < E_0 < 10\ keV$.

IV.2.5. Le modèle de Tilinin

Tilinin a appliqué l'équation cinétique de type Boltzmann pour l'approximation du transport dans le cas d'une incidence normale afin de déterminer le coefficient de retrodiffusion en fonction du paramètre de diffusion σ écrit sous forme du rapport,

$$\sigma = R_0 / \lambda_{tr} , \qquad \text{(IV.8)}$$

où R_0 *et* λ_{tr} sont respectivement, la distance maximale de parcours (expression (I.36)) et le libre parcours moyen de transport *(cf figure 4.1)*.

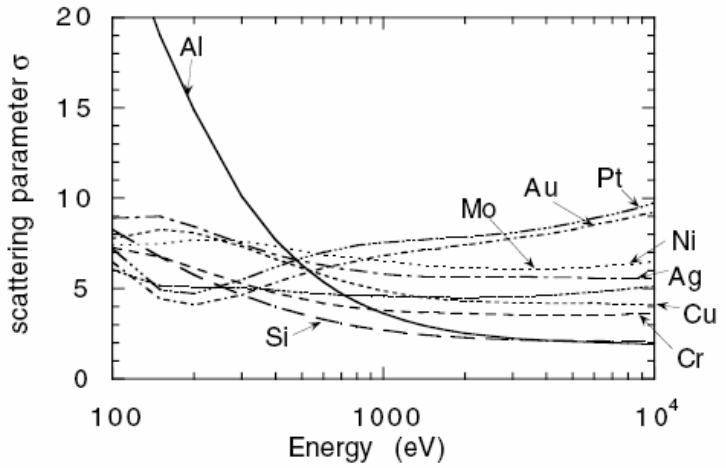

Figure 4.1 : Paramètre de diffusion σ *de neuf éléments en fonction de l'énergie de l'électron (Werner 2001).*

Tilinin a supposé que la particule primaire subit plusieurs diffusions à des angles larges avant d'être de retrodiffusée vers l'extérieur ou absorbée par le matériau, et que les électrons secondaires sont négligés. Alors le coefficient de retrodiffusion s'écrit comme suit *Tilinin et al. (1996)*,

$$r = \frac{(\sigma+1)^{1/2} - 1}{(\sigma+1)^{1/2} + h}, \qquad \text{(IV.9)}$$

Avec h=1.908

IV.2.6. Théories de Vicanek et Urbassek

Dans la théorie de *Vikanek et Urbassek (1991)*, l'expression du coefficient de retrodiffusion est donnée par,

$$\eta(\theta) = \left(1 + a_1 \frac{\mu_0}{\nu^{\frac{1}{2}}} + a_2 \frac{\mu_0^2}{\nu} + a_3 \frac{\mu_0^3}{\nu^{\frac{3}{2}}} + a_4 \frac{\mu_0^4}{\nu^2} \right)^{\frac{-1}{2}}, \qquad \text{(IV.10)}$$

avec: $\mu_0 = \cos(\theta)$ ou θ est l'angle de diffusion, $a_1 = \frac{6}{\sqrt{\pi}} \approx 3.39$,

$a_2 = \frac{27}{\sqrt{\pi}} \approx 8.59$, $a_3 = \frac{27}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{4}{\pi} - 1 \right] \approx 4.16$ et $a_4 = \left[\frac{3}{2} - \sqrt{2} \right]^{-2} \approx 135.9$

Dans l'expression (IV.10), ν est le nombre moyen de collisions aux grands angles *(mean number of wide angle collisions)* définis par,

$$\nu = NR\sigma_{tr}, \qquad \text{(IV.11)}$$

Ou N est le nombre d'atome par unité de volume et σ_{tr} est la section efficace de transport. Cette théorie a été largement utilisée dans l'étude de la retrodiffusion des électrons dans la matière *(Bentabet and Bouarissa 2007 ; Dapor and Miotello 1998 ; Chaoui and Bouarissa 2004 ; Rouabah[b] et al 2009 ; Rouabah[c] et al. 2009 ; Vicanek and Urbassek 1991*).

IV.3. Nouvelle correction de la section efficace de transport dérivée par Jablonski :

Comme déjà mentionné au troisième chapitre, *Jablonski (1998)* a dérivé une expression analytique approximative de la section efficace de transport *(III.9)*, s'écrivant comme suit,

$$\sigma_{tr}^{B} = \frac{32\pi \cdot Z^{2/3} \cdot C_F^4 \cdot a_0^2}{\left(\mu^{\infty}\right)^4} \cdot \frac{1}{\varepsilon_0^2} \left[\ln\left(1 + \varepsilon_0\right) - \frac{\varepsilon_0}{1 + \varepsilon_0} \right],$$

Où C_F : constante de Thomas-Fermi, m : masse d'électron au repos et a_0 : rayon Bohr. L'indice B exprime l'approximation de Bohr de premier ordre. En générale le facteur μ^{∞} dépend de l'énergie. Cependant il a été prouvé qu'il se comporte comme une constante aux énergies suffisamment hautes *(Jablonski 1981, 1982)*. Ainsi *Jablonski (1998)* a trouvé $\mu^{\infty} = 1.22$, d'où il a déduit les valeurs de la section efficace de transport à partir de l'expression *(III.9)*. La comparaison de ces résultats par rapport à ceux de *Mayol et Salvat*

- qui sont considérés comme des résultats précis - présente une déviation considérable pour les matériaux de nombre atomique élevé. Afin d'améliorer cette expression analytique, nous avons proposé (*Rouabah[a] al. 2009)* dans le troisième chapitre, une correction qui réside de remplacer le terme $1/(\mu^{\infty})^4$ de cette expression *(III.9)* par le terme correcteur $1/(\mu^{\infty})^k$, ou le facteur k dépend du nombre atomique Z. Cette correction nous a permis d'avoir des valeurs de la section efficace de transport en bon accord avec celles de *Mayol et Salvat (1997)* et meilleurs que celle de *Jablonski(1998)*.

Ainsi, et dans le but d'améliorer d'avantage les valeurs produites de cette expression nous allons proposer une nouvelle correction. Cette dernière repose aussi sur les mêmes constats expliqués dans la section 3 du chapitre III, relatifs à la comparaison des résultats obtenus par la section efficace dérivée par *Jablonski (1998)* et les résultats précis de *Mayol et Salvat (1997).* Dans cette nouvelle correction on propose que le paramètre μ^{∞} doit être variable et dépend de nombre atomique des éléments du tableau périodique (rangé de 1 a 96), comme suit,

$$\mu^{\infty} = 2.17\times10^{-7}Z^3 - 1.54\times10^{-4}Z^2 + 0.03Z + 0.89 \qquad \text{(IV.12)}$$

IV.3.1. Résultats et discussion :

Dans les *tables 4.1- 4.3* sont présentés les valeurs calculées de la section efficace de transport des électrons pour les six éléments (Hydrogène, Aluminium, Cuivre, Argent, Niobium, et l'Or). Ces valeurs sont obtenues en utilisant les expressions *(III.9*) et (IV.12). Pour mieux comparé les résultats de *Mayol et Salvat (1997)*, *Jablonski (1998)* et *Rouabah[a] et al. (2009)*, nous dressons les tableaux suivants :

Energy	*H (Z = 1)*				*Al (Z = 13)*			
(eV)	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{R}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{R}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}
50	0.227	0.20240	0.1670	-	5.501	6.1949	6.430	-
250	0.0169	0.01710	0.0141	0.01767	0.974	1.0215	1.060	0.8048
500	0.0050	0.00533	0.00440	0.005168	0.366	0.3763	0.391	0.3265
750	0.0025	0.00265	0.00218	-	0.1974	0.2013	0.2090	-
1000	0.0015	0.00160	0.00132	0.001494	0.1255	0.1273	0.1320	0.1205
1250	0.001	0.00108	0.00089	0.000999	0.0876	0.08859	0.0920	0.08593
1500	0.00072	0.00078	0.00065	0.0007188	0.0651	0.0656	0.0681	0.06483
1750	0.000549	0.00059	0.00049	0.0005437	0.0504	0.0508	0.0527	0.05089
2000	0.000431	0.00047	0.00039	0.0004267	0.0404	0.0406	0.0421	0.04115

Table 4.1 : Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour Hydrogène (H) et l'Aluminium (Al).

Energy	*Cu (Z = 29)*				*Ag (Z = 47)*			
(eV)	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{R}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{R}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}
50	5.611	11.96	16.244	-	4.136	15.259	26.953	-
250	1.904	2.6624	3.616	1.351	2.088	4.11	7.261	1.661
500	0.891	1.071	1.4548	0.7411	1.182	1.762	3.112	1.056
750	0.532	0.596	0.8095	-	0.780	1.0097	1.784	-
1000	0.359	0.386	0.5241	0.3258	0.560	0.6650	1.175	0.5262
1250	0.262	0.2728	0.3706	0.2428	0.426	0.4760	0.8410	0.4057
1500	0.200	0.204	0.2777	0.1895	0.3368	0.3598	0.6360	0.3247
1750	0.159	0.1596	0.217	0.1528	0.2743	0.2830	0.4997	0.2673
2000	0.130	0.1285	0.1746	0.1265	0.2285	0.2290	0.4050	0.2249

Table 4.2 : Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour le Cuivre (Cu) et l'Argent (Ag).

Energy	*Nb (Z = 60)*				*Au (Z = 79)*			
(eV)	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{R}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{R}	σ_{tr}^{B}	σ_{tr}^{M-S}
50	3.38	16.39	34.35	-	2.70	16.85	44.68	-
250	2.01	4.86	10.19	1.77	1.86	5.57	14.78	0.95
500	1.26	2.16	4.53	1.25	1.29	2.58	6.84	0.99
750	0.88	1.26	2.64	-	0.96	1.53	4.07	-
1000	0.656	0.837	1.75	0.663	0.75	1.03	2.74	0.69
1250	0.51	0.60	1.26	0.52	0.61	0.75	1.98	0.58
1500	0.41	0.46	0.96	0.42	0.50	0.57	1.52	0.49
1750	0.34	0.36	0.76	0.35	0.42	0.46	1.21	0.42
2000	0.289	0.294	0.62	0.29	0.36	0.37	0.98	0.36

Table 4.3: Section efficace de transport [Å^2] en fonction de l'énergie de l'électron pour le Niobium (Nb) et l'Or (Au).

