

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique



Faculté des Sciences et de l'Ingénierie
Département des Sciences Exactes
Université 08 mai 1945

Mémoire

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de **MAGISTER**

Option : Physique de la matière Condensée

Présenté par : Mr. Ammari Hocine

Calculs des effets induits par les rayonnements de protons

Dans les cristaux semi-conducteurs de type $A^{III} B^V$

Sous la direction de : **Dr. N. BOUKHAROUBA**

Devant le jury :

Président : **D. KHATMI**

Prof. Université de Guelma

Rapporteur : **N. BOUKHAROUBA**

M.C. Université de Guelma

Examineurs: **A. MEDDOUR**

Prof. Université de Guelma

: **S. BADRAOUI**

M.C. Université de Guelma

2008

Remerciements:

Cette thèse a été réalisée à l'Université de Guelma. Je tiens à remercier à tous les administrateurs et les professeurs qui ont participé à l'élaboration et à la facilitation de ce travail, je remercie particulièrement Pr. Djemel Eddine Khatmi, Dr. Abdelkader Dehici et Dr. Saleh Badraoui.

Cette thèse a été réalisée sous la direction de Dr. Nourredine Boukharouba. Je tiens à le remercier très sincèrement pour la confiance qu'il m'a accordée et aussi pour ces efforts et ces conseils pendant tout le long de la préparation de ce travail.

Je remercie Prof. D. KHATMI, Prof. A. MEDDOUR et Dr. S. BADRAOUI, qui ont accepté de juger ce mémoire.

Je n'oublie pas Saidia Mahmoud pour ses précieux conseils dans le domaine de la langue (Anglais, français) et Zanat kamel pour son aide pendant les trois dernières années en physique et en informatique. Merci à Ali, Ahmed, Mohamed, Mourad, Yassine...

Merci enfin à mes parents, tous les membres de ma famille et mes amis pour leur encouragement lors de toutes ces années d'études.

Sommaire

Remerciements

Sommaire

Abstract

Résumé

الخلاصة

<i>Introduction générale</i>	1
<i>Chapitre I: Les interactions</i>	2
I.1. Introduction et principe de base:	4
I.1.1. Les particules élémentaires.....	4
I.1.2. Les interactions et les particules d'échange.....	5
I.2. Les interactions fondamentales.....	5
I.2.1. Interaction gravitationnelle.....	5
I.2.2. Interaction électromagnétique.....	6
I.2.3. Interaction forte.....	7
I.2.4. Interaction faible.....	8
I.3. Interactions entre Rayonnements et matière.....	8
I.3.1. Principaux processus d'interaction.....	9
I.3.1.1. Pouvoir d'arrêt.....	10
I.3.1.2. Parcours d'arrêt.....	10
I.3.1.3. Expression de la perte d'énergie.....	11
I.3.2. Les grandes catégories de rayonnements.....	16
A. Interactions entre Rayonnements chargées et matière.....	17
B. Interactions entre Rayonnements neutres et matière	21
C. Interactions entre Rayonnements électromagnétiques (EM) et matière.....	21

Chapitre II: La méthode de Monte Carlo.....23

II.1. Introduction à la méthode de Monte Carlo.....24

 II.1.1. les éléments principaux d'un algorithme de Monte Carlo..... 25

II.2. Une introduction à la probabilité et aux statistiques..... 25

 II.2.1. Probabilité..... 25

 II.2.1.1. Variables aléatoires (v.a) 26

 II.2.1.2. Valeur d'espérance (moyenne), variance, fonctions de v.a.....26

 II.2.2. Variables aléatoires continues..... 27

 II.2.2.1. La fonction de distribution (fd) 27

 II.2.2.2. La fonction de distribution cumulative (fdc) 29

 II.2.2.3. Valeur et variance d'espérance pour les fd continues..... 29

 II.2.2.4. La relation entre les fd discrets et continus..... 30

 II.2.3. Exemple des fd continues: 31

 II.2.3.1. Distribution exponentielle.....31

 II.2.3. 2. Distribution (normale) gaussienne.....32

 II.2.3.3. Intégration de Monte Carlo 33

II.3. Échantillonnage de probabilité des fonctions de distribution.....34

 II.3.1. Transformation des fd..... 35

 II.3.2. l'échantillonnage par l'intermédiaire de l'inversion du fdc..... 37

**Chapitre III: Transport des ions énergétiques dans des cibles
amorphes avec la méthode de Monte Carlo**38

III.1. Introduction..... 39

III.2. Le potentiel interatomique.....40

 III.2.1. Potentiels de Born-Mayer..... 40

 III.2.2. Potentiels écrantés de Coulomb..... 40

III.3. dispersion et perte d'énergie nucléaire..... 41

 III.3.1. Évaluation analytique de l'angle de dispersion..... 41

 III.3.2. Formule d'ajustement (fitting) pour Δ 43

 III.3.3. La perte d'énergie nucléaire et la transformation angulaire.....44

 III.3.4. Distance entre les collisions et la sélection du paramètre d'impact..... 45

III.4. Perte d'énergie électronique..... 46

III.5 Le logiciel de calcul numérique SRIM (TRIM)	48
III.5.1 Introduction.....	48
III.5.2 Applications spéciales de TRIM.....	50
Chapitre IV: Résultat, Discussions et Conclusion	51
IV.1. Présentation de notre travail	52
IV.2. Résultat	55
IV.2.1. Calcul détaillé des endommagements avec toutes les cascades (T_c)... ..	55
IV.2.2. Distribution des Ions par un calcul rapide d'endommagement (T_p).....	55
IV.2.3. l'endommagement total	57
IV.3. Discussion.....	60
IV.3.1. Comparaison entre les résultats trouver par Les modèles CPD et SRIM.....	60
IV.3.1.1. Le modèle analytique CPD (Concentration of Primary Defects)	60
IV.3.1.2. La comparaison entre les deux modèles pour le cas de Silicium	61
2.1. Calcul direct de la densité des défauts purement nucléaires D_n ...	61
IV.3.1.3. La comparaison entre les deux modèles pour le cas de carbure	67
IV.4. Conclusion.....	69
Appendice I: Section efficace.....	71
I.1 Définitions et notations.....	72
I.2. Mesure des sections efficaces.....	72
I.3. Calcul de la section efficace coulombienne (de Rutherford)	73
Référence.....	77

Abstract

Radiation damage induced by intense proton beam bombardment in $A^{III} B^V$ crystals was studied over incident energies ranging from one MeV to one GeV to determine those compounds that are most suitable to withstand high levels of radiation. Crystals of type $A^{III} B^V$ are most promising and are most likely to replace silicon and germanium in the manufacturing of electronic compounds designed to work in high radiation fields. Applications abound in areas of science and technology as varied as computers, nuclear science and space as well as radiation oncology.

