

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur
Université de Guelma

Faculté des Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière
Département des Sciences de la Matière

Mémoire de fin d'études
Master



Spécialité : Physique de la Matière Condensée

Présenté par :

ABAIDIA Bochra

**Etude comparée des défauts induits par rayonnement de proton et de
hélium dans les cristaux SiC et NaI**

**Sous la Direction de :
Pr.N.BOUKHAROUBA**

Septembre 2020



Remerciement

En premier lieu, je tiens à remercier le bon Dieu tout Puissant de m'avoir donné la force et le courage de mener à bien ce modeste travail, également je remercie infiniment mes parents, qui m'ont encouragé et aidé à arriver à ce stade avancé de ma formation.

Ce travail a été réalisé à l'université 8 mai 1945-Guelma.

Tout d'abord, ce travail ne saurait être aussi riche et n'aurait pas vu le jour sans l'aide et l'encadrement de monsieur: N. BOUKHAROUBA, professeur à l'université de Guelma, aussi J'aimerais bien le remercier Pour tous ses remarques et ses encouragements.

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements à Monsieur (madame) le (la) président(e) du jury ainsi que tous les membres qui auront à apporter leurs soins dans l'évaluation de ce travail.

Mes derniers remerciements et ce ne sont pas les moindres, vont à toute personne qui a contribué de près ou de loin à l'élaboration de ce travail



Dédicace

*A l'aide d'Allah, le tout puissant, j'ai pu Réaliser ce travail que je
dédie :*

*A mes chers parents M.ABAIDIA Mohammed et Mme. RACHEDI
Aladjia*

Et

M.RADJEDI Saleh et Mme. R.Rabah

*En témoignage de ma reconnaissance pour leur patience, leurs
Sacrifices et leur soutien, tout le long de mes études. Qu'Allah Leur
prête santé et prospérité.*

A mon frère : Walid

A mes sœurs : Nora ; Imen et Chaïma

A mon amie : BOUKAHILI Roqiya

A mon fiancé : R.KHMAISSIA

A tout le groupe de ma promotion de physique 2019/2020

A tous ceux qui aiment le physique

A. Bohra

Résumé

Les effets induits par un rayonnement intense de protons et des particules alphas sur les deux composés SiC et NaI ont été calculés pour des énergies incidentes variant de 0,1 MeV jusqu'à 1 GeV afin de déterminer les cristaux les plus résistants à ce type de rayonnements. Le nombre moyen des lacunes et défauts engendrés par l'action de ces rayonnements dans ces deux composés ont été calculés et comparés pour les deux types de rayonnements. Le code SRIM basé sur la méthode de Monte Carlo a été utilisé pour effectuer ces calculs. Les résultats de ces calculs sur tout le domaine d'énergie montrent que dans le cas des protons le SiC est 19,2 % plus résistant que le NaI alors que pour les He^{++} le NaI est 14,6% plus résistant que SiC. Ces calculs ne prennent pas en compte les effets des neutrons induits qui sont supposés négligeables en raison de l'épaisseur très petite des cristaux considérés.

Abstract

The effects induced by intense radiation of protons and alpha particles on the two compounds SiC and NaI have been calculated for incident energies varying from 0.1 MeV up to 1 GeV in order to determine the crystals most resistant to this type of radiations. The average number of vacancies and defects generated by the action of these radiations in these two compounds were calculated and compared for the two types of radiations. The SRIM code based on the Monte Carlo method was used to perform these calculations. The results of these calculations over the entire energy range show that in the case of protons, SiC is 19.2% more resistant than NaI while for He⁺⁺ NaI is 14.6% more resistant. Than SiC. These calculations do not take into account the effects of the induced neutrons which are assumed to be negligible due to the very small thickness of the crystals considered.

ملخص

للطاقات NaI و SiC تم حساب التأثيرات الناتجة عن الإشعاع المكثف للبروتونات وجسيمات ألفا على المركبين من أجل تحديد البلورات الأكثر مقاومة لهذا النوع من GeV إلى 1 MeV العارضة التي تتراوح من 0.1 الإشعاعات: تم حساب متوسط عدد الوظائف الشاغرة والعيوب الناتجة عن عمل هذه الإشعاعات في هذين المركبين على أساس طريقة مونت كارلو لإجراء هذه الحسابات. SRIM ومقارنتها مع نوعي الإشعاع. تم استخدام كود أكثر مقاومة بنسبة SiC تظهر نتائج هذه الحسابات على نطاق الطاقة بأكمله أنه في حالة البروتونات ، يكون لا تأخذ هذه الحسابات SiC يكون أكثر مقاومة بنسبة 14.6%. من NaI He⁺⁺ بينما بالنسبة لـ NaI 19.2% من في الحساب تأثيرات النيوترونات المستحثة والتي يُفترض أنها ضئيلة نظرًا للسمك الصغير جدًا للبلورات.

Remerciement	
Dédicace	
Résumé Abstract ملخص	
Liste des tableaux	
Liste des figures	

Sommaire

Introduction	1
Chapitre I- Interactions Rayonnement-Matière	
I. 1.Rayonnement et Interactions des Particules.....	3
I. 1 .1.Types de Rayonnements.....	4
I.1.2.1.Classification des Rayonnements.....	4
I.1.2.1.A. Rayonnements Particulaires.....	4
I.1.2.1.B. Rayonnements Électromagnétiques.....	4
I.1.2.2. A. Rayonnement Ionisants.....	4
I.1.2.2.A.1.Directement ionisants.....	4
I.1.2.2.A.2.indirectement Ionisants.....	5
I.1.2.2.B. Rayonnements Non ionisants.....	5
I.1.2.3.Les Constituants Élémentaires de la Matière.....	5
I.2. Les interactions et les particules d'échange.....	6
I.2.1.Les interactions fondamentales.....	6
I.3. Interactions entre Rayonnements et matière.....	7
I.3.1.Caractérisation des Effets du Rayonnement de Particules Chargées.....	7
I.3.2.Expression de la Perte d'Énergie.....	10
I.3.2.1.Cas des Grandes Vitesses.....	10
I.3.2.2.Cas des Faibles vitesses (domaine de la perte d'énergie nucléaire).....	13
I.3.3.1.Perte d'énergie électronique.....	14
I.3.3.2.Perte d'énergie nucléaire.....	14
I.3.3.3 Particules Chargées Lourdes (proton, α).....	15
I.3.3.4.Quelques Définitions Utiles	17
Chapitre II- Méthode de Monte Carlo	
II.1. Introduction.....	20
II.1.1.Les éléments principaux d'un algorithme de Monte Carlo.....	20
II.2.Simulation de variables aléatoires.....	21
II.2.1.Probabilité.....	21
II.2.1.1.Variables aléatoires (v .a).....	21
II.2.1.2. Valeur d'espérance (moyenne), variance, fonctions de la v.a.....	21
II.2.2.Variables aléatoires continues.....	22
II.2.2.1. La fonction de densité (fd).....	22
II.2.2.2. La fonction de distribution cumulative (fdc)	23

II.2.2.3. Valeur et variance d'espérance pour les fd continues.....	24
II.2.2.4. La relation entre les fd discrets et continus.....	24
II.2.3. Exemple des fd continues.....	25
II.2.3.1. Distribution exponentielle.....	25
II.2.3. 2. Distribution (normale) gaussienne.....	26
II.2.3.3. Intégration de Monte Carlo.....	27
II.3. Échantillonnage de probabilité des fonctions de distribution.....	28
II.3.1. l'échantillonnage par l'intermédiaire de l'inversion du fdc	28
Chapitre III- Transport des ions énergétiques dans des cibles amorphes avec la méthode de Monte Carlo	
III.1.Introduction.....	30
III.2. Potentiel interatomique.....	31
III.2.1. Potentiels de Born-Mayer	31
III.2.1. Potentiels de Born-Mayer	31
III.2.2. Potentiels écrantés de Coulomb.....	31
III.3.Diffusion et perte d'énergie nucléaire.....	32
III.3.1.Évaluation analytique de l'angle de diffusion.....	32
III.3.2.perte d'énergie nucléaire et transformation angulaire.....	34
III.3.3. Distance entre les collisions et la sélection du paramètre d'impact.....	34
III.4. Perte d'énergie électronique.....	36
III.5 Le logiciel de calcul numérique SRIM (TRIM).....	37
III.5.1 Introduction	37
III.5.2 .Applications de SRIM et Types de Calculs.....	38
Chapitre IV-Résultat, Discussions et Conclusions	
IV.1. Présentation de notre travail	39
IV.1.1 Distribution Typique des ions en profondeur de la cible de SiC.....	40
IV.1.2 Distribution Typique des lacunes dans la cible de SiC.....	41
IV.1.3 .Evolution des parcours.....	42
IV.1.4.Définitions de quelques paramètres.....	43
IV.1.5.Les types de calculs utilisés par le code SRIM.....	43
IV.2. Résultat.....	43
IV.2.1 Création des Défauts.....	44
IV .2.2 La différence relative.....	46
IV.3 Conclusion.....	48
Conclusion générale.....	50
Les références.....	52

Liste des figures

Figure I.1 : Différentes types de rayonnement.....	3
Figure I.2: Parcours et portée d'un faisceau d'électron.....	10
Figure I.3: Interaction entre deux corps en fonction du paramètre d'impact.....	12
Figure I.4:Représentation des défauts crée dans la cible.....	17
Figure II.1: Typiques des fonctions de distribution.....	23
Figure II.2: La fonction de répartition correspondant a une densité de probabilité gaussienne.....	24
Figure II.3: Fonction de distribution exponentielle.....	25
Figure II.4: fonction de distribution gaussienne.....	27
Figure II.5: l'échantillonnage en utilisant l'inverse de la fdc.....	29
Figure III.1: Les trajectoires des particules dans le système de CM avec le "triangle de dispersion".....	33
Figure IV.1:Représentation typique de la distribution longitudinale et transversale des trajectoires des ions incidents dans la cible faite avec le logiciel SRIM [rayonnement de proton avec une énergie= 100MeV].....	40
Figure IV.2 : Distribution typique des lacunes causés par déplacement induit par des protons de 100 MeV dans le SiC.....	41
Figure IV.3: Evolution des parcours de l'Hélium dans le NaI et le SiC en fonction de l'énergie.....	42
Figure IV.4 : Dégâts créés par les collisions de H^+ et He^{++} de 1GeV avec les deux composés étudié.....	44
Figure IV.5:Nombre des lacunes induites par rayonnement protonique dans NaI et SiC en fonction d'énergie.....	45
Figure IV.6 : Différence entre le nombre de lacune induites par les protons dans NaI et SiC.....	46
Figure IV.7 : Comparaison de la Différence relative entre les Protons H^+ et les Alphas He^{++}	47
Figure IV.8: Evolution des lacunes induites par rayonnements des protons et des noyaux d'Hélium en fonction de l'énergie.....	47

Liste des tableaux

Tableau I.1: Représente les particules élémentaires.....	6
Tableau I.2: Les quartes interactions fondamentales.....	7
Tableau II 1: Les importantes propriétés pour fd continue et discrète.....	28
Tableau IV.1: Densités des différents composés.....	42
Tableau IV.2: Montre les lacunes créent par ion dans NaI et SiC.....	46
Tableau IV.3:Tableau comparatif des effets globaux (lacunes par déplacement) des rayonnements sur les deux cristaux NaI et SiC cumulés entre 0,1 MeV et 1000 MeV...	48

Introduction

L'étude des interactions des ions avec la matière fait encore l'objet de recherches très intenses. Les études portent sur les processus fondamentaux de l'interaction, la relaxation de l'énergie déposée dans les matériaux et les modifications induites dans ces matériaux. Des techniques expérimentales utilisant le bombardement ionique ainsi que des logiciels de simulation ont été conçus et développés pour étudier et comprendre la physique de base des processus se produisant lors de l'interaction des ions avec la surface cible. [1]

Les capteurs à semi-conducteurs sont très utilisés dans divers domaines de l'industrie. Avec l'introduction des capteurs micro-usinés (MEMs), ils se miniaturisent et trouvent de nouvelles applications en informatique, en médecine et dans les systèmes embarqués le choix des matériaux semi-conducteurs est judicieux car ces derniers peuvent être sensibles à diverses grandeurs physiques telle la température, la pression, le rayonnement électromagnétique, certains éléments chimiques, etc.

Parmi ces capteurs, un grand intérêt s'est porté sur les l'étude des semi-conducteurs résistants aux flux intenses de particules en raison de leurs applications dans tous les domaines d'activité humaine ou le niveau de rayonnement est important tels que l'industrie nucléaire, l'exploration de l'espace, la radiothérapie en médecine. Un intérêt particulier s'est récemment porté sur le SiC en raison de la promesse de fiabilité et de résilience qu'il semble présenter.

Nous nous proposons de tester cette résilience du SiC en comparant sa performance à celle d'un capteur scintillateur de base tel que le NaI. Notre travail consiste à étudier ces deux composés, à savoir le carbure de silicium (SiC) et l'iodure de sodium (NaI) par simulation Monte Carlo à l'aide du code de calcul SRIM (Stopping and Range of Ions in Mater) afin de simuler les trajectoires des particules incidentes (ions) dans les deux cibles choisies.

Les techniques de Monte Carlo sont couramment utilisées en physique des particules, où des simulations probabilistes permettent d'estimer la forme d'un signal ou la sensibilité d'un détecteur. La comparaison des données mesurées à ces simulations peut permettre de mettre en évidence des caractéristiques semblables à celle des caractéristiques réalisées par des systèmes de mesure expérimentaux.

Le bombardement d'une surface solide par des ions primaires s'accompagne d'une séquence d'interactions au cours desquelles les ions primaires transfèrent tout ou une partie de leur énergie au milieu. L'ion incident peut parcourir dans le solide une certaine distance, dissiper son énergie avant d'être finalement arrêté ou éjecté du solide.

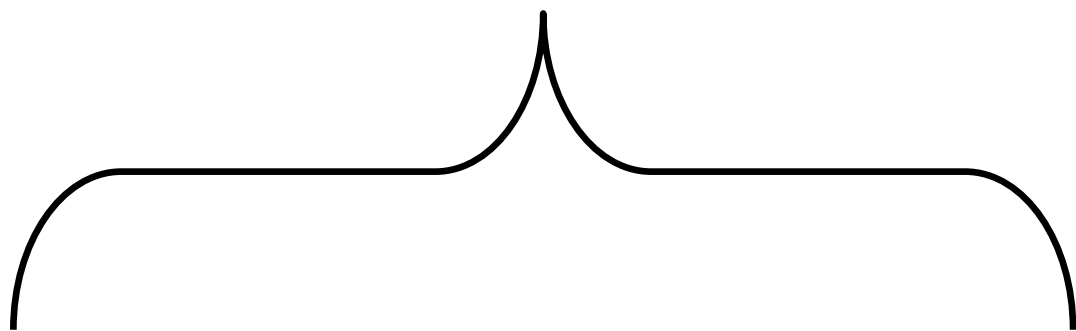
A cet effet, notre travail s'échelonne comme suite :

I. Partie bibliographique

- **Chapitre I** nous donner un rappel sur les interactions rayonnement matière, concernant l'interaction de la matière avec les particules chargée et en particulier avec les électrons et les ions. Les formules fondamentales relatives aux deux interactions électrons-matière et ions-matière seront rappelées.
- **chapitre II** nous rappelons la théorie de la méthode de Monte Carlo et décrivons l'aspect mathématique de la méthode de Monte Carlo et ses différentes versions. Une description générale de la méthode de Monte Carlo (MC) utilisée dans ce travail est fournie, ainsi que les fondements physiques et statistiques communs de toutes les méthodes de simulation (MC). Après une brève description de l'approche stochastique

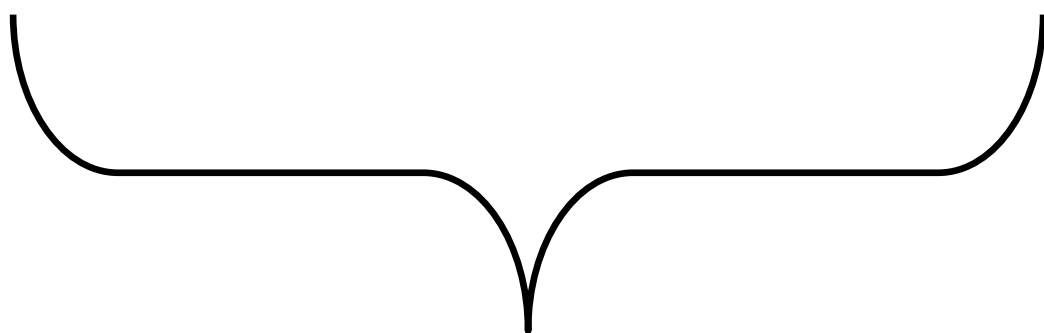
II. partie simulation

- **Chapitre III** présente la méthode de Monte Carlo utilisée pour modéliser Transport des ions énergétiques dans des cibles amorphes.
- On utilise le code de calcul SRIM permettant de simuler les interactions ions-matière. Les différents phénomènes comme les défauts Frenkel les vacances créés par les faisceaux d'ions, les distances parcourues par les ions dans leurs trajectoires, les phonons ; la perte d'énergie des ions seront traités.
- On s'intéressera à leurs courbes de variation avec l'énergie cinétique des ions incidents sur la surface de différents composants semi-conducteurs de notre choix comme le SiC et le NaI.
- **Chapitre IV** Les résultats obtenus via la méthode Monte Carlo.
- **Conclusion générale.**



Chapitre : I

*Interaction rayonnement
matière*



I. Interactions Rayonnement-Matière

I. 1. Rayonnement et Interactions des Particules

D'une manière générale, on peut définir un rayonnement comme un mode de propagation de l'énergie dans l'espace, sous forme d'ondes électromagnétiques ou de particules. Les rayonnements ne peuvent être détectés et caractérisés que grâce à leurs interactions avec la matière dans laquelle ils se propagent. Ils peuvent céder au milieu qu'ils traversent, la totalité ou une partie de leur énergie au cours de leur trajet, les rayonnements font entrer des modifications dans le milieu (la matière) traversé [2].

I. 1 .1. Types de Rayonnements

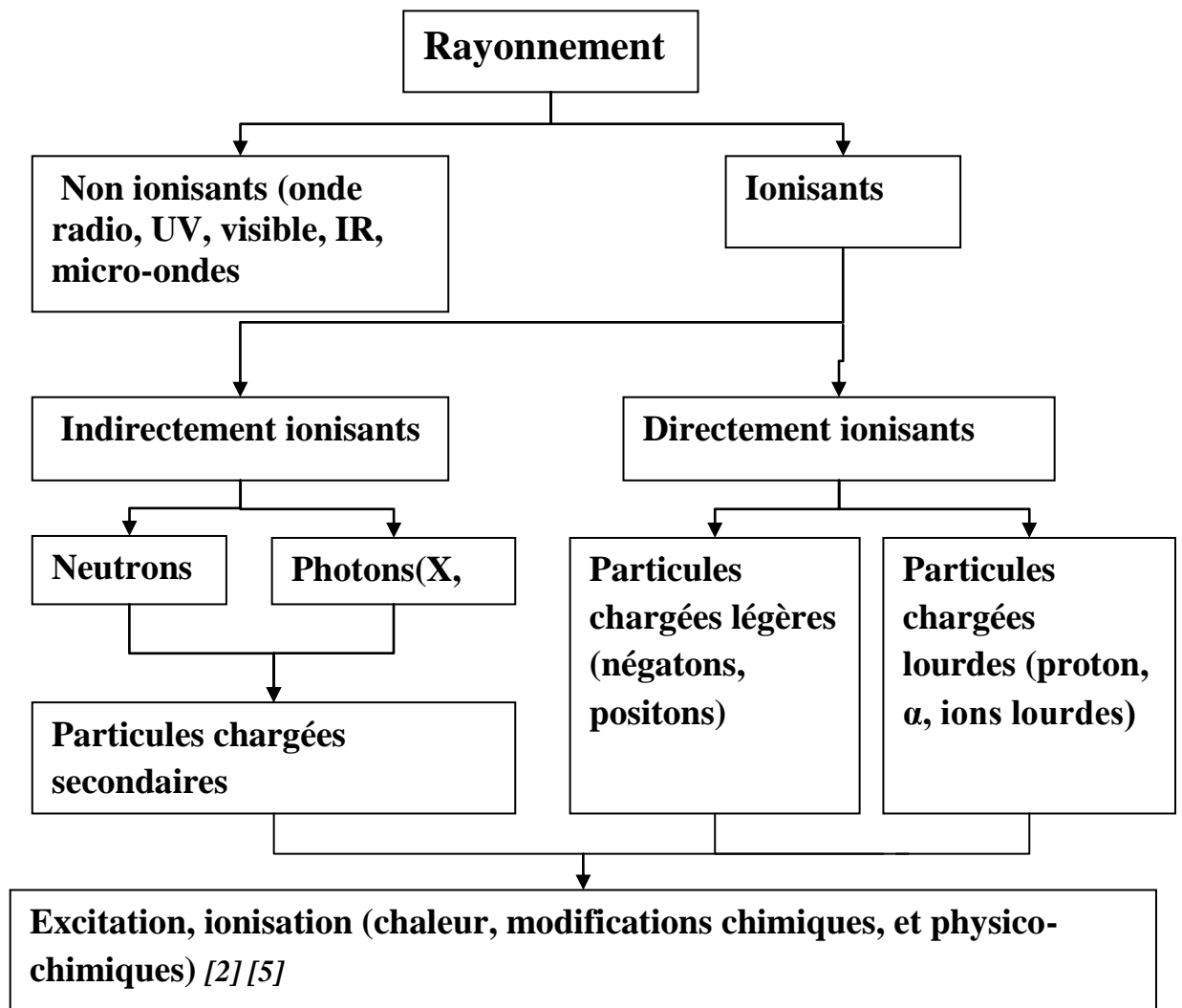


Figure I.1 : les différents types de rayonnement.

