



N° d'ordre : .....

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

**Université Mohamed Boudiaf - M'sila**

**Faculté des Sciences**

**Département de Physique**

**MEMOIRE**

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

**MASTER**

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Sciences des Matériaux**

Par

**KHEMISSA Siham**

**THEME**

---

**Etude des pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire des**  
**matériaux solides**

---

Soutenu le : 5./06/2016

Devant le jury composé de :

DEGHFEL Bahri	MCA Univ. de M'sila	Président
NEKKAB Mohammed	Prof Univ. de M'sila	Rapporteur
KAHOUL Abdelhalim	Prof Univ. de BBA	Examineur

Promotion Juin 2016

# Remerciements

Ce travail a été effectué sous la direction de Monsieur **NEKKAB Mohammed**, professeur à l'université Mohammed Boudiaf de M'sila, qui malgré ses nombreuses occupations, à dispensé sans compter son temps et ses conseils pour l'élaboration du mémoire, Qu'il veuille bien trouver ici l'expression de mes profondes gratitudes et mes admirations.

Nous avons toujours trouvé un accueil chaleureux et un bon conseil auprès de Monsieur **DEGHFEL Bahri**, maître de conférences à l'université Mohammed Boudiaf de M'sila, qui m'a fait l'honneur de présider le jury. Qu'il me soit permis de lui exprimer toute ma reconnaissance et mes plus sincères dévouements.

Que Monsieur **KAHOUL Abdelhalim**, professeur à l'université Mohammed el Bachir El Ibrahimi de Bordj-Bou-Arréridj, qui m'a fait l'honneur d'examiner ce travail, qu'il veuille bien accepter mes plus vifs remerciements.

Je suis heureuse également de trouver l'occasion de témoigner ma reconnaissance à tous ceux qui ont participé de près ou loin à l'élaboration de ce travail.

**KHEMISSA Siham**

**Mai 2016**

*Dédicace*

*Je dédie ce mémoire à:*

*En témoignage de ma reconnaissance*

*A mes très chers parents*

*A Mes sœurs*

*Imane, Sourya, Asma, Amira, Kenga*

*Tous les membres de ma famille*

*A tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin*

*A tous ceux qui dans la crainte d'Allah et d'Allah seul*

*Accomplissent leur devoir*

*Tous mes professeurs*

*Tous mes amis*

*Tous mes collègues*

# Sommaire

---

Introduction générale	1
<b>Chapitre I: Interaction Rayonnement-Matière</b>	
I.1. Introduction	4
I.2. Particules chargées lourdes (proton, $\alpha$ )	4
I.3. Interaction des particules chargées avec la matière	4
I.4. L'expérience et la description des collisions élastiques et inélastiques	5
I.5 La diffusion	6
I.5.1 Diffusion élastique	6
I.5.2 Diffusion inélastique	6
I.6. Les collisions élastique ion-atome	6
I.6.1. Notion de section efficace	9
<b>Chapitre II : Pouvoir d'arrêt et Parcours des Particules Chargées de la Matière</b>	
II.1. Introduction	14
II.2. La perte énergie	15
II.2.1. Le pouvoir d'arrêt d'une particule chargée dans la matière et le parcours	16
II.2.2. Diffusion de Rutherford	17
II.2.3. Calcul de la perte d'énergie due aux chocs coulombiennes	18
II.2.4 Cas d'un matériau amorphe	19
II.2.4.1 Perte d'énergie par collisions élastiques: pouvoir d'arrêt nucléaire	19
II.2.4.2 Perte d'énergie par collisions inélastiques: pouvoir d'arrêt électronique	20
II.2.4.2.1 Régime des grandes vitesses, non relativistes	21
II.2.4.2.2 Régime des vitesses intermédiaires	22
II.2.4.2.3 Régime des basses vitesses	22
II.2.5 Cas d'un matériau cristallin	23
II.2.6 Le pouvoir d'arrêt global	25
II.2.7 Comparaison entre les pertes d'énergie électronique et nucléaire	25
II.3 Distribution des ions implantés en profondeur	26

# Sommaire

---

II. 4 Modèle de distributions théoriques	27
II. 4.1 Modèle de distributions Gaussienne	27
II. 4.2 Modèle de distributions demi- Gaussienne	28
II. 4.3 Modèle de distributions Pearson IV	28
<b>Chapitre III : Résultats et discussions</b>	
III .1 Introduction	32
III.2 Le programme SRIM [The Stopping and Range of Ion in Matter]	33
III.2.1 Logiciel	33
III.3 Perte énergie électronique et nucléaire en fonction de l'énergie	36
III.4 Perte énergie électronique et nucléaire en fonction du numéro atomique de la cible Z	37
III.5 Etude du rapport perte d'énergie électronique/nucléaire	38
III.6 Parcours des protons dans différentes cibles	40
Conclusion	42
Référence bibliographiques	43
Résumé	

## Introduction générale

Dans la physique du solide moderne la diffusion des particules chargées ainsi que le transport de la matière est un thème très important pour déterminer les propriétés microscopiques des corps souvent en utilisant un faisceau des particules de caractéristiques physiques connues pour explorer une cible de composition inconnue.

En utilisant l'étude de la diffusion des particules à faible énergie pour le nettoyage de surfaces on étudie la structure périodique des atomes sur la surface du matériau, la modification des propriétés physiques sous la surface bombardée, l'implantation dans le dopage des semi-conducteurs le principe de base est le suivant, des atomes dopants sont vaporisés, ionisés, accélérés et projetés sur les matériau à doper dans lequel se produisent de nombreuses collisions avec les atomes cibles.

Les théories existantes modélisent les deux processus de pertes d'énergie (nucléaire et électronique), et tentent d'en déduire le profil de distribution des impuretés en volume dans le matériau, deux catégories sont distinguées selon que le matériau dopé est amorphe ou cristallin.

Pour détecter des particules chargées, on utilise à température ambiante des détecteurs à semi-conducteurs constitués de silicium. Les particules chargées sont directement ionisantes, elles cèdent toute leur énergie au milieu par des processus d'ionisation et d'excitation.

Les ions sont accélérés à l'énergie requise, cette énergie étant directement liée à la profondeur d'implantation des ions dans la cible. Lorsqu'un ion accéléré pénètre dans un solide, certains des atomes présents en surface sont éjectés du solide à l'état neutre ou ionisé : C'est le phénomène de pulvérisation

L'accélérateur de particules comprend une chambre d'ionisation ou la génération des ions est réalisée dans un plasma excité à partir d'une source liquide, gazeuse ou solide. Après une première accélération la sélection des ions se fait dans un spectromètre de masse (champs magnétique).

Le but essentiel dans cette travail est l'étude des pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire des matériaux solides.

Dans le premier chapitre nous décrivons les interactions ion-matière, nous introduisons, et la pénétration d'une particule chargées lourdes et l'interaction des particules chargées avec la matière, l'expérience et la description des collisions élastiques et inélastiques, nous exposons la diffusion en générale est les collisions

élastiques essentiellement et la notion de section efficace pour différents cas de potentiels.

Dans le deuxième chapitre nous décrivons le pouvoir d'arrêt et le parcours nous introduisons, la perte énergie et le pouvoir d'arrêt dans le cas d'un matériau amorphe et cristallin le pouvoir électronique et nucléaire (collision élastique et collision inélastique) et nous faisons une comparaison entre les deux types de pouvoirs d'arrêt. Nous déterminons ensuite le pouvoir d'arrêt global et nous parlons de la distribution des ions implantée en profondeur et les modèle de distributions en introduisant le modèle de distribution Gaussienne et le modèle en fonction demi-Gaussienne et modèle de distributions de Pearson IV

Enfin, nous donnons une brève description du programme de simulation SRIM /TRIM

Dans le troisième chapitre, nous présentons et discutons les résultats de simulation.

Nous terminerons notre étude par une conclusion générale

# Chapitre I

## Interaction Ion Matière

## I.1. Introduction

Une particule chargée pénétrante dans un milieu, interagit par la force coulombienne, avec les noyaux ou les électrons orbitaux des atomes cibles. Quel que soit le mécanisme d'interaction entre les particules chargées et la matière, il y a transfert progressif d'énergie et ralentissement des particules incidentes. [1]

## I.2. Particules chargées lourdes (proton, $\alpha$ ) :

Une particule chargée lourde (la masse d'un proton est environ 1840 fois plus grande que celle d'un électron) ; pénétrant dans un milieu, interagit avec les atomes du milieu et se ralentit. La force d'interaction dominante est la force coulombienne entre la particule incidente, chargée positivement, et les électrons atomiques, chargés négativement.

Les interactions avec les noyaux, que ce soit par l'intermédiaire des forces coulombiennes ou des forces nucléaires, sont exceptionnelles (environ 10 fois moins fréquentes qu'avec les électrons) et peuvent être négligées dans le processus de ralentissement. On distingue alors trois processus d'interaction majoritaires:

-Si l'interaction est assez intense, le transfert d'énergie peut être suffisant pour arracher un électron de l'atome auquel il était lié : c'est le phénomène d'ionisation. Il y a création d'une paire d'ions (ion positif et électron) dans le milieu.

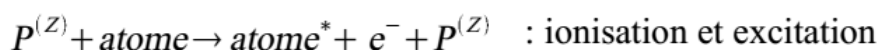
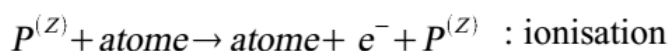
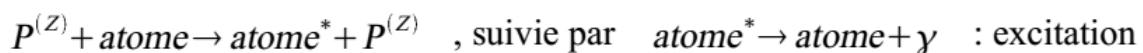
-Si l'interaction est insuffisante pour créer une ionisation, il y a seulement excitation : l'électron change d'état quantique, l'excitation le fait passer d'un état initial, d'énergie de liaison  $E_0$ , à un état final moins lié, d'énergie  $E$ .

-Un troisième type de processus concerne la capture électronique au cours de laquelle le projectile capture, sur une de ses orbitales externes, un électron de l'atome cible.

En conséquence, les particules chargées lourdes, étant beaucoup plus lourdes, elles ne sont pas sujettes au rayonnement de freinage. Les transferts d'énergie sont importants et la trajectoire est approximativement rectiligne. [1]

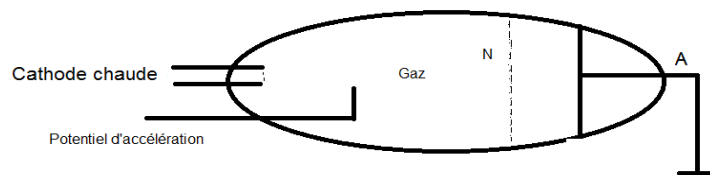
## I.3. Interaction des particules chargées avec la matière

L'ionisation et l'excitation coulombienne d'atomes sont les processus dominants dans l'interaction de particules chargées avec la matière. Une particule  $P$  d'état de charge  $Z$  peut provoquer les réactions suivantes : [2]



### I.4.L'expérience et la description des collisions élastiques et inélastiques :

La collision est l'interaction entre particules avec un transfert de quantité de mouvement ( $p$ ) et de transfert d'énergie ( $\varepsilon$ )[3]. Pour déterminer la nature des collisions à savoir si elles sont élastiques ou inélastiques, il est souvent nécessaire d'étudier, après le choc, la répartition des vitesses. Cette étude est réalisée à partir de la méthode des potentiels de freinage (figure (I.1)) par l'expérience de Frank et Hertz. Un faisceau d'électrons de même énergie cinétique est émis dans une ampoule contenant un gaz sous faible pression ou une grille (N) portée à un potentiel retardateur varié ( $V_1$ ). On analyse avec estimation d'énergie cinétique des électrons sortants qui sont en collision avec le gaz des atomes (Cette énergie est transférée aux atomes du gaz). Certains électrons ont perdu des quantités d'énergie de valeurs discrètes (distinctes), Seuls les électrons, qui ont une énergie supérieure ou égale à l'énergie potentielle entre A et N, peuvent atteindre la plaque A.



**Figure I.1** principe de la méthode des potentiels de freinage

D'après la démonstration de Frank et Hertz qui ont démontré que si l'énergie des électrons ne dépasse pas une certaine valeur critique ( $\leq$  la valeur critique), la collision entre les électrons et les atomes est de nature élastique. Cela est réalisé expérimentalement par la mesure de la distribution des énergies et des vitesses des électrons en fonction du potentiel de freinage pour différentes distances entre la cathode et la plaque A et pour un potentiel d'accélération bien défini [4].

Les courants résultants en A sont les mêmes bien que l'électron subisse un nombre beaucoup plus grand de collisions dans le cas où la distance est grande que dans le cas où la distance est petite. Il en résulte que les chocs s'effectuent de façon suffisamment élastique.

Frank et Hertz dans leurs expériences ont l'existence des collisions inélastiques. Ils ont porté la grille (N) un potentiel fixé ( $\approx 0.5V$ ) par rapport à la plaque A et ont fait varier le potentiel d'accélération. N devait retenir les électrons ayant perdu presque la totalité de leurs énergies par suite des collisions inélastiques. L'expérience consistait la mesure du courant de la plaque A en fonction du potentiel d'accélération [5]. Cette fonction présente des maxima. Tant que l'énergie de l'électron n'atteint pas la valeur maximale du potentiel d'accélération, il subit, avec les atomes, aux collisions élastiques et le courant augmente avec l'élévation du potentiel. Quand le potentiel atteint la valeur maximale, le choc devient inélastique, l'électron cède à l'atome, au cours de la collision, la majorité de

son énergie. Ces électrons n'atteignent pas la plaque A, car ils seront attirés par la grille N et le courant chute brusquement. Seuls les électrons qui n'ont ou peu perdu leur énergie, qui sont la majorité, peuvent atteindre la plaque A. Si l'énergie des électrons dépasse de beaucoup la valeur maximale, ces électrons, après avoir perdu une partie de leur énergie du fait de choc inélastique, conservent de nouveau un excès d'énergie suffisant pour atteindre la plaque A et le courant recommence à monter. Sur le parcours restant, après première collision, l'électron peut subir encore à une ou plusieurs collisions inélastiques (suivant les autres niveaux d'excitation de l'atome), ce que présente par la suite une réparation périodique des pics du courant en fonction du potentiel d'accélération.

**I.5. La diffusion :** Au cours de laquelle le neutron perd de l'énergie cinétique et change de direction; ce processus est dominant pour les neutrons rapides ( $\sim$ MeV).

**I.5.1 Diffusion élastique :** La diffusion élastique rappelle la collision entre des boules de billard. Un neutron frappe un noyau, lui transfère de l'énergie et rebondit dans une direction différente. (Parfois le noyau absorbe le neutron puis le réémet avec la même énergie cinétique.) La fraction de l'énergie de départ qui sera absorbée par le noyau dépend de l'angle d'incidence — en plein « front » ou avec un angle — tout comme une boule frappée par la boule de choc sur un billard. Le noyau cible absorbe l'énergie perdue par le neutron et se déplace ensuite à plus grande vitesse.

**I.5.2 Diffusion inélastique :** Lors d'une collision avec un noyau, un neutron peut être absorbé momentanément. Ce noyau composé sera dans un état excité. Il se désexcitera en émettant un nouveau neutron, moins énergétique, et un photon gamma qui emportera la différence d'énergie.[6]

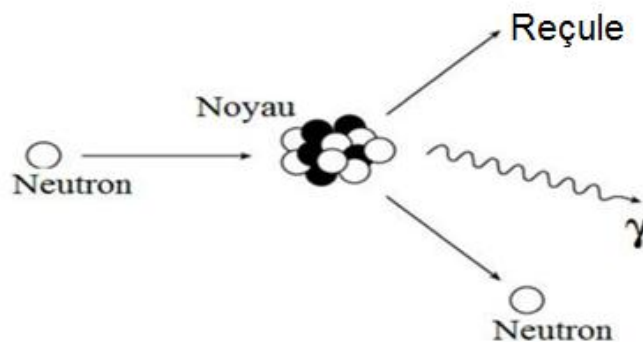


Figure I.2 diffusion inélastique.