The proton-crystal interaction is quantified using the code SRIM (The Stopping and Range of Ions in Matter) which computes the transport of a beam of incident protons through a given medium using Monte Carlo techniques to compute the statistical parameters of the collisions with the atoms of the medium. Lattice defects induced by these collisions and their recoils are estimated for a number of these compounds like GaAs, GaP, InP, InAs, InSb and SiC. The mean number of these defects per incident proton per unit range is used as a comparison criterion. This parameter exhibits a decreasing logarithmic variation as a function of incident energy for values greater than a one MeV. Furthermore, some compounds such as InP exhibit a high resilience to radiation damage for low energies, while others are more resistant at high energy as SiC.

Résumé

Les effets induits par un rayonnement intense de protons sur des composés cristallins de type $A^{III}B^V$ ont été étudiés pour des énergies incidentes variant de un MeV à un GeV afin de déterminer les cristaux les plus aptes à survivre ce type d'environnement. Ces composés sont les plus prometteurs en vue de remplacer les cristaux classiques à base de silicium et de germanium servant dans la fabrication des composants électroniques utilisés dans des domaines aussi différents que l'industrie informatique, nucléaire, spatiale ainsi qu'en oncologie médicale.

L'interaction proton-cristal est quantifiée à l'aide du programme SRIM (The Stopping and Range of Ions in Matter) qui permet le transport du faisceau de protons incident à travers un milieu donné en utilisant la méthode de Monte Carlo pour calculer les paramètres statistiques des collisions avec les atomes du milieu. Les défauts interstitiels dus au recul des atomes cristallins lors de ces collisions ainsi que les effets induits par cascade sont estimés et comparés pour un certain nombre de ces composés tel que GaAs, GaP, InP, InAs, InSb et SiC. Le nombre moyen de lacunes créées par proton incident par unité de parcours est utilisé comme paramètre de comparaison. Nous trouvons une variation logarithmique décroissante de ce paramètre en fonction de l'énergie du proton incident pour des énergies supérieures à un MeV. D'autre part certains de ces composés tel que le InP, à basse énergie, sont plus résistants aux rayonnements protoniques que les autres composés étudiés dans le présent travail, alors que d'autres sont plus performants aux hautes énergies comme le SiC.

الخلاصة

التأثيرات التحريضية من الأشعة البروتونية الشديدة على المركبات البلورية من نوع $A^{III} B^V$ قمنا بدراستها من أجل طاقات واردة (للبروتونات) متغيرة من واحد MeV إلى واحد GeV بغرض معرفة البلورات الأكثر جاهزية للتعايش مع هذا النوع من المحيط . هذه المركبات هي المؤهلة لخلافة البلورات الكلاسيكية ذات القاعدة من السليكون أو الجرمانيوم المستخدمة في صناعة المركبات الالكترونية التي تستعمل في مجالات صناعية متنوعة مثل: الإعلام الآلي و النووي و الصناعات الخاصة مثل علاج الأمراض السلطانية عن طريق الإشعاع.

التصادمات بروتون - بلور تدرس (تحسب) بواسطة البرنامج SRIM (The Stopping and Range of Ions in Matter) الذي يسمح لحزمة بروتونات الواردة لاخترق وسط ما معطى باستعمال طريقة Monte Carlo لحساب الوسائط الإحصائية للتصادمات مع ذرات الوسط . التشوهات بين الذرات الناتجة عن تراجع ذرات البلورات إلى الخلف في حالة صدمها و كذلك التأثيرات المحرصة بواسطة شلال التصادمات الذرية تحسب و تقارن مع مثل هذه المركبات GaAs ، GaP ، InAs ، InP ، InSb ، SiC . العدد المتوسط للفراغات الناتجة عن البروتونات الواردة على وحدة المسار المقطوع تستعمل كوسيط للمقارنة. لقد وجدنا تغيرا لوغاريتميا متناقصا مع هذا الوسيط بدلالة طاقة البروتونات الواردة من أجل طاقات أكثر من واحد MeV . من ناحية أخرى بعض هذه المركبات مثل: InSb في حالة الطاقة المنخفضة تكون جد مقاومة للإشعاعات البروتونية أكثر من بقية المركبات المدروسة في هذا الإنجاز والبعض الآخر جد مقاوم في حالة الطاقة المرتفعة مثل SiC .

Introduction générale

Introduction générale

L'utilisation des matériaux semi-conducteurs dans des milieux où règne une très haute concentration de rayonnements ionisants est de plus en plus fréquente dans des applications allant de la détection des particules dans les expériences de physique utilisant des réacteurs et des accélérateurs, aux applications médicales, industrielles, et spatiales. De part leur importance s'impose la nécessité de développer des matériaux "résistants" aux rayonnements pouvant fonctionner durablement et fiablement dans des environnements hostiles. En dépit des multiples efforts théoriques et expérimentaux pour comprendre et caractériser le comportement des semi-conducteurs sous l'action de rayonnements ionisants. Le domaine reste toujours un sujet ouvert à d'intenses recherches.

Les particules pouvant causer le plus de dégradations dans un cristal sont les particules les plus massives (les hadrons), loin devant les leptons et les photons. Les hadrons sont les plus susceptibles de créer des défauts en profondeur dans le cristal lors de collisions avec les noyaux des atomes du réseau cristallin. Les hadrons les plus importants à étudier sont les neutrons et les protons. L'interaction entre les particules incidentes et le cristal crée deux types de dégradations l'une induite à la surface, et l'autre, volumique, localisée à l'intérieur du cristal. Les dégradations volumiques (bulk defects) sont principalement dues au déplacement ou à l'éjection des noyaux atomiques hors des noeuds du réseau cristallin lors d'interactions entre les particules du rayonnement et les atomes du cristal. Les leptons et les photons ayant une petite masse ou une masse nulle ont peu d'effets permanents sur le cristal parce que leur interaction avec le cristal se fait principalement avec les électrons atomiques.

Parmi les cristaux les plus prometteurs du point de vue de leur résistance aux rayonnements on trouve les composés de type $A^III B^V$. Ce sont les candidats les plus probables pour remplacer le silicium dans les composants électroniques devant fonctionner sous d'intenses rayonnements particulaire. Par exemple. Le composé SiC est actuellement le sujet d'intenses recherches visant son utilisation comme futur détecteur de particules en physique des hautes énergies, dans le domaine de l'astronomie à base de rayons X (Chandra X-ray telescope), ainsi que dans l'exploration spatiale (e.g. Cameras CCD).

Chapitre I

Les interactions

Chapitre I

Les interactions

I.1. Introduction et principe de base:

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 leur *interaction (collision)* 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 ces interactions.

I.1.1. Les particules élémentaires:

- La matière courante (stable) est formée seulement de trois types de particules élémentaires: e, u, d.
 - Chaque atome contient des électrons et un noyau.
 - Les noyaux sont constitués de protons et de neutrons.
 - Un proton est une combinaison de quarks u, u et d.
 - Un neutron est une combinaison de quarks u, d et d [1].
- Toute la matière connue est formée de combinaisons de 6 leptons et 6 quarks
- Pour chacune de ces 12 particules, il existe une anti-particule de charge électrique opposée (anti-matière)
- Ces constituants élémentaires n'ont pas de structure connue.