I.1.2.1. Classification des Rayonnements

On peut classer les rayonnements selon leurs propriétés physique particulières ou non, électriquement chargés ou non, ou selon d'autres critères comme les effets causés par leurs interactions avec des milieux matériels. On distingue les catégories suivantes :

I.1.2.1.A. Rayonnements Particulaires

Il s'agit de flux de particules massives qui sont :

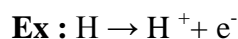
- Chargées : électrons, protons, positons \Rightarrow interactions coulombiennes plus fréquentes avec les électrons qu'avec les noyaux.
- Neutres : essentiellement les neutrons \Rightarrow perte d'énergie, ralentissement par collisions avec les noyaux du milieu traversé.

I.1.2.1.B. Rayonnements Électromagnétiques

Ce sont des rayonnements non-particulaires qui consistent en des flux de photons comme le $R\gamma$, RX et la lumière visible ou non, ainsi que les micro-ondes et les ondes radio.

I.1.2.2. A. Rayonnement Ionisants

Ce sont des rayonnements qui causent une libération de charges électriques dans le milieu matériel par la création de paires ion-électron libre. Cet aspect est important en radioprotection et en biologie. Cet effet est possible lorsque l'énergie incidente est suffisante pour arracher un électron à un atome du milieu traversé.



On peut distinguer deux classes de ce type de rayonnement :

I.1.2.2.A.1. Directement ionisants

Ils comprennent les particules chargées légères (ex. les électrons), et les particules chargées lourdes (les protons, les ions lourds) qui déposent l'énergie dans le milieu en une seule étape, par le processus d'interaction coulombienne entre la particule incidente et les électrons orbitaux.

I.1.2.2.A.2. Indirectement Ionisants

C'est le cas des radiations de non chargées tels que les rayonnements électromagnétiques (photons X et γ) et les neutrons qui déposent l'énergie dans le milieu en deux étapes :

- Dans un premier temps, une particule chargée est libérée dans le milieu absorbant soit par *ionisation* due à l'effet photoélectrique, Compton, création de paires pour le cas des photons et dans lequel une charge libre. Les neutrons interactions essentiellement par l'intermédiaire de la force nucléaire forte pour créer une réaction nucléaire qui résulte en une libération de particules secondaires chargées.
- Dans la deuxième étape les particules libérées déposent l'énergie dans le milieu absorbant par des interactions coulombiennes avec les électrons orbitaux des atomes.
- Le processus peut être itéré plusieurs fois résultant en une *cascade* ionisante.

I.1.2.2.B. Rayonnements Non ionisants

Lorsque l'énergie des "particules" incidentes est insuffisante pour libérer une charge libre dans le milieu, les seuls processus physiques possibles sont des processus où il n'y a pas de libération de charges électriques. Par exemple, lorsque l'énergie d'un photon incident est insuffisante pour initier un effet photoélectrique, Compton ou de création de paires, comme c'est le cas des rayonnements photoniques dans la fréquence est inférieure aux Ultra-violet (Onde radio, visible, IR, micro-onde et UV)

Remarque : L'énergie d'ionisation est l'énergie minimale nécessaire pour arracher un électron orbital des atomes ou des molécules du milieu irradié.

I.1.2.3. Les Constituants Élémentaires de la Matière

La matière courante (stable) est formée seulement de trois types de particules élémentaires: e, u, d.

- Chaque atome contient un noyau et des électrons
- Le noyau est constitué de protons et de neutrons
- Le proton est une combinaison de quarks u et d

- Le neutron est une combinaison de quarks u et d
- Les constituants élémentaires de la matière : les quarks et les leptons
- Toute la matière connue est formée de combinaisons de 6 leptons et 6 quarks
- Pour chacune de ces 12 particules, il existe une antiparticule de charge électrique opposée (antimatière)
- Ces constituants élémentaires n'ont pas de structure connue [4].
- les médiateurs des interactions: les bosons de jauge [5].

Tableau I.1: Représente les particules élémentaires [4].

				Charge électrique [e]	Charge forte
Leptons	Electron e	Muon μ	Tau τ	-1	Non
	neutrino ν_e	neutrino ν	neutrino ν_τ	0	
Quarks	Up u	Charm c	Top t	+2/3	oui
	Dawn d	Strange s	Bottom b	-1/3	

I.2. Les interactions et les particules d'échange

I.2.1. Les interactions fondamentales

Selon le Modèle Standard, il y a quatre interactions fondamentales sont :

- Interaction gravitationnelle
- Interaction électromagnétique
- Interaction nucléaire forte
- Interaction nucléaire faible [4]

Tableau I.2: Les quarts interactions fondamentales [4]

interaction	Intensité relative	Portée	Particules échangées	Structures liées stables	Source d'énergie (libération d'énergie potentielle)
gravifique	10^{-39}	Infinie	Graviton	Galaxie	(barrages, marées)
Electromagnétique	10^{-12}	Infinie	photon γ	Atome, molécules	Fossile (hydrocarbures)
Faible	10^{-14}	10^{-17} m	W^+, W^-, Z^0	-	Solaire, nucléaire
Forte	1	10^{-15} m	8 gluons	Noyaux des Atomes	(fission-fusion)

Il y a douze particules élémentaires et leurs antiparticules. Ceci est valable pour toutes les formes de la matière qu'elle soit étrange, ordinaire ou autre. La matière condensée ordinaire consiste en 3 particules élémentaires à savoir l'électron et les quarks up et down. À cette échelle on peut dire que la matière est constituée d'électrons, de protons et de neutrons, puisque les quarks sont des particules confinées qui ne peuvent exister à l'état libre.

I.3. Interactions entre Rayonnements et matière

Lorsqu'un rayonnement pénètre dans la matière, il se produit des interactions se manifestent par des échanges d'énergies entre le rayonnement et les atomes du milieu [7]. Le passage de particule à travers la matière génère une zone endommagée tout le long de sa trajectoire [8]. Nous nous intéressons dans le présent mémoire au cas spécifique des flux de protons et de particules α .

I.3.1. Caractérisation des Effets du Rayonnement de Particules

Chargées

Il y a deux aspects principaux à la problématique de l'interaction des protons et des particules α dans la matière. Il s'agit d'abord de particules chargées massives ayant une trajectoire rectiligne bien définie, contrairement aux particules légères comme l'électron. Elles possèdent donc un parcours –range que l'on pourra calculer. En premier lieu, le ralentissement de ces particules par la matière condensée s'effectue

principalement par ionisation des atomes du milieu et une libération continue d'électrons tout au long du parcours des particules incidentes. Ce mécanisme de ralentissement ne modifie pas la structure du milieu qui éventuellement retrouve son état électrique neutre par recombinaison des électrons libres induits. Cette *ionisation* est caractérisée par l'observable "Pouvoir d'arrêt électronique".

En second lieu, tout au long de son parcours, la particule chargée incidente peut éventuellement entrer en collision avec le noyau d'un des atomes du milieu et causer son déplacement hors de son site. Elle crée donc des lacunes dans la matière. Cet effet est quantifié par "le pouvoir d'arrêt nucléaire" qui contribue peu au ralentissement de la particule incidente mais qui modifie sa trajectoire. Le noyau de recul occasionné lors de la collision étant chargé peut à son tour induire d'autres déplacements lors de son recul dans le milieu [6] [7] [9].

Quelques Définitions des Observables de l'Interaction

Pouvoir d'arrêt

Le pouvoir d'arrêt S est la perte moyenne d'énergie de la particule par distance parcourue, mesurée en $\text{KeV} \cdot \mu\text{m}^{-1}$ [7] [10] [11].

On considère un matériau cible à une faible épaisseur Δx dans laquelle la particule incidente perd l'énergie ΔE en raison des nombreuses interactions avec les atomes [11].

$$S = \frac{dE}{dL} \quad (\text{I. 1})$$

$$S = S_c + S_f \quad (\text{I. 2})$$

Pouvoir d'arrêt par collision

Le pouvoir d'arrêt par collision est défini comme la perte de l'énergie cinétique de la particule chargée incidente par le processus collision avec les électrons le long de son parcours [7] [9].

$$S_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta X} \quad (\text{I. 3})$$

ΔE_c : L'énergie cinétique perdue lors de collision avec les électrons atomiques.

ΔX : la longueur du parcours de la particule incidente dans la matière.

Pouvoir d'Arrêt par freinage

Le pouvoir d'arrêt par freinage est défini comme la perte de l'énergie cinétique de la particule chargée incidente par le processus de freinage le long de son parcours.

$$S_f = \frac{\Delta E_f}{\Delta X} \quad (I.4)$$

ΔE_f : L'énergie cinétique perdue lors de l'émission par freinage.

ΔX : la longueur du parcours de la particule incidente dans la matière.

Transfert d'Énergie Linéaire (TEL)

Le transfert d'énergie linéaire est la quantité d'énergie transférée au milieu cible par la particule incidente d'énergie spécifiée par le processus de collision par unité de longueur de parcours [3]. Le TEL est connu de façon expérimentale et s'exprime en KeV. μm^{-1} [10] [12].

$$TEL = -\frac{dE}{dX} \quad (I.5)$$

Le signe (-) signifie une diminution d'énergie.

Densité Linéique d'Ionisation (DLI)

La densité linéique d'ionisation est définie comme le nombre de paires d'ion créée par unité de longueur de trajectoire de la particule. La DLI s'exprime en μm^{-1} [10] [12].

$$DLI = \frac{TEL}{W} \quad (I.6)$$

W : Énergie moyenne pour créer une paire d'ions.

Le Parcours

Les électrons ont une trajectoire très sinueuse : on observe généralement une déviation lors de chaque mode d'interaction (ionisation, excitation, freinage). Certains peuvent même subir une déviation de 180° (rétrodiffusion).

Pour caractériser la trajectoire de rayonnements électroniques, deux grandeurs peuvent être définies :

- **le parcours** : la longueur réelle de la trajectoire de l'électron. Cette grandeur est peu utilisée en radioprotection.
- **la portée** : représente la profondeur maximale atteinte par un faisceau d'électrons dans un milieu considéré. Cette grandeur est très utilisée en radioprotection ; lors de la conception d'écran.

La relation entre le parcours et le pouvoir d'arrêt est donnée par [2] [6] [10].

$$R = \int_E^0 \left(-\frac{dE}{dx}\right)^{-1} dE \quad (I.7)$$

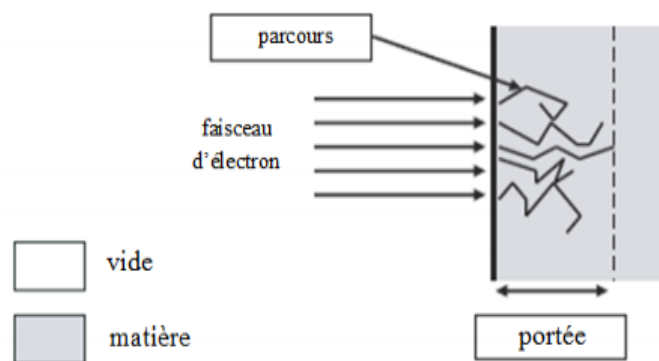


Figure I.2: parcours et portée d'un faisceau d'électron.

I.3.2 Expression de la Perte d'Énergie

I.3.2.1 Cas des Grandes Vitesses

La perte d'énergie d'une particule chargée se déplaçant dans un milieu est à cause de :

- L'interaction avec des électrons des atomes (des pertes de l'ionisation et l'excitation).
- L'interaction avec le champ coulombien d'un noyau écrané par les électrons des atomes.
- La diffusion par des forces nucléaires (collisions nucléaires élastiques et non élastiques).
- Les interactions dues aux moments magnétiques des particules en collision.
- Les pertes par rayonnement.

L'expression analytique de la perte d'énergie rend compte du type d'interaction mise en jeu entre la particule incidente et l'atome cible. Il est presque toujours supposé que ces interactions se produisent par collisions binaires, indépendantes nous négligerons les effets collectifs impliquant plusieurs atomes cibles à la fois, Si on considère une particule incidente de charge Z_1 , d'énergie E et de masse M_1 qui traverse une épaisseur dx composée de N centres diffuseurs, le nombre d'interactions qui se produiront avec une énergie de transfert T est donné par :

$$Nd\sigma(E, T)dx \quad (I. 8)$$

Où $d\sigma$ représente la probabilité de transfert d'une énergie T par une particule d'énergie E . L'énergie qui est transférée au cours de chaque collision s'écrit en fonction du nombre d'interactions.

$$-dE(T) = NTd\sigma(E, T) dx \quad (I. 9)$$

L'intégration de cette équation permet d'obtenir la perte d'énergie totale sur toutes les valeurs possibles de T comprises entre T_{min} et T_{max} [8] [13].

$$-\frac{dE}{dx} = N \int_{T_{min}}^{T_{max}} T d\sigma(E, T) \quad (I. 10)$$

La perte d'énergie est une fonction de la section efficace de transfert $d\sigma(E, T)$. Il est alors nécessaire de connaître la nature exacte de l'interaction entre la particule incidente et l'atome cible afin de définir un potentiel d'interaction, Deux modèles rendent compte des mécanismes de perte d'énergie, valables à grande et faible vitesse.

Dans le cas de collisions rapides, la vitesse de la particule incidente est supérieure à la vitesse de ses électrons orbitaux, On peut considérer que l'interaction s'établit entre deux charges ponctuelles et utilise un potentiel purement coulombien [8] [13].

Une particule incidente de masse M_1 , de charge Z_1e et d'énergie cinétique E_1 se dirigeant avec un paramètre d'impact b vers un atome cible au repos de masse M_2 , de charge Z_2e . La particule 1 subit une répulsion coulombienne qui la dévie d'un angle θ .

D'après la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement, la relation qui lie le paramètre d'impact à l'angle de diffusion est (Figure (I-3)) [6].

$$b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E} \cot\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{I. 11})$$

La distance minimale d'approche, d , s'écrit

$$d = 2b \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{I. 12})$$

L'énergie transférée au cours de la collision avec l'atome cible est :

$$T = T_{max} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{I. 13})$$

Où T_{max} est l'énergie maximale transférée lors d'un choc frontal ($b = 0$, $\theta = 180^\circ$)

$$T_{max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (\text{I. 14})$$

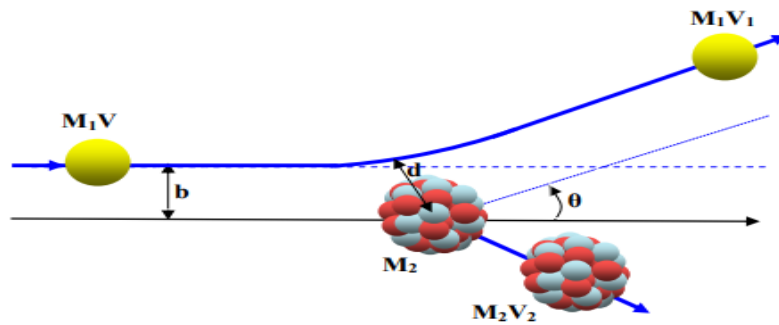


Figure I.3 : Interaction entre deux corps en fonction du paramètre d'impact.

L'énergie transférée peut être exprimée en fonction du paramètre d'impact b et de la distance minimale d'approche d par la relation :

$$T = \frac{T_{max}}{1 + \left(\frac{2b}{d}\right)^2} \quad (\text{I. 15})$$

La section efficace différentielle est

$$d\sigma = 2\pi b db \quad (\text{I. 16})$$

La perte d'énergie par choc nucléaire s'écrit comme l'équation (I-7), et en intégrant entre les valeurs minimale et maximale de l'énergie transférée, nous obtenons la relation suivante [13].

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{nuc} = 2\pi N \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{M_2 v^2} \ln\left(\frac{T_{max}}{T_{min}}\right) \quad (I.17)$$

Cette fois, l'interaction entre la particule incidente et les électrons de l'atome cible. Les approximations précédentes restent valables dans ce cas, à savoir une collision entre charges ponctuelles. L'équation (I-17) est modifiée, la masse M_2 est remplacée par celle de l'électron ainsi que la charge qui devient e au lieu de $Z_2 e$ [6]. La perte d'énergie électronique pour Z_2 électrons devient :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = 2\pi N \frac{Z_1 Z_2^2 e^4}{M_e v^2} \ln\left(\frac{T_{max}}{T_{min}}\right) \quad (I.18)$$

L'énergie maximale transférée aux électrons est d'après l'équation (I-11)

$$T_{max} \approx 2m_e v^2 \quad (I.19)$$

Car le rapport des masses entre un ion et un électron, M_1/m_e , est $\gg 1$.

Le rapport entre les pertes d'énergie nucléaire et électronique (en négligeant les variations logarithmiques puisque on considère des vitesses élevées du projectile) s'exprime par

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n / \left(\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{Z_2 m_e}{M_2} \approx \frac{1}{3600} \quad (I.20)$$

Et par conséquent
$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \gg \left(\frac{dE}{dx}\right)_n \quad (I.21)$$

La perte d'énergie nucléaire est négligeable devant la perte d'énergie électronique aux grandes vitesses. Les collisions inélastiques sont majoritaires et la perte d'énergie totale est inversement proportionnelle à l'énergie de la particule incidente [6] [8] [13].

I.3.2.2 Cas des Faibles vitesses (domaine de la perte d'énergie nucléaire)

A faible vitesse, la vitesse de l'ion est inférieure à celle de ses électrons. Dans ces conditions, la probabilité qu'a l'ion de se neutraliser est importante et les collisions entre le projectile et les électrons périphériques sont quasi élastiques. Ceci conduit à utiliser un potentiel coulombien écranté de type Thomas-Fermi

$$V\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (\text{I. 21})$$

Où $\Phi\left(\frac{r}{a}\right)$ est la fonction d'écrantage, a est le rayon d'écrantage de Thomas-Fermi que l'on exprime sous la forme

$$a = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} a_0 \left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{I. 22})$$

Avec $a_0 = 0.53 \text{ \AA}$ le rayon de Bohr.

I.3.3.1. Perte d'énergie électronique

A partir de ce potentiel écranté, Lindhard, Scharff et Schiott ont élaboré une théorie (dite théorie LSS) [10] qui permet de donner une expression analytique de la perte d'énergie électronique

$$\left(\frac{dE}{dx}\right) = \frac{8N\pi e^2 a_0 Z_1^{\frac{7}{2}} Z_2 v_1}{\left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}}\right)^{\frac{3}{2}} v_0} \quad (\text{I. 23})$$

Cette formule montre que la perte d'énergie varie comme la vitesse du projectile v_1 et donc comme $E^{\frac{1}{2}}$ [8] [13].