## I.6. Les collisions élastiques

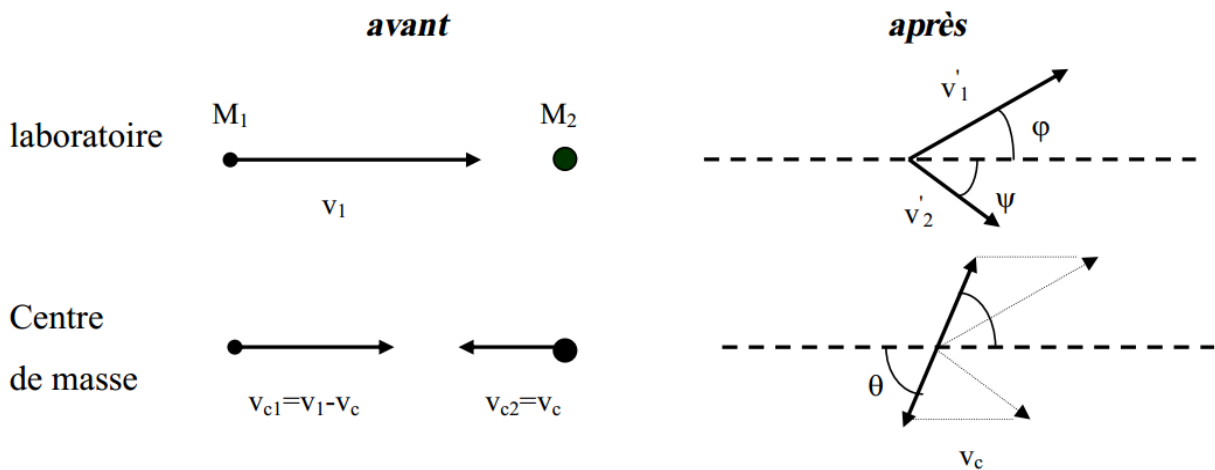
Les diffusions élastiques sont essentiellement des interactions coulombiennes avec les atomes, au cours de ces collisions, l'énergie cinétique des particules et leur quantité de mouvement sont conservées. Les noyaux, leurs masses étant très supérieures à celles des électrons incidents, induisent dans leur environnement un champ électrique très intense, peuvent faire subir à la direction de l'électron une variation allant jusqu'à un angle de 180 degrés [7].

Dans le cas d'interaction proche de la surface, l'électron peut ressortir par la surface avant du matériau, on dit qu'il est rétrodiffusé (diffusion vers l'arrière). La proportion et les énergies de tels électrons dépendant de leurs énergies primaires ainsi que des propriétés physiques du matériau considéré.

Cependant la majorité des électrons suivant leurs chemins sans trop s'approcher du noyau en raison de l'écrantage produit par les électrons atomiques [7].

La collision entre les projectiles les atomes de la cible dans laquelle l'énergie cinétique et la quantité de mouvement sont conservées est dite collision élastique [8].

Considérons dans le système du laboratoire une collision élastique entre un projectile de masse  $M_1$  de vitesse  $V_1$ , et un atome cible de masse  $M_2$  et au repos ( $V_2 = 0$ ). Soit  $\varphi$  l'angle de déflexion du projectile  $\Psi$  l'angle de recul de l'atome de la cible. Après la collision,  $V_1'$  et  $V_2'$  sont leur vitesse respectives, on considère le centre de masse du système avec les paramètres  $V_{c1}$ ,  $V_{c2}$  et  $\theta$  qui représente respectivement la vitesse du projectile, de l'atome de la cible et l'angle de déflexion du projectile [8]



**Figure I.3** : collision élastique entre deux particules dans le système de référence de laboratoire  $SL$  et centre de masse  $SCM$

On peut écrire les relations suivantes :

$$v_{c2} = v_c ; \quad v_c = \frac{M_1 v_1}{(M_1 + M_2)} \tag{I.1}$$

$$\text{ET} \quad v_{cl} = \frac{M_2 v_1}{(M_1 + M_2)} \tag{I.2}$$

$$\theta/2 + \Psi = \pi/2 \text{ d'où } \Psi = (\pi - \theta)/2 \tag{I.3}$$

$$v_1' \sin \varphi = v_{cl} \sin \theta \quad \text{et} \quad v_1' \cos \varphi = v_{cl} \cos \theta + v_c \tag{I.4}$$

Donc :

$$\tan \varphi = M_2 \sin \theta / (M_1 + M_2 \cos \theta) \quad \text{I.5}$$

L'énergie transférée à la particule de masse  $M_2$  est:

$$E'_2 = \frac{1}{2} M_2 v'^2_2 \text{ où } v'_2 = 2 v_c \frac{\sin \theta}{2} \quad \text{I.6}$$

Donc

$$E'_2 = \frac{2M^2_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} v^2_1 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad \text{I.7}$$

$$\text{Soit } E'_2 = 4 \frac{M^2_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \sin^2 \frac{\theta}{2} = T_{max} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad \text{I.8}$$

$$\text{Où } E + \frac{1}{2} M_1 v_1^2 \quad \text{et} \quad T_{max} = 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad \text{I.9}$$

On remarque que l'énergie transférée est maximale lorsque  $M_1 = M_2$  ( $T_{max} = E$ ) et elle décroît fortement lorsque la collision est dissymétrique.

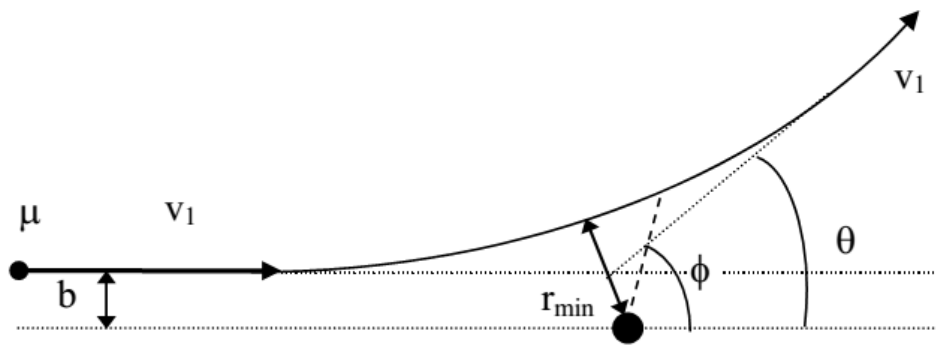
L'énergie résiduelle du projectile est:

$$E'_1(\theta) = \left[ 1 - 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \right] E \quad \text{I.10}$$

Exprimée en fonction de l'angle de déflexion dans le laboratoire, la formule précédente s'écrit:

$$E'_1(\varphi) = \left[ \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{M_1}{M_2}\right)^2 \sin^2 \varphi} + \frac{M_1}{M_2} \cos \varphi}{1 + \frac{M_1}{M_2}} \right]^2 E = K(\varphi) E \quad \text{I.11}$$

Où  $K(\varphi)$  est le facteur cinématique. Cette formule est utilisée en spectrométrie de rétrodiffusion Rutherford (RBS) pour caractériser l'énergie d'une particule rétrodiffusée à un angle donné. Cette énergie dépend de la masse du centre diffuseur et de l'énergie incidente. Lorsque le projectile est beaucoup plus léger que la cible ( $M_1 \ll M_2$ ), tous les angles de déflexion sont possibles cinématiquement et l'énergie du projectile est presque inchangée, l'angle de recul de l'atome de la cible est compris entre  $0^\circ$  et  $90^\circ$ . Dans le cas inverse ( $M_1 > M_2$ ), qui est le cas le plus fréquent avec des ions Au+, l'énergie du projectile varie peu également, et seuls les angles avant sont permis (faibles déflexions). Dans le cas particulier où  $M_1 = M_2$  le projectile peut être stoppé dans une collision où il transfère toute son énergie à l'atome diffuseur ( $T_{max} = E$ ). L'angle de déflexion  $\theta$  peut être calculé dans le référentiel du centre de masse. Pour cela on considère la trajectoire de la particule de masse réduite  $\mu = \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)}$  et de vitesse  $v_1$  lors d'une collision avec un centre diffuseur fixe de masse infinie.



$b$  est le paramètre d'impact de la collision,  $V(r)$  le potentiel d'interaction mis en jeu dans la collision et  $r_{min}$  la distance minimale d'approche. On en déduit alors l'angle de déflexion:

$$\theta = \pi - 2 \int_{r_{min}}^{\infty} d\Phi(r) = \pi - 2 \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{b}{r^2} \frac{dr}{\sqrt{1 - \frac{v(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}}} \quad \text{I. 12}$$

### I.6.1. Notion de section efficace :

Le nombre de particules que l'on détecte est bien sûr proportionnel au nombre de particules incidentes et au nombre de noyaux cibles. La relation de proportionnalité s'exprime par l'intermédiaire d'un coefficient de proportionnalité  $\sigma$ . [9]

La relation entre le taux d'interaction ( $T$ ) (nombre de particules « diffusées » par unité du temps) et la section efficace ( $\sigma$ )

$$T = \sigma \Phi N_{cible} = \sigma \Phi S_{cible} s \quad \text{I. 13}$$

Avec

$\Phi$  - le flux, c'est-à-dire le nombre de particules incidentes par unité de surface et par unité du temps,

$N_{cible}$  - le nombre de particules cibles dans le volume de la cible correspondant à la surface ( $S$ ) couverte par le faisceau,

$s_{cible}$  - le nombre de particules cibles par unité de surface (densité surfacique de particules).

Nous allons considérer le cas d'un potentiel d'interaction central  $V(r)$  qui dépend seulement de la distance  $r$  par rapport au centre du potentiel.

Le faisceau incident sera dans la direction de l'axe  $z$  et donc la section efficace différentielle sera une fonction de  $\theta$  seulement, pas de  $\phi$ . Un cas particulier est celui de la diffusion de particules  $\alpha$  sur un noyau.

Du fait de la symétrie, toutes les particules qui ont des paramètres d'impact compris entre  $b$  et  $b + db$  seront diffusées entre  $\theta$  et  $\theta + d\theta$ . Elles sont donc associées à une « surface »  $2\pi b \cdot db$  perpendiculaire au faisceau.

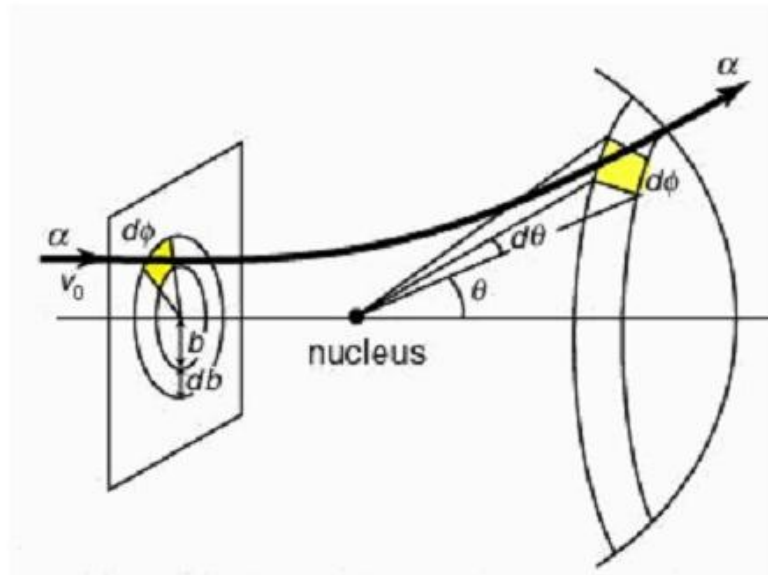


Figure I.4.representent la section efficace.

Nous aurons donc  $dn$  particules diffusées à l'angle  $(\theta, \theta+d\theta)$  :

Soit si l'on tient compte de  $d\Omega = 2\pi\sin\theta d\theta$  on obtient (secti 2010)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi b db}{2\pi\sin\theta d\theta} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| \tag{I.13}$$

La section efficace est une mesure de la probabilité de déflexion d'un ion à un angle  $\theta$ . Pour la calculer le potentiel d'interaction doit être connu.(8)

**Cas du potentiel coulombien :**

C'est le cas le plus simple car il ne tient pas compte de l'écrantage de la charge du noyau par les électrons. L'énergie potentielle de deux charges  $Z_1$  et  $Z_2$  ponctuelles séparées d'une distance  $r$  est :

$$V(\mathbf{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \tag{I.14}$$

On définit le diamètre de collision  $r_m^0$  tel que  $\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_m^0} = \frac{1}{2} \mu v_1^2$

Soit 
$$r_m^0 = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{\mu v_1^2} \tag{I.15}$$

$r_m^0$  C'est la distance minimale d'approche à paramètre d'impact nul ( $b=0$ ). L'angle de diffusion dans le référentiel du centre de masse s'écrit simplement  $tg\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{r_m^0}{2b}$

II. 13 S'écrit :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_m^{02}}{16\sin^4\frac{\theta}{2}} = \frac{Z_1 Z_2 e^4}{4(\mu v_1^2)^2 \sin^4\frac{\theta}{2}} \tag{I.16}$$

Cette formule connue sous le nom de formule Rutherford En utilisant l'équation de l'énergie transférée lors de la collision:

$T = T_{max} \sin^2 \frac{\theta}{2}$  et  $\frac{d\Omega}{dT} = \frac{4\pi}{T_{max}}$ , on obtient la section efficace différentielle en énergie transférée telle que :

$$\frac{d\sigma}{dT} = \frac{2\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{M_2 V_1^2} \frac{1}{T^2} \quad \text{I. 17}$$

On constate que la section efficace varie en  $1/E$  et  $1/T_2$  : la diffusion élastique est plus probable pour les faibles énergies incidentes et les faibles moments transférés.

### Cas des potentiels réalistes :

Des modèles théoriques ou empiriques ont tenté de tenir compte de l'écrantage de la charge ponctuelle du noyau cible par son cortège d'électrons, lors de l'interaction avec un ion incident. Un des plus couramment employés est le modèle statistique de Thomas Fermi. Dans ce modèle le noyau est entouré par un nuage d'électron dont la densité diminue au fur et à mesure qu'on s'éloigne du noyau. Le potentiel d'interaction s'écrit:

$$V(r) = \frac{Ze}{r} \phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad \text{I. 18}$$

Où  $\phi(r/a)$  est la fonction d'écran qui dépend de la distance  $r$  entre les deux noyaux,  $a$  est le rayon d'écran :  $a = 0.8853 a_0 Z^{-\frac{1}{3}}$  avec  $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$  qui est le rayon de Bohr. Il n'existe pas de solution analytique pour exprimer la fonction d'écran  $\phi$ . Différentes approximations permettent d'obtenir une approche analytique de la fonction d'écran, donc du potentiel Thomas Fermi comme l'approximation de Molière :

$$\phi_M(x) = 0,35e^{-0.3x} + 0,55e^{-1.2x} + 0,1e^{-6x} \quad \text{I. 19}$$

Ou l'approximation de Lindhard :

$$\phi_L(x) = 1 - \frac{x}{\sqrt{x^2+3}} \quad \text{I. 20}$$

Si l'ion projectile est lui-même écranté par ses propres électrons, Lindhard a proposé le rayon d'écran

$$a = \frac{0.8853 a_0}{\left(\frac{2}{Z_1^3} + \frac{2}{Z_2^3}\right)^{\frac{1}{3}}} \quad \text{I. 21}$$

Où  $Z_1$  est le nombre moyen d'électrons liés du projectile.  $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$  ( $h^2/me^2$ ) est le rayon de Bohr.