Les tables 4.1-4.3 montrent clairement que les résultats issus de cette deuxième correction sont généralement en bon accord avec ceux de *Mayol et Salvat (1997)* et meilleurs que ceux de *Jablonski* (1998) et de ceux de notre première correction *Rouabah[a] et al. (2009)*. De plus, cette nouvelle correction présente une efficacité remarquable pour les éléments intermédiaires et lourds. Par ailleurs, elle représente un avantage très important qui consiste à conserver la forme générale de l'expression de la section efficace de transport dérivée par Jablonski *(cf expression (III.9))*.

Afin d'avoir une idée plus clair sur les différents écarts, nous avons listés dans *la table 4.4* les erreurs relatives des différents résultats par rapport a ceux du *Mayol et Salvat (1997) :* $D_P = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{C}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ pour nos nouveaux résultats, $D' = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{R}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ pour les résultats de *Rouabah[b] et al. 2009* et $D' = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{B}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ pour les résultats de *Jablonski (1998)*. Le calcul des différentes erreurs relatives sont limités aux trois matériaux : légers (Al), Lourd (Au) et intermédiaire (Ag).

E (eV)	*Al (Z=13)*			*Ag (Z=47)*			*Au (Z=79)*		
	D_P	D	D'	D_P	D	D'	D_P	D	D'
250	0.21	0.27	0.32	0.26	1.47	3.37	0.95	4.62	14.56
500	0.12	0.15	0.20	0.12	0.67	1.95	0.30	1.61	5.90
1000	0.04	0.06	0.09	0.06	0.26	1.23	0.087	0.49	2.97
1250	0.02	0.03	0.07	0.05	0.17	1.07	0.052	0.29	2.41
1500	0.004	0.01	0.05	0.01	0.11	0.96	0.02	0.16	2.10
1750	0.0096	≈0	0.04	0.026	0.06	0.87	≈0	0.095	1.88
2000	0.018	0.01	0.02	0.016	0.02	0.80	≈0	0.028	1.72

Table 4.4 : Erreurs relatives $D_p = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{C}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$, $D = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{R}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *et*

$D' = \left|\left(\sigma_{tr}^{M-S} - \sigma_{tr}^{B}\right)/\sigma_{tr}^{M-S}\right|$ *en fonction de l'énergie.*

D'après la *table 4.4* en remarque que les écarts des erreurs relatives D_P sont petits par rapport à ceux de notre ancienne correction *(Rouabah[a] et al. 2009)* et de *Jablonski (1998)*. On peut constater que cette nouvelle correction donne des valeurs plus précises et qui se confondent presque totalement avec les valeurs de *Mayol et Salvat (1997)*.

Les *tables 4.5-4.6* présentent les valeurs de la section efficace de transport de la nouvelle correction σ_{tr}^{C} en fonction de l'énergie d'électron allant de 500 à 4000 *eV*. Pour comparaison, on a élaboré les valeurs de la SETs : σ_{tr}^{R} de *Rouabah et al. 2009[a]*, σ_{tr}^{C-B} de *Chaoui et Bouarissa (2002)*, σ_{tr}^{B-B} de *Bentabet et Bouarissa (2007)* et en fin celles de *Dapor (1996)*. D'où on remarque clairement que nos résultats sont en bon accord avec ceux de *Dapor (1996)* et meilleurs par rapport aux autres résultats. On remarque aussi une bonne stabilité de nos résultats le long de tout l'intervalle d'énergie allant de 500 à 4000 *eV*.

La *table 4.7* regroupe également les valeurs de la section efficace de transport de calculées pour deux semi-conducteurs du Si et le Ge et celles de *Dapor (1996)*. D'où on constate le bon accord entre les deux résultats.

E(eV)	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{R}	$\sigma_{tr}^{C_B}$	$\sigma_{tr}^{B_B}$	σ_{tr}^{D}
500	0.3658	0.3763	0.320	-	0.306
1000	0.1255	0.1273	0.110	0.114	0.115
1500	0.0651	0.0656	0.0568	-	0.0623
2000	0.0404	0.0406	0.0351	0.038	0.0397
2500	0.0277	0.0278	0.0240	-	0.0278
3000	0.0203	0.0204	0.0170	0.019	0.0206
3500	0.0156	0.0156	0.0135	-	0.0160
4000	0.0124	0.0124	0.0107	0.0119	0.0128

Table 4.5 : Section efficace de transport [$Å^2$] en fonction de l'énergie de l'électron pour l'Aluminium (Al).

E(eV)	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{R}	$\sigma_{tr}^{C_B}$	$\sigma_{tr}^{B_B}$	σ_{tr}^{D}
500	1.2888	2.580	1.64	-	1.01
1000	0.7497	1.033	0.810	0.674	0.709
1500	0.5017	0.574	0.478	-	0.489
2000	0.3642	0.371	0.318	0.335	0.359
2500	0.2788	0.262	0.229	-	0.278
3000	0.2216	0.196	0.174	0.206	0.223
3500	0.18120	0.153	0.137	-	0.183
4000	0.15144	0.123	0.112	0.142	0.155

Table 4.6 : Section efficace de transport [$Å^2$] en fonction de l'énergie de l'électron pour l'Or (Au).

Energy (eV)	*Si (Z=14)*		*Ge (Z= 32)*	
	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{D}	σ_{tr}^{C}	σ_{tr}^{D}
500	0.404	0.344	0.9604	0.724
1000	0.140	0.130	0.399	0.340
1500	0.0729	0.0705	0.225	0.203
2000	0.0454	0.0451	0.147	0.138
2500	0.0312	0.0316	0.105	0.101
3000	0.0229	0.0235	0.0788	0.0776
3500	0.0176	0.0182	0.0617	0.0619
4000	0.0140	0.0146	0.0498	0.0508

Table 4.7 : Section efficace de transport [Å²] en fonction de l'énergie de l'électron pour le Silicone (Si) et le Germanium (Ge).

IV.3.2. Libre parcours moyen de transport

Le libre parcours moyen de transport (LPMT) est un paramètre crucial dans l'étude de transport des particules dans la matière *(Jablonski 1998)*. Il est définie comme étant la distance caractéristique du processus de relaxation. On rappelle qu'il est relie a la section efficace élastique de transport par la relation (III.6) *(Jablonski and Powell 2007 ; Werner 2001)*,

$$\lambda_{tr} = \frac{1}{N.\sigma_{tr}}$$

où N est le nombre d'atome par unité de volume,

$$N = \frac{N_A \rho}{A}$$

Avec N_A : le nombre d'Avogadro, ρ la densité du matériau, et A est le poids atomique.

Plusieurs auteurs ont entrepris l'étude de LPMT, en utilisant différents méthodes de calculs (*Liljequist and Ismail 1990 ; Rostaing et al. 1977 ; Lantéri et al. 1980 ; Werner 2001, 2005 ; Tilinin et al. 1996)*. Le calcul du LPMT (λ_{tr}^{C}) à partir de la substitution des valeurs obtenues par la nouvelle correction de la section efficace de transport dans l'expression ci-dessus (III.6), est élaboré. Pour comparaison et interprétation, les *figures 4.2-4.5* illustrent le LPMT (λ_{tr}^{T}) calculé et de *Tilinin et al. (1996)* en fonction d'énergie de l'électron. Il est à

noter premièrement, qu'on a utilisé une interpolation pour avoir les valeurs de LPMT pour deux point de l'énergie (Energie 2500 et 3500 eV) et une extrapolation pour l'énergie 500 pour l'Or et ceux pour les valeurs de *Tilinin et al. (1996)*. Il est a noter également que *Tilinin* a appliqué l'équation cinétique de type Boltzmann pour l'approximation de transport en supposant que la particule primaire subisse plusieurs diffusions à des angles larges afin d'être retrodiffusée vers l'extérieur ou absorbé par le matériau.

Sur les *figures 4.2-4.5* nous avons présenté les courbes représentant la variation de LPMT en fonction de l'énergie de l'électron pour quatre éléments Al, Cu, Ag et Au. Plusieurs constatations peuvent être faites ici, tous abord, nous observons une bonne concordance de nos résultats avec celles de *Tilinin et al.*. On remarque ainsi que le LPMT croit lorsque l'énergie augmente. Ceci est attendu, car le LPMT évolue inversement proportionnel à la section efficace de transport *(cf expression III.6)* et que cette dernière diminue en augmentant l'énergie de l'électron *(cf tables 4.1-4.7)*. On constate aussi, que pour la même énergie, le LPMT diminue en allant de l'élément le plus léger (Al) vers le plus lourds (Au), ceci est évident car, plus la densité volumique est grande plus la probabilité de collisions est majeur, par conséquent le libre parcours de transport est petit.

D'autre part en remarque que le libre parcours moyen de transport augmente avec l'augmentation de l'énergie, ceci est traduit par le fait que lorsque l'énergie de l'électron et est grande, sa vitesse est aussi grande, ce qui lui permis d'échapper aux collisions élastiques et/ou inélastiques, et lui permettre un parcours plus long *(sachant que libre parcours moyen est la distance entre deux collisions consécutives)*. En revanche lorsque l'énergie de l'électron est faible, sa vitesse est aussi faible, et par conséquent la probabilité de collision est plus importante ce qui réduit le libre parcours moyen.