Tableau I.1: Représente les particules élémentaires.

				Charge électrique [e]	Charge forte
Leptons	Electron e	muon μ	tau τ	-1	Non
	neutrino ν_e	neutrino ν_μ	neutrino ν_τ	0	
Quarks	up u	charm c	Top t	+2/3	Oui
	dows d	strange s	bottom b	-1/3	

I.1.2. Les interactions et les particules d'échange:

Deux particules en interaction échangent une troisième particule. Cette particule d'échange leur permet de transférer de la quantité de mouvement, de l'énergie, du moment cinétique, et bien d'autres choses ...[1]

I.2. Les interactions fondamentales:

Aujourd'hui la physique théorique affirme qu'il y a quatre **types d'interactions** (forces) dans l'univers.

- Interaction gravitationnelle
- Interaction électromagnétique
- Interaction nucléaire forte
- Interaction nucléaire faible [2]

I.2.1. Interaction gravitationnelle:

Les trois principes de la dynamique (principe d'inertie, principe fondamental $m \cdot a = F$ principe d'action - réaction) et les lois de Kepler permettent à **Newton** d'énoncer la loi de la gravitation universelle, en 1686: deux masses (ponctuelles) m et m' s'attirent mutuellement d'autant plus fortement qu'elles sont proches l'une de l'autre, selon la relation suivante :

$$F = G \frac{m \cdot m'}{R^2}$$

où F s'exprime en N, m et m' en kg, r , la distance séparant les deux masses, en m. G , la constante de gravitation universelle qui vaut $6,672 \times 10^{-11}$ (SI) [3].

La gravitation est — uniquement — une force *attractive*. La force répulsive n'existe pas dans le domaine de la gravitation. De ce fait, il n'y a pas d'effet d'écran possible. Au contraire, essayer de placer un écran, c'est-à-dire ajouter une troisième masse entre les deux masses initiales, ne ferait qu'augmenter l'attraction entre ces dernières. La portée de l'interaction gravitationnelle est donc réellement infinie.

Sur le plan macroscopique, la force de gravitation joue un rôle très important ; elle fait que tous les objets sur la surface de la terre restent liés à la planète, et gèrent les mouvements des corps célestes, des planètes aux galaxies. Sur le plan microscopique, elle est tellement faible (la plus faible des 4 interactions) qu'elle joue un rôle négligeable par rapport aux autres forces que nous décrivons ci-dessous. Cependant, pour des distances extrêmement courtes (de l'ordre de

10^{-30} m), ça pourrait n'être plus le cas. On arriverait alors dans des dimensions où la « gravitation quantique » jouerait un rôle important. On ne maîtrise pas le sujet à ce jour.

I.2.2. Interaction électromagnétique:

L'interaction électromagnétique est la force de liaison des objets plus petits tels que les atomes, les molécules mais aussi les plantes et nous-mêmes. Comme pour la force gravitationnelle, les conséquences de la force électromagnétique se manifestent dans le monde macroscopique. Elle agit à l'échelle microscopique et produit des effets macroscopiques. Elle domine le monde à l'échelle humaine, par la stabilité des atomes et des molécules, par exemple la force de frottement, produit l'étirement, l'adhérence et la cohésion. Sa portée est elle aussi illimitée mais elle peut être soit attractive soit répulsive. Elle est plus forte que l'interaction gravitationnelle [2].

I.2.2.1. Loi de Coulomb:

Au repos, deux charges électriques de même signe se repoussent et deux charges électriques de signes opposés s'attirent. Considérons deux charges électriques ponctuelles Q et Q' (exprimées en C), au repos, séparées par une distance r (en m:mètre) ; on a la relation suivante

$$\text{(établie par Charles Coulomb en 1780) : } F = \frac{1}{4\pi\epsilon} \cdot \frac{Q \cdot Q'}{r^2}$$

où F s'exprime en N. La grandeur ϵ porte le nom de *permittivité électrique absolu* et dépend du milieu dans lequel sont placées les deux charges électriques.

Si nous plaçons de la matière électrisée entre les deux charges, il y aura modification de la force ; cette matière joue le rôle d'écran. La force n'est pas réellement de portée infinie [2,3].

I.2.2.2. Magnétisme: En magnétisme on trouve un coefficient de même type que la permittivité électrique: la *perméabilité magnétique absolue* μ du milieu dans lequel s'exerce l'influence magnétique; il intervient, par exemple, dans l'expression des forces apparaissant entre deux fils parallèles, de longueur l , séparés d'une distance r , dans lesquels circulent les courants d'intensités

$$I_1 \text{ et } I_2: \text{ on a } F = \mu \frac{I_1 \cdot I_2 \cdot l}{2\pi r}$$

Remarque:

En 1864, James Maxwell arriva à effectuer une première unification. Il exposa sa théorie électromagnétique de la lumière, dans laquelle figurent les équations générales du champ

électromagnétique (équations complexes que nous n'aborderons pas ici) : en associant ε_0 et μ_0 ($\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N/A}^2$ et $\varepsilon_0 = 8,854 \times 10^{-12} \text{ A}^2 \cdot \text{s}^2 / (\text{m}^2 \cdot \text{N})$), Maxwell trouva $\varepsilon_0 \mu_0 = 1/c^2$. Il en déduisit que la lumière ne pouvait être que le résultat de l'association d'une grandeur électrique (un champ électrique) et d'une grandeur magnétique (un champ d'induction magnétique). Ce fut la première unification de plusieurs branches séparées de la physique : électricité, magnétisme et optique.

I.2.3. Interaction forte:

L'interaction nucléaire forte lie les neutrons et les protons (mais aussi les protons entre eux) pour former les noyaux stables. Tandis que les trois autres forces sont subies par toutes les particules, celle-ci agit seulement sur les hadrons.

Si les deux premières interactions qui permettent de comprendre la stabilité des atomes, elles ne permettent pas, par contre, de comprendre celle des noyaux. S'ils contiennent plus d'un proton, la force de gravitation est insuffisante pour compenser la force de répulsion électrique entre charges positives. Une autre force, beaucoup plus forte que la force électrostatique répulsive doit être introduite. Sans cette nouvelle force, on ne comprend pas comment deux protons ou même un proton et un neutron ou encore deux neutrons tiennent aussi solidement ensemble, la seule force de gravitation ne pouvant y suffire.

Nous n'aurons certainement plus ici une relation en $1/r^2$. Cette force n'a, en effet, qu'une courte portée. La « portée » décrit la façon dont l'influence des forces se fait sentir au voisinage de leur source. En observant le comportement radioactif (découvert dès 1896) de certains isotopes du radium, du polonium etc.

On sait aujourd'hui que la portée de l'interaction forte ne dépasse pas « quelques fois » la dimension du proton (soit $10^{-15} \text{ m} = 1 \text{ fermi}$). Au-delà de quelques fois 10^{-15} m , la force forte s'annule [3].