Le calcul de la section efficace différentielle de diffusion élastique par un potentiel écranté n'est pas direct en général. Lindhard a montré qu'en introduisant des variables réduites pour l'énergie et le transfert d'énergie, la section efficace différentielle en transfert d'énergie peut être représentée par une courbe universelle valable pour tout couple ion-atome. (8)

Energie réduite :

$$\varepsilon = \frac{a}{r_m^0} = \frac{a}{Z_1 Z_2 e^2} \frac{M_2}{M_1 + M_2} E \quad \text{I. 22}$$

Transfert d'énergie réduite :

$$t = \varepsilon^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} = \varepsilon^2 T/T_{max}$$

**I.23**

## **Chapitre II**

### Le Pouvoir d'arrêt et le Parcours Rp

### II.1.Introduction

Un projectile (particule incidente) est caractérisé par sa masse atomique  $M$  ; son numéro atomique  $Z$ , sa charge  $q$  et son énergie initiale  $E$ . Lorsqu'il pénètre dans une cible ce projectile est ralenti en transmettant de l'énergie aux électrons et atomes de la matière traversée par plusieurs processus. D'où la notion de ralentissement des projectiles par perte d'énergie  $dE$ . Ce dernier est proportionnel à l'épaisseur traversée  $dX$  de la matière cible. (8)

Deux types d'interactions physiques peuvent se produire, chacun d'eux étant prédominant dans un domaine qui dépend des valeurs de l'énergie incidente de l'ion et de sa masse atomique. Ces deux processus de pertes énergétiques sont : la collision nucléaire et la collision électronique. La première est élastique et met à contribution les électrons de la cible, de fait, les modélisations du ralentissement de l'ion dans le matériau vont étudier séparément ces deux phénomènes, et les additionner ensuite pour déterminer le pouvoir d'arrêt total  $S$ . Lors d'une interaction ion-matière, l'ion incident transmet son énergie à la cible tout au long de son passage dans le matériau. La quantité d'énergie perdue par l'ion lors de son ralentissement dans la matière constitue alors un paramètre caractéristique concernant aussi bien les processus d'endommagement de la cible que l'émission de particules de cette dernière induite par irradiation. (10)

On appelle pouvoir d'arrêt  $S$  de la matière pour les ions incidents la perte d'énergie par unité de longueur et par unité de densité, soit  $S = \frac{1}{\rho} \times \frac{dE}{dX}$ , il est exprimé souvent en  $\text{MeV} / (\text{g}/\text{cm}^2)$ . Les longueurs sont exprimées en  $\text{g}/\text{cm}^2$  plutôt qu'en  $\text{cm}$  ( $1(\frac{\text{g}}{\text{cm}^2}) = \rho(\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}) \times 1(\text{cm})$  ou  $\rho$  est la densité). Quand on s'intéresse à l'interaction ion-solide du côté de l'ion incident, on étudie la perte d'énergie, la trajectoire et la variation d'état de charge. Du côté de la matière irradiée on considère ses transformations physico-chimiques sous l'effet de l'énergie reçue, telle que le dommage d'irradiation, la pulvérisation des atomes de surface ou l'implantation ionique (8). Les conséquences de l'interaction d'une particule chargée avec la matière peuvent être classées comme suit :

- Le transfert de quantité de mouvement aux atomes cible (par des chocs élastiques)
- Excitation et ionisation des électrons des atomes de la matière cible (chocs inélastiques)
- Collision ions atomes
- Génération de photons
- Diverse réactions nucléaires

Ces deux derniers processus se déroulent lors d'implantations à très hautes énergies (généralement supérieure au  $\text{GeV}$ ), et ne seront pas étudiés ici.

Le domaine énergétique envisagé dans la plupart des modèles présentés s'entend environ de  $1 \text{ KeV}$  à  $1 \text{ MeV}$ .

La profondeur de pénétration peut ainsi varier de  $100 \text{ \AA}$  à  $10 \mu\text{m}$ , et la dose de  $10^{12}$  à  $10^{18}$  ions/ $\text{cm}^2$ .

## II.2. La perte d'énergie

Lors d'une interaction ion-matière, l'ion incident transmet son énergie à la cible tout au long de son passage dans le matériau. La quantité d'énergie perdue par l'ion lors de son ralentissement dans la matière constitue alors un paramètre caractéristique concernant aussi bien les processus d'endommagement de la cible que l'émission de particules de cette dernière induite par irradiation. Ce paramètre est appelé **pouvoir d'arrêt**. Le pouvoir d'arrêt est caractéristique du milieu traversé et de la particule incidente (nature et énergie de l'ion projectile). Noté  $-\frac{dE}{dx}$  on peut l'exprimer en  $keV.nm^{-1}$  ou en  $MeV.g^{-1}.cm^{-1}$ . [11]

$$P_e = -\frac{dE}{dx} \quad \text{II. 1}$$

Ce concept peut être défini en ramenant l'interaction de la particule avec un constituant élémentaire de la cible comme par exemple ses atomes. On définit dans ce cas la section efficace d'arrêt :

$$S_E = \frac{1}{N} P_E = S_n + S_e \quad \text{II. 2}$$

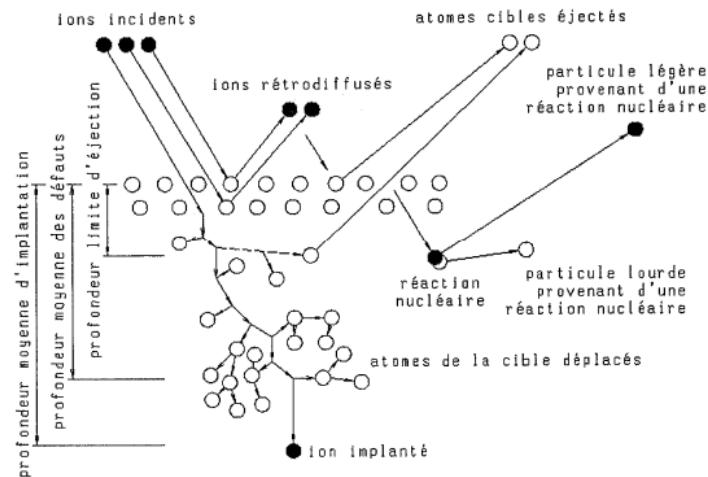
$S_E$  est le pouvoir d'arrêt atomique;  $S_n$  : le pouvoir d'arrêt nucléaire ;  $S_e$  : le pouvoir d'arrêt électronique ;  $N$  : concentration atomique de la cible ;

Selon le processus collisionnel considéré lors des interactions inélastiques ou élastiques, un pouvoir d'arrêt électronique et un pouvoir d'arrêt nucléaire sont définis.

D'après J. Lindhard et collaborateurs [Lindhard 1963a, Lindhard 1963b], la perte d'énergie ou pouvoir d'arrêt par unité de longueur dans la cible est obtenu en sommant les pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique :

$$\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e \quad \text{II. 3}$$

Si l'énergie transférée par collisions nucléaires aux atomes du matériau cible est supérieure à l'énergie de liaison, ces noyaux vont acquérir une énergie de déplacement qui leur permettra d'interagir avec d'autres noyaux du matériau cible, en les délocalisant à leur tour. On assiste à un processus en cascade de création de défauts, ce qui endommage le matériau. On peut avoir une pulvérisation de la cible quand ce processus a lieu en surface, les noyaux peuvent être éjectés du matériau. On précise aussi que si la masse des ions incidents est plus faible que celle des atomes du matériau cible, les ions incidents peuvent rebondir sur les noyaux, en subissant un phénomène de rétrodiffusion.



**Figure II.1.** Différentes interactions dans le matériau cible.[13]

Si nous négligeons les réactions nucléaires qui, pour les ions considérés, ont des sections efficaces trop faibles pour apporter une contribution notable à l'endommagement, nous pouvons dire que deux mécanismes fondamentaux décrivent l'interaction de l'ion incident dans la matière.

- Les collisions "élastiques" ou interactions coulombiennes directes entre la particule incidente et les noyaux de la cible. - Les collisions "inélastiques" ou interactions avec les électrons de la cible.

A basse énergie ( $\approx 1 \text{ keV/u}$ ), le ralentissement de l'ion est essentiellement de nature "élastique". En revanche, il est essentiellement de nature "inélastique" à haute énergie ( $> 100 \text{ keV/u}$ ), avec un maximum appelé "pic de Bragg" (voir § A-V.2). Il est localisé aux environs de  $0.15 \text{ MeV/u}$  (pour les protons) à  $5 \text{ MeV/u}$  (pour l'uranium). Dans cette étude, compte tenu de l'énergie des ions (supérieure à  $0.1 \text{ MeV/u}$ ), c'est donc essentiellement le domaine des collisions "inélastiques" qui nous intéresse.

Il existe plusieurs grandeurs qui nous permettent de quantifier le dépôt d'énergie dans la matière:

(1) Le pouvoir d'arrêt  $S = -\left(\frac{dE}{dx}\right)$  qui dépend des sections efficaces des collisions élastiques et inélastiques.

(2) Le parcours de l'ion dans la matière ( $R_p$ ) qui dépend de la vitesse de l'ion et du pouvoir d'arrêt  $S$ .

(3) Le flux ( $\Phi$ ) représentant le nombre de particules incidentes envoyées sur la cible, par unité de surface et par unité de temps ( $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ ).

(4) La fluence ( $F$ ) correspondant au nombre total de particules reçues par la cible par unité de surface (ions/ $\text{cm}^2$ ):  $F = \int_0^T \phi \, dT$ ,  $T$  étant le temps total d'irradiation exprimé en seconde.[14]

### II.2.1. Le pouvoir d'arrêt d'une particule chargée dans la matière et le parcours $R_p$

La relation liant les deux grandeurs est la suivante :  $S = -\frac{dE}{dx}$  Le pouvoir d'arrêt  $S$  s'exprime couramment en  $\text{keV/nm}$ , ou en  $[\text{MeV}/(\text{mg}/\text{cm}^2)]$  (souvent en physique nucléaire), ce qui correspond

à  $\frac{dE}{d(\rho x)}$ ,  $\rho$  étant la densité massique du matériau. Le pouvoir d'arrêt est donc une caractéristique du milieu traversé d'une part (la densité électronique de la cible, la structure de bandes...), et des particules projectiles d'autre part (l'énergie de l'ion projectile  $E_1$ , l'état de charge  $q_1$ , le nombre atomique  $Z_1$ , la masse  $M_1$ , états excités...).

Selon le processus collisionnel considéré, interactions inélastiques ou élastiques, le pouvoir d'arrêt électronique et le pouvoir d'arrêt nucléaire sont respectivement définis. Le pouvoir d'arrêt (ou la perte d'énergie) par unité de longueur dans la cible, est obtenu en sommant les pouvoirs d'arrêt nucléaire (n) et électronique (e) :[13]

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

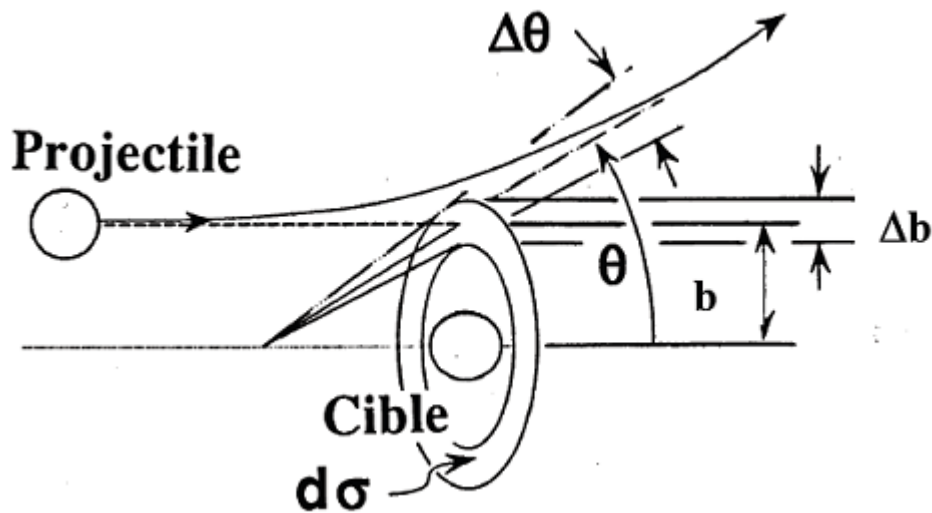
Le pouvoir d'arrêt permet d'évaluer le parcours réel de l'ion projectile dans la matière. Au cours de l'interaction, la vitesse de l'ion incident diminue et l'ion se retrouve piégé dans la matière. Il est alors possible de déterminer le parcours R de l'ion le long de sa trajectoire dans la cible, donné par la relation :

$$R = \int_0^T \frac{dE}{dx}^{-1} dE \tag{II.4}$$

Où T représente l'énergie cinétique de la particule à son entrée dans le milieu.[12]

**II.2.2 Diffusion de Rutherford :**

En mécanique classique, les trajectoires de deux particules après une collision sont bien déterminées par leurs vitesses, leurs masses et leurs paramètres d'impact (figure II.1).



**Figure II-2 :** Caractérisation classique de l'interaction entre deux corps en fonction du paramètre d'impact b, de l'angle de diffusion  $\theta$  et de la section efficace différentielle de collision  $d\sigma$  .

Pour une collision coulombienne, l'angle de diffusion  $\theta$  dans le référentiel du centre de masse est relié au paramètre d'impact b et au diamètre de collision p par la relation :

$$tg\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{p}{2b} \quad \text{II. 5}$$

$p$  : représente la distance minimum d'approche entre la particule incidente et la particule cible, lors d'un choc frontal ( $b = 0$ ), défini par :

$$\frac{Z_1 Z_2 e^2}{p} = \frac{M_0 V_1^2}{2} \quad \text{II. 6}$$

$Z_1$  et  $Z_2$  sont respectivement la charge du projectile et de la cible

$M_0$  : la masse réduite définie par :  $(M_1 M_2)/(M_1 + M_2)$

$M_1$  : la masse du projectile d'énergie  $E$  et de vitesse  $V_1$

$M_2$  : la masse de la particule cible, supposée au repos.

L'énergie cinétique communiquée à la cible est :

$$T = \frac{T_{max}}{1 + \left(\frac{2b}{p}\right)^2} = T_{max} \left(\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)^2 \quad \text{avec} \quad T_{max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad \text{II. 7}$$

$T_{max}$  Représente l'énergie maximale transférée dans le cas d'un choc frontal ("binary encounter"). [14]

### II.2.3. Calcul de la perte d'énergie due aux chocs coulombiens

La section efficace d'un tel transfert a été calculée par E. Rutherford [15] :

$$d\sigma(E, T) = 2\pi b db = \pi \left(\frac{p}{2}\right)^2 T_{max} \frac{dT}{T^2} \quad \text{II. 8}$$

La perte d'énergie est donnée par l'expression :

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right) = N \int_{T_{min}}^{T_{max}} T d\sigma(E, T) \quad \text{II. 9}$$

$N$  est la densité atomique.

En remplaçant  $d\sigma(E, T)$  par l'expression (II-8) ainsi que  $T_{max}$  par (II-7) et  $p$  par (II-6), nous obtenons :

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right) = N (Z_1 Z_2 e^2)^2 \frac{2\pi}{M_2 V_1^2} \ln \frac{T_{max}}{T_{min}} \quad \text{II. 10}$$

$T_{min}$  Correspond à une énergie de liaison minimale (électrons de valence, ou excitation intra-bande). Elle est introduite afin d'éviter la divergence de l'intégrale.