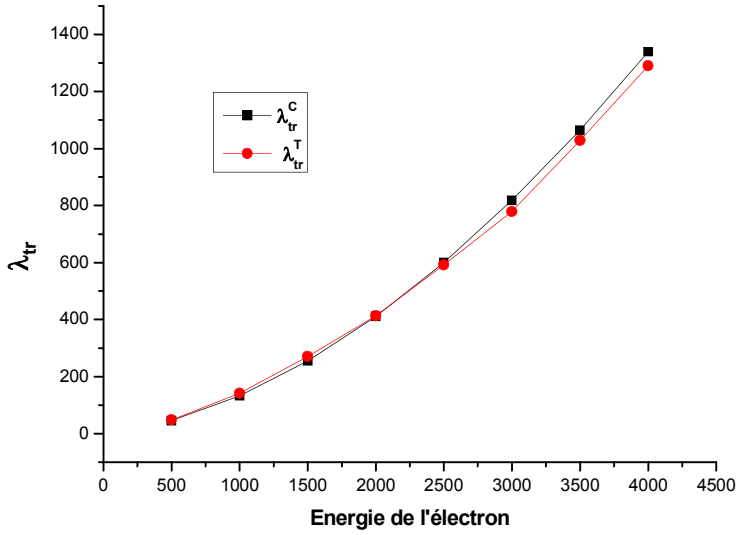

Figure 4.2 : Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [eV] pour le Al.

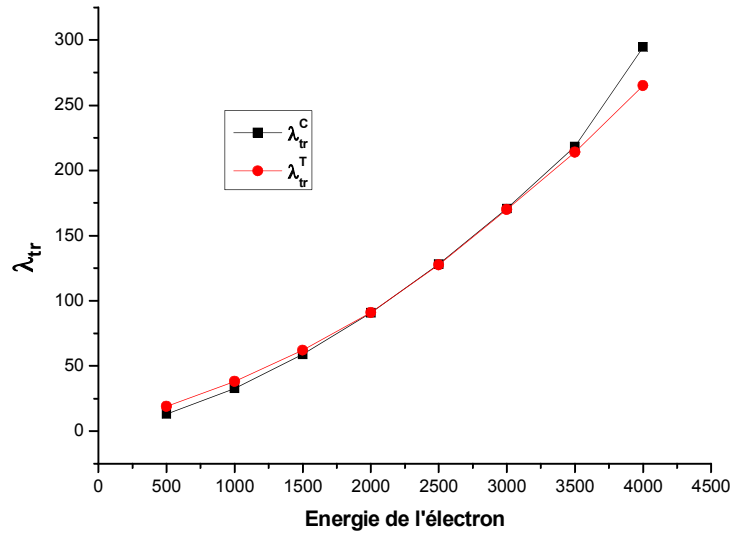

Figure 4.3 : Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [eV] pour le Cu.

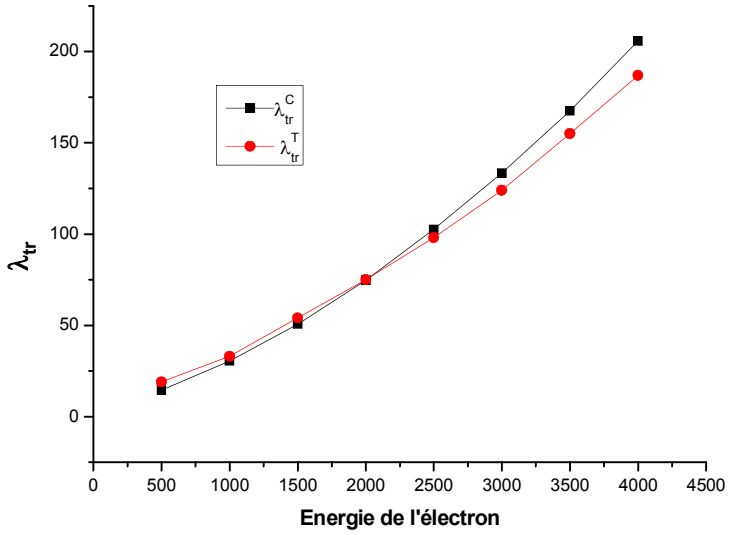

Figure 4.4 : Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [eV] pour l' Ag.

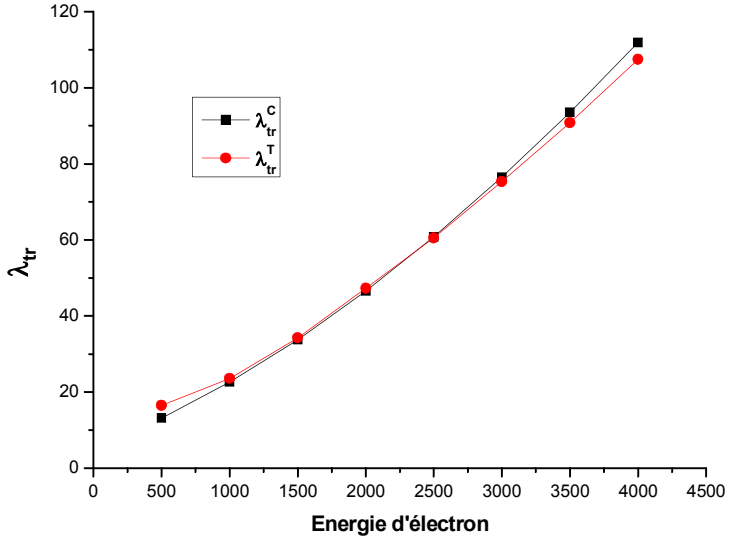

Figure 4.5 : Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [eV] pour l' Au.

IV.4. Etude des coefficients de retrodiffusion dans les métaux massifs

Parmi les applications des valeurs de la section efficace de transport, on trouve le calcul du coefficient de retrodiffusion. Dans cette partie on va calculer le coefficient de retrodifusion de l'électron dans l'Al et le Cu en utilisant la formulation de *Vikanek et Urbassek (1991)* couplée avec la simulation de MC expliquée au chapitre II.

L'expression *(*IV.*10)* de la retrodiffusion de *Vikanek et Urbassek* exige le calcule du nombre moyen de collision aux grands angles (cf expression (IV.11)) lequel est fonction de la distance maximale du parcours de l'électron. Cette dernière est calculée à partir de simulation MC en utilisant l'expression (I.36),

$$R = \int_{E_0}^{E} \frac{dE}{dE/dS}$$

Avec E_0 : est l'énergie initiale de l'électron et E : l'énergie minimale qui doit être égale a zéro. Cependant dans notre simulation MC, cette énergie - considéré comme critère d'arrêt- est choisie inférieure à *20 eV*. En fait à cette énergie l'électron parcours une profondeur de pénétration moyenne variant entre *1Å* et *2Å* pour une énergie allant de 100 *eV* à 20 *eV* (*Valkealahti and Nieminen 1983 ; Adesida et al 1980).*

Lors de la simulation MC nous introduisons les deux expressions du paramètre μ_N du coefficient d'écrantage *(I.20)* proposées par *Bouarissa et al. (2002)*,

$$\mu_N(E) = 19.10\times10^{-11}E^3 - 9.97\times10^{-7}E^2 + 26.27\times10^{-4}E + 7.25. \quad \textit{(pour l'Al)} \qquad (\text{IV}.13)$$

Et

$$\mu_N(E) = 45.38\times10^{-11}E^3 - 26.32\times10^{-7}E^2 + 54.31\times10^{-4}E + 16.6 \quad \textit{(Pour le Cu)} \qquad (\text{IV}.14)$$

Rappelons que *Nigam et al. (1959)* ont proposé que $\mu_N = 5.43$, obtenue par un ajustement de la section efficace de Rutherford à celle obtenue par la méthode des ondes partielles dans le cas de l'Aluminium. Plus tard, *Adesida et al. (1980)* ont suggéré que cette constante (μ^N) doive être multiplié par un facteur $\mu_A = 0.48$. Enfin, *Bouarissa et al. (2002)* ont suggéré pour leur part que μ_N n'était pas une constante mais qu'elle dépendait plutôt de l'énergie de l'électron *E*, suivant les deux expressions ci-dessus.

IV.4.1. Coefficients de retrodiffusion en fonction de l'énergie

L'utilisation de la simulation MC nous a permis de calculer la distance maximale de parcours de l'aluminium et de Cuivre pour les énergies 1, 2, 3 et 4 *keV table 4.8*.

E(keV)	*Al*	*Cu*
1	297.41	162.98
2	879.53	416.72
3	1717.4	780.77
4	2787.1	1235.5

Table 4.8: Distances maximale des parcours de l'électron en fonction de l'énergie de l'électron.

En substituant les valeurs de la distance maximale de parcours *(cf table 4.8)* dans l'expression (IV.11) on obtient les valeurs appropriées du nombre moyen de collisions aux grands angles ν pour Al et le Cu regroupés dans la *table 4.9*. On constate que les résultats obtenus (ν^{Pw}) sont en bon accord avec ceux de *Dapor (1996)* notant, ainsi que l'erreur percentile ne dépasse pas 17% pour Al et 9% pour le Cu.

Energie (keV)	*Al*		*Cu*	
	ν^{Pw}	ν^{Dapor}	ν^{Pw}	ν^{Dapor}
1	2.25	2.70	4.96	4.99
2	2.14	2.53	4.60	4.96
3	2.10	2.44	4.57	4.92
4	2.08	2.40	4.51	4.91

Table 4.9 : nombre moyen de collision aux grands angles en fonction de l'énergie de l'électron.

Dans *la table 4.10,* on présente nos résultats concernant les coefficients de retrodiffusion *(Bsc^{Pw})* de l'aluminium et du cuivre pour différentes énergies. Ces valeurs sont obtenues par la substitution des valeurs de nombre moyen de collisions aux grands angles *(table 4.8)* ainsi que les valeurs de la section efficace de transport de la nouvelle correction. A titre comparatif, les valeurs expérimentales *(Bsc^{exp})* de *Hunter et al. (1996)* et les valeurs théoriques *(Bsc^{theor})* de *Dapor (1996),* sont listés dans la table 4.10 suivant,

Energie (eV)	*Al*			*Cu*		
	Bsc^{Pw}	Bsc^{exp}	Bsc^{theor}	Bsc^{P}	Bsc^{exp}	Bsc^{theor}
1	0.169	-	0.197	0.314	-	0.315
2	0.162	0.175	0.187	0.297	0.30	0.314
3	0.159	0.170	0.181	0.296	0.30	0.312
4	0.158	0.165	0.178	0.293	0.30	0.312

Table 4.10 : Coefficient de retrodiffusion en fonction de l'énergie de l'électron.