I.2.3.1. Réaction nucléaire :

Une réaction est dite nucléaire lorsqu'il y a une modification de la nature d'un ou plusieurs noyaux. Participent alors à la réaction protons (1_1p) et neutrons (1_0n), mais également électrons ${}^0_{-1}e$ et positons ${}^0_{+1}e$. Les réactions nucléaires sont de plusieurs types, selon les transformations produites. On distingue les réactions de *fusion*, et les réactions de *fission*.

Fusion : on ajoute des composants pour former des noyaux plus lourds, dans les secondes au contraire

Fission: on casse un gros noyau pour donner naissance à deux noyaux plus légers.

Cas générale d'une équation de la réaction nucléaire : ${}^{A1}_{Z1}X_1 + {}^{A2}_{Z2}X_2 \rightarrow {}^{A3}_{Z3}X_3 + {}^{A4}_{Z4}X_4$

I.2.4. Interaction faible:

L'interaction faible (force faible) est plus faible que la force nucléaire forte et de portée environ cent fois plus courte. Elle est par exemple responsable de la désintégration radioactive β en changeant un nucléon en un autre. Le neutron se désintègre en : ${}^1_0n \rightarrow {}^1_1p + {}^0_{-1}e + {}^0_0\bar{\nu}$ Où ${}^0_0\bar{\nu}$ est un antineutrino [2,3].

Une étoile comme le Soleil tire son énergie d'un four thermonucléaire interne. Il brûle l'hydrogène, le transformant en hélium, un processus dû à la transformation graduelle des protons par interaction faible. L'interaction forte ne permet l'union de deux protons qu'en présence d'un neutron. L'intervention de l'interaction faible est nécessaire pour « fabriquer » un neutron à partir d'un proton par la réaction ${}^1_1p \rightarrow {}^1_0n + {}^0_1e + {}^0_0\nu$ où 0_1e est un antiélectron ou *Positon*.

L'interaction faible a une portée de « quelques fois » 10^{-18} m.

Tableau I.2: Les quatres interactions fondamentales [1,3].

interaction	Intensité relative	portée	Particules échangées	Structures liées stables	Source d'énergie (libération d'énergie potentielle)
gravifique	$\sim 10^{-39}$	infinie	(graviton?)	galaxie	(barrages, marées)
Electro-magnétique	$\sim 10^{-2}$	infinie	photon γ	Atome, molécules	Fossile (hydrocarbures)
Faible	$\sim 10^{-14}$	$\sim 10^{-17}$ m	W^+, W^-, Z^0	-	Solaire, nucléaire
Forte	1	$\sim 10^{-15}$ m	gluons	Noyaux des Atomes	(fusion ou fission)

où W^+, W^- et Z^0 les bosons de jauge, transmettent l'interaction faible.

I.3. Interactions entre Rayonnements et matière:

On appelle interaction entre rayonnements et matière tout phénomène se produisant lorsqu'un rayonnement traverse un milieu quel qu'il soit. **Le rayonnement peut être chargé ou non, avoir une masse au repos ou non.**

I.3.1. Principaux processus d'interaction:

Le passage de particule à travers la matière génère une zone endommagée tout le long de sa trajectoire. Selon que la particule subit une collision élastique ou inélastique sur un électron ou un noyau, on peut imaginer quatre types principaux d'interaction :

a. Collisions inélastiques avec les électrons atomiques: Ce sont des Collisions entre les électrons du matériau et le champ électrique de l'ion incident. Dans ce cas, la particule incidente à une trajectoire rectiligne puisque la masse des électrons est négligeable devant la masse de cette dernière.

C'est le mécanisme prépondérant qui conduit à l'ionisation ou l'excitation du milieu traversé. Elles sont prédominantes pour des ions ayant une énergie supérieure à quelques dizaines de keV par unité de masse atomique (uma).

b. Collisions inélastiques avec un noyau: La particule est déviée par les forces coulombiennes et son ralentissement se manifeste par l'émission d'un rayonnement de freinage (bremsstrahlung). Elle peut aussi céder de l'énergie au noyau et amener celui-ci dans un état excité. C'est l'excitation coulombienne du noyau. Ces processus sont négligeables dans l'estimation de la perte d'énergie des particules (p, d, t, α).

c. Collisions élastiques avec les électrons: Ces interactions ne sont observées que pour des particules de très faible énergie (<100eV).

d. Collisions élastiques avec les noyaux: C'est la diffusion élastique entre la particule incidente et les noyaux des atomes. La particule incidente est diffusée sans rayonner ni exciter les noyaux, mais en revanche, les noyaux subissent des déplacements. Ce processus est majoritaire pour des énergies de quelques keV/uma ou lors de la fin de parcours d'un ion ayant une énergie plus importante [4,5].

Donc l'altération du matériau est principalement due à deux interactions entre la particule incidente et la cible, collisions inélastiques avec les électrons et collisions élastiques avec les noyaux. Les contributions de ces deux types d'interactions vont dépendre de l'énergie de la particule incidente, de sa masse (et donc de sa vitesse), de sa charge et de la nature du matériau cible. Dans ces processus, les ions incidents subissent un ralentissement qui est caractérisé par le pouvoir d'arrêt.

I.3.1.1. Pouvoir d'arrêt:

Une particule se déplaçant dans un milieu perd son énergie par une combinaison de chocs élastiques et inélastiques avec les noyaux et les électrons du milieu, et ralentit de plus en plus, jusqu'à ce qu'elle perd toute son énergie cinétique et s'arrête. Le pouvoir d'arrêt représente la perte moyenne d'énergie de la particule par distance parcourue. Il dépend du type de particule, de son énergie et des propriétés de la matière traversée. En première approximation, le pouvoir d'arrêt des ions est la somme des pertes d'énergies nucléaire et électronique [6], lors de collisions élastiques et inélastiques, considérées comme indépendantes. On peut écrire le pouvoir d'arrêt (ou perte d'énergie si on parle de la cible comme référence) [7]:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{total} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_{nuc} + \left(\frac{dE}{dx}\right)_{ele} \quad (I-1)$$

- **Mécanisme d'arrêt** [8]:

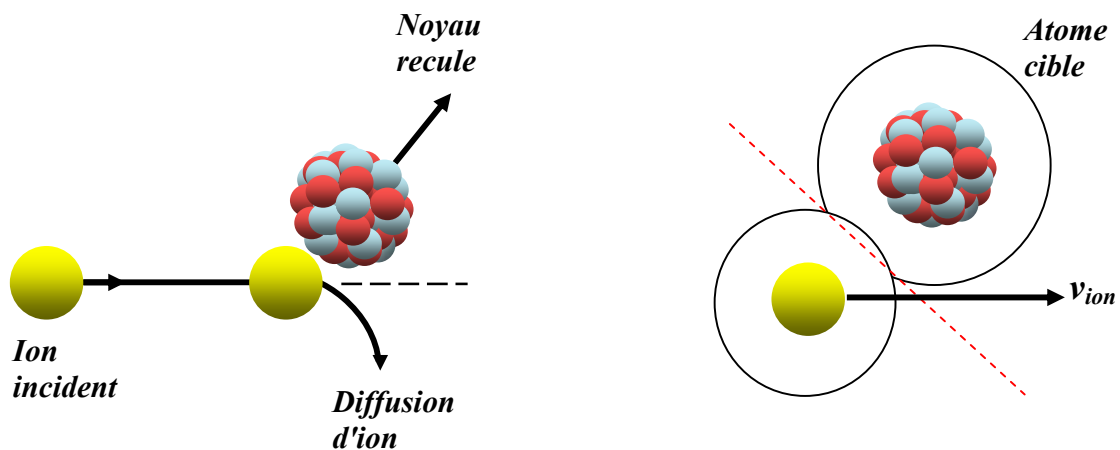


Figure I.1:

Echange d'énergie par collision élastique avec les noyaux.