### II.2.4 Cas d'un matériau amorphe

L'un des facteurs principaux qui joue un rôle intéressant dans les théories de l'arrêt des ions, dans un matériau, est la perte d'énergie par unité de profondeur (longueur) (i.e le pouvoir d'arrêt ou section efficace de ralentissement). Il traduit la diminution de l'énergie cinétique pendant la

pénétration des ions dans le solide selon la théorie LSS (Lindhard, Scharff et Schiott) [13,16]. Deux processus décrivent cette perte d'énergie. En fonction du domaine d'énergie utilisé et de la masse atomique de l'ion, l'un des deux processus devient dominant par rapport à l'autre. Le premier processus est la collision nucléaire (Sn) traduisant le choc élastique direct des ions avec les atomes du matériau. Quand au deuxième, il est dit collision électronique (Se). Il décrit l'interaction inélastique des ions avec le cortège électronique des atomes cibles. La superposition des deux processus donne le pouvoir total (S) qui est proportionnel à la perte énergétique de l'ion rapportée à la distance parcourue  $\frac{dE}{dx}$ .

#### II.2.4.1 Perte d'énergie par collisions élastiques: pouvoir d'arrêt nucléaire :

La première interaction est la perte d'énergie nucléaire. Les ions et les atomes rentrent en collision et diffusent élastiquement. Il s'agit d'un transfert de la quantité de mouvement des ions incidents aux atomes contenus dans le matériau-cible. Les ions incidents sont donc ralentis au fil des collisions. Le freinage nucléaire est quantifié par le pouvoir d'arrêt nucléaire.[17]

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = -NS_n(E) \quad \text{II. 11}$$

où N est la densité atomique et  $S_n(E)$  la section efficace d'arrêt nucléaire pour l'énergie E. C'est le principal mécanisme de perte d'énergie pour les ions à faible énergie ( $\sim keV$ ). Pour évaluer  $S_n(E)$ , on part du potentiel d'interaction entre deux atomes Z1 et Z2 (séparés par la distance r) qui peut être pris comme étant un potentiel de Coulomb écranté[17]:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \varphi\left(\frac{r}{a}\right) \quad \text{II. 12}$$

Où  $\varphi$  est la fonction d'écrantage et a le rayon d'écrantage de Thomas-Fermi ( $\sim 0.1-0.2 \text{ \AA}$ )

Les collisions nucléaires permettent alors le ralentissement des particules incidentes en transférant leurs moments cinétiques aux atomes cibles. Elles permettent également la détermination de la distribution spatiale des impuretés dans la cible. Le processus de ralentissement nucléaire se produit surtout pour des ions lourds et de faible vitesse. Si E est l'énergie cinétique de l'ion incident, N le nombre d'atomes par unité de volume du matériau cible et T<sub>max</sub> le transfert maximal d'énergie, le pouvoir d'arrêt nucléaire (section efficace de ralentissement nucléaire) est défini comme étant[18]

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = N \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \sigma(E_1, T) dT \quad \text{II. 13}$$

T: l'énergie transférée l'atome cible par l'ion incident;

$\sigma$ : la section efficace différentielle (i.e la probabilité pour que le projectile cède de l'énergie à la particule cible lors du processus de collision).

Le transfert d'énergie T à un atome de la cible s'effectue par interaction coulombienne pure entre le projectile (numéro atomique Z1, masse m1, énergie E1) et le noyau de cet atome (numéro atomique Z2, masse m2). La section efficace de diffusion Rutherford s'exprime alors par [19] :

$$\sigma(E_1, T_1) = \frac{\pi(Z_1 Z_2 e^2)^2 M_1}{T^2 E_1 M_2} \quad \text{II. 14}$$

L'expression du pouvoir d'arrêt nucléaire devient :

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_n = 2\pi N \frac{M_1}{M_2} \frac{Z_1^2 Z_2^2}{E_1} e^4 \ln \frac{T_{max}}{T_{min}} \quad \text{II. 15}$$

La théorie LSS (Lindhard, Scharff et Schiott) ont exprimé le freinage nucléaire dans un système de coordonnées dites « réduites » où l'énergie réduite  $\varepsilon$  et la longueur réduite  $\rho$  valent

$$\rho = 4\pi a^2 N M_2 \frac{M_1}{M_1 + M_2} x, \quad \varepsilon = \frac{M_1}{M_1 + M_2} \frac{4\pi \varepsilon_0 a}{Z_1 Z_2 e^2} E \quad \text{II. 16}$$

Où  $x$  est le chemin parcouru dans la cible de densité atomique  $N$ . J.P. Biersack a donné une expression analytique du pouvoir d'arrêt nucléaire réduit [8]

$$\left(-\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = \frac{0,5 \ln(1+\varepsilon)}{\varepsilon + 0,10718 \varepsilon^{0,37544}} \quad \text{II. 17}$$

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \frac{E\rho}{\varepsilon x} \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = 4\pi N a \frac{M_1}{M_1 + M_2} Z_1 Z_2 e^2 \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n \quad \text{II. 18}$$

#### II.2.4.2 Perte d'énergie par collisions inélastique: pouvoir d'arrêt électronique :

Lors des interactions électroniques inélastiques, l'énergie cinétique totale des particules n'est pas conservée du fait des processus d'excitation et/ou d'ionisation. Les mécanismes entrant en jeu dans le ralentissement de l'ion incident vont dépendre de sa vitesse. On se trouve dans le cas où la vitesse de la particule est beaucoup plus élevée que celles des électrons orbitaux des atomes de la cible. Dans le cas des collisions à haute énergie, l'interaction ion-électron peut être décrite par un potentiel purement coulombien. Lorsqu'un projectile rapide d'énergie  $E$ , de masse  $M_1$  et de numéro atomique  $Z_1$  passe à proximité d'un atome cible de masse  $M_2$  et de numéro atomique  $Z_2$ , le projectile est dévié d'un angle par effet coulombien entre la particule incidente et les électrons de la cible [20.21]

Les interactions inélastiques entre les ions incidents et les atomes cibles sont beaucoup plus complexes que les interactions élastiques. Ceci est dû au fait que les interactions inélastiques ne peuvent pas être décrites par des chocs entre deux corps. En effet, l'énergie transférée par l'ion incident aux électrons qui sont eux-mêmes liés aux noyaux de la cible est faible par rapport à l'énergie cinétique de la particule. Le ralentissement électronique est important dans le cas des ions légers à forte énergie. Bien que les implantations ioniques appartiennent généralement à la zone II, le pouvoir d'arrêt reste proportionnel à la vitesse de l'ion. Deux modèles principaux peuvent être utilisés pour les collisions électroniques, le modèle de Firsov [22] et le modèle LSS[23].

L'interaction entre les deux corps donne lieu à des échanges électroniques qui produisent une décélération de la vitesse de l'ion. Ce phénomène est gouverné par le potentiel interatomique de Thomas Fermi.

Ce modèle utilise l'approximation de la collision binaire, les chocs ne sont pas corrélés, étant supposés indépendants les uns des autres. Cette approximation est presque toujours utilisée dans les

logiciels de simulation ionique. Notons que pour des raisons de calcul, ce modèle est restreint au domaine des numéros atomiques suivants:  $\frac{1}{4} < \frac{Z_1}{Z_2} < 4$

D'autre part, il approxime relativement bien les valeurs expérimentales, mais ne rend pas compte d'un phénomène très important : le comportement oscillatoire de la valeur de  $S_e$  en fonction de  $Z_1$ , systématiquement observé expérimentalement.

L'énergie est alors considérée comme étant transférée au nuage électronique, en produisant des vibrations thermiques au sein de celui-ci. Le pouvoir d'arrêt électronique est souvent décrit par ce modèle exprimé comme suit [23] :

$$S_e = 8\pi e^2 a_0 \frac{Z_1^{\frac{7}{3}} v}{\left( Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}} \right)^{\frac{2}{3}} v_0} D \quad \text{soit, } S_e = KE^{\frac{1}{2}} \quad \text{II. 20}$$

Où,  $V_0$  et  $D_0$  sont la vitesse et le rayon de Bohr,  $E$  est l'énergie de l'ion,  $K$  est une constante tabulée théoriquement par Lindhard et al.[24] et expérimentalement par d'autres auteurs.

Dans le cas des ions que nous allons utiliser, les ions interagissant dans une première étape avec les électrons auxquels ils vont transférer une partie de leur énergie. Les électrons secondaires (électrons delta), suite à l'ionisation de la cible après passage de l'ion, peuvent être suffisamment énergétiques pour générer une cascade électronique. Trois domaines de vitesses sont à distinguer pour évaluer la perte d'énergie électronique : ils sont définis par rapport à la quantité  $Z_1^{\frac{2}{3}}V_0$  où  $v_0$  est la vitesse orbitale de l'électron 1s de l'atome d'hydrogène, c'est-à-dire la vitesse de Bohr :  $V_0 = 2.2 \times 10^6$  m/s.  $Z_1^{\frac{2}{3}}V_0$  est typiquement la vitesse moyenne des électrons liés au projectile dans le modèle de Thomas-Fermi. En considérant  $v_1$  comme la vitesse du projectile, on définit :

- Régime des grandes vitesses  $V_1 \gg Z_1^{\frac{2}{3}}V_0$ , non relativiste
- Régime des vitesses intermédiaires  $V_1 \approx Z_1^{\frac{2}{3}}V_0$
- Régime des basses vitesses  $V_1 \ll Z_1^{\frac{2}{3}}V_0$

#### II.2.4.2.1 Régime des grandes vitesses $V_1 \gg Z_1^{\frac{2}{3}}V_0$ , non relativiste

Dans ce cas, l'ion incident est complètement épluché de ses électrons et il peut être considéré comme un ion de charge ponctuelle  $Z_1 e$ . L'expression utilisée dans ce cas est la formule de Bethe [25] (voir équation II-5)

$$\left( -\frac{dE}{dx} \right)_e = \frac{4\pi e^2 Z_1^2 Z_2 N}{m_e v_1^2} \ln \left( \frac{T_{max}}{T_{min}} \right) \quad \text{II. 21}$$

$N$  est la densité atomique de la cible,  $Z_2$  est le numéro atomique de la cible,  $m_e$  est la masse de l'électron,  $T_{min}$  est l'énergie moyenne d'ionisation (I) des atomes de la cible et  $T_{max} = \frac{4m_e M_1 E}{(m_e + M_1)^2} \cong 2m_e V_1^2$ .

La prise en compte de l'excitation engendre l'ajout d'un facteur 2 dans cette formule. On obtient donc pour le pouvoir d'arrêt électronique :

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi e^2 (Z_{eff})^2 Z_2 N}{m_e V_1^2} \ln\left(\frac{2m_e V_1^2}{I}\right) \quad \text{II. 22}$$

$Z_{eff}$  est la charge effective du projectile. Dans ce domaine, la perte d'énergie est proportionnelle à  $\frac{Z_{eff} \ln(E_1)}{E_1} \approx \frac{Z_{eff}^2}{V_1^2} \ln(V_1^2)$  ;  $E_1$  est l'énergie initiale du projectile,  $\frac{Z_{eff}^2}{V_1^2}$  le paramètre de Sommerfeld, appelé aussi paramètre de perturbation. Cela signifie que la perte d'énergie diminue lorsque l'énergie de la particule augmente. Cette formule est valable pour les ions de très grande vitesse non relativiste.

#### II.2.4.2.2 Régime des vitesses intermédiaires $V_1 \approx Z_1^{2/3} V_0$

Quand la vitesse du projectile diminue, le processus de capture entre en concurrence avec celui d'ionisation. Dans ce domaine, l'ion projectile n'est alors plus totalement épluché : il capture des électrons de la cible et son état de charge diminue. Sa charge électrique moyenne devient inférieure à  $Z_1 e$ , et le pouvoir d'arrêt électronique devient ainsi plus faible que ne le prévoit la formule de Bethe. Le domaine de validité de cette dernière peut alors être étendu en introduisant une charge effective  $Z_1^*$ . Ainsi, aux vitesses intermédiaires, dû aux effets antagonistes entre la variation de la vitesse et de la charge effective (capture et perte des électrons), le dépôt d'énergie passe par un maximum, appelé **pic de Bragg**. Il dépend de  $Z_1$  comme  $Z_1^{2/3}$ , il est à 0.15 MeV/u pour les protons et à 5 MeV/u pour l'uranium.

#### II.2.4.2.3 Régime des basses vitesses $V_1 \ll Z_1^{2/3} V_0$

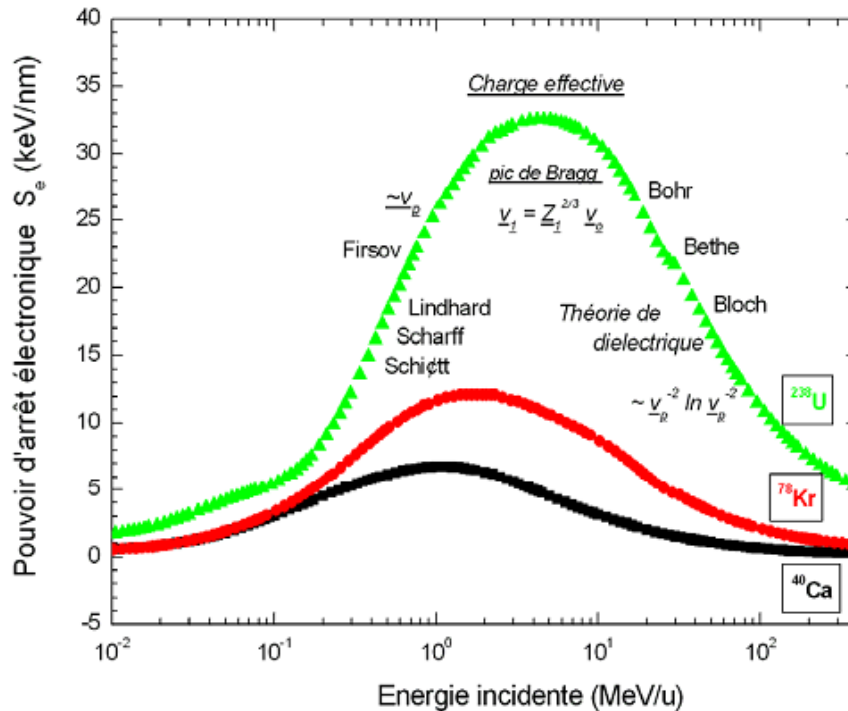
A faible vitesse, l'ion possède la plus grande partie de ses électrons. Au cours de la collision entre l'ion et un atome cible, les nuages électroniques des deux partenaires se recouvrent. Un réarrangement des niveaux électroniques a lieu au cours de l'interaction, engendrant la formation d'une quasi-molécule possédant ses propres états électroniques qui évoluent en fonction de la distance interatomique ("molecular orbitals"). Seuls les électrons faiblement liés de la cible contribuent à la perte d'énergie de l'ion. Lindhard, Scharff et Schiøtt [26] (théorie LSS) et indépendamment Firsov [22] ont montré que le pouvoir d'arrêt électronique est proportionnel à la vitesse de l'ion dans ce domaine de vitesse.

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = N \times 5.15 \times (Z_1 + Z_2) \times 10^{-15} \times \frac{v_1}{v_0} \quad (\text{Firsov, exprimé en } eV \cdot cm^{-1}) \quad \text{II. 23}$$

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \xi_\varepsilon \times 8\pi e^2 a_0 \times \frac{Z_1 Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{3/2}} \times \frac{v_1}{v_0} \quad (\text{Lindhard}) \quad \text{II. 24}$$

Où  $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{cm}$ .  $\xi \varepsilon$  varie entre 1 et 2 et il est approximé par  $\xi \varepsilon = NZ_1^{\frac{1}{6}}$ .

La figure II-3 montre l'évolution du pouvoir d'arrêt électronique dans le LiF en fonction de l'énergie de la particule incidente de différents ions.