D'après les résultats parus dans la *table 4.10* on peut constater que nos résultats concernant les coefficients de retrodiffusion dans la bande d'énergie entre 1 et 4 *keV*, sont en bon accord avec ceux de l'expérience *(Hunter et al. 1996)*. Cet accord présente des erreurs percentiles inférieures à 8% et 3% pour Al et le Cu, respectivement. Ce bon accord est dû principalement à la précision des valeurs de la section efficace de transport fournis par notre nouvelle correction portée à l'expression de la SET dérivée par Jablonski.

IV.4.1. Coefficients de retrodiffusion en fonction de l'angle d'incidence

Pour l'étude de l'influence de l'angle d'incidence du faisceau d'électron sur le coefficient de retrodiffudion pour les cibles massives d'Al et de Cu, *les figures 4.6 et 4.7* ont été illustrées par l'utilisation de la même procédure de calcul de la section précédente. Pour des raisons d'interprétation, *les figures 4.8-4.11* illustrent également le comportement des distances maximales de parcours et la profondeur moyenne de pénétration en fonction de l'angle d'incidence, et ce par l'utilisation de la simulation MC pour des incidences obliques allant de 0 au 80 degrés. Notant que tous les calculs sont effectués pour deux énergies fixes de l'électron 1*keV* et 3 *keV*.

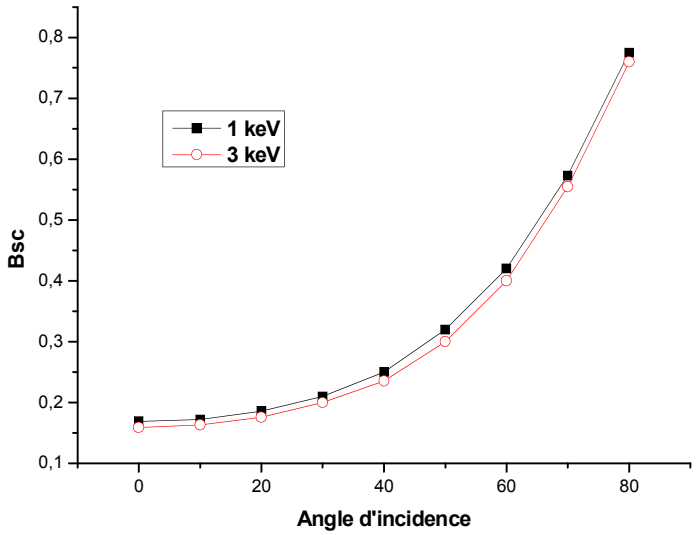

Figure 4.6 : Coefficient de retrodiffusion (Bsc) en fonction de l'angle d'incidence pour le Al.

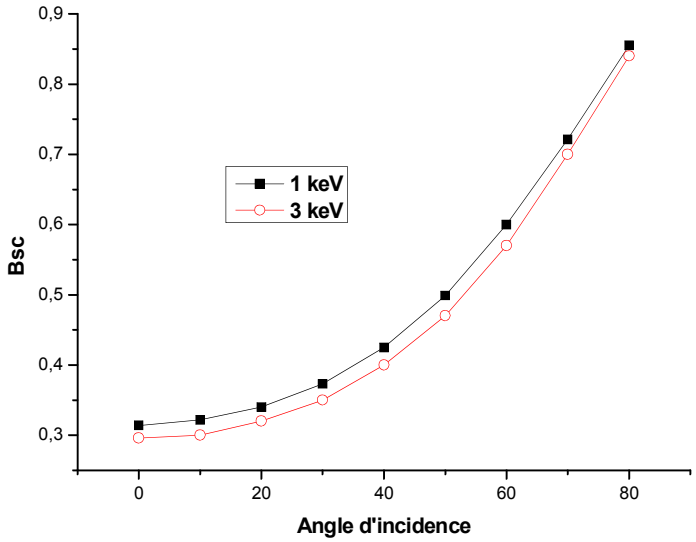

Figure 4.7 : Coefficient de retrodiffusion (Bsc) en fonction de l'angle d'incidence pour le Cu.

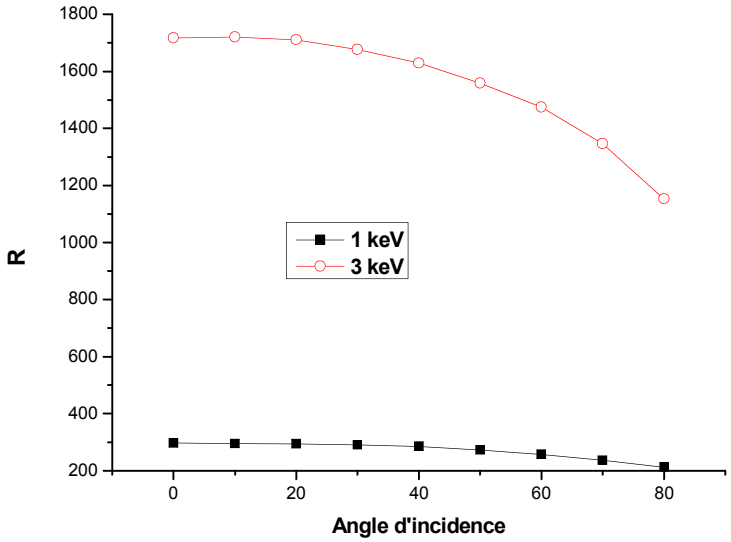

Figure 4.8 : Distance maximale du parcours de l'électron [Å] en fonction de l'angle d'incidence pour le Al.

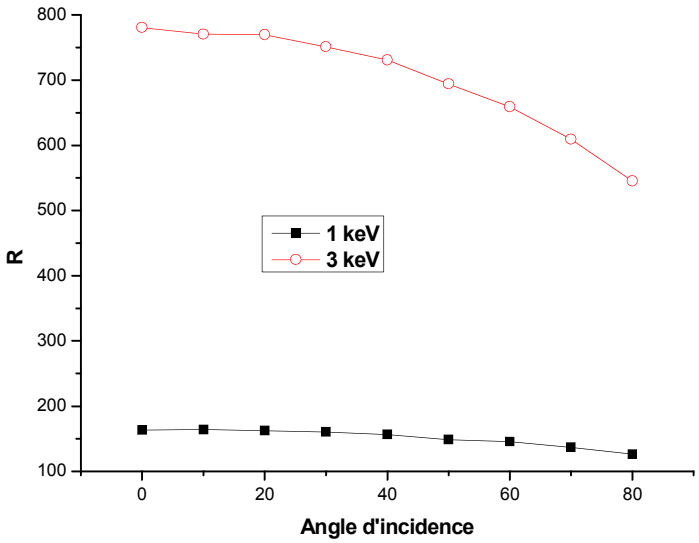

Figure 4.9 : Distance maximale du parcours d'électron [Å] en fonction de l'angle d'incidence pour le Cu.

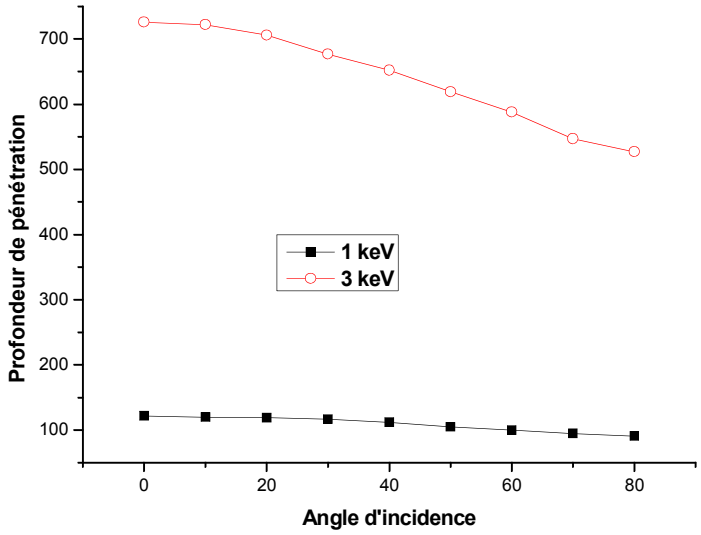

Figure 4.10 : Profondeur moyenne de pénétration de l'électron [Å] en fonction de l'angle d'incidence pour l'Al.

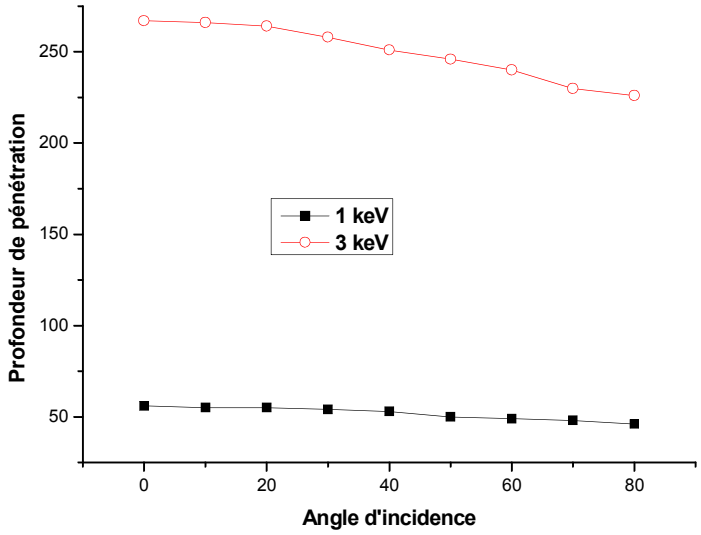

Figure 4.11 : Profondeur moyenne de pénétration de l'électron [Å] en fonction de l'angle d'incidence pour le Cu.