Donne: diffusion et dommage.

Echange d'énergie par interaction inélastique avec les électrons.

Donne: Ionisation et chaleur.

I.3.1.2. Parcours d'arrêt (Range):

Le fait que les particules chargées perdent leur énergie dans la matière amène à se poser la question de distance parcourue dans cette matière. La portée est la distance maximale parcourue par une certaine particule d'une énergie donnée dans un matériau donné.

La relation entre le parcours et le pouvoir d'arrêt est donnée par [9]:

$$R = \int_E^0 \left(\frac{dE}{dx}\right)^{-1} dE \quad (I-2)$$

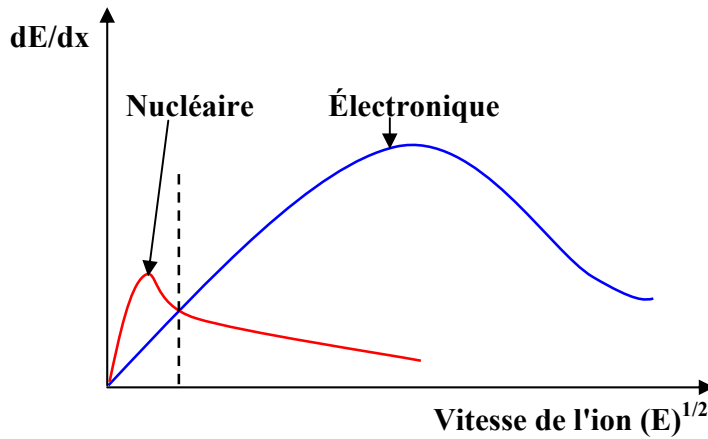


Figure I.2: Variation des pertes d'énergie nucléaire et électronique en fonction de la vitesse d'ion.

I.3.1.3. Expression de la perte d'énergie:

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

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

$$N.d\sigma(E,T)dx \quad (\text{I-3})$$

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 :

$$-dE(T) = N.T.d\sigma(E,T)dx \quad (\text{I-4})$$

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} [4]:

$$-\frac{dE}{dx} = N \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} T \cdot d\sigma(E, T) \quad (\text{I-5})$$

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.

1.3.1.3.1. Grande vitesse : domaine de la perte d'énergie électronique:

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 [4].

1.1. Perte d'énergie nucléaire:

Soit 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)) : $b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E} \cot\left(\frac{\theta}{2}\right)$ (I-6)

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

$$d = 2b \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{I-7})$$

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

$$T = T_{\max} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{I-8})$$

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

$$T_{\max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (\text{I-9})$$

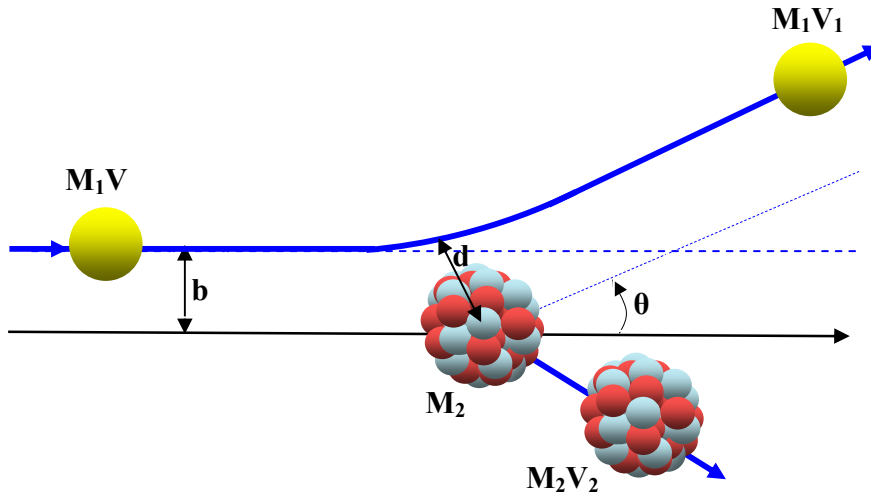


Figure I-3 : Interaction entre deux corps en fonction du paramètre d'impact.

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

$$T = \frac{T_{\max}}{1 + \left(\frac{2b}{d}\right)^2} \quad (\text{I-10})$$

La section efficace différentielle est

$$d\sigma = 2\pi b \cdot db \quad (\text{I-11})$$

La perte d'énergie par choc nucléaire s'écrit comme l'équation (I-5), et en intégrant entre les valeurs minimale et maximale de l'énergie transférée, nous obtenons la relation suivante [4] :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{nuc} = 2\pi N \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{M_2 v^2} \ln\left(\frac{T_{\max}}{T_{\min}}\right) \quad (\text{I-12})$$

1.2. Perte d'énergie électronique:

Cette fois, l'interaction a lieu 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-12) est modifiée, la masse M_2 est remplacée par celle de l'électron ainsi que la charge qui devient e au lieu de Z_2e .

La perte d'énergie électronique pour Z_2 électrons devient :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = 2\pi N \frac{Z_2 Z_1^2 e^4}{M_e v^2} \ln\left(\frac{T_{\max}}{T_{\min}}\right) \quad (\text{I-13})$$

L'énergie maximale transférée aux électrons est d'après l'équation (I-9) :

$$T_{\max} \cong 2m_e v^2 \quad (\text{I-14})$$

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 :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n / \left(\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{Z_2 m_e}{M_2} \approx \frac{1}{3600} \quad (\text{I-15})$$

et par conséquent : $\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \gg \left(\frac{dE}{dx}\right)_n$

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 [4].

1.3.1.3.2. Faible vitesse : 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 :

$$V\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (\text{I-16})$$

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 :

$$a = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} a_0 \left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{I-17})$$

Avec $a_0 = 0.53$ Å rayon de Bohr (voir chapitre III).

2.1. Perte d'énergie électronique:

A partir de ce potentiel écranté, Lindhard, Scharff et Schiott ont élaboré une théorie (dite théorie LSS) [11] qui permet de donner une expression analytique de la perte d'énergie électronique :

$$\left(\frac{dE}{dx} \right) = \frac{8N\pi e^2 a_0 Z_1^{7/6} Z_2 v_1}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{3/2} v_0} \quad (\text{I-18})$$

Cette formule montre que la perte d'énergie varie comme la vitesse du projectile V_1 et donc comme $E^{1/2}$ [4].