I.3.3.2. Perte d'énergie nucléaire

Au fur et à mesure que la vitesse de l'ion diminue, la distance minimale d'approche du noyau cible augmente. Nous venons de voir que lorsque la vitesse de l'ion est de l'ordre de celle de ses électrons périphériques, il a tendance à devenir neutre. Dans ces conditions, le potentiel décrivant l'interaction entre la particule projectile et l'atome cible peut être considéré comme un potentiel de Coulomb écranté de type Thomas-Fermi équation (I-8), dont la fonction d'écrantage est égale à :

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{a}{2r} \quad (\text{I. 24})$$

D'où le potentiel d'interaction

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2 a}{2r^2} \quad (\text{I. 25})$$

On sait que l'énergie maximale transférée est

$$T_{max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (\text{I. 26})$$

La perte d'énergie par choc nucléaire s'écrit donc

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \frac{\pi^2 N Z_1 Z_2 e^2 a M_1}{2(M_1 + M_2)} \quad (\text{I. 27})$$

Lindhard et al ont exprimé la perte d'énergie par choc nucléaire en utilisant une énergie réduite ε (sans dimension)

$$\varepsilon = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E \frac{4\pi\varepsilon_0 a}{Z_1 Z_2 e^2} \quad (\text{I. 28})$$

Et une longueur réduite ρ

$$P = x N M_2 4\pi a^2 \frac{M_1}{(M_1 + M_2)^2} \quad (\text{I. 29})$$

La perte d'énergie avec ces variables devient

$$\frac{dE}{dx} = a N Z_1 Z_2 e^2 \frac{M_1}{M_1 + M_2} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \quad (\text{I. 30})$$

Où $\frac{d\varepsilon}{d\rho}$ dépend de la forme du potentiel $V(r)$ utilisé et donc de la forme de la fonction de Fermi. Selon l'approximation de Kalbitzer et al [14], cette perte d'énergie peut s'écrire

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \frac{1.7 \varepsilon^{\frac{1}{2}} \log(\varepsilon + e)}{1 + 8.6\varepsilon + 3.4\varepsilon^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{I. 31})$$

Cette relation reste la même quel que soit le couple projectile-atome cible. C'est une fonction universelle de la perte d'énergie nucléaire [8] [13].

I.3.3.3 Particules Chargées Lourdes (proton, α)

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_1 .
- 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 [7].

Création de Défauts (Endommagement)

Déplacement des atomes de leur position normale dans une structure d'un matériau. Des atomes déplacés peuvent laisser des lacunes dans le réseau et se mettre en position interstitielle.

- Déplacement = le processus où un atome énergétique incident frappe un atome de réseaux de son emplacement.
- Lacune = un emplacement de réseaux sans atomes. A l'origine tous les emplacements de réseaux sont occupés, et les déplacements causent des lacunes.
- Les atomes Interstitiels = les atomes qui ont été frappés hors de leur emplacement original, et viennent à un arrêt dans le solide. Aussi les ions incidents, quand ils s'arrêtent, sont considérés des atomes interstitiels

- Collisions de Remplacements = des atomes d'emplacement avec des nouveaux atomes, identiques à leur atome original (c'est discuté ci-dessous). C'est le seul mécanisme dans lequel une lacune peut être réoccupée. [11]

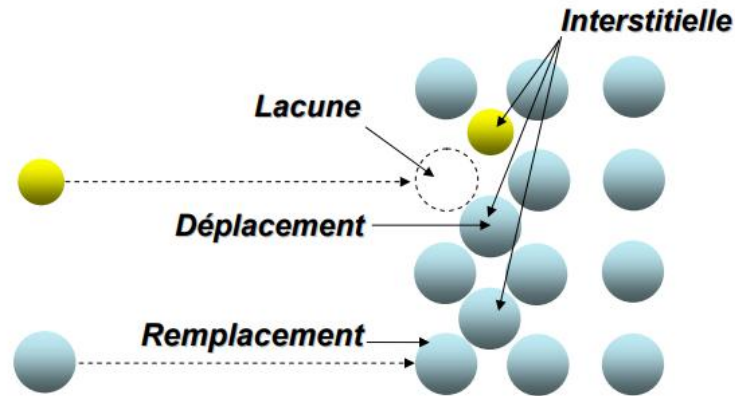


Figure I.4 : une représentation des défauts créés dans la cible.

I.3.3.4. Quelques Définitions Utiles

- $E_{dép}$ (E_d) = énergie de déplacement, c'est l'énergie minimale requise pour frapper un atome de cible assez loin de son emplacement de réseaux de sorte qu'il ne retourne pas immédiatement. Cette énergie minimale produit des « couples de Frenkel » = une seule lacune et un atome interstitiel voisin, qui est le type le plus fondamental de dégâts provoqués par un ion.
- $E_{réseau}$ = énergie de liaison de réseaux, l'énergie minimale nécessaire pour enlever un atome de son emplacement de réseaux. Il capture l'énergie pour casser les bandes électroniques et déplace un atome d'un emplacement du réseau. L'énergie de liaison de réseaux doit être plus petite que l'énergie de déplacement.
- E_{surf} = énergie de liaison de surface. Un atome sur la surface de cible n'est pas limité d'un côté, ainsi l'énergie nécessaire pour l'enlever de son emplacement de réseaux est moins que si elle était à l'intérieur du solide et entouré par d'autres atomes. Un atome extérieur a moins de bandes électroniques qui doivent être cassées. Cette énergie est très importante pour pulvériser (déplacement des atomes extérieurs) [12].

- E_{fin} = énergie finale d'un atome mobile. Le calcul de la cinétique d'ion doit être fini à une certaine énergie minimale. Les divers processus de la perte d'énergie tendent à devenir plus petits comme un ion ralenti.

Pour des cibles de silicium, les valeurs par défaut sont

$$E_{dép} = 25 \text{ ev} , E_{réseau} = 2 \text{ ev} , E_{surf} = 4.7 \text{ ev} \text{ et } E_{fin} = 2 \text{ ev}$$

Lorsqu'un atome mobile frappe un atome cible, et lui transmet plus que l'énergie de déplacement ($E_{dép}$), l'atome cible sera éjectés de son emplacement de réseaux. Avec une énergie de recul, $E_{recul} = E_{dép} - E_{réseaux}$. Si l'énergie de l'atome cible de recul, est plus grand que $E_{dép}$, il peut continuer et créer plus de lacunes.

Il y a un type spécial d'endommagement qui doit être considéré. Si l'atome incident est le même élément que l'atome qu'il touche, alors l'atome incident pourrait transférer son énergie à l'atome cible, la frappe hors de son emplacement de réseaux, et l'atome incident, prendra alors sa place dans le réseau alors que l'atome frappé se déplace. Ceci s'appelle une collision de remplacement. Ce mécanisme peut réduire toutes les lacunes jusqu'à 30%. [11]

Les différents éléments d'une collision de remplacement

Trois éléments différents doivent être rencontrés pour une Collision de remplacement

- ✓ L'atome mobile doit être identique à l'atome cible
- ✓ l'atome incident doit finir avec moins d'énergie que E_{final} (il doit s'arrêter)
- ✓ l'atome touché doit avoir assez d'énergie à se déplacer, c.-à-d. son énergie est plus grande que $E_{dép}$.

Ces types d'endommagement sont liés

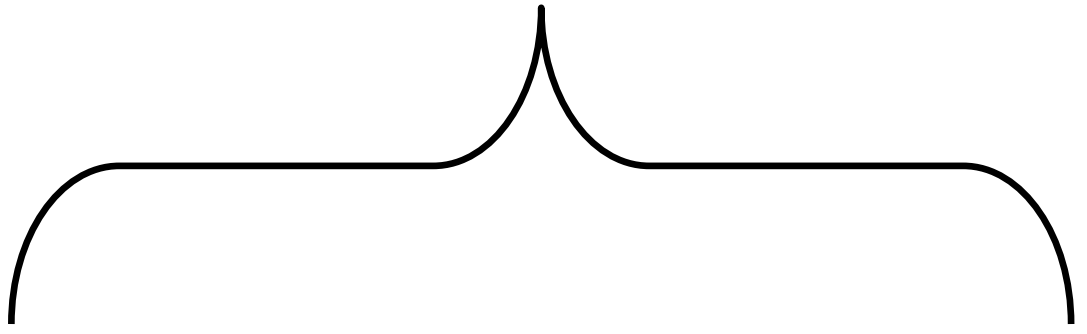
$$\text{Déplacements} = \text{lacunes} + \text{collisions de remplacement} \quad \text{(Equation 1)}$$

$$\text{Lacunes} = \text{interstitiels} + (\text{atomes qui quittent le volume de cible}) \quad \text{(Equation 2)}$$

Le calcul des cascades, des déplacements, des collisions de remplacement, etc. crée des prétentions ce qui sont définis explicitement ci-dessous : Supposons qu'un atome incident a le nombre atomique Z_1 , et l'énergie E . Il fait une collision avec un atome cible

du nombre atomique Z_2 . Après la collision, l'ion incident a l'énergie E_1 et l'atome frappé à l'énergie E_2 .

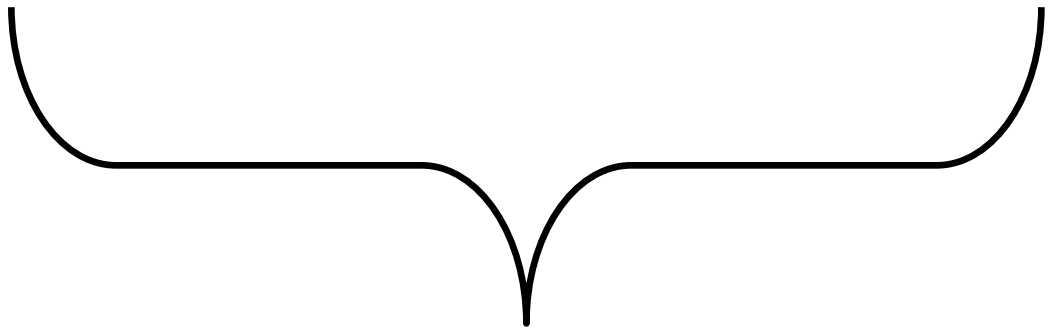
- Un déplacement atomique se apparaît si $E_2 > E_{dép}$ (l'atome frappé est donné assez d'énergie pour quitter l'emplacement).
- La lacune se produit si $E_1 > E_{dép}$ et $E_2 > E_{dép}$ (les deux atomes ont assez d'énergie pour quitter le site). Les deux atomes deviennent alors les atomes mobiles de la cascade. L'énergie, E_2 de l'atome Z_2 est réduite par $E_{réseaux}$ avant d'avoir une autre collision.
- Si $E_2 < E_{dép}$, alors l'atome frappé n'a pas assez d'énergie et elle vibrera de nouveau à son emplacement original libérant E_2 comme phonons (énergie déposée dans une vibration de réseaux cristal).
- Si $E_1 < E_{dép}$ et $E_2 > E_{dép}$ et $Z_1 = Z_2$, alors l'atome entrant restera au site et la collision s'appelle une collision de remplacement avec E_1 libéré comme phonons. L'atome dans le site de réseaux reste le même atome par échange. Ce type de collision est commun dans les cibles d'élément inique avec une grande cascade de recul.
- Si $E_1 < E_{dép}$ et $E_2 > E_{dép}$ et $Z_1 \neq Z_2$, alors Z_1 devient un arrêt d'atome interstitiel.
- Finalement, si $E_1 < E_{dép}$ et $E_2 < E_{dép}$, alors Z_1 devient un interstitiel et $E_1 + E_2$ libéré comme phonons [11].



*Chapitre : **II***

Méthode

Monte Carlo



Chapitre II : Méthode de Monte Carlo

II.1. Introduction

Le nom Monte Carlo (MC) a été proposé par les scientifiques du projet Manhattan lors de la deuxième guerre mondiale et fait allusion aux jeux de hasard pratiqués à Monaco. Parmi les pionniers des méthodes MC nous retrouvons E. Fermi, J. Neumann, S. Ulam, N. Metropolis. Les méthodes MC sont aujourd'hui utilisées pour simuler des phénomènes physiques complexes dans plusieurs domaines scientifiques et appliqués : radioactivité, physique des hautes énergies, réseaux, économétrie, logistique. Il peut être visualisé comme une boîte noire où entre un flux de nombres pseudo-aléatoires (c-à-d générés par l'ordinateur) et on obtient un flux de nombres comme sortie; l'estimation de la quantité d'intérêt est obtenue en analysant l'output [15] [17].

La méthode Monte Carlo est une méthode d'approximation, au sens statistique du terme, elle représente les techniques permettant d'évaluer une quantité déterministe avec des paramètres ou des entrées stochastiques [15] [16] [17].

II.1.1. Les éléments principaux d'un algorithme de Monte Carlo

Les éléments primaires d'une méthode de simulation de Monte Carlo (pour construire sa propre méthode) incluent ce qui suit [15] [18] :

- **Les fonctions de distribution (fd)** : le système physique (ou mathématique) doivent être décrites par un ensemble de fd .
- **Générateur à nombre aléatoire**: une source des nombres aléatoires uniformément distribués sur l'intervalle d'unité.
- **Règle de l'échantillonnage**: une prescription qui lie le nombre aléatoire avec la fd .
- **Évaluation des erreurs**: une méthode pour estimer l'erreur en fonction du nombre d'essais.
- **Techniques de réduction de variance**: se sont des méthodes permettant la réduction de variance sur la solution tout en limitant le temps de calcul.

II.2.Simulation de variables aléatoires

II.2.1.Probabilité

A un événement E_k nous assignerons une probabilité P_k , qui est également dénotée $P(E_k)$. La quantité P_k doit satisfaire les propriétés suivantes pour être une probabilité légitime [8] [18] :

- $0 \leq P_k \leq 1$
- Si E_k se produit certainement alors $P_k=1$
- Si E_k ne se produira certainement pas alors $P_k=0$
- Si l'événement est mutuellement exclusif $P(E_i \text{ et } E_j)=0, P(E_i \text{ ou } E_j) = P_i + P_j$
- Si l'événement $i, i=1,2,\dots,N$ est mutuellement exclusif approfondi

$$\sum_{i=1}^N P_i = 1$$

II.2.1.1. Variables aléatoires (v. a)

Pour appliquer une méthode de Monte Carlo, il faut savoir simuler suivant une loi donnée. Nous supposons ici que nous disposons d'un générateur de nombres aléatoires de loi $U([0, 1])$. Le langage R contient les générateurs d'un grand nombre de lois classiques [19]

Dans de nombreuses expériences aléatoires, on n'est pas intéressé directement par le résultat de l'expérience, mais par une certaine fonction de ce résultat. qui associer un nombre. Cette association est une "variable aléatoire" [20].

De façon générale, on appelle variable aléatoire comme un nombre réel x_i qui est assigné à un événement E_i [21].

II.2.1.2. Valeur d'espérance (moyenne), variance, fonctions de la variable aléatoire (v. a)

C'est une moyenne pondérée. Plus précisément, c'est le barycentre du système (x_i, p_i) [22], elle a la définition suivante

$$E(x) = \bar{x} = \sum_i P_i x_i \quad (\text{II. 1})$$

Nous pouvons définir la valeur d'espérance de $g(x)$

$$E[g(x)] = \bar{g} = \sum_i P_i g(x_i) \quad (\text{II. 2})$$

La valeur d'espérance est simplement le « premier moment » du $v.$, les moments plus élevés « *moment d'ordre n* » d'un $v.$ a x sont comme suit [22]

$$E(x^n) = \overline{x^n} \quad (\text{II. 3})$$

Nous définissons également les moments « centraux » qui expriment la variation d'un $v.$ au sujet de son moyen, par conséquent « corrigés pour le moyen » [22]

$$n^{\text{ième}} \text{ Moment central} = \overline{(x - \bar{x})^n} \quad (\text{II. 4})$$

Le premier moment central est zéro. Le deuxième moment central est la variance [23] [24] [25] :

$$\text{Variance} \equiv \text{var}(x) = \sigma^2(x) = \overline{(x - \bar{x})^2} \quad (\text{II. 5})$$

$$\sigma^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \quad (\text{II. 6})$$

Déviations standard « l'écart type de X » [22] [23] :

$$d = \sigma(x) = [\text{var}(x)]^{1/2} \quad (\text{II. 7})$$

II.2.2. Variables aléatoires continues

Jusqu'ici nous avons considéré seulement le $v.$ discret, c'est-à-dire, un nombre spécifique x_i est assigné à l'événement E_i , mais il y a des événements ne peuvent pas être énumérés par des nombres entiers.

II.2.2.1. La fonction de densité ($f d$)

La fonction de densité $f(x)$ est la probabilité de $f(x)dx$ pour que la $v.a$ soit écrit dans l'intervalle $(x, x + dx)$, comme [23]

$$\text{prob}(x \leq x' \leq x + dx) = f(x) dx \quad (\text{II. 8})$$

Nous pouvons également déterminer la probabilité de trouver le $v.$ quelque part dans l'intervalle fini $[a, b]$:

$$\text{prob}(a \leq x \leq b) \equiv p(a \leq x \leq b) = \int_a^b f(x) dx \quad (\text{II. 9})$$

Qui est, naturellement, la zone sous la courbe $f(x)$ de $x=a$ à $x=b$

Les deux conditions nécessaires pour $f(x)$ être une *fd* légitime [23] [26] :

$$f(x) \geq 0, -\infty < x < \infty \quad (\text{II.10})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x') dx' = 1 \quad (\text{II.11})$$

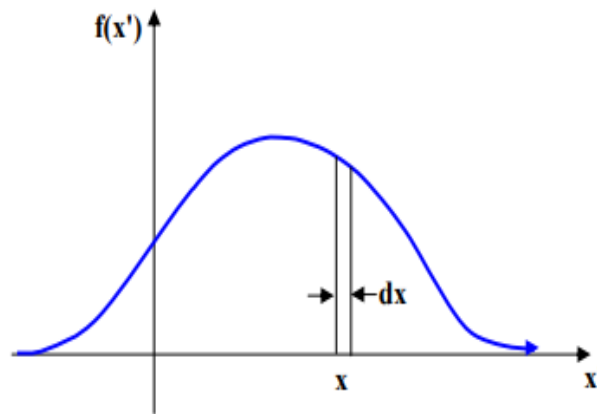


Figure II.1: Typiques des fonctions de distribution.

II.2.2.2. La fonction de distribution cumulative (fdc)

La fonction de distribution cumulative donne la probabilité que la v. x est inférieur ou égal à x :

$$\begin{aligned} FDC &\equiv \text{prob}(x' \leq x) \equiv F(x) \\ &= \int_{-\infty}^x f(x') dx' \end{aligned} \quad (\text{II.12})$$

Notez que puisque $f(x) \geq 0$, et l'intégrale de $f(x)$ est normalisée à l'unité, $F(x)$ obéit aux conditions suivantes [21] [25] :

- $F(x)$ est une augmentation monotone
- $F(-\infty) = 0$
- $F(+\infty) = 1$

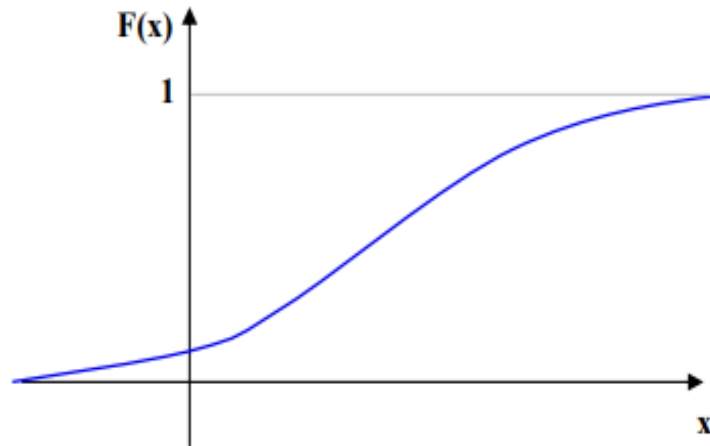


Figure II.2: La fonction de répartition correspondant a une densité de probabilité gaussienne [21].