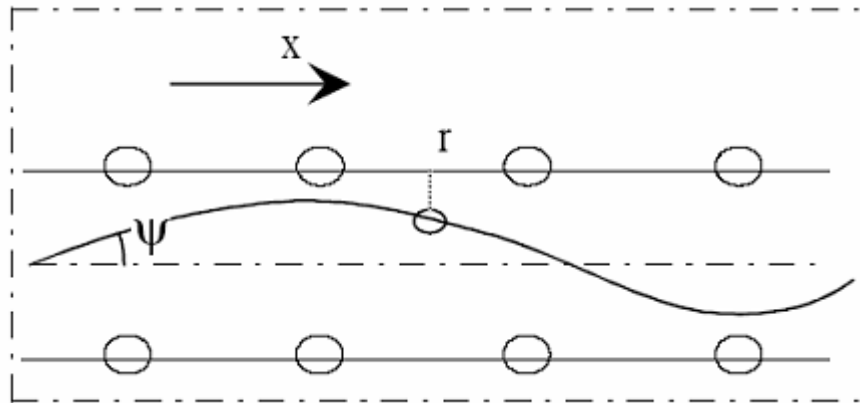


**Figure II-3** : Evolution de la perte d'énergie électronique en fonction de l'énergie des différents ions incidents dans le *LiF*, calculée avec le code SRIM [27]

### II.2.5 Cas d'un matériau cristallin

Le matériau monocristallin possède une structure anisotrope dont les effets directionnels peuvent jouer un rôle important lors de l'implantation ionique. En effet, l'arrangement en rangées et en plans cristallins a une influence non négligeable sur le pouvoir d'arrêt. Si le faisceau d'ions possède une direction quelconque par rapport aux axes et aux plans cristallographiques, l'effet directionnel est nul, et tout se passe comme si le matériau implanté est amorphe. Lorsque l'angle d'incidence des ions (par rapport à une rangée ou à un plan de la cible) est inférieur à une valeur critique  $\psi_c$ , l'ion est repoussé progressivement, par une série de déviations successives corrélées vers la rangée ou le plan adjacent. De cette façon, l'ion est focalisé entre deux plans ou dirigé suivant un axe cristallographique. Ceci est désigné par l'effet de canalisation qui peut être axial (par rapport à une direction) ou planaire (par rapport à un plan). Les cas d'une canalisation axiale sont schématisés dans la figure 4. Le parcours des ions en profondeur est par conséquent très augmenté par rapport au cas de la cible amorphe parce que la transition entre les deux types de ralentissement ( $S_n$ ) et ( $S_e$ ) dans la zone I (Figure 3) se fait avec une énergie beaucoup plus faible. Le parcours ionique moyen devient alors important, c'est-à-dire l'ion pénètre plus profondément dans le matériau. En pratique, les cibles monocristallines sont généralement désorientées, par rapport à l'axe du faisceau ionique,

d'un angle de  $7^\circ$  pour empêcher la canalisation des ions. Lors d'une canalisation axiale ou planaire, l'ion ne subit que très peu de collisions élastiques (nucléaires) avec les noyaux, et le pouvoir d'arrêt nucléaire est considérablement réduit. Les ions canalisés perdent leur énergie, presque uniquement, par interactions inélastiques sur les électrons. De la même façon que pour les matériaux amorphes, deux approches sont possibles pour étudier théoriquement ces phénomènes : une approche analytique basée sur l'approximation du potentiel continu, et une approche de type Monte-Carlo qui considère les interactions comme étant une suite de collisions binaires.



**Figure.4** Schématisation d'une canalisation axiale ( $\Psi$  est l'angle du faisceau incident par rapport au centre du canal, et  $r$  est la distance entre l'ion et la paroi) [28].

Dans l'approximation du potentiel continu, l'angle critique  $\Psi_c$  de canalisation s'exprime comme suit : Pour une canalisation axiale :

$$\Psi_c = \sqrt{\frac{2Z_1Z_2e^2}{E_0d}} = 9.73 \sqrt{\frac{Z_1Z_2}{E_0d}} \quad \text{II. 25}$$

Pour une canalisation planaire :

$$\Psi_c = \sqrt{\frac{2Z_1Z_2e^2na}{E_0}} = 9.73 \sqrt{\frac{Z_1Z_2na}{E_0}} \quad \text{II. 26}$$

Où :

$d$  : distance inter-atomique en  $\text{\AA}$  ;

$E_0$  : énergie incidente de l'ion en keV ;

$n$  : densité atomique surfacique dans le plan ;

$a$  : rayon d'écran de thomas-Fermi.

On constate que l'effet de la canalisation est probable dans le cas d'ions lourds et de faible énergie [19].

### II.2.6 Le pouvoir d'arrêt global

En considérons les pertes d'énergies électroniques et nucléaires indépendantes et additives, la perte d'énergie totale s'exprime comme la somme des deux processus :

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right) = -\left(\frac{dE}{dx}\right)_e - \left(\frac{dE}{dx}\right)_n = N(S_e(E) + S_n(E)) \quad \text{II. 27}$$

N, est la densité volumique atomique du matériau exprimée en cm<sup>-3</sup>

Pour les matériaux composés, on utilise la loi de Bragg pour le calcul du pouvoir d'arrêt, il faut tenir compte des contributions des constituants de chaque élément dans le calcul du pouvoir d'arrêt global [29]. Pour un matériau composé quelconque  $AnBm$  :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{(AB)} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_{\left(\frac{A}{AB}\right)} + \left(\frac{dE}{dx}\right)_{\left(\frac{B}{AB}\right)} \quad \text{II. 28}$$

$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\left(\frac{A}{AB}\right)}$  est le pouvoir d'arrêt des atomes de A présents dans le composé AB et  $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\left(\frac{B}{AB}\right)}$ , celui des atomes de B présents dans le composé AB.

La section efficace d'arrêt d'un matériau composé est égale à la somme des sections efficaces d'arrêt des éléments constituants pondérés par leur rapport stœchiométrique, cette relation se généralise par :

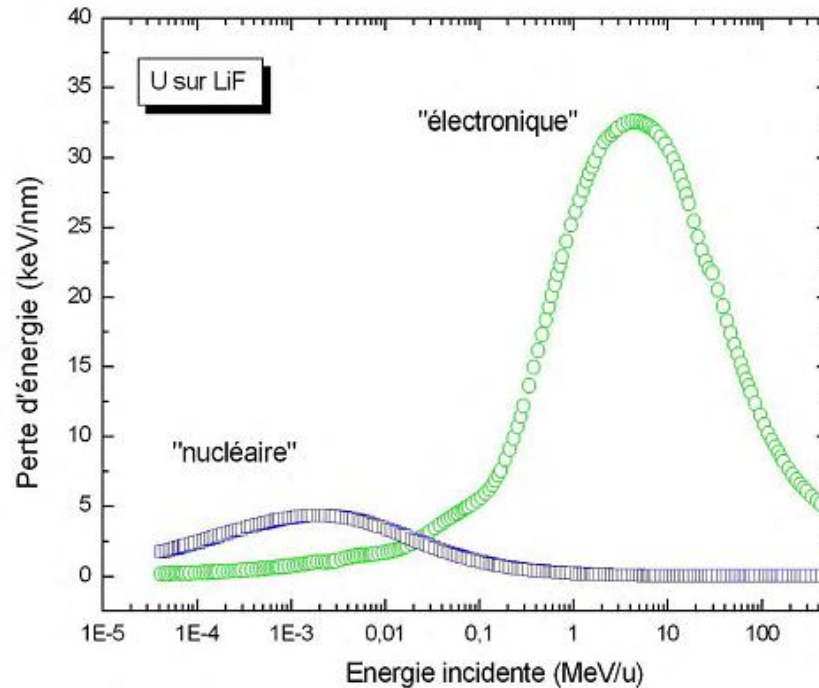
$$S(E)_{AnBm} = \frac{n}{n+m} S(E)_A + \frac{m}{n+m} S(E)_B \quad \text{II. 29}$$

### II.2.7 Comparaison entre la perte d'énergie électronique et nucléaire

Dans le domaine des vitesses  $v_1 \gg v_0$ , si nous négligeons la variation logarithmique des relations (II-6) et (II-7), le rapport entre la perte d'énergie nucléaire et la perte d'énergie électronique peut s'écrire :

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_n / -\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = Z_2 m_e / M_2 \text{ voisin de } \frac{m_e}{2m_p} \approx \frac{1}{3500} \quad \text{II. 30}$$

La perte d'énergie par collision Rutherford avec les noyaux de la cible est donc négligeable devant la perte d'énergie électronique, pour des énergies incidentes supérieures à 0.1 MeV/u (figure II-5). Compte tenu que notre étude concerne les ions lourds de grande énergie, supérieurs à quelques MeV/u, le transfert d'énergie se fait majoritairement par collisions inélastiques.



**Figure II-5** : Comparaison entre la perte d'énergie nucléaire et électronique dans le cas des ions d'uranium sur *LiF*, calculée avec le code SRIM [27].

### II.3 Distribution des ions implantés en profondeur

L'étude de la profondeur de distribution des ions est souvent basée sur l'hypothèse d'un solide amorphe. Selon la théorie L.S.S (Lindhard, Scharff et Schiott), l'arrêt des ions présente une distribution gaussienne [16, 24, 30]. Les ions incidents vont perdre leur énergie par chocs successifs avec les atomes de la cible. Ceci explique d'une part, la dispersion des trajectoires et d'autre part, que l'on définisse statistiquement une profondeur moyenne de pénétration. La statistique qui convient assez bien est gaussienne. Nous définissons ainsi deux paramètres :

- **Le parcours moyen projeté  $R_p$**  : c'est la profondeur où les ions implantés s'arrêtent avec un maximum de concentration avec un écart type  $\Delta R_p$  (la déviation standard) qui caractérise la répartition statistique des ions en profondeur autour de  $R$ .

- **La déviation latérale (l'écart moyen latéral)  $\Delta R_{\perp}$**  : est le parcours projeté sur le plan perpendiculaire à la direction d'incidence (perpendiculaire à la direction d'implantation), il caractérise la dispersion latérale des ions. C'est un paramètre très important surtout dans le cas de l'utilisation des masques pour la conception (architecture) des composants.

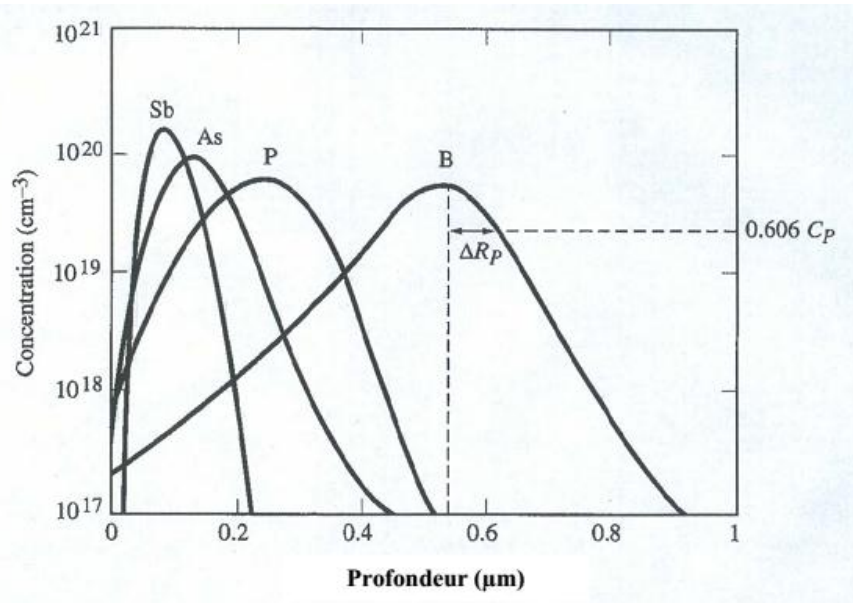
La distribution de pénétration des ions dépend des facteurs suivants :

- le numéro atomique de l'ion incident ;
- le numéro atomique de la cible ;
- l'énergie cinétique des ions incidents ;
- la température de la cible ;
- le nombre d'ions incidents reçu par unité de surface de la cible, appelé dose ;

- l'angle d'incidence du faisceau par rapport aux axes cristallographiques.

La distance parcourue par un ion le long de sa trajectoire est déterminée à partir de l'énergie perdue, par collisions nucléaire et électronique, comme suit :

$$R = \int_0^R dr = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)} \tag{II.31}$$



**Figure.II.6.** Distribution d'ions dans le silicium implantés à 200 KeV [31].

Expérimentalement nous n'avons pas accès à la distance (R) parcourue par l'ion incident. En pratique, le paramètre utilisé est la projection de ce parcours sur la direction perpendiculaire à la surface de la cible. Comme mentionné plus haut, ce paramètre est désigné par le parcours moyen projeté  $R_p$ . Il correspond à la moyenne de tous les parcours projetés et s'exprime comme suit :

$$R_p = \frac{1}{\Phi} \int x \cdot n(x) \cdot dx \tag{II.32}$$

$\Phi$  : la dose totale implantée (ions/cm<sup>2</sup>) ;  $n(x)$  : la distribution en profondeur de tous les ions implantés.

## II.4 Modèle de distributions théoriques

### II.4.1 Modèle de distributions Gaussienne

Considéré comme le plus classique des modèles analytiques, ce modèle est exprimé par la relation suivante :

$$C(x) = \frac{N}{\sqrt{2\pi}\delta R_p} \exp\left(-\frac{(x-R_p)^2}{2\delta R_p^2}\right) \tag{II.33}$$

Où N est le nombre total d'ions implantés par unité de surface,  $R_p$  est la profondeur moyenne de pénétration (projected range) et  $\delta R_p$  est un facteur qui caractérise la déviation standard du profil (projected straggle). Pour le calcul et la détermination de ces deux paramètres, qui ne sont en fait

que les deux premiers moments de la distribution gaussienne, il suffit simplement de se référer aux formules qui ont été rapportées dans la littérature et qui sont données par plusieurs auteurs [32].

#### II.4.2 Modèle de distributions demi-Gaussienne

Nous venons de voir que la première description des profils de dopage est basée sur la distribution de probabilité Gaussienne centrée autour de la portée projetée  $R_p$  avec une déviation standard projetée (l'écart type)  $\delta R_p$ . Généralement, le profil Gaussien de l'équation précédente est insuffisant pour décrire parfaitement les profils réels. Si le profil est légèrement asymétrique, alors un troisième moment devient indispensable pour obtenir une bonne description des profils. Dans ce cas le profil est donné par le joint des deux profils demi-gaussiens avec la portée  $R_m$  et les déviations  $\delta R_{p1}$  et  $\delta R_{p2}$

$$x \leq R_m \quad C(x) = \frac{2N}{\sqrt{2\pi(\delta R_{p1} + \delta R_{p2})}} \exp\left(-\frac{(x-R_m)^2}{2\delta R_{p1}^2}\right) \quad \text{II. 34}$$

$$x \geq R_m \quad C(x) = \frac{2N}{\sqrt{2\pi(\delta R_{p1} + \delta R_{p2})}} \exp\left(-\frac{(x-R_m)^2}{2\delta R_{p2}^2}\right) \quad \text{II. 35}$$

$R_m$ ,  $\delta R_{p1}$  et  $\delta R_{p2}$  peuvent être calculés ou donnés par des tables :

$$R_p = R_m + 0,8(\delta R_{p2} - \delta R_{p1}) \quad \text{II. 36}$$

$$\delta R_p^2 = -0,64(\delta R_{p2} - \delta R_{p1})^2 + (\delta R_{p1}^2 - \delta R_{p2} + \delta R_{p2}^2) \quad \text{II. 37}$$

$$\gamma = \delta R_p^{-3}(\delta R_{p2} - \delta R_{p1}) \times (0,218\delta R_{p1}^2 + 0,362\delta R_{p1}\delta R_{p2} + 0,128\delta R_{p2}^2) \quad \text{II. 38}$$

$$\beta \approx 2,91 + 1,56\gamma^2 + 0,59\gamma^4 \quad \text{II. 39}$$

Ces dernières équations se résolvent itérativement et les valeurs approchées de  $\delta R_{p1}$  et  $\delta R_{p2}$  sont obtenues par une interpolation. Pour la plupart des implantations dans le Silicium et dans beaucoup d'autres semi-conducteurs [33, 34]. On en déduit que si on utilise d'avantage des moments d'ordre supérieurs, les résultats sont beaucoup plus meilleurs. Donc, il apparaît nécessaire de travailler avec des distributions ayant des distributions d'ordre supérieur qui deviennent de plus en plus recherchées.