2.2. 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-6), dont la fonction d'écrantage est égale à :

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{a}{2r} \quad (\text{I-19})$$

d'où le potentiel d'interaction :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2 a}{2r^2} \quad (\text{II-20})$$

On sait que l'énergie maximale transférée est :

$$T_{\max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (\text{I-21})$$

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

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \frac{\pi^2 NZ_1 Z_2 e^2 a M_1}{2(M_1 + M_2)} \quad (\text{I-22})$$

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

$$\varepsilon = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E \frac{4\pi\varepsilon_0 a}{Z_1 Z_2 e^2} \quad (\text{I-23})$$

et une longueur réduite ρ :

$$\rho = x N M_2 4\pi a^2 \frac{M_1}{(M_1 + M_2)^2} \quad (\text{I-24})$$

La perte d'énergie avec ces variables devient :

$$\frac{dE}{dx} = a N Z_1 Z_2 e^2 \frac{M_1}{M_1 + M_2} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \quad (\text{I-25})$$

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. [12], cette perte d'énergie peut s'écrire:

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = \frac{1.7\varepsilon^{1/2} \log(\varepsilon + e)}{1 + 8.6\varepsilon + 3.4\varepsilon^{3/2}} \quad (\text{I-26})$$

Cette relation reste la même quel que soit le couple projectile-atome cible. C'est une fonction universelle de la perte d'énergie nucléaire [4].

I.3.2. Les grandes catégories de rayonnements:

A. Rayonnements chargés:

- Particules chargées légères β^\pm ; μ^\pm ; e^\pm
- Particules chargées lourdes: protons; deutons : d^+ ; α^{++} ; π^\pm ..
- Fragments lourds de fissions _ ions lourds

B. Rayonnements neutres :

- Neutrons : n ; Neutrinos : ν
- Pions : π^0 .

C. Rayonnements électromagnétiques (EM):

- RX et $R\gamma$ [10].

A. Interactions entre Rayonnements chargés et matière:

Lors de leur passage dans la matière, les particules chargées perdent leur énergie par collisions inélastiques et élastiques avec les électrons et les noyaux atomiques du milieu ralentisseur. La perte d'énergie totale est la somme de ces deux contributions : pouvoir d'arrêt électronique et nucléaire [9].

Les rayonnements chargés sont formés de deux types de particules: *Particules chargées légères* et *Particules chargées lourdes*

A.1. Particules chargées légères:

Trois processus jouent un rôle important dans l'interaction des électrons avec la matière. Il s'agit de:

- la diffusion inélastique sur les électrons atomiques (diffusion de Möller).
- la diffusion élastique sur les noyaux (diffusion de Mott).
- la diffusion inélastique sur les noyaux (Bremsstrahlung)

La diffusion de Möller est en principe similaire à la diffusion étudiée pour les particules chargées. La diffusion de Mott s'apparente à la diffusion de Rutherford, avec les électrons qui ont généralement des vitesses relativistes. Le traitement de cette diffusion au niveau relativiste a été effectuée par Mott. Lorsque l'électron passe à proximité du noyau, il subit une accélération qui peut causer l'émission d'un photon. Cette émission s'appelle le **rayonnement de freinage** ou Bremsstrahlung [14].

A.2. Particules chargées lourdes:

Les particules chargées lourdes sont tout simplement l'ensemble de toutes les particules chargées, à l'exception des électrons (et positrons). On peut en citer quelques unes, tel le proton, la particule alpha (noyau d'hélium) et les ions lourds. Le passage d'une particule chargée dans la matière a deux effets principaux qui sont la perte d'énergie par la particule et une déflexion de la trajectoire de la particule. Les processus qui gouvernent le freinage des particules chargées dans la matière sont extrêmement complexes. Nous nous bornerons à une approche simplifiée. Processus peuvent en principe entrer en ligne de compte pour freiner une particule chargée:

- Collisions inélastiques avec les électrons atomiques.
- Collisions inélastiques avec un noyau.
- Collisions élastiques avec les électrons.

- Collisions élastiques avec les noyaux [14].

A.3. 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 [15].

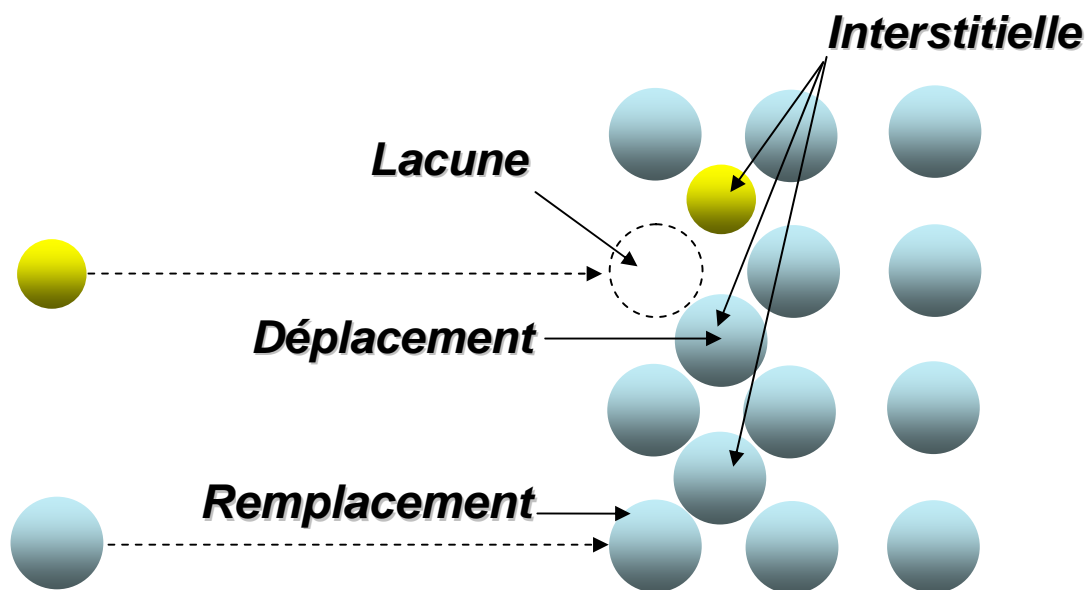


Figure I-4 : une représentation des défauts créés dans la cible.

A.4. Les différentes énergies des atomes cibles:

- $E_{dép}$ (E_d) = **énergie de déplacement**, 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.
- $E_{réseaux}$ = **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 de réseaux. 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 cassé. Cette énergie est très importante pour pulvériser (déplacement des atomes extérieurs) [15].
- E_{final} = **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 petit comme un ion ralenti.

Pour des cibles de silicium, les valeurs par défaut sont : $E_{dép} = 25\text{eV}$, $E_{réseaux} = 2\text{ eV}$,
 $E_{surf} = 4.7\text{eV}$ et $E_{final} = 2\text{eV}$.