II.2.2.3. Valeur et variance d'espérance pour les *fd* continues

Nous pouvons définir la valeur et la variance d'espérance pour une *fd* continue (conformés à nos définitions plus tôt pour une *fd* discrète) [8].

$$E(x) \equiv u \equiv \bar{x} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(x') x' dx' \quad (\text{II-13})$$

$$\text{var}(x) \equiv \sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') (x' - u)^2 dx' \quad (\text{II. 14})$$

De même, si nous définissons une fonction à valeurs réelles $g(x)$ de la v.a x , nous obtenons facilement les expressions suivantes pour le moyen et la variance de g pour une *fd* continue

$$E(g) \equiv \bar{g} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') g(x') dx' \quad (\text{II. 15})$$

$$\text{var}(g) \equiv \sigma^2(g) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') [g(x') - \bar{g}]^2 dx' \quad (\text{II. 16})$$

Il est important de maintenir dans l'esprit que les quantités x et g sont des moyens vrais, des propriétés de la *fd* de $f(x)$ et $g(x)$ dans beaucoup de cas d'intérêt pratique le moyen vrai n'est pas connues, et le but de la simulation de Monte Carlo sera estimé le moyen vrai [18] [8].

II.2.2.4. La relation entre les *fd* discrets et continus

Si x est une variable aléatoire discrète de loi de probabilité (x_i, p_i) , définie sur un nombre fini N d'événements élémentaires alors [18] [21] :

$$E_d(x) = \sum_{i=1}^N p_i x_i \quad (\text{II.17})$$

$$\text{var}_d(x) = \sum_{i=1}^N p_i (x_i - u)^2 \quad (\text{II.18})$$

Où (L'indice inférieur « d » correspond à « discrète »)

Prenons maintenant la limite $N \rightarrow \infty$ au passage du discret aux continues

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} E_d(x) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N x_i p_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N x_i \frac{p_i}{x_i} x \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N x_i f_i x_i = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') x' dx' \\ &= E(x) \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \text{var}_d(x) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N (x_i - u)^2 \frac{p_i}{x_i} x_i \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N (x_i - u)^2 f_i x_i = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') (x' - u)^2 dx' \\ &= \text{var}(x) \end{aligned} \quad (\text{II.20})$$

II.2.3. Exemple des fd continues

II.2.3.1. Distribution exponentielle

$$f(x) = \lambda e^{-\lambda x}, \quad x \geq 0, \quad \lambda > 0 \quad (\text{II.21})$$

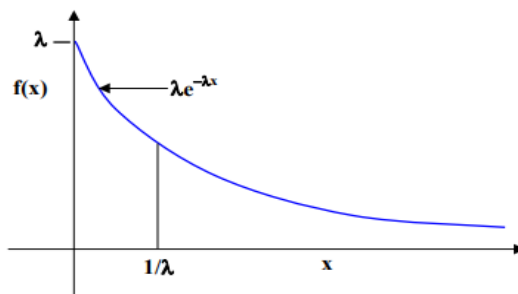


Figure II.3: Fonction de distribution exponentielle.

Cette distribution peut décrire un certain nombre de phénomènes physiques, telle que l'heure t pour un noyau radioactif qui se dégrade, ou l'heure pour un composant d'échouer, ou la distance z des voyages d'un photon dans l'atmosphère avant de souffrir une collision avec une molécule d'eau.

La distribution exponentielle est caractérisée par le paramètre simple λ , et on peut facilement prouver que le moyen et la variance pour la distribution exponentielle sont donnés par

$$\mu = \frac{1}{\lambda} \quad (\text{II. 22})$$

$$\sigma^2 = \left(\frac{1}{\lambda}\right)^2 \quad (\text{II. 23})$$

Notez que l'écart type de la distribution exponentielle est [18] :

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} \quad (\text{II. 24})$$

II.2.3. 2. Distribution (normale) gaussienne

Le deuxième exemple est peut-être la *fd* la plus importante dans la probabilité et les statistiques : la gaussienne (ou distribution normale).

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma)^2} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, -\infty < x < \infty \quad (\text{II. 25})$$

Calculons la probabilité qu'un échantillon de la distribution gaussienne fera partie d'un écart type simple σ du moyen μ :

$$p(\mu - \sigma \leq x \leq \mu + \sigma) = 0.6826 \quad (\text{II. 26})$$

De même, la probabilité que l'échantillon est à moins de deux écarts type moyen (dans " σ^2 ") est :

$$p(\mu - 2\sigma \leq x \leq \mu + 2\sigma) = 0.9544 \quad (\text{II. 27})$$

Par conséquent 68% des échantillons, en moyenne, chute à moins d'une, et plus de 95%

Des échantillons feront partie de deux σ du moyen μ .

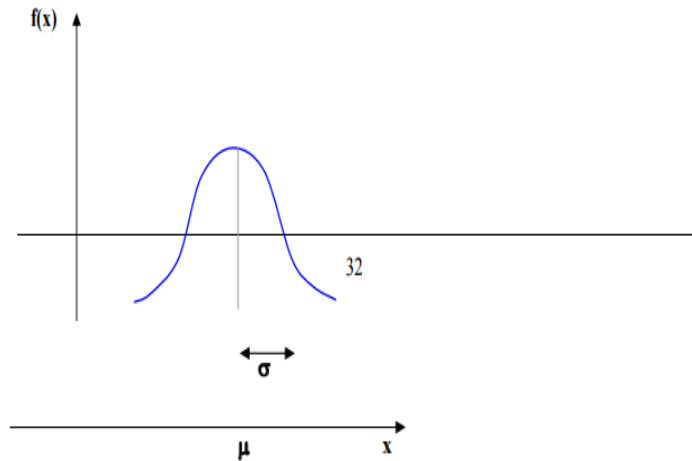


Figure II.4: fonction de distribution gaussienne.

La distribution gaussienne est une *fd* fondamentale pour beaucoup des applications physiques et mathématiques, et aussi joue un rôle central dans l'évaluation des erreurs avec la simulation de Monte Carlo [18].

II.2.3.3. Intégration de Monte Carlo

Plus généralement l'intégration MC est seulement pratique si la fonction en question est continue et s'il est possible de trouver une bonne forme simple. On va essayer de reformuler une intégrale défini arbitrairement dans une forme qui peut être facilement résolue en utilisant MC [27].

Appliquons la méthode de MC au calcul de l'intégrale I d'une fonction f sur [a, b] [8] [24] [27] :

$$f(x) = \begin{cases} 1/(b-a) \\ 0 \text{ pour les autres cas} \end{cases}, a \leq x \leq b \quad (\text{II. 28})$$

Et avec l'insertion dans l'équation (II – 28) pour obtenir l'expression de l'intégrale I

$$I = \frac{1}{b-a} \int_a^b g(x)f(x)dx \quad (\text{II. 29})$$

Notez que $f(x)$ peut être regardé comme *fd* uniforme sur l'intervalle $[a, b]$, comme représenté sur la figure (II.4). Nous observons que l'intégrale du côté droit de l'équation

(II-30) est simplement la valeur d'espérance pour $g(x)$

$$I = \frac{1}{b-a} \int_a^b g(x)f(x)dx = \frac{1}{b-a} \bar{g} \quad (\text{II.30})$$

II.3. Échantillonnage de probabilité des fonctions de distribution

Le but de la méthode de Monte Carlo est de simuler le système physique (ou mathématique) par l'échantillonnage aléatoire de ces fd et en exécutant les calculs nécessaires pour montrer l'évolution de système. Essentiellement, la physique et les mathématiques sont remplacées par l'échantillonnage aléatoire des états possibles du fd qui décrit le système. Nous tournons maintenant notre attention à la façon dont on obtient réellement les échantillons aléatoires des fd arbitraires

On considérera le prélèvement de la fd continue et de la fd discrète. Le tableau (II.1) résume les propriétés importantes des deux types de fd .

Tableau II.1: Les importantes propriétés pour fd continue et discrète.

Propriété	Continuité: $f(x)$	Discrète: $\{p_i\}$
Positivité	$f(x) \geq 0$, tout les x	$p_i > 0$, tout les i
normalisation	$\int_{-\infty}^{\infty} f(x')dx' = 1$	$\sum_{j=1}^N p_j = 1$
interprétation	$f(x)dx =$ $prob(x \leq x' \leq x + dx)$	$p_i = prob(i) =$ $prob(x_j = x_i)$
moyen	$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x)dx$	$\bar{x} = \sum_{j=1}^N x_j p_j$
variance	$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^2 f(x)dx$	$\sigma^2 = \sum_{j=1}^N (x_j - \bar{x})^2 p_j$

II.3.1. l'échantillonnage par l'intermédiaire de l' inversion du fdc

La méthode la plus simple s'applique lorsqu'on connaît une forme explicite de la fonction de répartition inverse F^{-1} . La fdc est uniformément distribuée à l'intervalle $[0,1]$. [22][28] Par conséquent, nous utilisons simplement un générateur à nombre aléatoire (RNG) qui produit des nombres dans u $[0,1]$.

L'algorithme est le suivant [17] [23] :

- Générer un nombre aléatoire u uniforme dans $[0,1]$
- Retourner $x = F^{-1}(u)$

Cette règle simple de l'échantillonnage a été proposée la première fois par Von Neumann dans une lettre à Ulam en 1947 [Los Alamos Science, P. 135, juin 1987]. Ce s'appelle parfois « la règle d'or » pour l'échantillonnage [8].

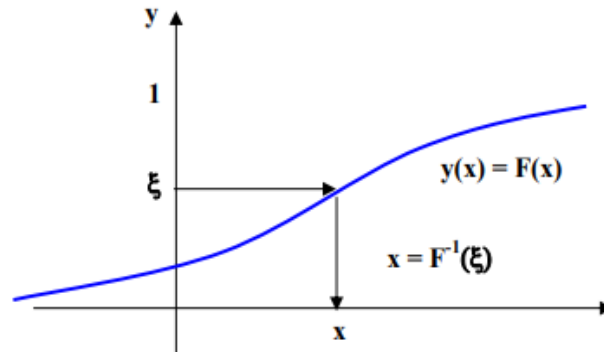
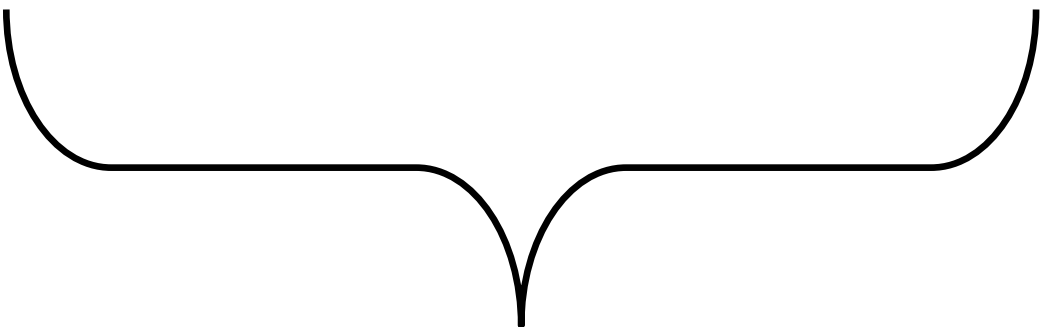


Figure II.5: l'échantillonnage en utilisant l'inverse de la fdc [8].



Chapitre : III

*Transport des ions
énergétiques dans des cibles
amorphes avec la méthode
de Monte Carlo*



Chapitre III : Transport des ions énergétiques dans des cibles amorphes avec la méthode de Monte Carlo

III.1.Introduction

La méthode de Monte Carlo est considérée parmi les méthodes mathématiques les plus importantes et techniquement sophistiquées dans la simulation numérique des phénomènes physiques. Elle est basée sur la théorie des probabilités et l'utilisation de l'échantillonnage aléatoire [29].

Au cours de la deuxième partie du XXème siècle, la méthode Monte-Carlo a connu une utilisation croissante, poussée par la disponibilité grandissante des ordinateurs et des ressources de calcul. De nos jours, les simulations Monte-Carlo trouvent de nombreuses applications (Kroese et al. 2014), par exemple dans les assurances, la finance ou encore la météorologie et tous les domaines des sciences. En particulier, de nombreux codes Monte Carlo destinés spécifiquement au transport des particules, sont disponibles de nos jours [30].

Cette méthode est basée sur la simulation des trajectoires de particules individuelles à travers leurs collisions successives avec les atomes cibles [31] [32] [35].

Les collisions nucléaires et électroniques sont calculées de façon indépendante, et les moyennes statistiques sont faites sur un nombre N de trajectoire (en général $N > 1000$) [33], Chaque ion arrive à la surface de matériau avec une énergie, une position et une direction données. Sa direction change à chaque collision nucléaire, le chemin étant supposé rectiligne de longueur L_d entre les deux chocs élastiques. Les pertes d'énergie subies le long de ce chemin sont alors essentiellement dues aux collisions inélastiques électroniques [34].

Ce parcours virtuel, appelée "histoire" de la particule, se termine lorsque son énergie devient inférieure à une valeur spécifiée au préalable [33] [34], ou lorsque la position de la particule sort de la cible. Celle-ci est considérée comme amorphe, les sites atomiques sont distribués uniformément, et donc les propriétés directionnelles du cristallin sont ignorées. Cette méthode est applicable à une large gamme d'énergies incidentes, environ 1 eV à 10 GeV . Les réactions nucléaires ne sont pas incluses [8] [38].

III.2. Potentiel interatomique

L'interaction d'un projectile avec l'atome cible chargés $Z_{ion}e$ et $Z_{atome}e$ a donné lieu à différentes formulations mathématiques. Une méthode consiste à donner une forme générale au potentiel, son expression comportant des paramètres ajustables. Parmi les potentiels existants répondant à ce critère on distingue le groupe des potentiels écrantés de Coulomb, le plus communément employé, mais également les potentiels répulsifs de type Born-Mayer [8] [54].

III.2.1. Potentiels de Born-Mayer

Ils se présentent sous la forme suivante :

$$v(r) = C_{BM}e^{-r/a_{BM}} \quad (\text{III. 1})$$

Où C_{BM} : une constante d'énergie

a_{BM} : Un rayon d'écrantage

Andersen et Sigmund ont proposé un ensemble « universel » de paramètres tels que :

$$a_{BM} = 0.219\text{Å}, C_{BM} = 52(Z_{ion}Z_{atome})^{3/4}eV$$

Les potentiels de type Born-Mayer ont été si souvent utilisés [8] [54].

III.2.2. Potentiels écrantés de Coulomb

Le potentiel coulombien écranté s'exprime comme le produit du potentiel coulombien et de la fonction de Thomas-Fermi d'écrantage [32] [34] [40].

$$v\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{Z_1Z_2e^2}{r} f\left(\frac{r}{a}\right) \quad (\text{III.2})$$

Avec a le rayon d'écrantage donné par

$$a = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} a_0 (Z_{ion}^x + Z_{atome}^x)^{\frac{-y}{3}} \quad \text{tq : } a_0 = 0.529\text{Å}$$

f est souvent approximée par [32].

$f\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \exp\left(-\beta_i \frac{r}{a}\right)$ Tq : α_i et β_i sont des constantes semi-empiriques

Le potentiel coulombien écranté a été calculé numériquement et il a été tabulé. Des expressions empiriques ont été proposées pour son utilisation (Gombas , Firsov, Lindhard,

Molière), et le modèle ZBL (Ziegler, Biersack et Littmark)) [41].

Dans l'expression du rayon d'écrantage, le produit xy est égal à l'unité dans le modèle de Thomas-Fermi. Firsov a proposé pour x la valeur de $1/2$ et Lindhard lui affecte la valeur $2/3$, ce qui donne

$$a_{TF} = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} a_0 \left(Z_{ion}^{\frac{1}{2}} + Z_{atome}^{\frac{1}{2}} \right)^{-\frac{2}{3}} \quad \text{Dans le cas du modèle de Thomas-Fermi}$$

$$a_L = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} a_0 \left(Z_{ion}^{\frac{2}{3}} + Z_{atome}^{\frac{2}{3}} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad \text{Dans le cas du modèle de Lindhard.}$$

Pour le modèle de ZBL [34]: $xy = 0.69$ avec $x=0$.

$$a_{ZBL} = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} a_0 (Z_{ion}^{0.23} + Z_{atome}^{0.23})^{-\frac{1}{3}}$$

Des expressions plus complexes ont été considérées avec l'apparition de calculateurs numériques à l'aide d'ordinateur tel : Le potentiel de G. Molière 1947 [42] [47] :

$$f\left(\frac{r}{a}\right) = 0.35 \exp\left(-0.3 \frac{r}{a}\right) + 5.5 \exp\left(-1.2 \frac{r}{a}\right) + 0.1 \exp\left(-6 \frac{r}{a}\right) \quad (\text{III. 3})$$

III.3. Diffusion et perte d'énergie nucléaire

La diffusion nucléaire non seulement un processus important de ralentir la particule incidente par le transfert dynamique aux atomes cibles, mais aussi pour détermine la distribution spatiale des trajectoires de particules.

III.3.1. Évaluation analytique de l'angle de diffusion

Figure (III.1) représente la diffusion, à travers un angle θ dans le système de centre de masse (CM), d'une particule incidente de masse M_1 et d'énergie cinétique E par une particule initialement stationnaire de masse M_2 pour un potentiel d'interaction répulsif. Le "triangle de diffusion" est la superposition des orbites de deux particules. Ce triangle est formé des quantités b (paramètre d'impact), r_0 ($r_0 = d$: la distance minimale d'approche), ρ_1 , ρ_2 (rayons de courbure de la trajectoire à l'approche minimale), et généralement des termes de correction, δ_1 et δ_2 . À partir du triangle de diffusion, on trouve que [8] [38] :

$$\cos \frac{\theta}{2} = \frac{\rho + b + \delta}{\rho + r_0} \text{ Avec } \begin{cases} \rho = \rho_1 + \rho_2 \\ \delta = \delta_1 + \delta_2 \end{cases} \quad (\text{III. 4})$$

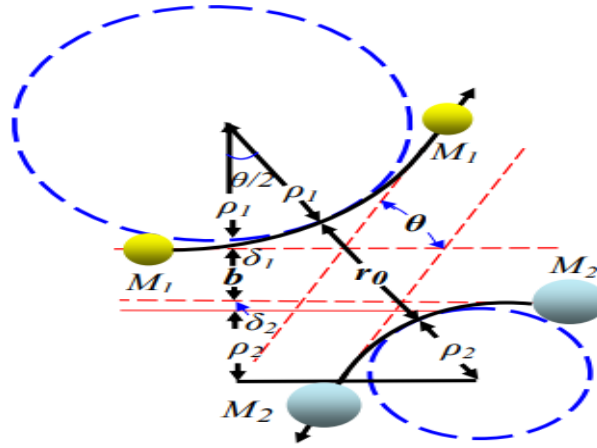


Figure (III.1): Trajectoires des particules dans le système de CM avec le "triangle de diffusion".

Où l'énergie cinétique disponible dans le système de CM elle est donnée par la relation :

La distance minimale d'approche r_0 est obtenue par la relation [32] [45] [47] :

$$E_{cdm} = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_0 \quad (\text{III. 5})$$

$V(r)$ Est le potentiel d'interaction entre l'ion incident et l'atome cible.

r_{min} : La distance minimale d'approche, c'est la solution de l'équation suivante [32] [45] [47] :

$$1 - \frac{V(r_{min})}{E_{cdm}} - \left(\frac{b}{r_{min}} \right)^2 = 0 \quad (\text{III. 6})$$

Nous introduisons l'énergie réduite ε (sans dimension) [32] [33] [45] [46] [47] :

$$\mathcal{E}_e = \frac{aE_{cdm}}{Z_1 Z_2 e^2} = \frac{M_2}{Z_1 Z_2 (M_1 + M_2) e^2} E_0 \quad (\text{III. 7})$$

III.3.2. perte d'énergie nucléaire et transformation angulaire

La perte d'énergie cinétique ou le transfert d'énergie E_n à l'atome cible dans une seule collision est proportionnel à $\sin^2(\theta/2)$ est donné par [8] [36] [37]

$$E_n = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \sin^2(\theta/2) \quad (\text{III. 8})$$

Le formalisme précédant pour la diffusion nucléaire fournit l'angle de diffusion θ dans le système CM . L'angle de diffusion dans le système de laboratoire est donné par la relation suivante [8] [36] [37] :

$$\theta = \arctan\left\{\frac{\sin\theta}{[\cos\theta + (M_1/M_2)]}\right\} \quad (\text{III. 9})$$

L'angle de diffusion azimutale ϕ est choisi au hasard en utilisant la relation [8] [36] [37] :

$$\phi = 2\pi R_n \quad (\text{III. 10})$$

R_n : Un nombre aléatoire uniformément réparti entre 0 et 1.