#### II.4.3 Modèle de distributions Pearson IV

La correction par la distribution de type Pearson a pour objectif d'améliorer la description du profil de dopage des particules en rendant son allure plus proche avec celui obtenu expérimentalement, cette distribution est définie par les quatre paramètres suivants : la position moyenne ( $R_p$ ), l'écart type  $\sigma_p$ , l'asymétrie ( $\gamma$ ) et l'aplatissement ( $\beta$ ) [35]. Afin de calibrer ces paramètres de manière à ce que les distributions Pearson IV aient une allure similaire à celle des profils expérimentaux, commençons par caractériser ces fonctions en fonction de chacun de ces quatre paramètres.

D'une manière générale, une distribution  $f(x)$  se caractérise en fonction de ses moments. Le moment d'ordre 1,  $\mu_1$  est défini par :

$$\mu_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot f(x) \cdot dx \tag{II.40}$$

Où,  $\mu_1$  correspond à la position moyenne de la distribution, on le note en général  $R_p$ .

Les moments d'ordre supérieurs  $\mu_i$  ( $i=2, 3, \dots$ ), s'expriment en fonction de  $R_p$  de la manière suivante :

$$\mu_i = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^i \cdot f(x) \cdot dx \tag{II.41}$$

Les distributions de type Pearson sont solutions de l'équation différentielle [36] :

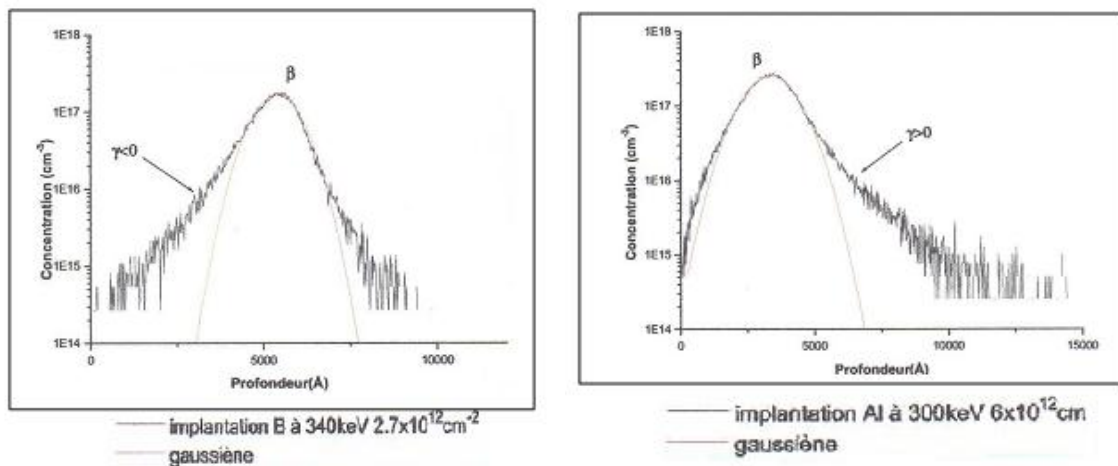
$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{(x-a)f(x)}{b_0+b_1x+b_2x^2} \tag{II.42}$$

Où, les quatre coefficients  $a$ ,  $b_0$ ,  $b_1$  et  $b_2$  s'expriment par :

$$a = b_1 = -\frac{\gamma\sigma_p(\beta+3)}{A} \quad b_0 = -\frac{\sigma_p^2(4\beta+3\gamma^2)}{A} \quad b_2 = -\frac{2\beta-3\gamma^2-6}{A} \tag{II.43}$$

Où,  $A = 10\beta - 12\gamma^2 - 18$  et  $\sigma_p$  représente l'écart type de la distribution.

Le coefficient  $\gamma$  mesure l'asymétrie (*VNHZQHVV*) de la distribution ; Si  $\gamma < 0$ , nous avons une queue vers la surface, par contre si  $\gamma > 0$  la queue sera après  $R_p$  et donc le profil aura une descente moins abrupte [37]. Des exemples sur la figure II.5 de profils d'implantation représentant, le coefficient  $\beta$  mesure l'aplatissement (*NXUWRVLV*) de la distribution ou le pic.



**Figure II.7 :** Exemple de profils d'implantation Al et B dans la *SiC*

La distribution de Pearson s'exprime en fonction de ses quatre moments :

$$R_p = \mu_1 \quad \sigma_p = \sqrt{\mu_2} \quad \gamma = \frac{\mu_3}{\sigma_p^3} \quad \beta = \frac{\mu_4}{\sigma_p^4} \tag{II.44}$$

Selon la valeur de ces coefficients, nous pouvons distinguer sept types de distributions Pearson, mais dans notre cas on utilise la distribution Pearson IV, car elle définit pour tout  $x$  tel que  $-\infty < x < +\infty$ , alors que les autres types sont définis sur des domaines restreints [35]. De plus, elle présente un unique maximum à la profondeur  $x = R_p + a$ , avec  $a$  le coefficient défini par

l'équation (II.49) et décroît de manière monotone vers 0 de chaque côté de ce maximum, dans ces conditions des distributions Pearson IV, les coefficients asymétrie  $\gamma$  et aplatissement  $\beta$  doivent satisfaire les conditions énoncées ci-dessous [35] :

$$0 < \gamma^2 < 32 \quad \text{et} \quad \beta > \frac{39\gamma^2 + 48 + 6(\gamma^2 + 4)^{\frac{3}{2}}}{32 - \gamma^2} \quad \text{II. 45}$$

L'expression de la distribution Pearson IV se présente alors sous la forme :

$$f(x) = K [b_0 + b_1(x - R_p) + b_2(x - R_p)^2]^{\frac{1}{2b_2}} \exp \left[ -\frac{\frac{b_1}{b_2} + 2a}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^2}} a \tan \left( \frac{2b_2(x - R_p) + b_1}{\sqrt{4b_0b_2 - b_1^2}} \right) \right] \quad \text{II. 46}$$

Avec, K une constante de normalisation dont la valeur est fixée de manière à ce que la relation suivante soit vérifiée :

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cdot dx = 1 \quad \text{II. 47}$$

# **Chapitre III**

## Résultats et Discussions

### III .1 Introduction

La perte d'énergie et la diffusion des ions dans la matière est un processus statistique. Par conséquent, les énergies et les angles de diffusion des ions derrière une cible sont distribués statistiquement. Pour des cibles minces (faibles épaisseurs), le nombre d'interactions est approximativement proportionnel à l'épaisseur de la feuille. Le but de ce chapitre est l'estimation du phénomène d'interaction ion-matière à l'aide de simulation numérique.

La simulation numérique est un outil de calcul numérique permettant l'étude et la prédiction des phénomènes réels. Elle permet de simuler, par exemple, un phénomène physique complexe en utilisant un programme informatique sur un ordinateur. Il existe aujourd'hui plusieurs codes de calcul (basés sur le principe de la méthode stochastique dite de "Monté Carlo") dédiés à la simulation du phénomène de transport des ions dans la matière.

Le programme SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) est basé sur le code TRIM (Transport of Ions in Matter). Il fonctionne sous Windows et il est considéré comme étant une évolution du TRIM qui s'exécute sous DOS. Il permet de simuler les pouvoirs d'arrêt les parcours et la transmission des ions ( $10 \text{ eV} \text{ - } 2 \text{ GeV} / \text{amu}$ ) dans la matière. Les collisions entre les ions et les atomes cibles sont supposées de type coulombiennes écrantés. C'est un programme qui utilise l'approximation des collisions binaire (BEA). TRIM effectue des calculs détaillés de l'énergie transférée à l'atome cible pour chaque collision.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés au ralentissement des protons d'énergie variant de  $1 \text{ keV}$  jusqu' à  $1000 \text{ keV}$  pour des cibles de Al ,P, Cl ,K , Sc ,V ,Mn ,Co ,Cu ,Ga ,As ,Br ,Rb ,Y. Les énergies incidentes ont été choisies correspondantes à celles utilisée généralement dans les techniques d'analyse comme l'émission X induite par des particules chargées PIXE (Particle Induced X-ray Emission) et la technique de rétrodiffusion de Rutherford RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry).

## III.2 Le programme SRIM [The Stopping and Range of Ion in Matter]:

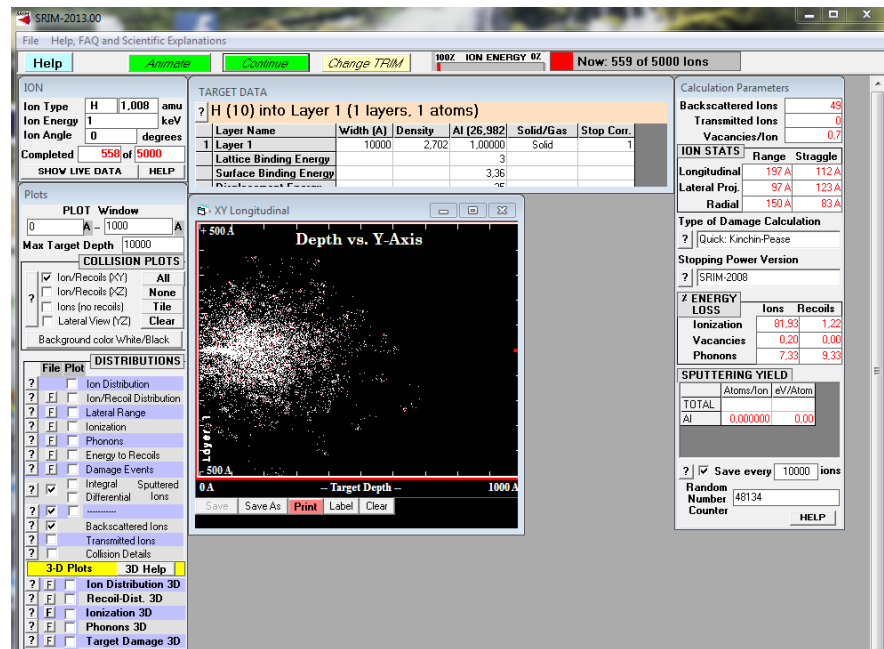
### III.2.1 Logiciel

**SRIM** est un groupe de programmes qui calculent l'arrêt et la gamme d'ions (jusqu'à 2 GeV /amu) dans la matière en utilisant un traitement quantique des collisions ions-atomes. L'ion a des interactions à longue portée créant excitation électroniques dans la cible. Ils sont décrits en incluant une description de la structure électronique collective de la cible et de la structure obligataire interatomique lorsque le calcul est configuré (tableaux de valeurs nominales sont fournis). L'état de l'ion dans la cible de charge est décrit en utilisant le concept de charge effective qui comprend un état de charge dépend de la vitesse et à long dépistage de gamme due à la mer d'électrons collective de la cible (36).

Une description complète du calcul se trouve dans un livre **SRIM** – l'arrêt et la gamme des ions dans des solides, par Ziegler, Biersack et Littmark en 1985 (une nouvelle édition a été publiée en 2009 (29)). Ce livre présente la physique de la pénétration des ions dans solides d'une manière simple tutorielle, puis présente le code source des programmes **SRIM** avec une explication complète de la physique. D'autres chapitres analysent la qualité des **SRIM** et montrent diverses applications. Disponible sur ce site sont des graphiques montrant les pouvoirs d'arrêt **SRIM** et toutes les données expérimentales disponibles pour H et He ions dans toutes les cibles.

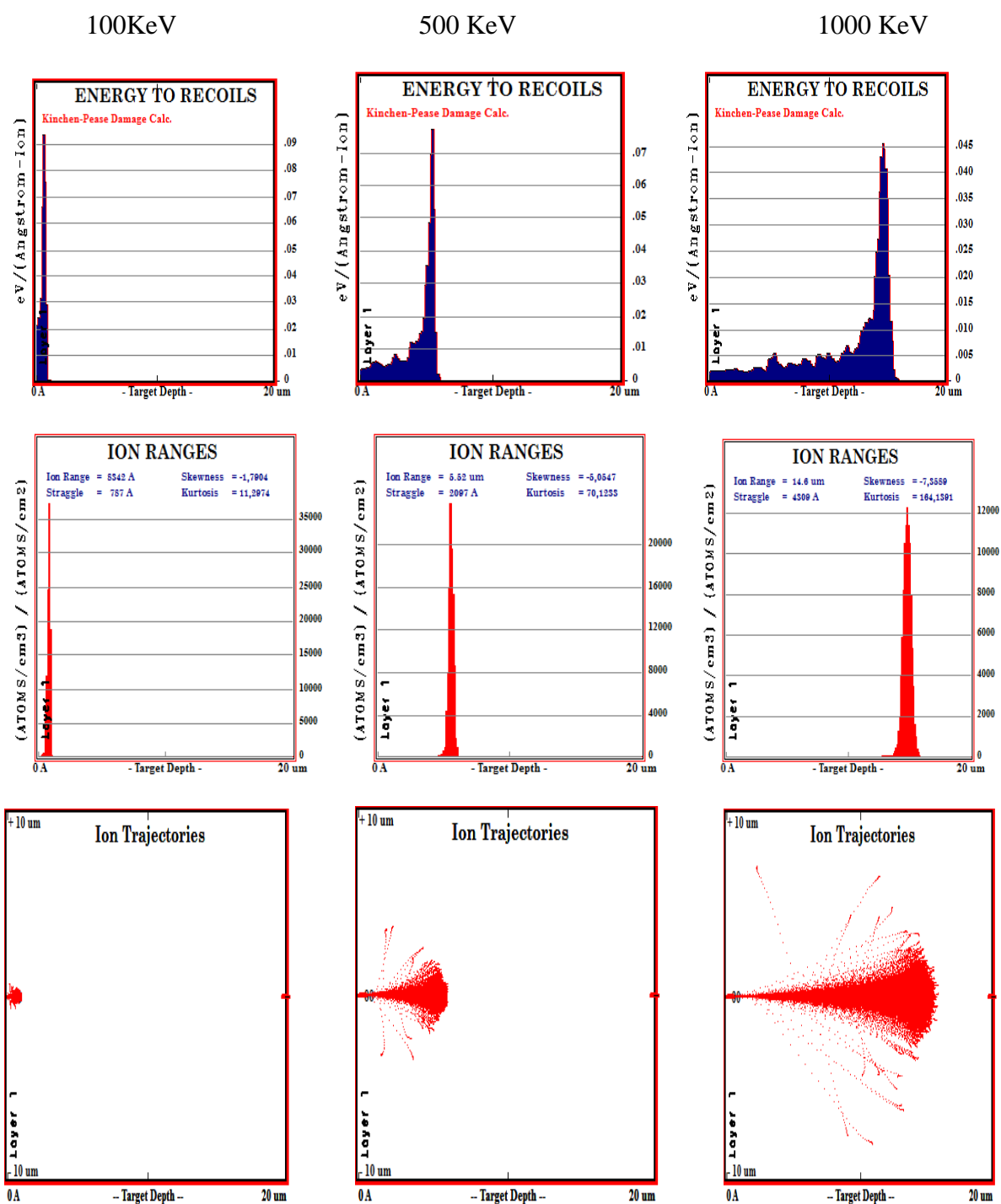
**TRIM** (le Transport des Ions dans la Matière) est le programme le plus complet inclus. **TRIM** acceptera cibles complexes en matériaux composites avec un maximum de huit couches, chacun de matériaux différents. Il va calculer à la fois la distribution 3D finale des ions et aussi tous les phénomènes associés à l'énergie cinétique perte de l'ion : cible les dégâts, la pulvérisation, l'ionisation, et production de phonons. Toutes les cascades d'atomes de la cible dans la cible sont suivies en détail. Les programmes sont faits de sorte qu'ils peuvent être interrompus à tout moment, puis repris plus tard.