Lorsqu'un atome mobile frappe un atome cible, et lui transfère plus que l'énergie de déplacement ($E_{dép}$), l'atome cible sera éjecté 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 réseaux alors que l'atome frappé se déplace. Ceci s'appelle une **Collision de remplacement**. Ce mécanisme peut réduire toutes les lacunes jusqu'à 30% [15].

A.5. les différents éléments pour 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 :

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

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

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 a 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* [15].

B. Interactions entre Rayonnements neutres et matière:

Le neutron n'est pas chargé et n'est donc pas sensible à l'interaction de Coulomb avec les électrons et noyaux de la matière. De ce fait, sa principale interaction avec la matière a lieu au moyen de l'interaction forte. Ces réactions sont bien sûr beaucoup plus rares, de part le fait que l'interaction forte n'interagit qu'à très courte distance. Le neutron doit se trouver à environ 10^{-13} cm d'un noyau pour entrer en interaction.

Lorsque le neutron interagit, une diffusion élastique se produit avec les noyaux du type $A(n,n)A$ qui est la principale source de ralentissement des neutrons, soit une collision inélastique du type $A(n,n')A$ qui excite les noyaux. Une autre réaction possible est la capture radiative de neutron, $n + (Z, A) \rightarrow \gamma + (Z, A + 1)$ ou bien la fission nucléaire. La section efficace totale est; bien sûr la somme de toutes les réactions possibles [14].

C. Interactions entre Rayonnements électromagnétiques (EM) et matière:

Les photons sont classés d'après leur origine et non d'après leur énergie.

- **rayons X caractéristiques:** transitions entre les orbites des électrons.
- **rayons X continus:** accélération de particules chargées (Bremsstrahlung).
- **rayons γ :** origine nucléaire.
- **rayons d'annihilation:** issus de la combinaison d'un positron et d'un électron par exemple.

L'interaction d'un photon avec la matière est supposée indépendante de son mode de formation. Les interactions peuvent avoir lieu avec les électrons atomiques, les nucléons, le champ électrique des noyaux et des électrons, le champ de mésons qui entourent les nucléons. Les effets de l'interaction peuvent être une absorption totale, une diffusion élastique ou inélastique. On peut bien sûr combiner les interactions et leurs effets, de telles sortes que nous avons beaucoup de combinaisons possibles. Les trois principales interactions à étudier sont [14]:

C.1. L'effet photoélectrique :

Le photon γ d'énergie $h\nu$ transmet toute son énergie à un électron situé sur une couche profonde dont l'énergie de liaison est E_L . L'électron sera éjecté avec une énergie cinétique E_2 si [16]: $h\nu > E_L$, $E = h\nu - E_L$

C.2. L'effet Compton :

Le photon incident est dévié à la suite d'une collision élastique avec un électron (quasi-libre) des couches externes d'un atome de la cible. L'électron éjecté emporte avec lui une énergie cinétique égale à celle perdue par le photon incident [16].

C.3. La production de paires électron-positon :

Si le photon possède l'énergie équivalente en masse de deux électrons (c'est-à-dire 2×511 keV), il peut interagir avec un noyau ou un électron de la cible et disparaître en produisant une paire électron-positon. Le positon est généralement annihilé par un électron, ce qui génère deux photons γ d'annihilation d'énergie 511 keV qui se déplacent en sens opposé selon une même direction [16].

Ces réactions expliquent les deux principales différences qualitatives entre les interactions des photons ou celles des particules chargées. Essentiellement, les photons sont nettement plus pénétrants que les particules chargées et l'énergie d'un faisceau de photon n'est pas dégradée lors d'un passage à travers la matière, seule son intensité est diminuée.

I.4. Détection des rayonnements:

Le principe physique de la détection des rayonnements est basé sur leur interaction avec la matière constituant le détecteur. On classe ces détecteurs en deux grandes catégories :

- Les détecteurs visuels pour lesquels une interaction conduit directement à la création de traces (endommagement) individuelles observables par perte d'énergie et par changement local de l'organisation structurale du matériau.
- Les détecteurs électroniques qui exploitent l'ionisation ou l'excitation atomique lors de l'interaction avec la matière permettant l'analyse électronique de l'énergie des rayonnements [9].

Chapitre II

La méthode de Monte Carlo

Chapitre II

La méthode de Monte Carlo

II.1. Introduction à la méthode de Monte Carlo:

La méthode de Monte Carlo (MC) doit son nom à Métropolis et Ulam qui les premiers ont décrit l'utilisation de cette méthode dans le cadre de calculs liés au projet Manhattan de conception des premières bombes atomiques (1944) [17,18].

La méthode MC fait appel à des nombres aléatoires pour résoudre un problème. Elle constitue un outil mathématique très général, dont le champ d'application est très vaste ; les problèmes résolus sont, entre autres : intégration d'équation différentielle, inversion de matrice, simulation des phénomènes physiques complexes tel que le transport de particules (neutrons, électrons, photons...) dans l'atmosphère de la terre et la simulation des processus subatomique dans des expériences de grande énergie, mécanique des fluides, mathématiques financières...

Les résultats obtenus par une méthode de Monte Carlo sont exacts au sens statistique, c.-à-d. qu'ils présentent une certaine incertitude qui diminue avec l'augmentation de la taille des échantillons considérés.

La forme actuelle de la méthode de Monte Carlo appliquée au transport de particules est due à Fermi, Von Neumann et Ulam, qui l'ont développée pour le transport de neutrons. Elle s'appuie sur la simulation du déplacement aléatoire de particules soumises à des lois de probabilités résultant de mécanismes microscopiques. Cette méthode fait partie des algorithmes, auxquels ont été adjoints des événements aléatoires, appelés collisions ou interactions.

Dans beaucoup d'applications de Monte Carlo, le processus physique est simulé directement, et il n'y a aucun besoin de noter même les équations qui décrivent le comportement du système. La seule condition est que le système physique (ou mathématique) soit décrit par les *fonctions de densité de probabilité (fonctions de distribution (fd))*, qui seront discutées, avec plus de détail plus tard dans ce chapitre [19].

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 :

- **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 [20].

II.2. Une introduction à la probabilité et aux statistiques:

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 [20]:

- _ $0 \leq P_k \leq 1$
- _ 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 E_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):

Dans de nombreuses expériences les observations sont des nombres (taille, poids, etc.) D'autre part, lorsque le résultat d'une expérience n'est pas numérique, il convient souvent d'y associer un nombre. Cette association est une "variable aléatoire" [21]. Nous définissons une variable aléatoire comme vrai nombre x_i qui est assigné à un événement E_i . Les variables aléatoires sont utiles parce qu'elles permettent la quantification des processus aléatoires, et elles facilitent des manipulations numériques, telles que la définition de l'écart type moyenne, pour être présentée. Par exemple, si on tirait des boules de couleurs différentes d'une cuvette, il serait difficile d'envisager une couleur « moyenne », bien que si des nombres étaient assignés aux différentes boules colorées, alors une moyenne pourrait être calculée. D'une part, dans beaucoup de cas de vrai intérêt, il n'y a aucune manière raisonnable d'assigner un vrai nombre aux résultats du processus aléatoire, tels que les résultats de l'interaction entre un neutron 1eV et un noyau uranium-235 nucléons, qui pourraient mener à la fission, capture, ou disperse. Dans ce cas-ci, La définition d'une « moyenne » de l'interaction n'a pas de sens, et assigner un nombre réel au processus aléatoire ne nous aide pas à cet égard. Néanmoins, dans la discussion suivante, nous avons implicitement supposé qu'un nombre réel x_i a été assigné à l'événement E_i que nous savons se produit avec la probabilité P_i . Ainsi, on peut essentiellement indiquer que la v.a x_i se produit avec la probabilité P_i .