En observant aux figures précédentes, plusieurs constatations peuvent être faites : tous d'abord en remarque que le coefficient de retrodiffusion *(cf figures 4.6-4.7)* augmente en augmentant l'angle d'incidence. Ceci est évident car les distances maximale de parcours ainsi que la profondeur de pénétration diminue en augmentant l'angle d'incidence. En fait, plus la pénétration de l'électron à l'intérieur du solide est importante, plus la probabilité de sa retrodiffusion est petite. De plus une simple comparaison entre les deux *figures (4.10) et (4.11)*, montre que pour la même énergie et le même angle, la profondeur de pénétration de l'Al est plus grande que celle du Cu. Cela est du au fait que le Cuivre possède un nombre atomique plus grand et par conséquent un nombre de collision plus élevé, ce qui empêche les électrons de pénétrer plus profondément à l'intérieur du solide. On constate également que la croissance des coefficients de retrodiffusion est lente dans l'intervalle d'angle entre 0° et 30°, puis ils subissent une augmentation rapide jusqu'à l'angle 80°. A cet angle, les valeurs du coefficient de retrodiffusions sont très grandes par rapport aux valeurs correspondant à l'incidence normale, et deviennent presque cinq fois pour l'Al $(Bsc_{Al}^{80^\circ} \approx 4.78 Bsc_{Al}^{0^\circ} \quad pour\ 3keV)$ et trois fois pour le Cu $(Bsc_{Cu}^{80^\circ} \approx 2.84 Bsc_{Cu}^{0^\circ} \quad pour\ 3keV)$.

IV.5. Etude des coefficients de retrodiffusion dans les métaux en couche mince

Les techniques d'analyse de surface comme la spectroscopie d'électrons Auger ***(AES)*** et la spectroscopie de photoélectron *X* ***(XPS)***, avec une surface de haute sensitivité qui font d'elles un moyen approprié à l'analyse de la surface *(Werner 2001)*. Cela est du au fait que les processus physique régissant l'interaction électron-solide a basse et moyen énergies donne lieu à une atténuation de faisceau d'électron sur des distance de quelques dixièmes à quelques dizaine de nanomètres *(Dapor 2003 ; Werner 2001)*.

L'étude de la transmission et la retrodiffusion des électrons dans les couches minces métalliques est très intéressante vus l'importance des couches minces dans les domaines de la microélectronique, de dépôts de couche et la microscopie électronique en transmission *(Hunter et al. 1996)*. De plus la retrodiffusion des électrons dans les couches minces a un impact sur l'étude scientifique et technique de la surface *(Niedrig 1892)*. En effet les coefficient de rétrodiffusion représente un essai rigoureux afin d'offrir une

description exacte du processus de diffusion et permette une bonne interprétation des données expérimentales dans l'étude des phénomènes se passant au dessous de la surface *(subsurface phenomena)*.

L'étude des électrons interagissant avec des cibles solides massifs pour une large gamme d'énergie a été entreprise par plusieurs auteurs, cependant il y a peu de donnée concernant l'interaction des électrons avec des cibles en couche mince, particulièrement pour des électrons incidents a basse énergie *(Dapor 1992, 1996, 2003 ; Jensen and Walker 1993 ; Massoumi et al. 1992 ; Shimizu and Ze-Jun 1992)*.

IV.5.1. Méthode de calcul et résultats

Quand un faisceau d'électrons frappe une cible d'un matériau en couche mince, un nombre d'électrons, et après avoir fait un certain nombre de collisions avec les électron et les noyaux de l'atome, reviennent et sortent de la surface (électrons rétrodiffusés), tandis que d'autres électrons pénètrent une distance plus grande que l'épaisseur de l'accueil du matériau, et sont ainsi transmis et sortent de l'autre face de l'échantillon. Le reste des électrons qui ont une profondeur de pénétration inférieure à l'épaisseur de la matière d'accueil et qui ne sont pas rétrodiffusée restent, bien entendu, implantés dans la cible *(électrons absorbés ou thermalisés)*. Les fractions des électrons absorbés, rétrodiffusés, et transmis dépendent de l'épaisseur de la cible *(Dapor and Miotello 1997)*.

Dans cette partie, nous allons calculés les facteurs de retrodiffusion des électrons dans les couches minces d'Al et de Cu, en utilisant la théorie de *Vicanek et Urbassek (1992)* combinée avec la simulation de Monte Carlo. La dépendance du coefficient de rétrodiffusion des électrons et de la profondeur de pénétration moyenne en fonction de l'épaisseur de la couche mince d'Al et de Cu pour des énergies fixes entre 1 et 4 *keV* a été rapportés dans les tables *4.12-4.15*. L'épaisseur de la couche mince a été prise dans la région de l'échelle nanométrique et au-delà de celui-ci.

Les distances maximales du parcours sont calculées par la simulation de Monte Carlo pour différentes épaisseurs de couches minces inférieures à 500 nm. Les valeurs de ces distances sont utilisées avec les valeurs de la section efficace de transport de la

nouvelle correction afin de calculer le coefficient de retrodiffusion et ce par l'utilisation de la théorie de *Vicanek and Urbassek (1992).*

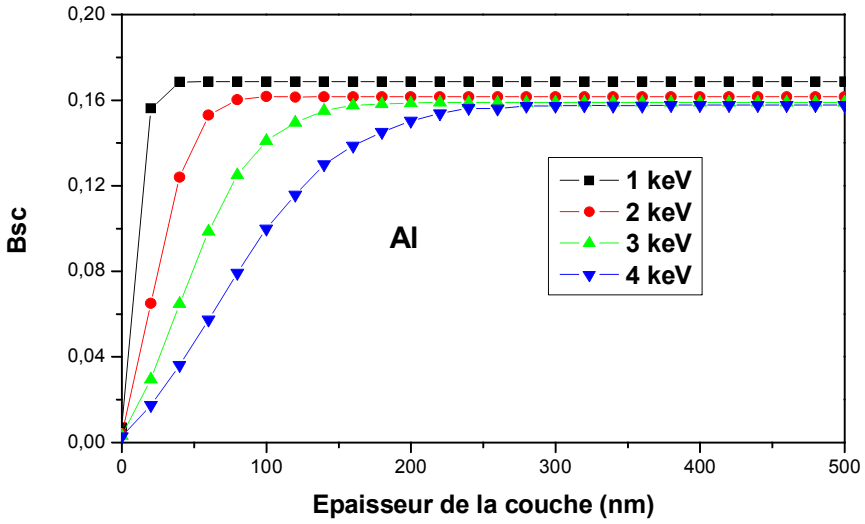

Figure 4.12 : Coefficients de retodiffusion (Bsc) en fonction de l'épaisseur de la couche.

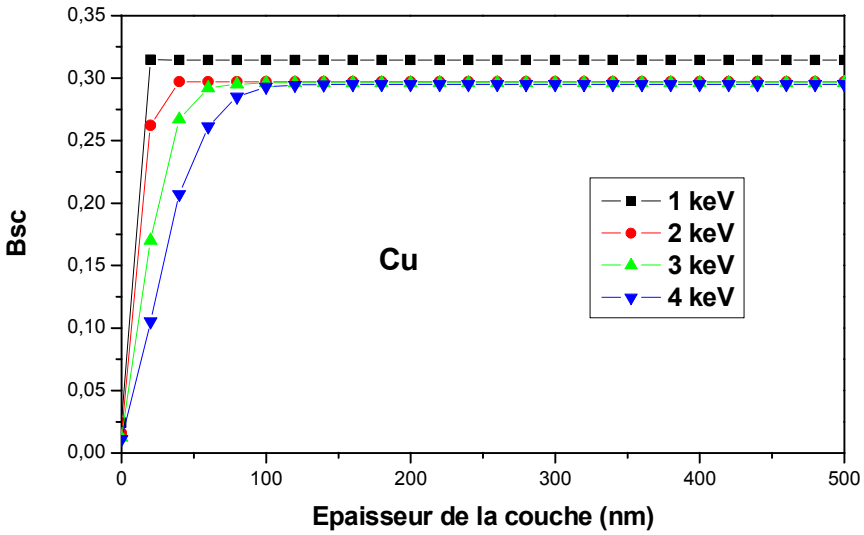

Figure 4.13 : Coefficients de retodiffusion (Bsc) en fonction de l'épaisseur de la couche.

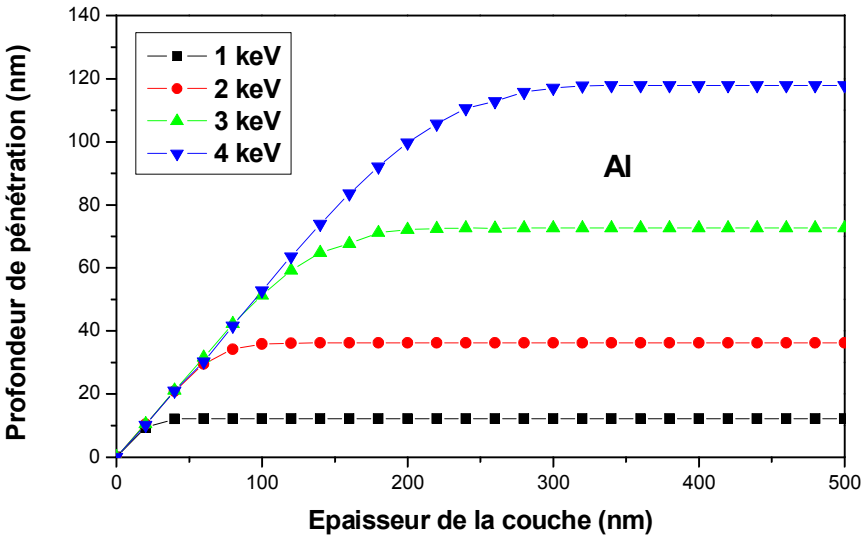

Figure 4.14 : Profondeur moyenne de pénétration en fonction de l'épaisseur de la couche