Dans ces calculs les particules sont suivies de référence à un axe fixe, normal à la cible. L'angle α par rapport à cet axe est déterminé après chaque collision. Le cosinus de cet angle, après la i ème collision est donné par [8] [36] [37] :

$$\cos\alpha_i = \cos\alpha_{i-1}\cos\theta_i + \sin\alpha_{i-1}\cos\theta_i\cos\phi_i \quad (\text{III. 11})$$

III.3.3. Distance entre les collisions et la sélection du paramètre d'impact

- A hautes énergies : $\mathcal{E} \gg 10$ seules quelques interactions dans la cible causent une déflexion importante du parcours droit. Même sur des distances assez grandes L par rapport aux distances interatomiques dans un solide, une déflexion notable $\psi > 1^\circ$ est un événement rare, lié à un paramètre d'impact très petit. Ainsi, le programme sélectionne le plus petit paramètre d'impact qui se produit sur la

longueur du parcours L , et de négliger les autres collisions ayant des grands paramètres d'impact et des angles de déflexion petits. Le paramètre d'impact le plus petit sur la longueur du parcours L est trouvé de la manière suivante : La probabilité $W_1(b)\delta b$ pour trouver l'atome cible a une distance radiale entre b et $b + \delta b$ est [8].

$$W_1(b)\delta b = NL2\pi b\delta b \quad (\text{III. 12})$$

Où N est la densité atomique de la cible. La probabilité de ne pas trouver un autre atome plus proche que la distance b , c'est-à-dire entre 0 et b , est :

$$W_2(b)\delta b = e^{-NL\pi b^2} \quad (\text{III. 13})$$

Par conséquent, la probabilité de trouver le plus proche atome cible entre b et $b + \delta b$, c'est-à-dire de trouver un atome ici (à condition aucun atome n'est plus proche), le produit devient:

$$W(b)\delta b = W_2(b)W_1(b)\delta b = e^{-NL\pi b^2} NL2\pi b\delta b \quad (\text{III. 14})$$

Cette distribution de probabilité conduit à la détermination du paramètre d'impact

$$b = [-\ln(R_n/\pi NL)]^{1/2} \quad (\text{III. 15})$$

À partir des nombres aléatoires R_n qui sont uniformément distribués entre 0 et 1 . Pour les hautes énergies, la longueur L est choisie de telle sorte que la déflexion angulaire moyenne par la longueur de parcours L reste constante.

$$\frac{M_2}{M_1} \frac{\Delta E_n}{E} = \frac{M_2}{M_1} \frac{LS_n(E)}{E} = \text{constant} \quad (\text{III. 16})$$

Selon la règle de Bohr[52] et Williams[53]. En présentant l'expression déterminée analytiquement pour le pouvoir d'arrêt nucléaire S_n (du potentiel de Molière) et en choisissant la constante dans l'équation (III-16) de telle sorte que la déviation moyenne est d'environ 5° par intervalle de parcours L , nous obtenons de l'équation (III-16)

$$L = \frac{0.02[1+(M_1/M_2)]^2 \varepsilon^2 + 0.052\varepsilon^{1.32}}{4\pi\alpha^2 N \ln(1+\varepsilon)} \quad (\text{III. 17})$$

• Pour les faibles énergies, l'équation (III.17) du libre parcours L devient inférieur à $N^{-1/3}$, la séparation atomique moyenne approximative $N^{1/3}$ est utilisée au lieu de L . Dans ce cas, le paramètre d'impact doit être choisi en fonction.

$$W(b)\delta b = \begin{cases} 2\pi N^{2/3} b \delta b & \text{pour } b < \pi^{-1/2} N^{-1/3} \\ 0 & \text{pour } b > \pi^{-1/2} N^{-1/3} \end{cases} \quad (\text{III. 18})$$

Depuis maintenant un seul atome est supposé dans l'élément de volume de longueur $N^{-1/3}$ et de superficie de base $N^{-2/3}$. Cette procédure maintient la densité atomique dans la cible sans corrélérer les positions latérales des atomes cibles successifs (on néglige la structure cristalline). Cette hypothèse, équation (III-18), conduit à la détermination des paramètres d'impact [8] [38].

$$b = \left[\frac{R_n}{\pi N^{2/3}} \right]^{1/2} \quad (\text{III. 19})$$

III.4. Perte d'énergie électronique

Dans la région des hautes énergies, la perte d'énergie électronique inélastique est traitée indépendamment de la perte de l'énergie nucléaire élastique, comme dans tous les précédents modèles et des théories de transport d'ions. Les raisons de négliger la relation entre les pertes d'énergie élastique et inélastique, dans notre cas sont deux ordres. La raison pragmatique est l'efficacité de l'ordinateur, principalement grâce à l'applicabilité du concept de trajectoires de libre parcours prolongé. L'autre, plus importante raison est le manque de descriptions théoriques satisfaisantes des données expérimentales de la dépendance du paramètre d'impact de la perte d'énergie électronique.

Négliger la dépendance du paramètre d'impact et straggling à hautes énergies, la relation entre la perte d'énergie électronique et la distance parcourue L donnée par:

$$\Delta E_e = L N S_e(E) \quad (\text{III. 20})$$

Où $S_e(E)$ est la section transversale d'arrêt électronique Ce qui égale à faibles énergies

$$S_L = K E^p \quad (\text{III. 21})$$

Où k est la vitesse de paramètre d'arrêt indépendant. Nous utilisons principalement la formule de Lindhard, Scharff.

III.5 Le logiciel de calcul numérique SRIM (TRIM)

III.5.1 Introduction

Dans ce paragraphe, nous présentons le code de simulation utilisé dans cette étude. Il est basé sur la méthode de Monte Carlo que nous avons adaptée ici pour étudier la diffusion des particules par une surface solide. C'est une approche statistique qui repose sur la génération de nombres aléatoires.

Il existe aujourd'hui plusieurs logiciels de simulation numérique sont utilisés pour calculer les phénomènes cinétiques associés aux pertes d'énergie des ions. Le plus connu et reconnu d'entre eux est le code SRIM, anciennement dénommé TRIM, qui fut développé à IBM et maintenu pendant cinq décennies.

- **SRIM** (The Stopping and Range of Ion in Matter) : l'arrêt et l'étendue de pénétration des ions dans la matière. Il est basé sur la méthode de Monte Carlo. SRIM c'est un groupe de programmes dédiés aux calculs des pertes d'énergie et du parcours des particules chargées dans la matière. Initialement créé en 1983 par J.F. Ziegler
Et J.P Biersack [48], la dernière version de ce programme date de 2013. Le calcul de Transport dans un matériau se base sur le programme
- **TRIM** (Transport of Ion in Matter) : transport des ions dans la matière [29], Ce logiciel utilisé a été développé par Ziegler et al [41] [49]. TRIM dont la dernière version date de 1998. TRIM accepte une définition de cible selon une géométrie en couches parallélépipédiques successives. Un dictionnaire complet de matériaux composés programmés est disponible.

Dans ces programmes, l'énergie transférée à un atome-cible est analysée pour donner les résultats suivants: l'ionisation induite par les atomes repoussés, le nombre de lacunes et d'interstitiels créés suite à une cascade de collisions, et également le nombre de collisions transférant des énergies inférieures à E_d (énergie de déplacement), et qui produisent des phonons [47], Le code de ces programmes couple deux méthodes: celle de Kinchin-Pease modifiée pour les calculs locaux, et celle de la cascade de collisions (suivi des atomes individuels reculés jusqu'à ce que leur énergie devienne inférieure à

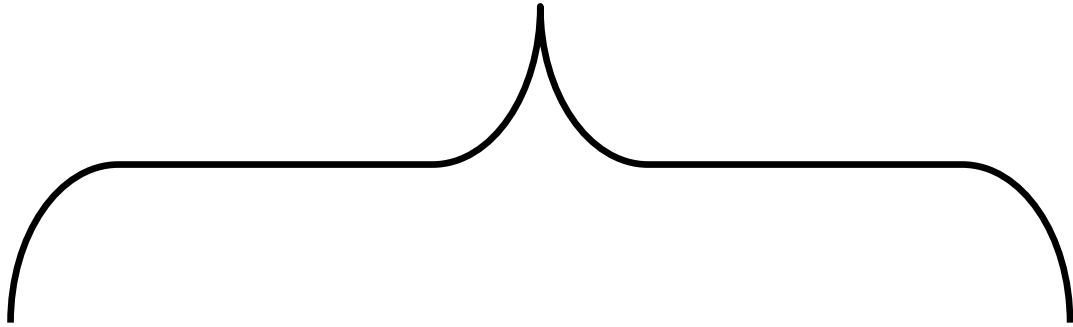
E_d) [47] [50] , Cette dernière donne directement la distribution spatiale des défauts [39] [40]. Ce programme permet de calculer différents paramètres liés au rayonnement d'ions dans une cible, entre autres [31] [51]

- la distribution spatiale des ions implantés (profondeur moyenne, diffusion, distribution latérale)
- les distributions des pertes d'énergies électronique et nucléaire en fonction de la profondeur
- la distribution des lacunes (atomes déplacés) calculée à partir du modèle de Kinchin Pease [39] [40]
- la simulation ne tient pas compte non plus des effets liés à l'élévation de température due à l'irradiation.
- SRIM ne tient pas compte aux réactions nucléaires.
- SRIM n'utilise rien que les matériaux amorphes, et les composés utilisés sont des cristaux. On sait qu'un matériau monocristallin possède une structure anisotrope dans les effets directionnels peut jouer un rôle important lors de rayonnement. Si le faisceau d'ion possède une direction quelconque par rapport aux axes et aux plans cristallographique, l'effet directionnel est nul c.-à-d. le phénomène de canalisation est nul, et tout se passe comme si le matériau implanté était amorphe. Les théories développées dans les amorphes restent alors valables.

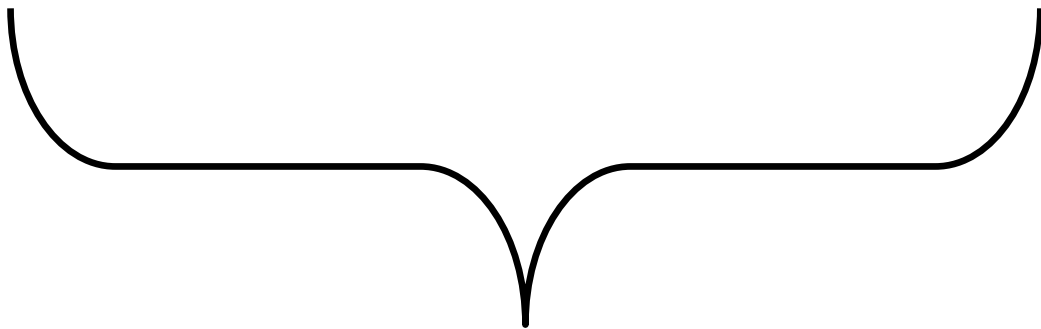
III.5.2 Applications de SRIM et Types de Calculs

Le code SRIM possède une grande diversité d'applications. On s'intéressera essentiellement au calcul estimatif des dégâts causés par les ions chargés H^+ et He^{++} incidents sur des cibles consistant de couches planes de différentes épaisseurs de NaI et SiC dans un domaine d'énergie entre 100 keV et 1 GeV. Pour cela on considèrera :

- Des ions incidents avec des énergies, des angles et;
- Des épaisseurs de la cible suffisantes pour complètement arrêter la particule incidente,
- Le calcul des dégâts cumulatifs occasionnés par les rayonnements incidents jusqu'à leur arrêt.



Chapitre IV :
Résultat, Discussions et Conclusions



Chapitre IV

Résultats, Discussions et Conclusions

IV.1 Présentation de notre travail

Afin d'estimer la résilience des cristaux NaI et SiC aux rayonnements intenses de protons de noyaux d'hélium, nous faisons des simulations MC du transport de ces ions dans ces milieux et nous estimons le nombre moyen des défauts et lacunes créés par ces particules chargées lourdes lors des collisions avec les noyaux des atomes constituant des cristaux. Le cristal semi-conducteur est le carbure de silicium ; le cristal NaI est utilisé comme référence de comparaison puisqu'il est établi depuis très longtemps comme un standard des détecteurs à scintillation parmi les détecteurs de particules connus. Nous faisons varier l'énergie par décades entre 0.1 MeV jusqu'à une énergie de 1000 MeV afin d'obtenir une courbe estimative des dégâts causés par le rayonnement lors de son passage dans le cristal.

Nous avons utilisé les routines du logiciel SRIM 2013 pour effectuer ces calculs. Nous commençons d'abord par calculer le parcours (range) dans le milieu afin de déterminer l'épaisseur du cristal que nous devons utiliser. Cette épaisseur doit être suffisante pour arrêter l'ion incident afin qu'il perde toute son énergie dans le cristal. Un échantillon typique de ce calcul est illustré dans la figure IV.1 dans le cas de α dans le NaI et le SiC; la table des parcours en fonction de l'énergie incidente est jointe en annexe.

Voici quelques points importants relatifs aux calculs et ses limitations :

- Les protons ont des énergies cinétiques de [10KeV à1000MeV].
- Le nombre des protons incidents est suffisant pour obtenir un échantillonnage statistique de l'ordre de 1%, donc nécessitant au moins 10000 ions incidents à essayer.
- L'angle incident égal à 0°.
- Le calcul des lacunes induites dans le cristal se fait suivant le modèle simple de Kinchin-Pease [39]. Ceci permet un calcul rapide qui dure quelques dizaines de minutes. Cependant, un calcul plus précis demande beaucoup de temps et d'heures de calculs et peut durer quelques heures pour un seul ion si le nombre

de canaux ouvert devient trop important et les cascades de recul deviennent plus importante. Nous n'avons pas le temps nécessaire pour cela ce qui nous oblige à utiliser un faire un calcul estimatif.

- Les canaux neutroniques ne sont pas pris en compte dans le présent calcul. Ils sont négligeables en raison de la minceur des couches cristallines utilisées comme cible dans le présent travail.

La figure (IV.1) montre un exemple de simulation des interactions de la particule dans la cible (SiC) par SRIM particule par particule.

IV.1.1 Distribution Typique des ions en profondeur de la cible de SiC

La figure (IV.1) représente la distribution à deux dimensions d'atomes à l'intérieur de la cible, une simulation provoquée par 6000 ions incidents de H^+ (100MeV) calculé par le logiciel SRIM 2013 dans la cible de SiC. Ce profile est donné directement par l'interface du logiciel, il montre la pénétration des ions dans la cible avec une animation complète, ainsi que les cascades de recul et des atomes cibles qui se mélangent. Chaque ion projectile est représenté par sa trajectoire.

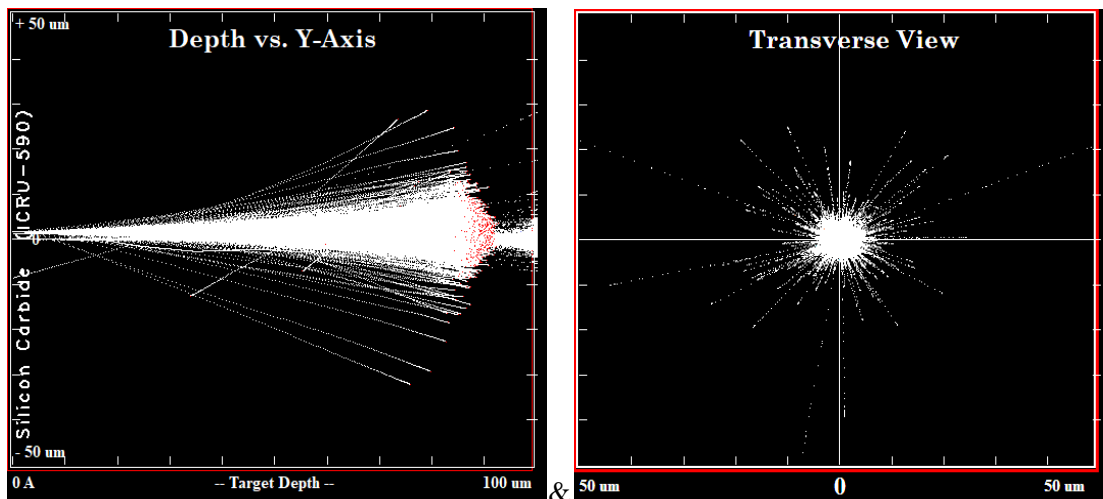


Figure IV.1: Représentation typique de la distribution longitudinale et transversale des trajectoires des ions incidents dans la cible faite avec le logiciel SRIM [rayonnement de proton avec une énergie= 100MeV].

IV.1.2 Distribution Typique des lacunes dans la cible de SiC

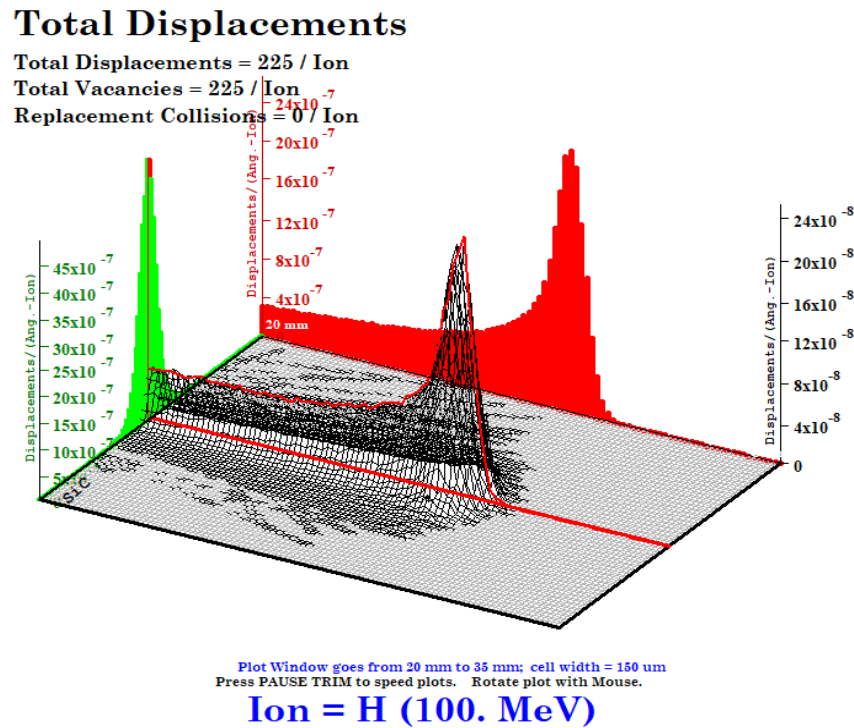


Figure IV.2 : Distribution typique des lacunes causés par déplacement induit par des protons de 100 MeV dans le SiC.

Les paramètres physiques donnés par la même interface sont : type de l'ion, l'énergie d'impact et l'angle d'incidence, on trouve aussi d'autres paramètres comme la densité (3.21g/cm^3) et la perte d'énergie en pourcentage, l'énergie de liaison de surface (4,34 eV), l'énergie de liaison de réseau (3 eV) et l'énergie de déplacement (25 eV). Dans le cas des ions H^+ de 100MeV, la profondeur de pénétration est d'environ $100\ \mu\text{m}$, nous remarquons que le déplacement des atomes est limité. Lorsqu'un ion pénètre dans la matière, il perd son énergie suite aux collisions nucléaires avec les atomes cibles. Si cette énergie est supérieure à l'énergie de liaison de l'atome cible, ce dernier quitte son site pour devenir un projectile (atome de recul) à son tour qui va extraire d'autres atomes, un site vacant est ainsi créé.

Tableau IV.1: Densités des différents composés.