Le logiciel **TRIM** (Transport of Ions in Matter), va nous permettre de faire une étude de simulation du straggling dans la cible, Pour cela, on va simuler un grand nombre de projectiles entrant dans la cible. La figure III.1 montre un exemple de simulation des interactions de la particule dans la cible (Al) par **TRIM** particule par particule.



**Figure III.1** simulation de stragging par le logiciel TRIM

La figure III.2 représente les résultats de simulation de l'interaction des protons avec une cible d'Aluminium d'épaisseur 2000000Å° montrant l'énergie de recul communiquée à la cible lors de la collision, le parcours des protons dans la cible et la trajectoire suivie par le proton avant d'être arrêté dans la cible pour des énergies incidentes de 100 keV, 500 keV et 1000 KeV.

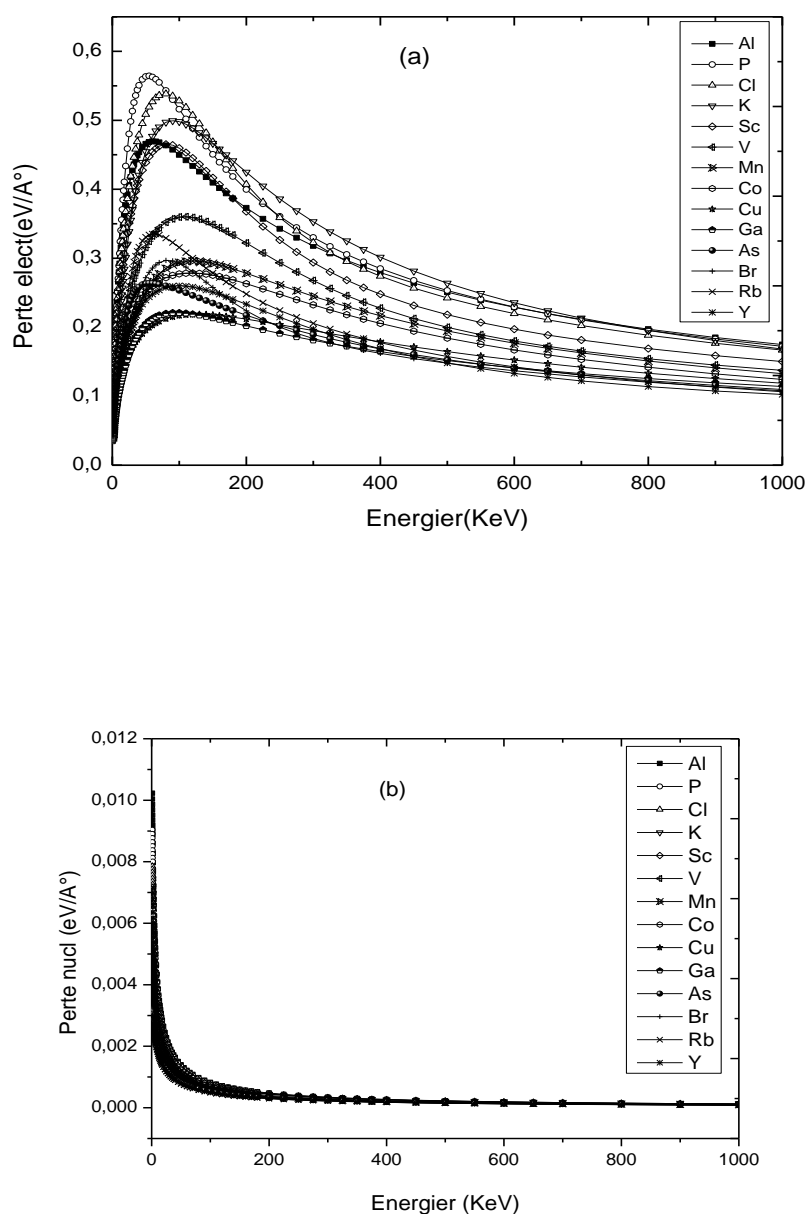


**Figure III.2 :** Energie de recul, parcours et trajectoire des protons dans une cible d'Aluminium d'épaisseur de 2000000A° pour une énergie incidente de 100 keV , 500 keV et 1000 keV.

### III.3 Perte énergie électronique et nucléaire en fonction de l'énergie

Nous avons étudié la diffusion de protons d'énergies  $1\text{ keV}$ ,  $10\text{ keV}$ ,  $20\text{ keV}$ ,  $50\text{ keV}$ ,  $100\text{ keV}$ ,  $300\text{ keV}$ ,  $500\text{ keV}$ ,  $1000\text{ keV}$ , sur diverses cibles Al ,P, Cl ,K ,Sc ,V ,Mn ,Co ,Cu ,Ga As ,Br ,Rb ,Y.

Les figures III.3 (a) et (b) montrent l'évolution de la perte d'énergie électronique et perte d'énergie nucléaire en fonction de l'énergie des protons incidents pour les éléments Al ,P, Cl ,K ,Sc ,V ,Mn ,Co ,Cu ,Ga As ,Br ,Rb ,Y.



**Figure III.3.** Evolution de la perte d'énergie électronique et perte d'énergie nucléaire des protons en fonction de l'énergie incidente pour des énergies incidentes  $1\text{ keV}$ ,  $10\text{ keV}$ ,  $20\text{ keV}$ ,  $50\text{ keV}$ ,  $100\text{ keV}$ ,  $300\text{ keV}$ ,  $500\text{ keV}$ ,  $1000\text{ keV}$  (b).

L'examen de la figure **III.3** :

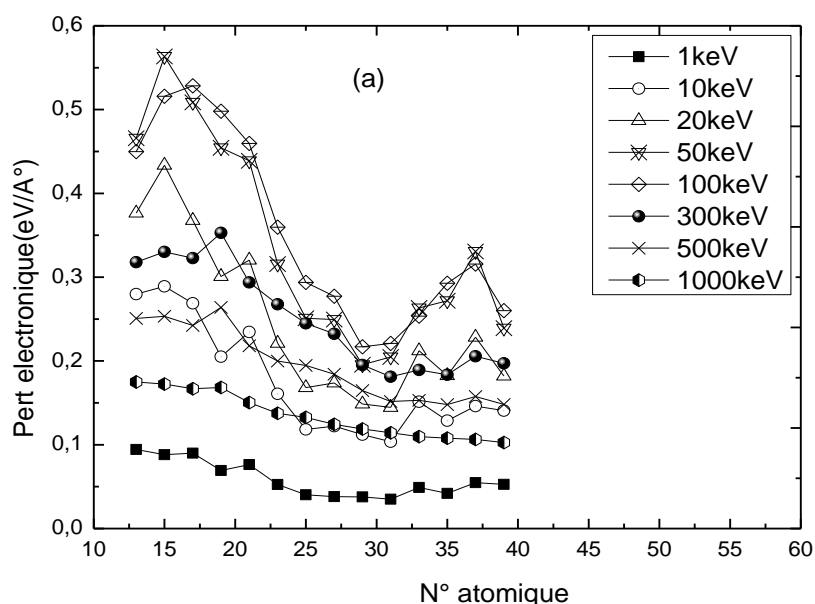
Pour la figure III.3 (a) et pour tous les éléments cibles étudiés dans ce travail, la perte d'énergie électronique présente l'allure d'une gaussienne asymétrique avec un étalement vers les grandes énergies et présentant un maximum vers une énergie allant de 50 keV à 100 keV correspondant au pic de Bragg. Notons cependant que la position du pic ne varie pas de façon monotone pour les différents éléments.

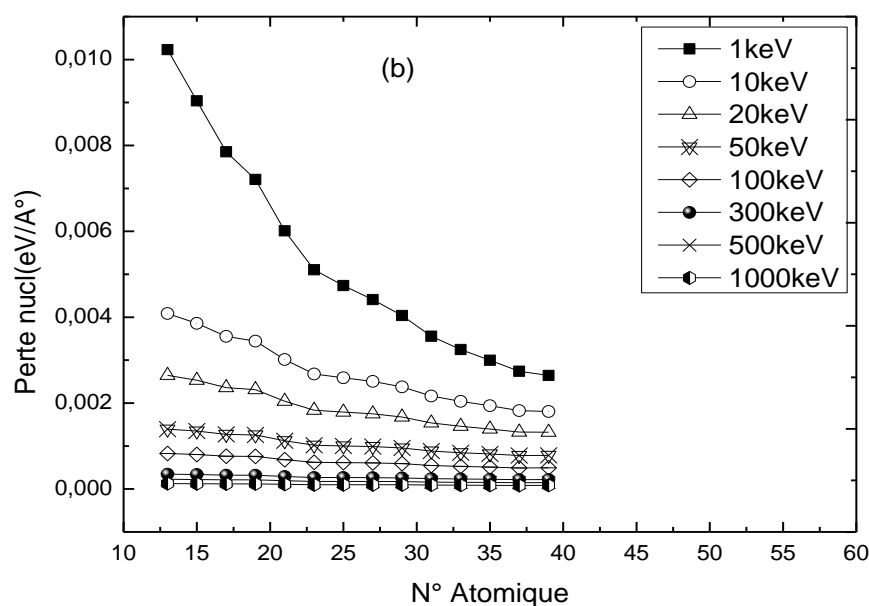
Pour la figure III.3 (b), la perte d'énergie nucléaire décroît rapidement avec l'énergie incidente pour tous les éléments étudiés jusqu'à environ 250 keV puis elle devient constante. Notons cependant que la perte d'énergie nucléaire varie très peu en allant de Al à Y.

La perte énergie nucléaire est très faible (négligeable) comparée à la perte énergie électronique.

### III.4 Perte d'énergie électronique et nucléaire en fonction du numéro atomique de la cible Z :

Les figures III.4 (a) et (b) montrent les évolutions des pertes d'énergie électronique et nucléaire des protons de différents énergies et dans différentes cibles.





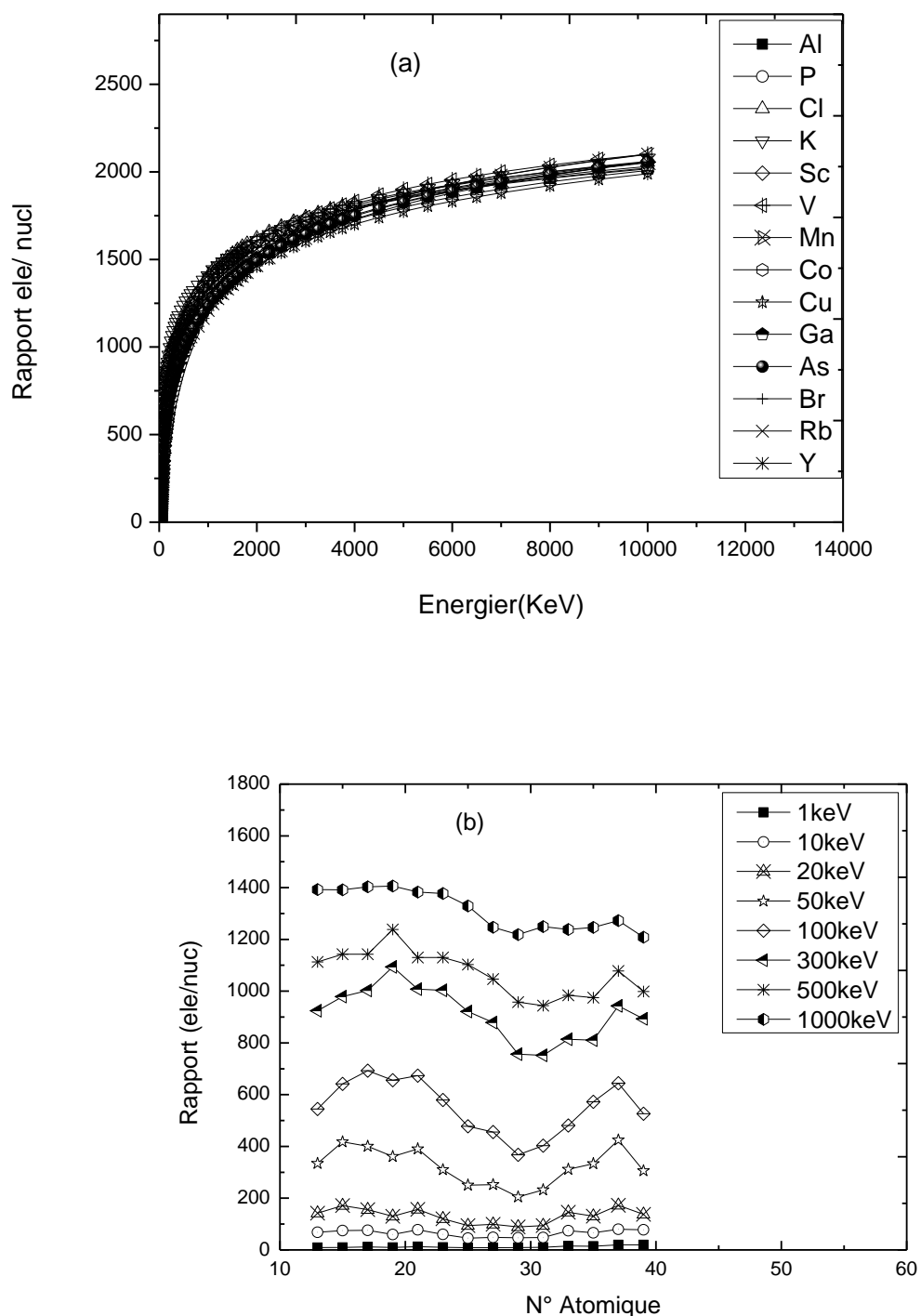
**Figure III.4.** Evaluation de la perte d'énergie électronique (a) et nucléaire (b) des protons en fonction du numéro atomique de la cible pour des énergies incidentes 1 keV, 10 keV, 20 keV, 50 keV, 100 keV, 300 keV, 500 keV et 1000 keV.

Pour la perte d'énergie électronique représentée sur la figure III.4 (a), la variation pour les différents éléments n'est pas monotone pour une énergie incidente donnée comme conséquence directe de l'évolution non monotone de la densité de la cible. Ceci met en évidence le pic de Bragg prévu pour chaque élément cible. Pour les faibles énergies incidentes inférieures à 100 keV et à l'exception de l'énergie 1 keV, la perte d'énergie passe par un maximum pour les éléments P et Rb, observation qui demeure cependant inexpiquée. Notons aussi que la perte d'énergie électronique décroît globalement avec le numéro atomique de la cible c'est-à-dire que les éléments légers sont de bons ralentisseurs des protons.

Pour la perte d'énergie nucléaire donnée en figure III.4 (b), la variation est, en général, monotone pour tous les éléments cibles et pour toutes les énergies incidentes. En effet, dans la gamme d'énergie reportée dans ce travail, on est loin du pic correspondant de Bragg pour la perte d'énergie électronique. La plus grande perte d'énergie est observée pour les éléments légers aux basses énergies incidentes (1 keV à 20 keV). Pour les autres énergies incidentes dépassant 300 keV, la perte d'énergie nucléaire est quasiment négligeable.