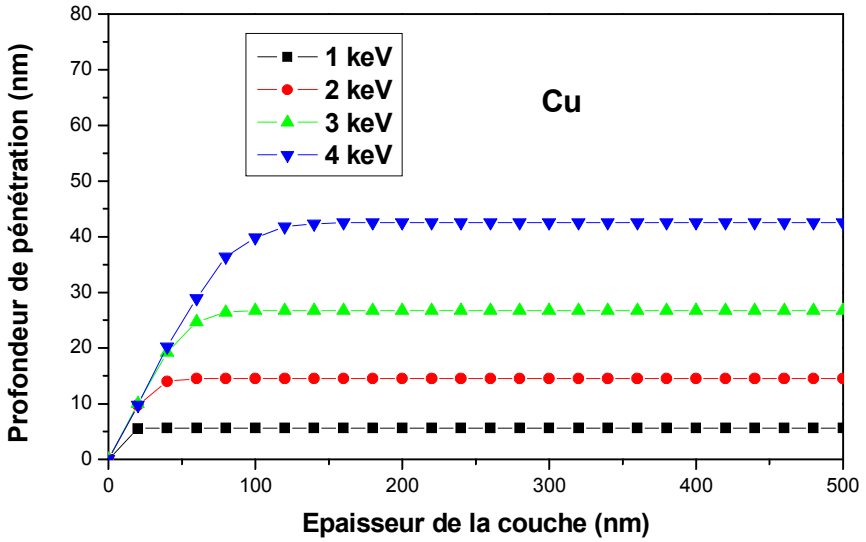

Figure 4.15 : Profondeur moyenne de pénétration en fonction de l'épaisseur de la couche

IV.5.2. Discussion des résultats :

Comme il n'existe pas, à notre connaissance, dans la littérature des données relatives aux coefficients de rétrodiffusion des électrons d'énergies allant de 1 à 4 *keV* dans les couches minces d'Al et de Cu. Nos résultats sont comparés à l'approche expérimentale et théorique des données précédentes concernant les coefficients de rétrodiffusion des électrons dans les métaux massifs d'Al et de Cu. Rappelons que dans la section (VI.4.1) nous avons calculé les facteurs de retrodiffusion de l'électron dans les métaux massifs (Al, Cu) en fonction de l'énergie. Notant le bon accord entre nos résultats et l'expérience *(cf table 4.9)* et qui sont dans les limites de la précision statistique. Cela donne confiance à nos résultats attendus concernant les couches minces.

La variation du coefficient de rétrodiffusion des d'électrons en fonction de l'épaisseur de la couche mince d'Al et de Cu , tel que calculée par la méthode décrite ci-dessus est illustrée dans *les figures (4.12) et (4.13)*, respectivement. Comme on le voit dans ces figures, pour une énergie primaire donnée (E_0) et quand l'épaisseur de la couche cible d'Al ou de Cu devient plus épaisse, le coefficient de rétrodiffusion des électrons augmente progressivement jusqu'à une certaine valeur critique de l'épaisseur de la couche qui dépend de l'énergie (E_0), où il devient constant. Ceci est cohérent avec le fait que pour la cible massive, le nombre de particules transmises est nulle, tandis que la fraction des électrons rétrodiffusée atteint sa valeur maximale. Toutefois, il convient de noter que la valeur du coefficient de rétrodiffusion dépend de la nature de la cible : Elle est plus importante pour les électrons rétrodiffusés de Cu par rapport à ceux d'Al. Cela est dû à la surface de collision, car les atomes plus lourds (Cu, dans notre cas) ont une plus grande section efficace de collision et aussi une plus grande probabilité de la diffusion aux grands angles dans les collisions élastiques. Lorsque l'énergie primaire d'électrons est faible, c'est-à-dire 1 keV, par exemple, la valeur de l'épaisseur de la couche mince au cours de laquelle le coefficient de rétrodiffusion est constant pour les deux matériaux étudiés, se trouve dans la région à l'échelle du nano. Cette valeur va au-delà de la région du nano lors de l'augmentation à 4 *keV*. Il est à noter que pour une couche d'épaisseur fixe le coefficient de retrodiffusion diminue lorsque E_o augmente. Toutefois, il présente une dépendance énergétique faible. Un tel comportement a été signalé au cours des précédentes

simulations de Monte-Carlo concernant la pénétration des électrons dans les métaux *(Dapor 1996 ; Hunter et al. 1996 ; Jensen and Walker 1993 ; Miotello and Dapor 1997)*. La diminution du coefficient de rétrodiffusion lors de l'augmentation de E_o semble être due au fait que l'électron avec une plus grande énergie incidente (E_0) pénètre plus profondément dans la cible, et par conséquent, on a une augmentation du nombre de collisions y compris les collisions inélastiques conduisant ainsi à l'augmentation de la perte d'énergie. Cette situation rend difficile le retour de l'électron incident a l'extérieur (c'est a dire de ce retro-diffuser) .

Dans les *figures 4.14 et 4.15*, est illustré la profondeur moyenne de pénétration des électrons en fonction de l'épaisseur de la couche mince d'Al et de Cu, pour diverses énergies incidentes. Il est observé que pour un électron d'énergie incidente donnée E_o dans l'intervalle d'énergie 1-4 *keV*, la profondeur moyenne de pénétration présente une augmentation monotone pour les deux métaux (Al et Cu), en augmentant l'épaisseur de la couche, puis elle devient constante lorsque l'épaisseur de la couche atteint une certaine valeur qui dépend de E_o. Notant aussi que l'augmentation de E_o conduit à une pénétration de l'électron plus profonde dans les deux matériaux étudiés. En d'autres termes, pour une épaisseur d'une couche donnée, la profondeur moyenne de pénétration de l'électron augmente de façon monotone. Qualitativement, ce comportement est en concordance avec les résultats expérimentaux et avec ceux des précédentes simulations de Monte-Carlo concernant les taux de pénétration des électrons dans les métaux massifs *(Hunter et al. 1996 ; Valkealahti and Nieminen 1983,1884)*. Toutefois, il est important de signaler que pour une énergie E_o donnée, l'électron pénètre plus profondément dans l'Aluminium que pour le Cuivre. Un tel comportement est dù au fait que les atomes plus lourds ont des probabilités de diffusion aux grands angles de collisions élastiques. Particulièrement, il convient également de noter que similairement au comportement du coefficient de rétrodiffusion, le comportement de la profondeur moyenne de pénétration de l'électron en fonction de l'épaisseur de la couche dans la région du nano est différent de celle au-delà de cette région. Ceci signifie que les propriétés physiques des matériaux se comportent différemment à l'échelle nanométrique par rapport a l'état massif des solides.

IV.6. Conclusion

Dans ce chapitre, une deuxième correction portée sur la section efficace de transport dérivée par *Jablonski (1998)*, était présentée. Les différentes comparaisons des valeurs de la SETE obtenues à partir de cette correction montrent qu'ils sont en bon accord avec les valeurs précises de *Mayol et Salvat (1997)* et de *Dapor (1996)* et meilleurs que ceux de *Jablonski* (1998), *Rouabah*[a] *et al. (2009), Chaoui et Bouarissa (2002)* et de *Bentabet et Bouarissa (2007)*. La substitution des valeurs des SETEs obtenues, dans les expressions de *Vikanek-Urbasek (1991)* avec la simulation de MC a permis de calculer le coefficient de retrodiffusion pour les métaux massifs d'Al et de Cu dans la gamme d'énergie allant de 500 à 4000 eV. Une étude a été effectuée sur la variation des coefficients de la retrodiffudion en fonction de l'angle d'incidence et de l'épaisseur de la couche mince de l'Al et le Cu. Elle a révélée que l'épaisseur de la couche mince s'étale de la région nanométrique et au delà de celle-ci. Plusieurs constatations et conclusions peuvent être tirer, dont la suivante, considérée comme la plus importante : On observant aux comportements des facteurs de la retrodiffusion dans les couches minces, on conclu que les propriétés physiques des matériaux se comportent différemment à l'échelle nanométrique par rapport a état massif des solides.

Conclusion générale

La section efficace de transport, le libre parcours moyen de transport ainsi que le coefficient de retrodiffusion sont considérés comme des paramètres déterminant du transport des électrons dans la matière. Plusieurs méthodes ont été utilisées pour étudier le transport des électrons afin d'améliorer les résultats quantitatives, et de les prédire. Dans le présent travail nous avons utilisé des expressions analytiques couplées avec la méthode de simulation de MC afin d'atteindre cet objectif.

En premier lieu, une première correction argumentée, apportée à l'expression analytique de la section efficace de transport dérivée par Jablonski (1998) a été présentée dans le troisième chapitre *(Rouabah[a] et al. 2009)*. La comparaison des résultats obtenus pour six éléments du tableau périodique *(Hydrogène, Aluminium, Cuivre, Argent, Niobium et l'Or)* par rapport à d'autres données existantes dans la littérature, nous a montré la bonne concordance de nos résultas avec les résultats précis de *Mayol et Salvat (1997)* et de *Dapor (1996)* et ils sont meilleurs que ceux de *Jablonski (1998)* et de *Chaoui et Bouarissa (2002)*. Tout en signalant que la correction proposée est caractérisée par sa simplicité, son efficacité et ainsi que par sa validité pour produire des valeurs de la SETE plus précises notamment quant l'énergie de l'électron augmente.

En second lieu, une deuxième correction apportée à l'expression analytique SETE dérivée par Jablonski. En utilisant cette nouvelle correction nous avons calculé les SETEs pour huit éléments *(Hydrogène, Aluminium, Cuivre, Argent, Niobium, Or, Silicium et le Germanium)*. On a constaté que les résultats obtenus sont plus précis par rapport à la première correction *Rouabah et al. (2009[a])*. Par ailleurs, ils sont très proches et presque confondue avec les résultats précis *Mayol et Salvat (1997)* et de *Dapor (1996)* et meilleurs que d'autres travaux comme ceux de *Chaoui et Bouarissa (2002)* et *Bentabet et Bouarissa (2007)*. De plus de la simplicité de cette nouvelle correction, elle présente un avantage important qui se traduit par la conservation de la forme générale de l'expression dérivée par Jablonski.