Composés	Densités (g.cm ⁻³)
SiC Carbure de Silicium	3.21
NaI Iodure de sodium	3.667

IV.1.3 Evolution des parcours

Nous avons étudié l'Evolution des parcours de l'Hélium He⁺⁺ dans les composés NaI et SiC en fonction de l'énergie et nous avons fait le graphe à partir de les ANNEXES 1 et 2 :

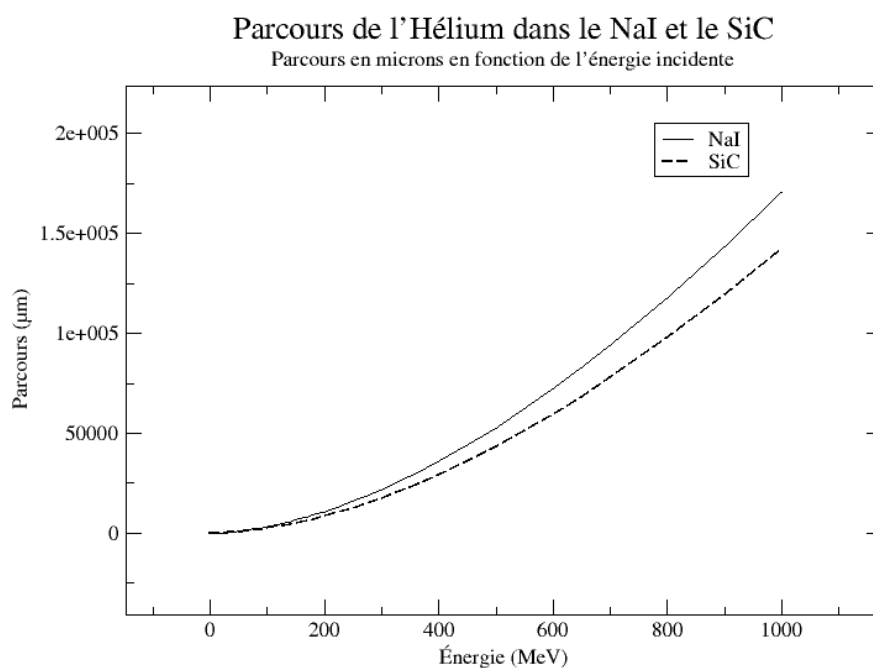


Figure IV.3: Evolution des parcours de l'Hélium dans le NaI et le SiC en fonction de l'énergie.

La figure (IV.3) montre que le parcours augmente rapidement avec l'énergie incidente des protons.

IV.1.4 Définitions de quelques paramètres

Parmi les paramètres que nous avons calculés le Range et la lacune afin de trouver la densité des défauts (densité des lacunes) D . Donc, par définition en aboutit à ce qui suit :

- **Lacune:** Les atomes déplacés de leur position normale dans une structure d'un matériau, peuvent laisser des lacunes (vides) dans le réseau et se mettent en position interstitielle.
- **parcours d'arrêt (Range):** est la distance nécessaire à une particule chargée traversant la matière pour que son énergie devienne approximativement nul à la suite de collisions électroniques et nucléaires jusqu'à son implantation, donc le range est la distance parcourue.

IV.1.5 Les types de calculs utilisés par le code SRIM

SRIM utilise deux types de calcul :

- Calcul détaillé des endommagements avec toutes les cascades (Detailed Calculation with full Damage Cascades) type des endommagements des cascades où les atomes de reculs ayant interagi avec les autres atomes cible, interaction (atome-atome). On a abrégé se titre par deux mots type de cascade (T_c), dans tout se chapitre.
- Distribution des Ions par un calcul rapide des endommagements (Ion Distribution and Quick Calculation of Damage) type d'endommagement où les protons ayant interagi avec les atomes cible, interaction (proton-atome) [type de défaut primaire (T_p).

IV.2 Résultat

Le calcul commence par une énergie, une position et une direction données à la particule incidente (proton) qui interagit avec des cibles composés de type NaI et SiC. Parmi les paramètres que nous avons calculé le Range et la lacune.

L'interaction des protons, de l'énergie environ de un 100 KeV à un GeV, avec la cible peut être traitée selon le modèle à grande vitesse, qui favorise les collisions inélastiques. Dans ce cas, la perte d'énergie totale est assimilable à la perte d'énergie électronique où le proton perd son énergie essentiellement par chocs inélastiques et n'augmente pas le nombre total moyen de déplacements atomiques (de lacune) que d'un petit pourcentage.

IV.2.1 Création des Défauts

Les dégâts créés par les collisions des ions de H^+ et l'ions de He^{++} de 1GeV avec les deux composés SiC et NaI représenté dans les graphes suivant :

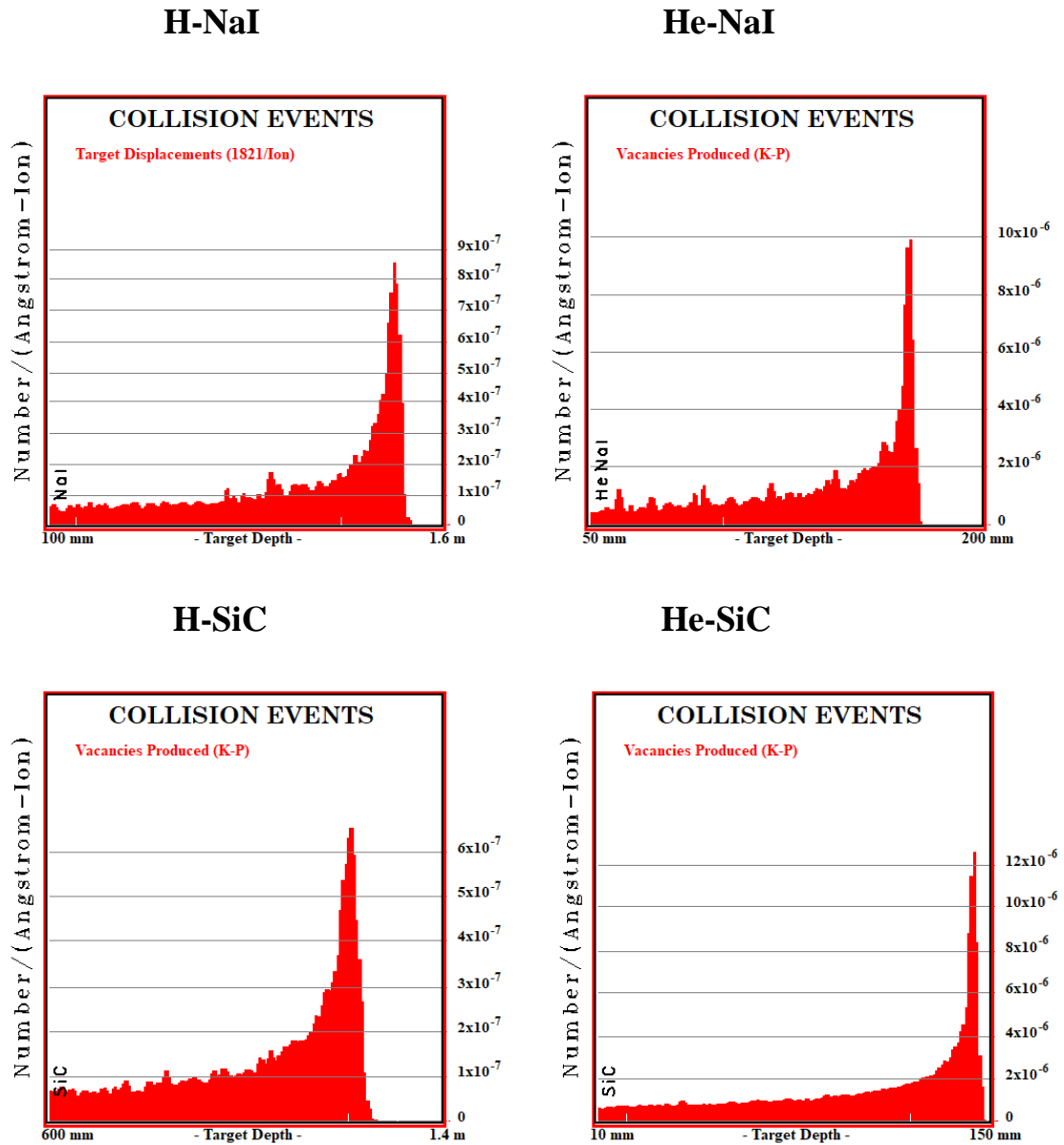


Figure IV.4 : Dégâts créés par les collisions de H^+ et He^{++} de 1GeV avec les deux composés étudié.

Nous avons étudié les lacunes induites par rayonnement protonique dans les deux composés NaI et SiC et nous avons fait les graphes d'après les ANNEXES 3,4, 5 et 6.

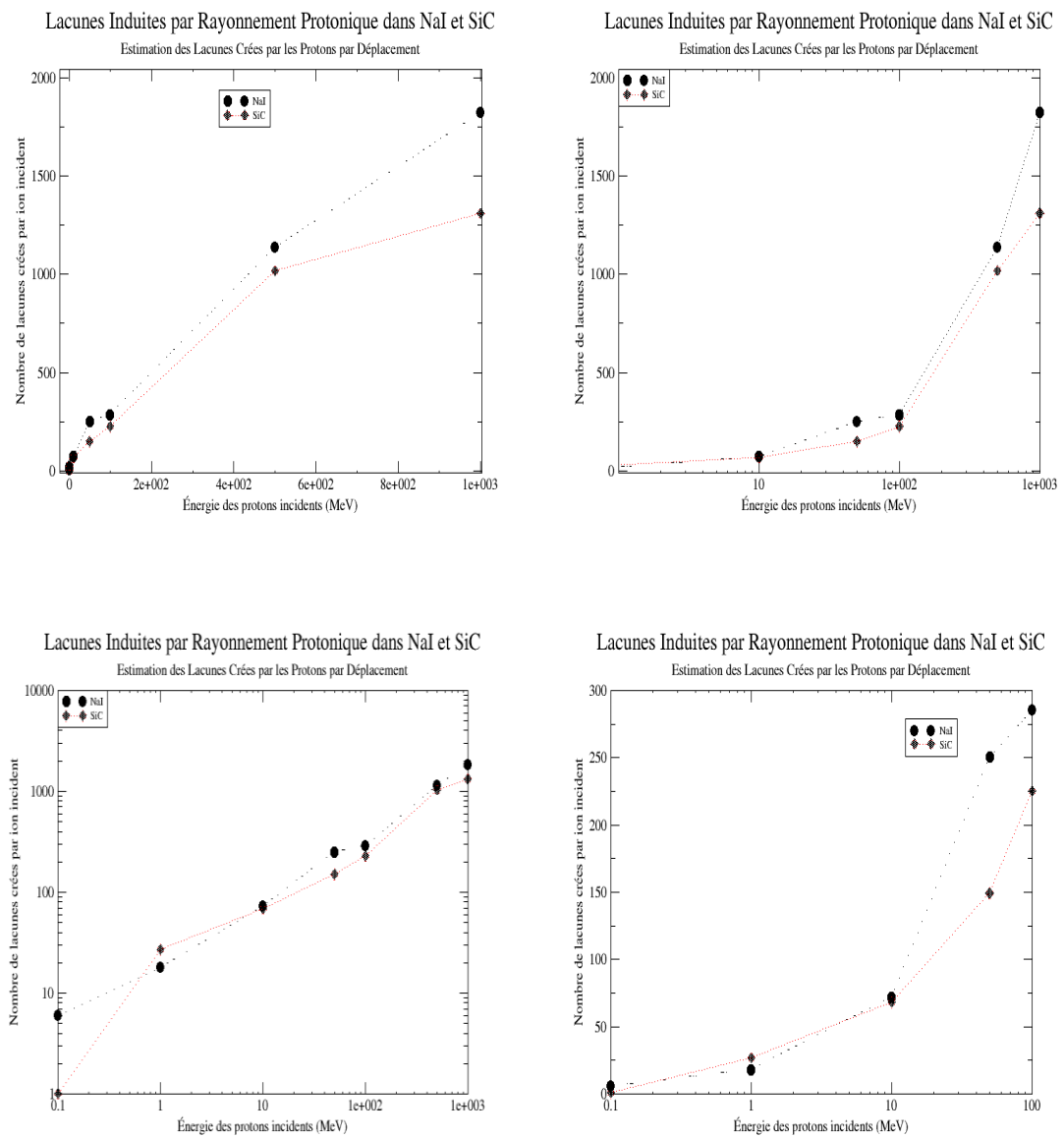


Figure IV.5: Nombre des lacunes induites par rayonnement protonique dans NaI et SiC en fonction d'énergie.

IV .2.2 La différence relative

Nous avons étudié la différence relative entre les deux composés SiC et NaI d’après le tableau suivant :

Tableau IV.2: Montre les lacunes créées par proton dans NaI et SiC.

Energie (MeV)	NaI dép/ion	SiC dép/ion	différence relative
0.1	6.	1.	83.3
1.	18.	27.	-33.3
10.	72.	68.	5.9
50.	250.	149.	67.8
100.	285.	225.	26.7

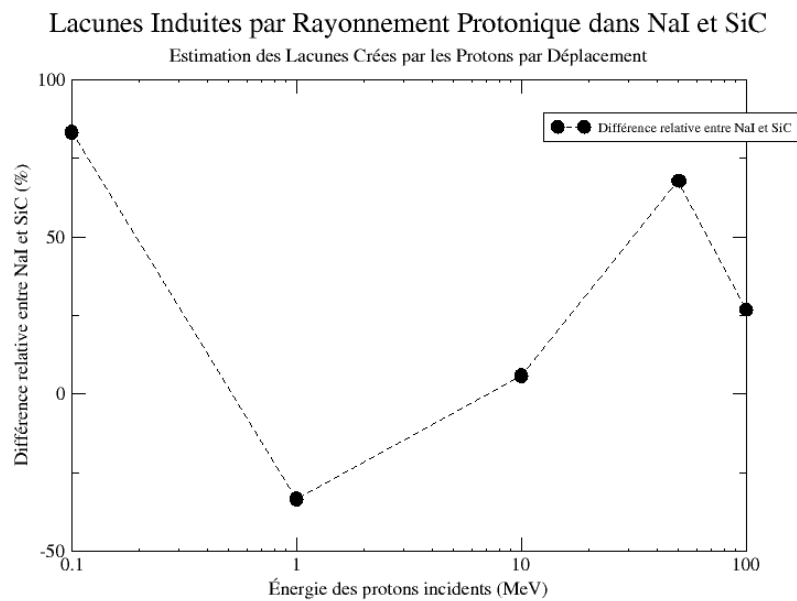


Figure IV.6 : Différence du le nombre de lacune induites par les protons dans NaI et SiC.

Comparaison de la Différence Relative entre les Protons et les Alphas

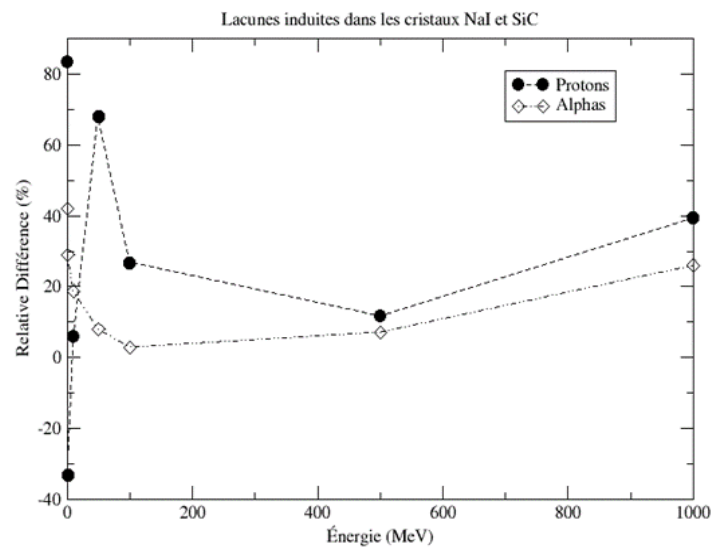


Figure IV.7 : Comparaison de la Différence relative entre les Protons H^+ et les Alphas He^{++} .

La comparaison des lacunes entre les deux composés SiC et NaI dans les deux cas du bombardement par les protons H^+ et par les alphas He^{++} est présentée dans la figure suivante :

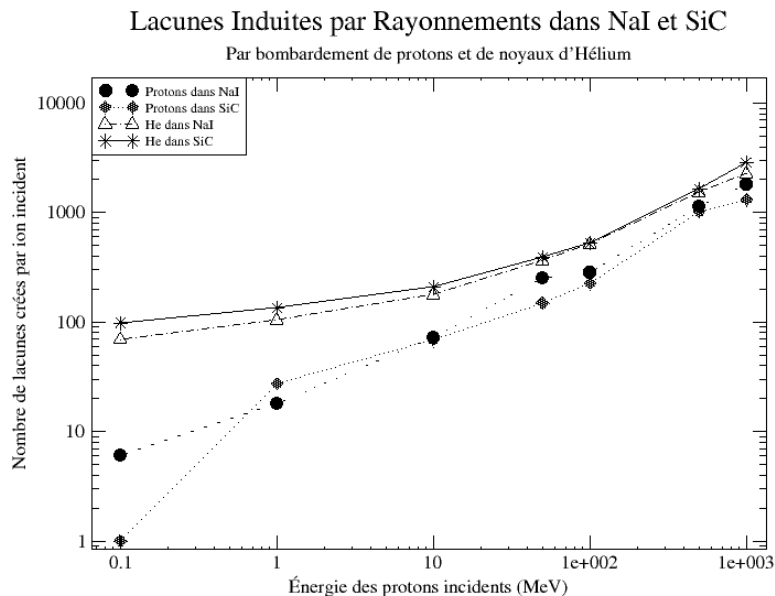


Figure IV.: Evolution des lacunes induites par rayonnements des protons et des noyaux d'Hélium en fonction de l'énergie.

Nous avons effectué des intégrales de volumes sur les fonctions d'endommagement ainsi obtenues, afin de déterminer la résilience de chaque cristal pour chaque type de rayonnement pour pouvoir effectuer une comparaison globale sur tout le domaine d'énergie. Les résultats obtenus sont résumés dans le tableau IV.2 suivant.

Tableau IV.3 : Tableau comparatif des effets globaux (lacunes par déplacement) des rayonnements sur les deux cristaux NaI et SiC cumulés entre 0,1 MeV et 1000 MeV.

	Intégrale de volume (lacunes/MeV/ion)	Différence relative (%)
<i>protons sur NaI</i>	$1,042 \times 10^6$	19,2
<i>protons sur SiC</i>	$0,842 \times 10^6$	
<i>α sur NaI</i>	$1,385 \times 10^6$	14,6
<i>α sur SiC</i>	$1,587 \times 10^6$	

Le tableau récapitulatif IV.2 indique clairement une supériorité du SiC sur le NaI dans le cas des protons par une marge de 19,2%, alors que pour les noyaux d'hélium, le NaI est globalement supérieur au SiC par un facteur de 14,6%.

IV.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons introduit le logiciel SRIM 2013 Dans ce présent travail, nous avons simulé quelques dégâts créés lors de l'interaction d'un ion H^+ et des Alphas pour gamme d'énergie de 100KeV à 1GeV dans les deux cibles SiC et NaI, tel que le déplacement d'atomes et les sites vacants créés.

L'analyse et le dépouillement des résultats des calculs indique une résilience du SiC supérieure au NaI par un facteur de 19,2% pour un bombardement protonique, alors que le NaI est plus résistant que le SiC pour un flux de noyaux d'hélium par un facteur de 14,6 %. Étant donné que la charge électrique des Alphas est le double de celle des protons, les sections efficaces de production de particules Alpha dans les cristaux devrait être beaucoup moindres que celle des protons induits par réactions nucléaire dans le cristal sur les atomes Na, I, C, et Si, en raison de la barrière coulombienne beaucoup plus élevée pour les Alphas. Il est raisonnable donc de conclure que le SiC

est plus résilient et résistant que le NaI en raison de cet effet de suppression de la production d'Alphas par la barrière coulombienne. Cela pourrait être confirmé par des calculs Monte Carlo qui incluraient ces canaux de réactions, tq. $(p, p), (p, \alpha), (\alpha, p), (\alpha, n)$ Sur les noyaux Na, I, Si, C dans l'estimation du nombre de lacunes induites.