### III.5 Etude du rapport perte d'énergie électronique/nucléaire :

Les figures III.5 (a) et (b) montrent l'évolution du rapport entre la perte d'énergie électronique et la perte d'énergie nucléaire en fonction de l'énergie des protons incidents pour les éléments Al, P, Cl, K, Sc, V, Mn, Co, Cu, Ga, As, Br, Rb et Y (a) et en fonction du numéro atomique de la cible pour différentes énergies des protons (b).



**Figure III.5.** Evolution de la perte d'énergie électronique des protons en fonction de l'énergie incidente (a) et en fonction du numéro atomique de la cible pour des énergies incidentes 1 keV, 10k keV, 20 keV, 50 keV, 100 keV, 300 keV, 500 keV et 1000 keV (b).

L'examen des courbes de la figure **III.5** montre que :

Pour la figure III.5(a) :

- Le rapport entre la perte d'énergie électronique et la perte d'énergie nucléaire croît rapidement avec l'énergie des protons incidents et montre que pour les énergies étudiées, la perte d'énergie des protons dans les différentes cibles a lieu essentiellement par interaction des protons avec les électrons de la cible

Pour la figure III.5(b) :

- Pour les faibles énergies incidentes (1, 10 et 20 keV), le rapport entre la perte d'énergie électronique et la perte d'énergie nucléaire est quasiment constant pour tous les atomes cibles étudiés.

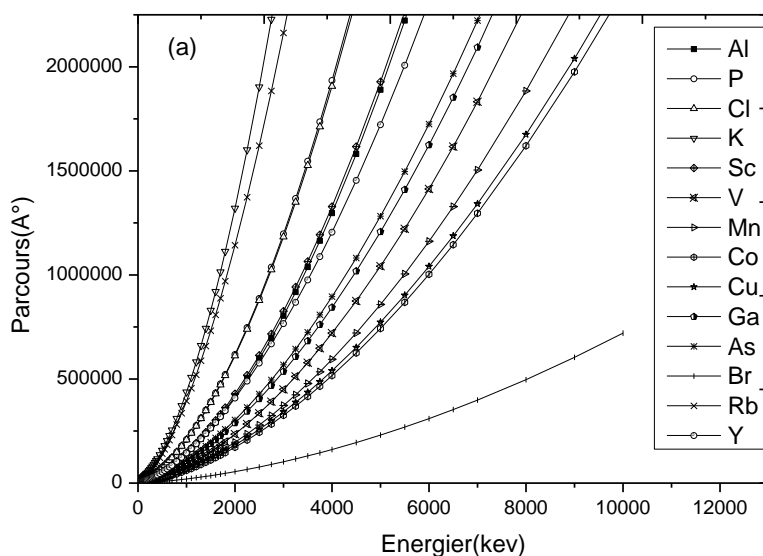
- Pour les autres énergies incidentes (50, 100, 300 et 500 keV), des fluctuations dans le rapport sont observées montrant un minimum dans la région du Cu et des maximums qui semblent apparaître dans la région P à K et pour l'élément Rb.

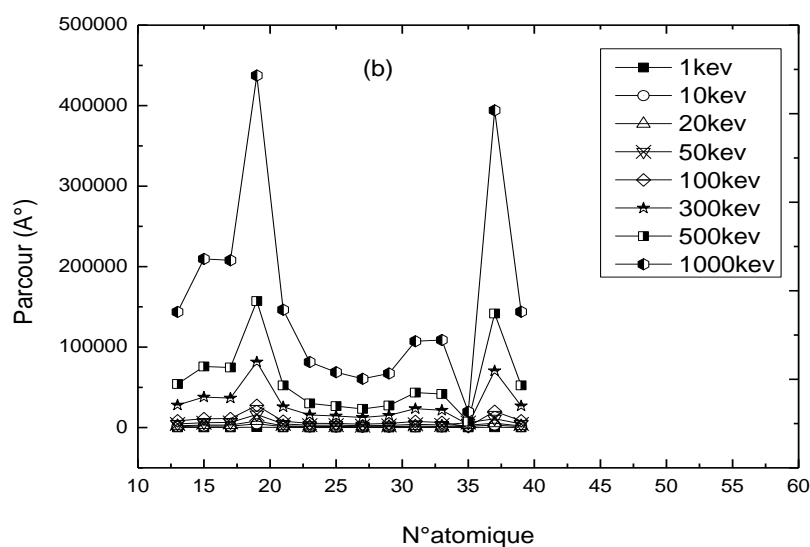
- Pour l'énergie 1000 keV, le rapport est maximum pour les éléments légers allant de Al à Sc et atteint une valeur environ 1400.

En conséquence, nous pouvons conclure que la perte d'énergie électronique est prépondérante dans le processus de ralentissement des protons avec les cibles et énergies reportées dans ce travail.

### III.6 Parcours des protons dans différentes cibles :

Les parcours des protons dans diverses cibles et pour différentes énergies incidents sont représentés sur les figures III.6 (a) et (b).





**Figure III.6.** Evolution des parcours des protons en fonction de l'énergie incidente (a) et en fonction du numéro atomique de la cible pour des énergies incidentes 1 keV, 10 keV, 20 keV, 50 keV, 100 keV, 300 keV, 500 keV, 1000 keV (b)

L'examen de la figure III.6 (a) montre que le parcours augmente rapidement avec l'énergie incidente des protons. L'évolution du parcours en fonction du numéro atomique de la cible (Figure III.6 b) montre des parcours maximums pour les éléments K et Rb pour quasiment toutes les énergies incidentes. Nous pensons que cette observation peut être expliquée en considérant les densités des différentes cibles. En effet, en regardant les densités, le potassium a une densité faible (0.862) par rapport à ses voisins Ar (1.784) et Ca (1.550). La même observation concernant l'élément Rb de faible densité (1.532) par rapport à ses voisins Kr (3.733) et Sr (2.540). Une faible densité de la cible implique moins de collisions dans la cible et par conséquent un parcours plus grand.

### Conclusion générale

Nous avons reporté dans ce mémoire l'étude des pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire des protons d'énergies allant de 1 keV jusqu'à 1000 keV dans des matériaux solides allant de l'élément  $Z=13$  (Aluminium) jusqu'à l'élément  $Z=39$  (Yttrium).

A cet effet, nous avons utilisé le code SRIM 'Stoppings and Ranges of Ions in Matter' pour calculer les pertes d'énergie électronique et nucléaire et les parcours des protons dans les différentes cibles.

En ce qui concerne les pertes d'énergie, les résultats ont montré que, pour les énergies incidentes utilisées dans ce travail, le ralentissement des protons se fait essentiellement par interaction avec les électrons de la cible : la perte d'énergie électronique est prépondérante et atteint un facteur 1500 fois la perte d'énergie nucléaire pour des protons d'énergie 1000 keV. Les courbes de perte d'énergie électronique ressortent le pic de Bragg qui se situe aux environs d'une énergie de 100 keV.

En ce qui concerne l'étude du parcours des protons dans les différents matériaux, il varie avec le numéro atomique de la cible au-delà de 500 keV mais demeure quasiment constant pour toutes les cibles étudiées aux basses énergies des protons incidents. Un fait marquant a été cependant observé : le parcours est maximum pour les éléments K et Rb.

## REFERENCES

- [1] ERVIN. B.PODGORSK "Radiation Physics for Medical Physicists". Edition: Springer, 2<sup>ème</sup> édition (2010), ISBN 978-3-642-00874-0.
- [2] Johann Collot Cours de physique expérimentale des hautes énergies du DEA de Physique Théorique Rhône–Alpin Année : 2001
- [3] E. Chpolski, Physique Atomique, 2<sup>ème</sup> édition, Edition Mir-Moscou(1977)
- [4] R.M .Turnbu, the structure of the Matter, Blackie (1979)
- [5] L. Reimer, K. Brockmann and V. Rhein, J. Appl. Phys. D11, 2151 (1978)
- [6] Thèse DAHI el hadj, MEHERCHI Lamia (Système de double calcul dosimétrique) (2010-2011)
- [7] I. Adesida, R. Shimizu and T.E. Everhert, J. Appl. Phys. 51,5962 (1980)
- [8] N. Wehbe. Emission ionique des solides `a l'impact d'agrégats Au n + (n=1-9) accélérés entre 0.15 et 1.25 MeV. Physique [physics]. Université Claude Bernard - Lyon I, 2006. Français. <tel-00097671 >
- [9] <http://hebergement.upsud.fr/m2apim/cours/cours%20APIM1/3%20Section%20efficace-2010.pdf>
- [10] Giles M.D., "ion implantation, in VLSI technology", New York: Mc Graw-Hill, (1988), pp.327-374.
- [11] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff and P.V. Thomsen, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 3, 10 (1963)
- [12] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff and P.V. Thomsen, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 3, 14 (1963).
- [13] M.Nastasi, J.W. Mayer, J.K. Hirvonen, Ion-solid Interactions: Fundamentals and Applications, University Press Combridge, 1995
- [14] Hussein Hijazi. Interaction ions-surfaces : étude de la pulvérisation du fluorure de lithium LiF par technique d'imagerie XY-TOF-SIMS. Physique [physics]. Université de Caen, 2011.Français. <tel-00634553 >
- [15] E. Rutherford, E. Phil. Mag. 21, 669 (1911).

- [16] Lindhard, Scharff, Schiott, Range Concepts and Heavy Ion Ranges, Mat. Fys. Medd., 33, (1963).
- [17] P. -N. Favennec, L'implantation ionique - pour la microélectronique et l'optique, Edt MASSON, 1993
- [18] N. Bohr, Kgl. Danske Videnskab. Mat-Fys. Medd., 18 (8), (1948).
- [19] L. Ottaviani, "Réalisation de jonction p-n dans le carbure de silicium par implantation ionique d'aluminium", Thèse de Doctorat, Strasbourg (France) (1999).
- [20] J.F.Gibbons, W.S.Myloie, "projected Range Statistics-Semiconductor and Related Materials", Stroudsburg (PA), Dowden, Hutchinson and Ross Publisher, p.402, (1975).
- [21] W.K.Hofker, D.P.Osthoek, N.J.Koeman et al, Radiation Effects, 24, p.223, (1975).
- [22] O. B. Firsov, "A qualitative Interpretation of the Mean Electron Excitation Energy in Atomic Collision", Soviet Physics, 1959, Vol.36, n°5, pp.1076-1080.
- [23] J. Lindhard, "Slowing-Down of Ions", Proc. Royal Society of London, 1969, Vol.311, pp.11-19.
- [24] Lindhard J., Scharff M., "Energy dissipation by Ion in the KeV Region" Physical Review, (1961), Vol.24, n°1, pp.128-130.
- [25] H. Bethe, Handbuch de physik **14**, 491 (1933)
- [26] J. Lindhard, J. Exp. Theor. Phys. Rev. **124**, 128 (1961).
- [27] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, in "The stopping and ranges of ions in solids", vol. 1, Pergamon press, New York (1985).
- [28] J. Stark, Phys. Z, 13, (a), (1912), p. 973.
- [29] Simulation à l'aide de d'un modèle dite de « Monté Carlo » des profils de bore implantés.
- [30] A. Bensaada, " Technologie des Semi-conducteurs", Office des Publications Universitaires, Alger, (1994).
- [31] [http://extraerg.enserg.fr/fr/form/m8/cours\\_td Annales/montes/mems/Cours/Dif\\_fusion\\_implantation LM.pdf](http://extraerg.enserg.fr/fr/form/m8/cours_td Annales/montes/mems/Cours/Dif_fusion_implantation LM.pdf)

- [32] W. L. Engl ,”Process and Device Modeling” , North-Holland Editions, (1986), Chap.2.
- [33] H. Ryssel, K. Muller, K. Habberger, R. Hankelmanne, F. Jahel, J. Appl. Phys., Vol.22, (1980), p.35.
- [34] J. H. Ryssel, K. Habberger, K. Hoffmann, G. Prinke, R. Dumcke, A. Sacks, IEEE, Trans. Electron. Devices, Vol. ED 27, (1980), p.1485.
- [35] M. A. JAUD, "Approche du potentiel effectif pour la simulation Monte-Carlo du transport électronique avec effets de quantification dans les dispositifs MOSFETs ‘’. Thèse de Doctorat, Paris Sud XI, Orsay, France, (2006).
- [36] S. Selberherr,"Analysis and simulation of semiconductor devices", Springer-Verlag, (1984).
- [37] M. B. Lazar, " Etude du dopage par implantation ionique d’aluminium dans le carbure de silicium pour la réalisation de composants de puissance ", Thèse de Doctorat, INSACEGELY, n° 02 ISAL 0016, Lyon. France, (2002).

## خلاصة

تطرقنا في هذا العمل بدراسة تباطؤ الألكترونات و الأيونية للمواد الصلبة باستعمال SRIM (توقفات ونطاقات لأيونات في المادة)

قمنا بحساب الضياع في الطاقة الألكترونية و النووية ومسار البروتونات في مختلف المواد . فيما يتعلق بفقدان الطاقة أظهرت النتائج أن التباطؤ البروتونات يحدث من خلال التفاعل مع الإلكترونات لهذا الهدف. فقدان الطاقة الألكترونية هي الغالبة وتصل إلى 1500 مرة من فقدان الطاقة النووية للبروتونات في 2000 كيلوفولط, منحنيات فقدان الطاقة الألكترونية تبرز ذروة براغ حوالي كيلوفولط 100 تنزاح في الطاقات العالية لأهداف أثقل البروتونات, وفيما يتعلق بمسار البروتونات ثابتة في جميع الطاقات المنخفضة (10-100 كيلو فولط ) لكنه يتغير بصفة معتبرة بدلالة العدد الذري للهدف .

**كلمات مفتاحية:** (توقفات ونطاقات لأيونات في المادة), الضياع في الطاقة الألكترونية, الضياع في الطاقة النووية, المقطع العرضي الفعال لرذرفورد, التباطؤ, المسار, قدرة التوقف, انتقال البروتونات.

## Résumé

Nous avons étudié, dans ce travail, les pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire des matériaux solides en utilisant le code SRIM (Stoppings and Ranges of Ions in Matter). Nous avons calculé les pertes d'énergie électronique et nucléaire et les parcours des protons dans différents matériaux et pour différentes énergies incidentes.

En ce qui concerne la perte d'énergie, les résultats ont montré que le ralentissement des protons se fait essentiellement par interaction avec les électrons de la cible. La perte d'énergie électronique est prépondérante et atteint un facteur 1500 fois la perte d'énergie nucléaire pour des protons de 2000 keV. Les courbes de perte d'énergie électronique ressortent le pic de Bragg autour d'une énergie d'environ 100 keV ; lequel pic est décalé sensiblement vers les hautes énergies pour les cibles plus lourdes.

En ce qui concerne le parcours des protons, il est quasiment constant pour toutes les cibles aux basses énergies (10 à 100 keV), mais varie de façon significative avec le numéro atomique de la cible pour les autres énergies.

**Mots-clés:** Pouvoirs d'arrêt et parcours dans la matière, perte d'énergie électronique et nucléaire, section efficace de Rutherford, ralentissement, parcours des protons.

## Summary

We reported in this study the electronic and nuclear stopping powers of solid materials for protons by using SRIM (Stoppings and ranges of Ions in Matter)

We calculated the loss of electronic and nuclear energy and proton paths in different materials.

Regarding the loss of energy, the results show that the slowing down of protons results from the interaction with the target. The electronic loss energy is predominant and reaches a factor of 1500 times than the nuclear loss energy 2000 keV proton. The electronic loss energy curves show the Bragg peak around 100 keV; this peak is substantially shifted toward the high energies for heavier targets.

As regards the path of the protons, they are almost constant for all targets at low energies (10 to 100 keV), but vary significantly with the target atomic number for the other energies.

**Keywords:** Stoppings and ranges of Ions in Matter, electronic and nuclear loss energy, Rutherford stopping cross section, slowing down, path of the protons.