En utilisant cette nouvelle correction, les graphes illustrant la variation des libres parcours moyen de transport (LPMT) des éléments *Al, Cu, Ag et de l'Au* en fonction de l'énergie de l'électron avec les valeurs de *Tilinin et al. (1996),* montrent le bon accord entre les deux valeurs. De plus, le comportement du LPMT présente une croissance monotone avec l'augmentation de l'énergie de l'électron. Ce comportement est prévisible et justifié par le fait que le LPMT est inversement proportionnel à la section efficace de transport *(cf expression III.6)* qui diminue en augmentant l'énergie de l'électron.

La théorie de *Vicanek et Urbassek (1992)* combinée avec la simulation Monte-Carlo ont été utilisées afin de calculer le coefficient de rétrodiffusion des électrons d'énergie allant de 1 à 4 keV, et ce pour une incidente normale sur l'Al et le Cu massifs. Les valeurs obtenues du coefficient de retrodiffusion, sont en bon accord avec ceux de l'expérience *(Hunter et al. 1996).* Cet accord présente des erreurs percentiles inférieures à 8% et 3% pour Al et le Cu, respectivement. Ce bon accord est du principalement à la précision des valeurs de la section efficace de transport fournis par la nouvelle correction.

La même procédure ci-dessus est utilisée cette fois-ci pour établir des courbes représentant le coefficient de rétrodiffusion, la profondeur de pénétration moyenne et la distance maximale du parcours des électrons en fonction de l'incidence de l'électron. En a remarqué que le comportement des coefficients de retrodiffusion croit en augmentant l'angle d'incidence. Ceci est évident car les distances maximales du parcours ainsi que la profondeur moyenne de pénétration diminue en augmentant l'angle d'incidence. En effet, plus la pénétration de l'électron à l'intérieur du solide est importante, plus la probabilité de sa retrodiffusion est petite.

Une étude a été effectuée sur le coefficient de rétrodiffusion et sur la profondeur de pénétration moyenne pour des énergies fixes, et avec une incidence normale en fonction de l'épaisseur des couches minces d'Al et de Cu. Ces épaisseurs sont prises dans la région nanométrique et au delà de celle-ci c'est-à-dire des régions inférieures à 500nm.

On a montré que le coefficient de rétrodiffusion des électrons et de la profondeur moyenne de pénétration pour les matériaux augmente d'une façon monotone avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche jusqu'à une certaine valeur critique, où ils

deviennent constants. L'épaisseur critique de la couche mince dépend fortement de l'énergie de l'électron incident. Bien que le coefficient de rétrodiffusion et la profondeur moyenne de pénétration ont montré le même comportement qualitatif à l'égard de l'épaisseur de la couche mince d'Al et de Cu, une différence de point de vue quantitatif est observée entre les deux cibles en question. En outre, il est constaté que la tendance du coefficient de rétrodiffusion et de la profondeur de pénétration moyenne par rapport à l'épaisseur de la couche mince dans la région à l'échelle du nano est différente de celle au-delà de cette région ce qui confirme le fait que les propriétés physiques des matériaux dans la région nanométrique se comportent différemment de celles des matériaux massifs.

Néanmoins, la partie consacrée à l'étude des propriétés de transport des positrons dans les solides n'a pas été approfondie et achevée et pour cela on a jugé nécessaire de mener des recherches complémentaires comme perspectives au présent travail.

Bibliographies:

Adesida I., Shimizu R. and Everhart T. E., J. Appl. Phys. **51** (1980) 5962.

Archard G. D., J. Appl. Phys., 32 (1961) 1505.

Ashley J. C., J. Electron Spectrosc. Related Phenom. **46** (1988) 199.

Ashley J. C., J. Electron Spectrosc. Related Phenom. **50** (1990) 323.

Aydin A., Radia. Phys. and Chemis. **59** (2000) 277.

Bacri J., Gomes A. M. et Benzaid *S*., J. Phys. D: Appl. Phys. **9** (1976)1743.

Basdevant J. L., Rich J., Spiro M., Energie nucléaire, Ecole polytechnique, Palaisseau (2002).

Benedito E., Fernandez-Area J.M., Salvat F., Nuc. Instr. Methods, **B 174**(2001) 91.

Bentabet A. and Bouarissa N., Appl. Phys. A **88** (2007) 353.

Bichsel H., Phys. Rev. A **65** (2002) 052709.

Bouarissa N., Thesis, University of East Anglia, Norwich, UK (1987)

Bouarissa N. and Walker A. B., Int. J. Mod. Phys. B **14** (2000) 1603.

Bouarissa N., Deghfel B. and Bentabet A., Eur. Phys. J. AP **19** (2002) 89.

Bouarissa N., Walker A. B. and Aourag H., J. Appl. Phys. **83** (1998) 3643.

Bouarissa N. and Walker A. B., Int. J. Mod. Phys. B **14** (2000) 1603.

Browning T. Z. LI., Chui B., Jun Ye, Pease R. F. W., Gzyzewki Z., and Joy D. C., J. App. Phys. **7** (1994) 2016.

Byatt W.J., Phys. Rev, **104**(1956) 1298.

Chaoui Z. , Bouarissa N., Phys. Letter A **297** (2002) 432.

Chaoui Z., Bouarissa N., J. Phys. : Condens. Matter. **16** (2004) 799.

Coleman P. G., Albrecht L., Jensen K. O. and Walker A. B., J. Phys.: Condens.Matter **4** (1992) 10311.

Dapor[a] M., Phys. Letters A, **143** (1990) 160.

Dapor[b] M., Phys. Letters A, **151** (1990) 84.

Dapor M., Phys. Latters A., **158** (1991) 425.

Dapor M., Phys. Rev. B **46** (1992) 618.

Dapor M., Nucl. Instrum. Methods Phys. Research B **95** (1995) 470.

Dapor M., J. Appl. Phys. **79** (1996) 8406.

Dapor M., Miotello A., Phys. Rev. B **56** (1997)2234.

Dapor M. and Miotello A., Scanning Microscopy **12** (1998) 131.

Dapor M., Electron-Beam Interactions with Solids : Application of the Monte Carlo Method Solids, Springer (2003).

Dapor M., J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena **151** (2006)182.

M. Dapor, Surf. Interface Anal. **38** (2006) 1198.

Delacroix J. L. Physique des Plasmas T1, Dunod (1963).

Demidovitch B., Maron I., éléments de calcul Numérique, deuxième édition, édition MIR, Moscou (1979).

Dubus A ;, Jablonski A. and Tougaard S., Progress in surface science, **63** (2000) 135.

Dudarev S. L., Rez P. and Whelan M.J., Phys. Rev. B **50** (1994)14525.

Everhart T., J. Appl. Phys., 31 (1960) 1483.

Fernandez-Varea J. M., Mayol R., Baro J. and Salvat F., Nucl. Instr. Meth.Phys. Research B **73** (1993) 447.

Fishman G. S., Monte Carlo, concepts, algorithms and applications, Springer, New York (1996).

Fink M., Ingram J., Atomic Data **4** (1974) 129.

Friedrich H., Theorical Atomic Physics, Springer-Verleg, (1991).

Gergely G., Progress in Surface Science **71** (2002) 31.

Golstein J., Newbury D. E., Joy D. C., Lyman C. E., Echlin P., Lifshin E., Sawyer L. C. and Michael J. R., Scanning electron microscopy and x-ray Microanalysis, Springer(2003).

Goodhew P. J., Humphreys J., Beanland R., Electron Microscopy and Analysis, Taylor and Francis edition, third edition (2001)

Greenspan H., Kelber C.N. and Ohrent D., computing methods in reactor physics, Gordonaud Breach Science Publishers, New York (1965)

Gregory D., Fink M., Atom. Data Nucl. Data **14** (1974) 470.

Gryzinski M., Phys. Rev. **115** (1959) 374.

Gryzinski[a] M., Phys. Rev. **138** (1965) A305.

Gryzinski[b] M., Phys. Rev. **138** (1965) A322.

Gryzinski[c] M., Phys. Rev. **138** (1965) A336.

Heermann D. W., Computer Simulation methods in theorical physics, Springer-Verlag, second edition (1989).

Hirayama H., Namito Y., Bielajew A. F., Wilderman S. J. and Nelson W. R., The EGS5 Code System. Report SLAC-R-730, Stanford Linear Accelerator Center, Stanford, CA, (2005).

Hunter K. L., Snook I.K. and Wagenfeld H. K., Phys.Rev. B **54** (1996) 4507.

Jablonski A., J. Phys. B **14** (1981) 281.

Jablonski A., J. Phys. B **15** (1982) L623.

Jablonski A., , Jansson C. and Touggard S., Phys. Rev B **47** (1993)

Jablonski[a] A., Tilinin I. S., J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena **74** (1995) 207.

Jablonski[b] A., Surface science **151** (1995) 166.

Jablonski, A. I. S. tilinin, C. J. Powell, Phys. Rev. B **54** (1996) 10927.

Jablonski A., Phys. Rev B **58** (1998)16470.

Jablonski A., Powell C.J., Surf. Sci. **463** (2000) 29.

Jablonski A., Salvat F., and Powell C. J., *NIST Electron Elastic-Scattering Cross-Section Database*, Version 3.1 (Standard Reference Data Program Database 64, U. S. Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 2003), http://www.nist.gov/srd/nist64.htm.

Jablonski A., Powell C. J., Phys. Rev. B **76** (2007) 085123.

Jaccoboni C. and Reggiani L., Rev. Mod. Phys., **55** (1983) 645.

Jamil M., Rhee J.T. and Jean Y. J., Radiat. Measurm. 43 (2008) 1554.

Jensen K. 0. and Walker A. B., Surface Science **292** (1993) 83.