Conclusion générale

L'étude des effets induits par un rayonnement intense de protons et de particules α dans les cristaux semi-conducteurs est d'un grand intérêt pour des domaines aussi variés que l'informatique, les sciences nucléaires et de l'espace, ainsi que le traitement du cancer. En effet, toute activité humaine dans des environnements soumis à des rayonnements ionisants intenses utilise des systèmes électroniques basés sur des composants à base de semi-conducteurs. On citera pour l'exemple, les réacteurs nucléaires et laboratoires de recherche équipés d'accélérateurs de particules, le rayonnement cosmique pour les satellites et leurs ordinateurs de bord, ainsi que les rayonnements particuliers générés par les machines utilisées en oncologie pour traiter les tumeurs cancéreuses. Ces systèmes demandent des matériaux plus résistants à ce type de rayonnement afin d'en assurer fiabilité et durabilité.

Le travail présenté dans le cadre de ce mémoire porte sur l'étude de l'interaction d'un faisceau énergétique d'ions H^+ et He^{++} avec les cristaux cibles SiC et NaI pouvant servir de détecteur de particules.

Nous nous sommes intéressés aux particules chargées qui ont la caractéristique de perdre toutes leurs énergies sur des distances très petites comparées aux particules neutres telles que le neutron pour lesquels une grande épaisseur de matériau est nécessaire pour les arrêter pour une énergie équivalente ou pour qu'ils aient une chance significative d'interaction. Ces particules neutres interagissent avec le cristal par le biais de réactions nucléaires dont les sections efficaces sont beaucoup plus petites que la section efficace coulombienne. Ce sont les noyaux de reculs induits par ces particules, qui sont aussi des particules chargées, qui créeront des défauts par déplacement des atomes du réseau cristallin lors de la collision du faisceau incident avec le cristal. Les principaux effets pour ces composés dont l'épaisseur est négligeable devant le libre parcours moyen des neutrons dans ces milieux. On néglige donc les effets induits par les neutrons dans les cas présents.

Les ions incidents sont ralentis par les électrons atomique du milieu de façon continue, mais subissent de temps en temps et de façon aléatoire et *ponctuelle* des collisions avec les noyaux du cristal, et les déplacent de leurs sites dès que l'énergie communiquée au

noyau est supérieure à l'énergie de déplacement du cristal pour ce type d'atomes, causant ainsi création de lacunes. Le noyau de recul à son tour peut causer une cascade de défaut par le même procédé de collision.

Les calculs entrepris ne prennent pas en compte l'effet des neutrons supposés négligeables, et négligent ainsi les *réactions nucléaires* de types (p, n) , (p, z) où z est une particule chargée. On ne prend en compte donc que les processus *primaires*, c'est-à-dire directement induits par la particule incidente.

Les résultats de nos calculs montrent que dans le cas des protons le SiC est globalement 19,2 % plus résistant que le NaI. La situation est renversée pour le cas des noyaux d'hélium pour lesquels le NaI est 14,6% plus résistant que le SiC. Ces estimations sont obtenues par comparaison sur le domaine entier d'énergie entre 0,1 MeV jusqu'à 1000 MeV.

Nous souhaitons que ce travail de simulation, puisse être étendu à l'avenir pour inclure les réactions nucléaires dans un calcul plus détaillé et précis.

Les références

[1] : F.Perry, Diagnostic d'un plasma de pulvérisation cathodique magnétr on: contribution à l'étude des possibilités de contrôle d'un procédé de dépôt d'alumine en condition sré-activés, Thèse de doctorat, Nancy1, 1996.

[2] : Mme SAIM Asma, Détection et détecteurs de rayonnements. Maitre de conférences classe B. Département de Génie Physique.

[3] :J.P. Cussonneau, Enseignant Chercheur, Interaction Rayonnement Matière. Subatech, Ecole des Mines de Nantes.pdf.

[4] : Diffusion coulombienne (suite), OS, 13 avril 2006.

[5] :Gilles Cohen-Tannoudji, Particules élémentaires et interactions fondamentales. Laboratoire de recherche sur les sciences de la matière (LARSIM) CEA-Saclay. 04/01/2013. www.gicotan.fr.pdf.

[6] : Belbachir Ahmed Hafid, interaction rayonnement– matière. Université des Sciences et de la Technologie d'Oran. Faculté de physique. Septembre 2010.

[7] : Dahi el haj, Meherchi lamia(2011), Système de double calcul dosimétrique, mémoire de master, Université de Aboubekr Belkaid, Tlemcen.

[8] :Mr. Ammari Hocine, Calculs des effets induits par les rayonnements de protons Dans les cristaux semi-conducteurs de type AIII BV. Faculté des Sciences et de l'Ingénierie Département des Sciences Exactes Université 08 mai 1945.2008

[9] : ERVIN. B.PODGORSK, "Radiation Physics for Medical Physicists". Edition: Springer, 2éme édition (2010), ISBN 978-3-642-00874-0.

[10] :Pr. Laurent Dusseau, Interaction Rayonnement Matière.equipe « électronique et rayonnement ».Institut d'Electronique du Sud (IES).2009.

[11] :G. SATTONNAY, Impact des rayonnements ionisants sur les matériaux. Université Paris Sud CSNSM-IN2P3, CNRS Orsay, France.2017.

[12] :Pr. Eva PEBAY-PEYROULA, interaction matiere-rayonnement.université Joseph Fourier de Grenoble.2010/2011.

- [13] : Catherine Sabathier. Thèse de doctorat. Effets de l'irradiation dans une Pérovskite : utilisation de cette matrice pour un conditionnement des actinides. Université Paris Orsay (2003).
- [14] : Kalbitzer S., Oetzman H., Grahmann H., Feuerstein A., Z. Phys., A 278, (1976), 3,223, A simple universal fit formula to experimental nuclear stopping power data.
- [15] : Bontempi, G. Modélisation et simulation. Tech. Rep. Département d'Informatique, 2008.
- [16] : Baranger, C., and Mathiaud, J. Méthode de Monte-Carlo, 2012/2013.
- [17] : Melle DERRADJI NAWEL, MelleKHALFI LINDA. Les méthodes Monte Carlo, Quasi Monte Carlo et leurs applications, Béjaia 2013.
- [18]: The Computational Science Education Project, Introduction to Monte Carlo Methods <http://www.utdallas.edu/~cantrell/ee6481/MC.pdf>.
- [19] : Sylvain Rubenthaler, Méthodes de Monte-Carlo (Cours et exercices) M1 IM, 2018-2019.
- [20] : Tabea Rebafka, Statistique computationnelle, Sorbonne Université, 2018.
- [21] : S.MERABET, Simulation à l'aide d'un modèle dit de "Monté Carlo" des profils de bore implantés requis pour la réalisation des jonctions courtes utilisées dans les processus de haute densité d'intégration (PHDI), Université Mentouri de Constantine, 29/06/2009.
- [22] : M. L. Gallardo, Probabilités, Université de Tours, année 2009-2010.
- [23] : Nicolas Martin, Méthode Monte Carlo pour la physique des réacteurs, école polytechnique Montréal.
- [24] : Julien STOEHR, Méthodes de Monte Carlo, UNIVERSITÉ PARIS DAUPHINE, Département MIDO Master 1 2019–2020.
- [25] : Jean Bérard, Introduction aux probabilités et à la statistique.

[26] : Marc Hayoun, LA MÉTHODE DE MONTE CARLO METROPOLIS, Laboratoire des Solides Irradiés, École “Simulation Numérique en Matière Condensée” Jussieu, Paris, 29 au 31 mai 2002.

[27] : Mr Richi Wissem, Calcul des corrections d’absorption des Neutrons par La Méthode de Monte Carlo sur des Echantillons de Poudres Cristallines, Mémoire Présenté en vue de l’obtention du diplôme de MAGISTER, 2012, Université 8 mai 1945.

[28] : B . Ycart, Méthodes de Monte-Carlo, UFR mathématique et informatique, Université René Descartes, Paris.

[29]:J. Kelvin, Ninetieth century clouds over the dynamical theory of heat and light, Phil-Mag. 2 (1901) 1.

[30] :Julien Bordes. Modélisation du transport des électrons de basse énergie avec des modèles physiques alternatifs dans Geant4-DNA et application à la radioimmunothérapie. Imagerie médicale. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2017. Français. NNT: 2017TOU30332 . tel-01998577.

[31] :Mr.Lachgueur Abdellah,Etude des couches minces de ZnO dopées. Simulation des dopages par TRIM (Transportof Ions in Matter), Faculté Des Sciences - Département De Physique,UNIVERSITE ABOU BEKR BELKAID & TLEMCEN,Année Universitaire 2014/2015.

[32] :NEFFAI Mohammed,simulation de la diffusion d’ions He (4kev) PAR UNE SURFACE DE SILICIUM.Science nucléaire et interaction rayonnement matière. Université des sciences et des technologies « HOUARI BOUMADIENE ».

[33] :FERDI Assia,Concentration atomique des impuretés implantées dans le GaAs par la méthode de Monté Carlo,Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie ,Département des Sciences de la Matière,Université de Tébessa,17/06/2012.

[34] :M. Rouha « Etude de l’effet de l’implantation ionique dans le CuInSe₂ et autres ternaires», thèse de doctorat, université Ferhat Abbas – Sétif 1, Algérie, 2014.

- [35] :F.Z. Satour « Application de la spectroscopie de photoacoustique dans l'analyse des propriétés optiques des effets d'implantation de Ne⁺ et de Xe⁺ dans CuInSe₂ », thèse de doctorat, université Ferhat Abbas – Sétif, Algérie, 2012.
- [36] :Alex F Bielajew. Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport. The University of Michigan, Department of Nuclear Engineering and radiological Sciences page 112. (2001).
- [37] :Mr Richi Wissem, Mémoire Présenté en vue de l'obtention du diplôme de MAGISTER, Calcul des corrections d'absorption des Neutrons par La Méthode de Monte Carlo sur des Echantillons de Poudres Cristallines, Faculté des Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de la Matière Département des sciences de la matière Université 8 mai 1945, 2012.
- [38] :J. P. Biersack et L. G. Haggmark A Monte Carlo program for the transport of energetic ions in amorphous targets, Nuclear Instruments and Methods 174 (1980).
- [39] :J. Lindard, M. Scharff, H.E. Schiff and K. Dan, Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 33 (1963) 1-39.
- [40] :ABDI Naima, Modélisation des propriétés électriques du GaAs dopé par implantation ionique, Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie, 18/06/2012.
- [41] :F. Zeigler, J.P. Biersack, U. Littman, 1985, "The Stopping and Range of Ions in Solids", Pergamon Press, New York, version 2013.
- [42] :L. H. Thomas, The calculation of atomic fields, proc. Cambridge philos., vol. 23, pp 242-548, 1927.
- [43] :J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark, The stopping and range of ions in solids, Pergamon Press, New York, 1985.
- [44] :A. I. Melker, Potentials of inter-atomic interaction in molecular dynamic, Rev. Adv. Mater. Sci., vol. 20, pp. 1-13, 2009.
- [45] :J.W. Rabalais, Low Energy Ion-Surface Interactions, USA (Wiley series Chemistry and Physics) 1994.

- [46] :Bettou Nadia, Application de la méthode de Monte Carlo à l'étude de l'interaction rayonnement-matière codes TRIM et Casino, Université de KHEMIS MILIANA, 2015/2016.
- [47] :S.MERABET, Simulation à l'aide d'un modèle dit de "Monté Carlo" des profils de bore implantés requis pour la réalisation des jonctions courtes utilisées dans les processus de haute densité d'intégration (PHDI), Université Mentouri de Constantine, 29/06/2009.
- [48]:F.Z. Satour and A. Zegadi, Proc. 25th Europ. Photovolt. Solar Energy Conf., 5th World Conf. Photovolt. Energy Conv., Valencia (Spain), 6 – 9 Sept. (2010), pp. 3418 – 3421.
- [49]:J.F.Ziegler, J.P.Biersack, and U.Littmark, "The Stopping and Range of Ions in Solids", volume I and II, 1980.
- [50] :L. Baouni « étude des défauts d'irradiation induits par implantation ionique de Sb dans Si », mémoire de master, université Mentouri Constantine, Algérie, 2009.
- [51] :H. Faik-Etienne, « étude de l'implantation ionique dans les miroirs multicouches mo/si : application aux optiques diffractives.» thèse de doctorat, université Toulouse, France, 2005.
- [52] :N. Bohr, Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Mat.-Fys. Medd. 18, no.8 (1948).
- [53] :E. J. Williams, Proc. Roy. Soc.(London) 169 (1939); Phys. Rev. 58 (1940) 292.
- [54] :René Vascon Cascades de déplacement atomiques dans le Fer- α simulation par dynamique moléculaire (1997).

ANNEXE

ANNEXE 1 : la variation du parcours d'ion He⁺⁺ dans le composé NaI en fonction de l'énergie

Energie (MeV)	Range (µm)
0,01	0,0924
0,011	0,101
0,012	0,1096
0,013	0,1182
0,014	0,1267
0,015	0,1351
0,016	0,1435
0,017	0,1519
0,018	0,1602
0,02	0,1766
0,0225	0,1968
0,025	0,2168
0,0275	0,2364
0,03	0,2557
0,0325	0,2747
0,035	0,2934
0,0375	0,3118
0,04	0,3299
0,045	0,3654
0,05	0,4
0,055	0,4336
0,06	0,4664
0,065	0,4983
0,07	0,5295
0,08	0,5899
0,09	0,6478
0,1	0,7035
0,11	0,7572
0,12	0,8092
0,13	0,8596
0,14	0,9086
0,15	0,9562
0,16	1,00
0,17	1,05
0,18	1,09
0,2	1,18
0,225	1,28
0,25	1,38
0,275	1,48

ANNEXE

0,3	1.57
0,325	1.66
0,35	1.75
0,375	1.84
0,4	1.93
0,45	2.10
0,5	2.27
0,55	2.44
0,6	2.61
0,65	2.78
0,7	2.95
0,8	3.29
0,9	3.65
1	4.01
1,1	4.39
1,2	4.77
1,3	5.17
1,4	5.58
1,5	5.99
1,6	6.42
1,7	6.86
1,8	7.30
2	8.22
2,25	9.42
2,5	10.67
2,75	11.98
3	13.34
3,25	14.75
3,5	16.22
3,75	17.74
4	19.31
4,5	22.62
5	26.13
5,5	29.86
6	33.79
6,5	37.93
7	42.27
8	51.55
9	61.61
10	72.44
11	84.02
12	96.29
13	109.22
14	122.80

ANNEXE

15	137.03
16	151.89
17	167.37
18	183.46
20	217.44
22,5	263.23
25	312.62
27,5	365.52
30	421.86
32,5	481.58
35	544.62
37,5	610.93
40	680.45
45	828.88
50	989.72
55	1160
60	1350
65	1540
70	1750
80	2200
90	2690
100	3230
110	3810
120	4430
130	5080
140	5780
150	6520
160	7290
170	8100
180	8950
200	10750
225	13200
250	15860
275	18720
300	21780
325	25030
350	28480
375	32100
400	35900
450	44000
500	52760
550	62140
600	72110
650	82650

ANNEXE

700	93740
800	117410
900	142990
1000	170320

ANNEXE 2: la variation du parcours de l'Hélium He⁺⁺ dans le SiC en fonction de l'énergie

Energie (MeV)	Range (µm)
0,01	0,4347
0,011	0,4638
0,012	0,4919
0,013	0,519
0,014	0,5453
0,015	0,5709
0,016	0,5958
0,017	0,6202
0,018	0,6441
0,02	0,6905
0,0225	0,7465
0,025	0,8006
0,0275	0,8534
0,03	0,9051
0,0325	0,9559
0,035	1.01
0,0375	1.06
0,04	1.10
0,045	1.20
0,05	1.30
0,055	1.40
0,06	1.49
0,065	1.59
0,07	1.69
0,08	1.89
0,09	2.09
0,1	2.30
0,11	2.52
0,12	2.74
0,13	2.97
0,14	3.20

ANNEXE

0,15	3.44
0,16	3.68
0,17	3.94
0,18	4.20
0,2	4.73
0,225	5.44
0,25	6.20
0,275	6.99
0,3	7.82
0,325	8.69
0,35	9.61
0,375	10.56
0,4	11.55
0,45	13.65
0,5	15.90
0,55	18.29
0,6	20.84
0,65	23.52
0,7	26.35
0,8	32.42
0,9	39.03
1	46.18
1,1	53.89
1,2	62.13
1,3	70.89
1,4	80.15
1,5	89.92
1,6	100.18
1,7	110.94
1,8	122.17
2	146.07
2,25	178.58
2,5	213.97
2,75	252.19
3	293.18
3,25	336.91
3,5	383.34
3,75	432.42
4	484.14
4,5	595.24
5	716.53
5,5	847.81

ANNEXE

6	988.91
6,5	6500
7	7000
8	8000
9	9000
10	10000
11	11000
12	12000
13	13000
14	14000
15	15000
16	16000
17	17000
18	18000
20	20000
22,5	22500
25	25000
27,5	27500
30	30000
32,5	32500
35	35000
37,5	37500
40	40000
45	45000
50	50000
55	55000
60	60000
65	65000
70	70000
80	80000
90	90000
100	100000

ANNEXE 3 : la variation des nombres des lacunes induites par les protons H⁺ dans le composé NaI en fonction de la profondeur de cible.

profondeur cible (Å)	H Knock-ions	Na Vacancies	I Vacancies
115000. E+04	1124.44E-11	2007.78E-11	3083.11E-11
130000. E+04	1139.11E-11	2492.67E-11	3780.00E-11
145000. E+04	1128.89E-11	1737.56E-11	2806.89E-11
160000. E+04	1147.56E-11	1550.67E-11	2580.67E-11

ANNEXE

175000. E+04	1164.22E-11	1479.11E-11	2548.67E-11
190000. E+04	1172.89E-11	2372.00E-11	3572.22E-11
205000. E+04	1171.11E-11	1701.78E-11	2816.22E-11
220000. E+04	1207.33E-11	2491.78E-11	3845.78E-11
235000. E+04	1188.00E-11	1543.78E-11	2655.78E-11
250000. E+04	1229.56E-11	2234.67E-11	3497.56E-11
265000. E+04	1230.00E-11	3400.00E-11	4810.44E-11
280000. E+04	1210.67E-11	2051.33E-11	3258.67E-11
295000. E+04	1237.78E-11	2654.00E-11	4033.11E-11
310000. E+04	1266.67E-11	2293.78E-11	3611.11E-11
325000. E+04	1260.89E-11	2801.33E-11	4160.89E-11
340000. E+04	1300.89E-11	1890.00E-11	3152.89E-11
355000. E+04	1294.22E-11	1838.89E-11	3146.44E-11
370000. E+04	1305.33E-11	2158.00E-11	3425.33E-11
385000. E+04	1340.89E-11	2338.89E-11	3658.89E-11
400000. E+04	1334.22E-11	2413.56E-11	3848.00E-11
415000. E+04	1362.44E-11	2259.78E-11	3644.44E-11
430000. E+04	1365.33E-11	2805.78E-11	4203.33E-11
445000. E+04	1377.11E-11	2844.22E-11	4246.67E-11
460000. E+04	1392.44E-11	1851.33E-11	3208.22E-11
475000. E+04	1382.44E-11	2387.78E-11	3783.56E-11
490000. E+04	1420.44E-11	2559.33E-11	4149.56E-11
505000. E+04	1479.56E-11	2313.56E-11	3826.00E-11
520000. E+04	1452.00E-11	2038.00E-11	3451.56E-11
535000. E+04	1479.11E-11	3019.78E-11	4661.78E-11
550000. E+04	1492.89E-11	2761.33E-11	4286.89E-11
565000. E+04	1472.67E-11	2056.22E-11	3494.89E-11
580000. E+04	1551.78E-11	2325.78E-11	3838.22E-11
595000. E+04	1557.78E-11	2364.22E-11	3844.22E-11
610000. E+04	1587.56E-11	2666.89E-11	4265.11E-11
625000. E+04	1613.78E-11	2498.00E-11	4104.67E-11
640000. E+04	1607.11E-11	2193.33E-11	3778.89E-11
655000. E+04	1632.44E-11	2497.78E-11	4100.22E-11
670000. E+04	1659.56E-11	2738.22E-11	4326.44E-11
685000. E+04	1679.56E-11	2603.78E-11	4326.22E-11
700000. E+04	1725.56E-11	2286.22E-11	3934.00E-11
715000. E+04	1714.22E-11	2501.33E-11	4128.44E-11
730000. E+04	1729.33E-11	2441.11E-11	4124.44E-11
745000. E+04	1795.33E-11	2507.33E-11	4245.33E-11
760000. E+04	1799.33E-11	2827.78E-11	4457.56E-11
775000. E+04	1851.11E-11	5912.44E-11	8342.22E-11
790000. E+04	1871.33E-11	3206.22E-11	5105.11E-11
805000. E+04	1881.78E-11	3854.00E-11	5732.22E-11
820000. E+04	1952.00E-11	2480.44E-11	4373.78E-11