Jensen K. O., Walker A. B. and Bouarissa N., in:Schultz P. J., Massoumi G. R., Simpson P.J., Positron Beams for Solids and Surfaces (AIP Conf. Proc. Vol.218), American Institute of Physics, New York, (1990) p.19.

Kanaya K. and Ono S., J. Phys. D: Appl. Phy., **9** (1976)161.

Kanaya K. and Okayama **S.**, J. Phys. D: Appl. Phys., Vol. **5** (1972) 43.

Kawrakow I. and Rogers D. W. O., The EGSnrc Code System: Monte Carlo simulation of electron and photon transport, Ionizing Radiation Standards National Research Council of Canada, NRCC Report PIRS-701 (2006).

Kurniawan O., Ong V. K. S., Scaning **29** (2007)280.

Lanteri H., Bindi R. et Rostaing P., J. Phys. D : Phys., **13** (1980) 677.

Lapeyre B., Pardoux E. et Sentis R., Methode de Monte Carlopour les equations de transport et de diffusion, Springer, Allemagne (1998).

Liljiquist D., Ismail M., Salvat F., Mayol R. and Martinez J. D., J. Appl. Phys. **68** (1990) 3061.

Llovet X., Sorbier L., Campos C. S., Acosta E., and Salvat F., J. Appl. Phys. **93** (2003) 3844.

Llovet X., Salvat F., Fernadez-Varea J. M., Michrochim Acta **145** (2004) 111.

Mangiarotti A., Ballestro S., Sona P. and Uggerhoj U.I., Nucl. Instr. Methods in Physics **266** (2008) 501.

Massoumi G. R., Hozhabri N., Jensen K. O., Lennard W. N., Lorenzo M.S., Schultz P.J., Walker A.B., Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 3873.

Massoumi G. R., Lennard W. N., Schultz P. J., Walker A. B. and Jensen K. O., Phys.Rev.B **47** (1993) 11007.

Mayol R. and Salvat F., At. Data Nucl. Data Tables **65** (1997) 55.

Mazurier J., Thèse doctorat en physique, Université Paul Sabatier de Toulouse, France (1999).

Messiah A., Mécanique quantique T1, T2, Dunod (1995).

Messina G., Santangelo S., Paoletti A., Tucciarone, Microsystem Technologies **1** (1994) 23.

Miotello A., Dapor M., Phys. Rev. B **56** (1997) 2241.

Nacheb A., thèse doctorat, Université Louis Pasteur, Strasbourg, France (2003).

Najar S., Thèse Doctorat Ecole Polytechnique, Palaiseau, France (1992).

Niedrig H., J. Appl. Phys. **53** (1982) R15.

Nigam B. P., Sundaresan M. K., Ta-You Wu, Phys.Rev. **115** (1959) 491.

Nougier J. P., Méthode de Calcul Numérique, troisième édition, édition Masson, Paris (1887).

Penn D. R., Phys. Rev. B **13** (1976)5248.

Penn D. R., Phys. Rev. B **35** (1986)482.

Riley M. E., MAcCallum C. J., and Biggs F., Atom. Data and Nucl. Data Tab, **15** (1975) 443.

Rostaing P., Bindi R., Lanteri H. et Keller P., J. Phys. D : Phys., **10** (1977) 1991.

Rouabah[a] Z., Bouarissa N. and Champion C., Phys. Lett. A **373** (2009) 282.

Rouabah[b] Z., Bouarissa N., Champion C. and Bouaoudja N., Appl. Surf. Sci. **255** (2009) 6217.

Rouabah[c] Z., Bouarissa N. and Champion C. Thin Solid Films (2009) submitted.

Salvat F., Martinez J.D., Mayol R., Parellada J., Phys. Rev. A, **36**(1987) 467.

Salvat F., Fernandez-Varea J. M. , Acosta E and Sempau J., PENELOPE a Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, Workshop proceeding Issy-Les-Moulineaux, France, 5-7 Novembre (2001).

Salvat F., Jablonski A., Powell C.J., Comp. Phys. Communications **165** (2005) 157.

Salvat F., Llovet X., and Fernandez-Varea J. M. Microchim. Acta **145** (2004) 193.

Samoto N., Shimitzu R., Hashimoto H., Adesida I., Wolf E. and Namba S., J. Sci. Technol. B1 (1983).

Schilling J. S. and Webb M. B., Phys. Rev. B **2** (1970) 1665.

Shimizu R., Kataoka R., Ikuta T., Koshikawa T. and Hashimoto H., J. Phys. D.: Appl. Phys. **9** (1976) 101.

Shimizu R., Ze-Jun D., Rep. Prog. Phys. **55** (1992) 487.

Shimizu R. and Ichimura S., Surface Science **133** (1983) 250.

Shimizu R., Ze-Jun D., Rep. Prog. Phys. **55** (1992) 487.

Sorbier L., Thèse Doctorat d'Université Montpellier II, France (2001).

Sjostrand N. G., Surf. Interf. Anal. **23** (1995) 785.

Tannoudji C. C., Mécanique quantique T2, édition Herman (1993).

Tanoudji C. C., La matière espace temps, logique des particules élémentaires, édition Fayard (1986).

Tanuma S., Powell C.J. and Penn D.R., Surf. and interface analys. **11** (1988) 577.

Tilinin I. S., M. Werner W. S., Phys. Rev. B **46** (1992)13739.

Tilinin I. S., Werner W. S. M., Surf. Sci. **290** (1993) 119.

Tilinin I. S., Phys. Rev. A **51** (1995) 3058.

Tilinin I. S., Jablonski A., S. Tougaard, Phys. Rev. B **52** (1995) 5935.

Tilinin I. S., Jablonski A., Werner W. S. M., Prog. Surf. Sci. **52** (1996) 193.

Tilinin I. S., Eksp Zh., Teor. FIZ **94** (1998) 96 [SN. Phys. JETP 67, 1570(988)].

Tilke A., Vogel M., Simmel F., Kriele A., Blick, R. H., Lorenz H., Wharam, D. A. and Kotthaus J. P., J. Vac. Sci. Technol. B **17**(1999)1594.

Valkealahti S. and Nieminen R. M., Appl. Phys. A **32** (1983) 95.

Valkealahti S. and Nieminen R. M., J. Appl. Phys. A: solids surf. 35, **51** (1984) 51.

Vicanek M. and Urbassek H. M., Phys. Rev. B **44** (1991) 7234.

Wedepohl P. T., J. Phys., B (Proc. Phys. Soc.), **1**(1968) 307.

Werner W. S. M., Tilinin I. S., Appl. Surf. Sci. **70/71** (1993)29.

Werner W. S. M., Tilinin I. S. and Hayek M., Phys. Rev. B 50 (1994) 4819.

Werner W. S. M., Surf. Interface Anal. **31** (2001)141.

Werner W. S. M., Phys. Rev. B **71** (2005)115415.

Wong B. T. and Menguç M. P., Thermal for application in micro Nanomachining, Springer (2008).

Yasuda M., Kawata H. and Murata K., J. Appl. Phys. **77** (1995) 4706.

Yu Ki-Su and Lin S., J. Korean Phys. Society, **22** (1989) 253.

Zhenyu T. and Hancai H., Chines Scie. Bulletin, **43** (1998) 171.

ملـــــخص

لقد استعرضنا تصحيحا مبسطـــا للعبـــارة التحليلية التقريبية للمـقطع الفعـــال لتنقل الإلكـترون و المشتقة مـــن طرف جبلونســكي *[PRB 58,24(1998)]*. من جهـــــة أخرى، تم اقــتراح تصحيحا جديــدا لنفس العبـــارة . استعمـــالنا للقيم الناتجة من هـــاته العبـــارة مع عبـــــارات فيكاناك و أوربزك *[Phys.Rev.B 44, 7234 (1991)]* و كذا طريقة المحاكات مونتي كارلو ، تم حساب معامل الحيود الإرجاعي للألومنيوم و النحـــاس في مجـال الطاقة بين 1 و 4 كـــيلوفولط. إن النتائج المتحصل عليها فيما يخص معامل الحيود الإرجاعي تتوافق مع النتائج التجريـــبية . زيـــادة على ذالك، تم دراسة و مناقشة معامل الحيود الإرجاعي و المسافـــة المتوسطة للإنغمـاس بدلالة سمك الطبقات الرقيـــقة المعدنية في مجال النانومتر و أكبر من ذالك.

Abstract

In the present work, we propose a simplified correction to the approximate analytical expression of transport cross section of electron derived by Jablonski *[PRB 58, 24(1998)]* where an argued parameter is introduced. In other order, we have proposed a new correction to the same expression. Using the value of this new correction with the Vicanek and Urbassek theory *[Phys.Rev.B 44, 7234 (1991)]* combined with a Monte Carlo simulation are used to investigate the transport, we have calculate backscattering coefficient of electron in Al and Au. And theses are for the energy range between 1 and 4 keV. The obtained results accord with success with previous calculations and clearly represent an improvement with respect to more sophisticated transport cross sections. In addition, the behavior of both backscattering coefficient and mean penetration depth versus the metallic film thickness in the nano-scale region and beyond of it is analyzed and discussed.

Résumé

Dans le présent travail, on a proposé une correction simple, à l'expression analytique approximative de la section efficace de transport des électrons dérivée par Jablonski *[PRB 58,24(1998)]*, où un paramètre argumenté a été introduit. D'autre part, une nouvelle correction à la même expression analytique est proposée. En utilisant les valeurs obtenues a partir de cette nouvelle correction avec la théorie de *Vicanek et Urbassek [Phys.Rev.B 44, 7234 (1991)]* combinée avec la simulation Monte-Carlo on a calculé le coefficient de rétrodiffusion de l'électron pour l'Al et le Cu, et ce pour des électrons d'énergie allant de 1 à 4 keV. Les valeurs obtenues du coefficient de retrodiffusion, sont en bon accord avec ceux de l'expérience. De plus, le coefficient de rétrodiffusion et la profondeur moyenne de pénétration en fonction de l'épaisseur des couches minces métalliques dans la région nanométriques et au delà de cette région ont été étudié est discuté.