ANNEXE

835000. E+04	1959.33E-11	4306.44E-11	6388.67E-11
850000. E+04	1996.22E-11	3270.00E-11	5289.78E-11
865000. E+04	2005.33E-11	3061.33E-11	5168.00E-11
880000. E+04	2077.33E-11	2864.89E-11	4950.89E-11
895000. E+04	2091.78E-11	4311.56E-11	6492.67E-11
910000. E+04	2136.67E-11	3132.89E-11	5138.00E-11
925000. E+04	2215.78E-11	4805.33E-11	7216.67E-11
940000. E+04	2257.56E-11	6785.78E-11	9683.11E-11
955000. E+04	2233.33E-11	4883.56E-11	7290.67E-11
970000. E+04	2324.44E-11	5014.67E-11	7517.78E-11
985000. E+04	2354.22E-11	3554.00E-11	5961.11E-11
100000. E+05	2450.67E-11	3372.00E-11	5661.11E-11
101500. E+05	2529.33E-11	4595.11E-11	7190.89E-11
103000. E+05	2542.67E-11	4875.78E-11	7737.56E-11
104500. E+05	2615.56E-11	4506.00E-11	7145.78E-11
106000. E+05	2693.78E-11	4951.78E-11	7736.89E-11
107500. E+05	2791.11E-11	4932.22E-11	7725.78E-11
109000. E+05	2842.00E-11	3973.33E-11	6651.56E-11
110500. E+05	2915.78E-11	3975.11E-11	6688.00E-11
112000. E+05	3041.11E-11	5208.67E-11	8288.89E-11
113500. E+05	3121.33E-11	4549.56E-11	7580.67E-11
115000. E+05	3234.67E-11	4412.22E-11	7475.11E-11
116500. E+05	3338.00E-11	5231.33E-11	8571.78E-11
118000. E+05	3496.00E-11	5312.89E-11	8663.11E-11
119500. E+05	3624.00E-11	6923.78E-11	1063.58E-10
121000. E+05	3774.22E-11	5580.22E-11	9256.22E-11
122500. E+05	4061.11E-11	5794.22E-11	9775.56E-11
124000. E+05	4256.00E-11	7370.22E-11	1168.76E-10
125500. E+05	4472.44E-11	9702.67E-11	1459.49E-10
127000. E+05	4735.33E-11	7503.11E-11	1206.62E-10
128500. E+05	5041.78E-11	9286.00E-11	1440.78E-10
130000. E+05	5456.22E-11	8846.00E-11	1430.67E-10
131500. E+05	5992.22E-11	1187.80E-10	1818.91E-10
133000. E+05	6628.44E-11	1256.33E-10	1944.31E-10
134500. E+05	7502.00E-11	1481.44E-10	2275.36E-10
136000. E+05	9025.33E-11	1597.60E-10	2518.87E-10
137500. E+05	1147.53E-10	2104.84E-10	3292.29E-10
139000. E+05	1649.29E-10	2830.49E-10	4486.67E-10
140500. E+05	2044.56E-10	3606.36E-10	5632.71E-10
142000. E+05	1503.69E-10	2295.31E-10	3691.27E-10
143500. E+05	4374.67E-11	6258.67E-11	1022.64E-10
145000. E+05	5884.44E-12	7797.78E-12	1281.11E-11
146500. E+05	2466.67E-13	2155.56E-13	3866.67E-13
148000. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00	0000.00E+00

ANNEXE

149500. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00	0000.00E+00
151000. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00	0000.00E+00
152500. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00	0000.00E+00
154000. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00	0000.00E+00
155500. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00	0000.00E+00
157000. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00	0000.00E+00
158500. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00	0000.00E+00
160000. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00	0000.00E+00

ANNEXE 4 : la variation des nombres des lacunes induites par ion de H⁺ dans la cible Sic

profondeur de la cible (Å)	lacunes par ion	lacune par recul
608000. E+04	2538.75E-11	6875.01E-11
616000. E+04	2507.50E-11	6308.06E-11
624000. E+04	2649.58E-11	6744.94E-11
632000. E+04	2583.33E-11	7508.92E-11
640000. E+04	2639.58E-11	6182.74E-11
648000. E+04	2608.75E-11	6783.68E-11
656000. E+04	2671.25E-11	7439.57E-11
664000. E+04	2757.08E-11	5597.40E-11
672000. E+04	2710.00E-11	6559.10E-11
680000. E+04	2764.58E-11	6689.99E-11
688000. E+04	2763.33E-11	5744.47E-11
696000. E+04	2840.83E-11	6429.13E-11
704000. E+04	2809.58E-11	5363.13E-11
712000. E+04	2869.58E-11	7149.30E-11
720000. E+04	2873.33E-11	7484.05E-11
728000. E+04	2875.83E-11	5896.68E-11
736000. E+04	2939.58E-11	8398.11E-11
744000. E+04	2974.17E-11	6807.21E-11
752000. E+04	3080.00E-11	7758.79E-11
760000. E+04	3066.25E-11	8766.54E-11
768000. E+04	3078.75E-11	6546.73E-11
776000. E+04	3110.42E-11	6399.78E-11
784000. E+04	3180.00E-11	6916.45E-11
792000. E+04	3218.75E-11	6488.51E-11
800000. E+04	3280.83E-11	8707.19E-11
808000. E+04	3266.67E-11	8664.68E-11
816000. E+04	3335.83E-11	7330.63E-11
824000. E+04	3323.75E-11	8427.16E-11
832000. E+04	3377.92E-11	8378.91E-11
840000. E+04	3468.75E-11	1104.52E-10

ANNEXE

848000. E+04	3500.00E-11	8341.56E-11
856000. E+04	3602.08E-11	7977.42E-11
864000. E+04	3630.42E-11	7903.77E-11
872000. E+04	3666.67E-11	8889.05E-11
880000. E+04	3728.33E-11	8496.47E-11
888000. E+04	3784.17E-11	9198.70E-11
896000. E+04	3889.17E-11	9811.29E-11
904000. E+04	3945.83E-11	9014.78E-11
912000. E+04	3948.75E-11	8271.07E-11
920000. E+04	3996.25E-11	8504.30E-11
928000. E+04	4135.83E-11	9720.69E-11
936000. E+04	4202.08E-11	1098.72E-10
944000. E+04	4301.67E-11	9045.05E-11
952000. E+04	4333.33E-11	1140.32E-10
960000. E+04	4433.33E-11	1164.41E-10
968000. E+04	4480.00E-11	1001.68E-10
976000. E+04	4640.42E-11	9644.66E-11
984000. E+04	4727.50E-11	1043.55E-10
992000. E+04	4817.08E-11	1003.84E-10
100000. E+05	4930.83E-11	1126.19E-10
100800. E+05	4955.42E-11	1131.35E-10
101600. E+05	5190.00E-11	1067.58E-10
102400. E+05	5348.75E-11	1455.38E-10
103200. E+05	5372.50E-11	1357.17E-10
104000. E+05	5507.50E-11	1188.67E-10
104800. E+05	5692.92E-11	1541.47E-10
105600. E+05	5816.25E-11	1231.15E-10
106400. E+05	6057.92E-11	1431.44E-10
107200. E+05	6235.00E-11	1640.46E-10
108000. E+05	6620.00E-11	1629.70E-10
108800. E+05	6700.00E-11	1759.88E-10
109600. E+05	6972.92E-11	1769.29E-10
110400. E+05	7371.67E-11	1748.91E-10
111200. E+05	7666.25E-11	1779.52E-10
112000. E+05	8075.83E-11	1829.90E-10
112800. E+05	8371.67E-11	1954.34E-10
113600. E+05	9032.92E-11	2349.06E-10
114400. E+05	9608.75E-11	2315.51E-10
115200. E+05	1037.96E-10	2781.35E-10
116000. E+05	1121.42E-10	2918.32E-10
116800. E+05	1249.54E-10	2844.65E-10
117600. E+05	1407.79E-10	3303.08E-10
118400. E+05	1695.79E-10	4008.08E-10
119200. E+05	2158.92E-10	5325.40E-10

ANNEXE

120000. E+05	2640.88E-10	6043.53E-10
120800. E+05	2948.83E-10	6484.49E-10
121600. E+05	2569.83E-10	5284.06E-10
122400. E+05	1614.12E-10	3580.75E-10
123200. E+05	7775.00E-11	1693.61E-10
124000. E+05	2124.58E-11	4495.16E-11
124800. E+05	5054.17E-12	8248.97E-12
125600. E+05	6666.67E-13	1027.93E-12
126400. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
127200. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
128000. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
128800. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
129600. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
130400. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
131200. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
132000. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
132800. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
133600. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
134400. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
135200. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
136000. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
136800. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
137600. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
138400. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
139200. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00
140000. E+05	0000.00E+00	0000.00E+00

ANNEXE 5 : la variation des nombres des lacunes induites par ion d'He⁺⁺ dans le composé NaI.

profondeur de la cible	lacunes par ion	lacunes par recul
515000. E+03	1846.00E-10	3944.24E-10
530000. E+03	1886.44E-10	4082.35E-10
545000. E+03	1858.67E-10	4254.87E-10
560000. E+03	1916.67E-10	4830.69E-10
575000. E+03	1899.33E-10	6711.73E-10
590000. E+03	1944.22E-10	5067.41E-10
605000. E+03	1962.67E-10	5054.69E-10
620000. E+03	1965.11E-10	1210.18E-09
635000. E+03	1977.11E-10	6523.46E-10
650000. E+03	1979.56E-10	4341.61E-10
665000. E+03	2006.89E-10	8890.71E-10
680000. E+03	2037.33E-10	4333.29E-10

ANNEXE

695000. E+03	2023.56E-10	6031.30E-10
710000. E+03	2050.22E-10	5939.69E-10
725000. E+03	2092.67E-10	5051.65E-10
740000. E+03	2099.78E-10	9206.30E-10
755000. E+03	2081.11E-10	8411.91E-10
770000. E+03	2138.22E-10	4855.19E-10
785000. E+03	2170.67E-10	5551.83E-10
800000. E+03	2219.33E-10	7299.93E-10
815000. E+03	2197.56E-10	7493.55E-10
830000. E+03	2205.78E-10	6204.56E-10
845000. E+03	2240.22E-10	7167.48E-10
860000. E+03	2272.22E-10	5824.78E-10
875000. E+03	2280.22E-10	5561.15E-10
890000. E+03	2330.67E-10	7511.34E-10
905000. E+03	2345.56E-10	1375.49E-09
920000. E+03	2370.22E-10	6544.46E-10
935000. E+03	2399.56E-10	1780.78E-09
950000. E+03	2440.22E-10	8813.57E-10
965000. E+03	2481.33E-10	6326.60E-10
980000. E+03	2474.67E-10	6861.45E-10
995000. E+03	2518.89E-10	6500.77E-10
101000. E+04	2590.22E-10	6808.08E-10
102500. E+04	2602.67E-10	8757.38E-10
104000. E+04	2660.22E-10	9251.88E-10
105500. E+04	2642.67E-10	7745.67E-10
107000. E+04	2662.67E-10	6425.93E-10
108500. E+04	2703.56E-10	7612.66E-10
110000. E+04	2723.33E-10	8016.77E-10
111500. E+04	2814.89E-10	9083.39E-10
113000. E+04	2811.33E-10	9230.16E-10
114500. E+04	2885.33E-10	8328.61E-10
116000. E+04	2917.11E-10	7896.93E-10
117500. E+04	2942.89E-10	1082.61E-09
119000. E+04	3012.00E-10	1422.78E-09
120500. E+04	3065.11E-10	8361.48E-10
122000. E+04	3105.78E-10	9465.43E-10
123500. E+04	3141.78E-10	6910.96E-10
125000. E+04	3235.78E-10	1054.38E-09
126500. E+04	3261.33E-10	1177.22E-09
128000. E+04	3362.22E-10	9379.12E-10
129500. E+04	3461.78E-10	1184.93E-09
131000. E+04	3530.89E-10	9272.07E-10
132500. E+04	3550.22E-10	1101.51E-09
134000. E+04	3618.67E-10	1038.62E-09

ANNEXE

135500. E+04	3763.56E-10	1250.01E-09
137000. E+04	3874.67E-10	1217.96E-09
138500. E+04	3960.89E-10	1083.61E-09
140000. E+04	4016.22E-10	1515.70E-09
141500. E+04	4165.56E-10	1275.90E-09
143000. E+04	4291.56E-10	1857.52E-09
144500. E+04	4370.89E-10	1240.52E-09
146000. E+04	4594.22E-10	1231.54E-09
147500. E+04	4784.22E-10	1165.15E-09
149000. E+04	4890.67E-10	1530.52E-09
150500. E+04	5129.11E-10	1338.63E-09
152000. E+04	5370.22E-10	1747.34E-09
153500. E+04	5579.11E-10	1987.99E-09
155000. E+04	5872.44E-10	1882.21E-09
156500. E+04	6208.89E-10	2016.61E-09
158000. E+04	6703.11E-10	1984.20E-09
159500. E+04	7100.67E-10	2206.91E-09
161000. E+04	7625.78E-10	2854.20E-09
162500. E+04	8391.56E-10	2593.13E-09
164000. E+04	9332.67E-10	2478.60E-09
165500. E+04	1079.31E-09	3174.27E-09
167000. E+04	1313.78E-09	3968.48E-09
168500. E+04	1835.91E-09	5602.43E-09
170000. E+04	3369.11E-09	9572.06E-09
171500. E+04	3677.58E-09	1012.26E-08
173000. E+04	1019.13E-09	2644.68E-09
174500. E+04	5991.11E-11	1630.64E-10
176000. E+04	8222.22E-13	7502.35E-12
177500. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
179000. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
180500. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
182000. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
183500. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
185000. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
186500. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
188000. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
189500. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
191000. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
192500. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
194000. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
195500. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
197000. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
198500. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
200000. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00

ANNEXE

ANNEXE 6:montre la variation des nombres des lacunes induites par le He⁺⁺ dans le composé SiC

profondeur de la cible(Å)	lacunes par ion	lacunes par recul
114000. E+03	2622.93E-10	6069.51E-10
128000. E+03	2637.14E-10	5560.31E-10
142000. E+03	2658.50E-10	6454.16E-10
156000. E+03	2643.86E-10	6274.34E-10
170000. E+03	2680.07E-10	6028.88E-10
184000. E+03	2738.93E-10	7033.23E-10
198000. E+03	2737.93E-10	6441.33E-10
212000. E+03	2768.64E-10	6974.23E-10
226000. E+03	2765.43E-10	6281.49E-10
240000. E+03	2762.64E-10	6319.20E-10
254000. E+03	2804.79E-10	7389.35E-10
268000. E+03	2828.00E-10	6935.25E-10
282000. E+03	2833.57E-10	6509.33E-10
296000. E+03	2849.93E-10	7232.75E-10
310000. E+03	2877.36E-10	6848.26E-10
324000. E+03	2913.21E-10	7386.42E-10
338000. E+03	2919.14E-10	6141.14E-10
352000. E+03	2940.71E-10	7774.19E-10
366000. E+03	2965.00E-10	7077.23E-10
380000. E+03	2977.93E-10	6777.31E-10
394000. E+03	3021.50E-10	7793.04E-10
408000. E+03	3069.64E-10	9280.71E-10
422000. E+03	3083.43E-10	7650.19E-10
436000. E+03	3092.50E-10	7277.15E-10
450000. E+03	3095.79E-10	7368.78E-10
464000. E+03	3122.50E-10	7412.67E-10
478000. E+03	3181.93E-10	7631.58E-10
492000. E+03	3195.07E-10	7568.56E-10
506000. E+03	3223.36E-10	7647.82E-10
520000. E+03	3249.57E-10	7467.31E-10
534000. E+03	3297.86E-10	7767.04E-10
548000. E+03	3299.29E-10	7905.95E-10
562000. E+03	3340.79E-10	7568.82E-10
576000. E+03	3369.57E-10	8744.52E-10
590000. E+03	3411.00E-10	8389.30E-10
604000. E+03	3441.43E-10	8045.50E-10
618000. E+03	3487.93E-10	8681.09E-10
632000. E+03	3507.43E-10	8175.78E-10
646000. E+03	3553.07E-10	8979.44E-10
660000. E+03	3595.86E-10	9454.55E-10

ANNEXE

674000. E+03	3597.43E-10	9665.60E-10
688000. E+03	3669.00E-10	9232.07E-10
702000. E+03	3688.43E-10	8798.43E-10
716000. E+03	3738.57E-10	8855.02E-10
730000. E+03	3761.79E-10	9465.62E-10
744000. E+03	3835.36E-10	9457.67E-10
758000. E+03	3883.71E-10	9279.20E-10
772000. E+03	3930.43E-10	9984.18E-10
786000. E+03	3974.14E-10	1051.70E-09
800000. E+03	4052.71E-10	9309.67E-10
814000. E+03	4065.79E-10	9807.07E-10
828000. E+03	4111.43E-10	9162.39E-10
842000. E+03	4168.36E-10	1072.88E-09
856000. E+03	4227.71E-10	9322.19E-10
870000. E+03	4285.29E-10	1049.55E-09
884000. E+03	4362.21E-10	9940.28E-10
898000. E+03	4437.29E-10	1111.51E-09
912000. E+03	4483.07E-10	1196.28E-09
926000. E+03	4590.00E-10	1046.12E-09
940000. E+03	4646.29E-10	1139.74E-09
954000. E+03	4744.71E-10	1081.31E-09
968000. E+03	4780.86E-10	1203.57E-09
982000. E+03	4868.00E-10	1226.37E-09
996000. E+03	4946.57E-10	1145.19E-09
101000. E+04	5068.00E-10	1173.31E-09
102400. E+04	5150.29E-10	1227.55E-09
103800. E+04	5280.71E-10	1228.34E-09
105200. E+04	5369.93E-10	1363.10E-09
106600. E+04	5463.21E-10	1276.87E-09
108000. E+04	5581.50E-10	1401.11E-09
109400. E+04	5744.29E-10	1350.89E-09
110800. E+04	5911.43E-10	1460.40E-09
112200. E+04	6025.50E-10	1402.35E-09
113600. E+04	6181.00E-10	1537.65E-09
115000. E+04	6335.57E-10	1498.29E-09
116400. E+04	6515.36E-10	1598.82E-09
117800. E+04	6769.00E-10	1662.51E-09
119200. E+04	6981.79E-10	1719.37E-09
120600. E+04	7229.93E-10	1696.42E-09
122000. E+04	7453.57E-10	1788.05E-09
123400. E+04	7773.79E-10	1838.51E-09
124800. E+04	8128.71E-10	2010.88E-09
126200. E+04	8484.57E-10	2042.37E-09
127600. E+04	8923.21E-10	2090.26E-09

ANNEXE

129000. E+04	9415.86E-10	2161.17E-09
130400. E+04	9977.36E-10	2449.55E-09
131800. E+04	1070.81E-09	2798.51E-09
133200. E+04	1153.74E-09	2750.58E-09
134600. E+04	1263.63E-09	3127.31E-09
136000. E+04	1393.65E-09	3438.89E-09
137400. E+04	1586.94E-09	3850.36E-09
138800. E+04	1880.85E-09	4455.41E-09
140200. E+04	2479.55E-09	6077.85E-09
141600. E+04	4583.94E-09	1136.92E-08
143000. E+04	5730.36E-09	1361.94E-08
144400. E+04	1311.16E-09	3030.76E-09
145800. E+04	2817.86E-11	7899.95E-11
147200. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
148600. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00
150000. E+04	0000.00E+00	0000.00E+00