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

La valeur moyenne s'appelle *la valeur d'espérance* pour la variable aléatoire x , 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 » de la v.a, les moments plus élevés

d'une v.a x sont comme suit : $E(x^n) = \bar{x}^n$ (II-3)

Nous définissons également les moments « centraux » qui expriment la variation d'une v.a au sujet de son moyen, par conséquent « corrigés pour le moyen » :

$$n^{\text{ème}} \text{ moment central} = \overline{(x - \bar{x})^n} \quad (\text{II-4})$$

Le premier moment central est zéro. Le deuxième moment central est la *variance* :

$$\text{variance} \equiv \text{var}(x) \equiv \sigma^2(x) = \overline{(x - \bar{x})^2} = \sum_i p_i (x_i - \bar{x})^2 \quad (\text{II-5})$$

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

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

II.2.2. Variables aléatoires continues:

Jusqu'ici nous avons considéré seulement la v.a 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.

Pour un angle entre 0 et 2π , la probabilité d'obtenir exactement un angle spécifique est zéro, parce qu'il y a un nombre infini d'angles à choisir, et il serait impossible de choisir exactement l'angle correct. Par exemple, la probabilité de choisir l'angle $\theta = 1.34$ radian doit être zéro.

Remarque: Les définitions ci-dessus pour la v.a discret peuvent être facilement généralisées au cas continu [20].

II.2.2.1. La fonction de distribution (fd):

La signification de la fonction de distribution $f(x)$ est la probabilité de $f(x)dx$ pour que la v.a soit écrit dans l'intervalle $(x, x+dx)$, comme :

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

C'est une définition opérationnelle de $f(x)$. Puisque $f(x)dx$ est sans unité (c'est une probabilité), alors $f(x)$ a des unités inverses de la v.a, par exemple, 1/cm ou 1/s ou 1/cm², selon

les unités de x . La figure (II.1) montre une fonction de distribution typique $f(x)$ et illustre l'interprétation de la probabilité de trouver la v.a dedans $(x, x+dx)$ avec la zone sous la courbe $f(x)$ de x à $x+dx$.

Nous pouvons également déterminer la probabilité de trouver la v.a 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:

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

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

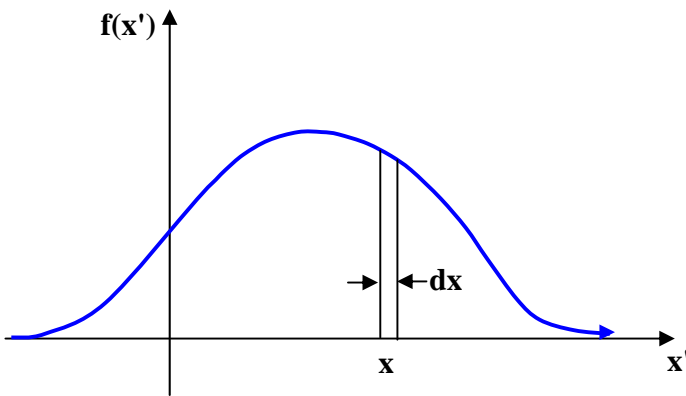


Figure (II.1): typiques de la fonctions de distribution.

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

La fonction de distribution cumulative donne la probabilité que la v.a 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 :

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

La figure (II.2) illustre une *fdc* représentative.

Notez la dépendance de $F(x)$ comme $x \rightarrow \pm\infty$. Puisque $F(x)$ est l'intégrale indéfinie de $f(x)$, $f(x) = F'(x)$. La *fdc* peut également être définie pour une *fd* discret [20].

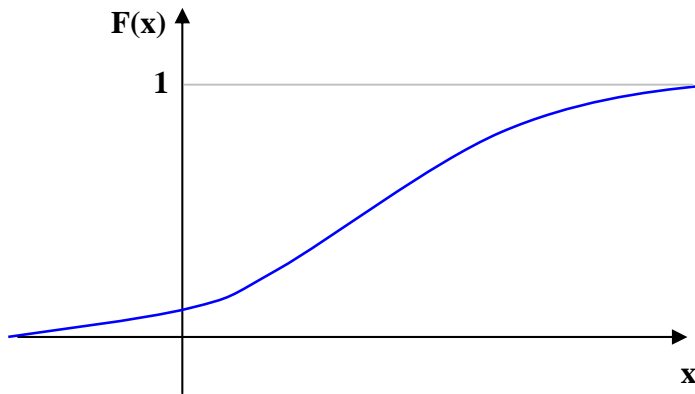


Figure (II.2): La fonction de distribution cumulative représentative.

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) :

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

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

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 \bar{x} et \bar{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 connue, et le but de la simulation de Monte Carlo sera estimé le moyen vrai. [20].

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

Comparez ces définitions pour une **fd** continue aux définitions précédentes pour le moyen et la variance pour une **fd** discrète, données dans les équations (II-1) et (II-5) où (L'indice inférieur « **d** » correspond à « discrète ») [20]:

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

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

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

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

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

II.2.3. Exemple des *fd* continues:

II.2.3.1. Distribution exponentielle:

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

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 x 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.

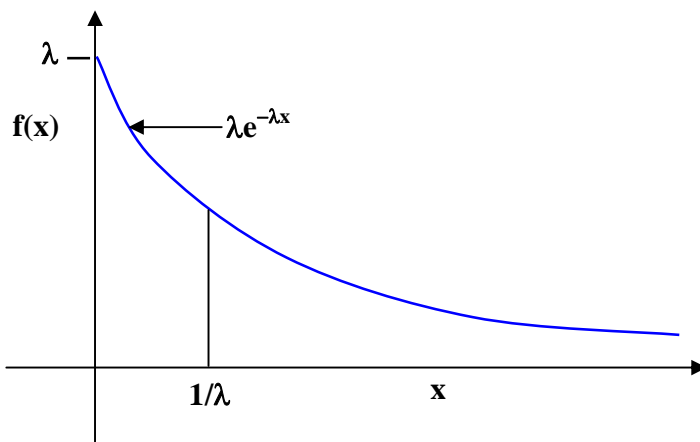


Figure (II.3): fonction de distribution exponentielle.

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 :

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

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

La figure (II.3) représente la distribution exponentielle.

Notez que l'écart type de la distribution exponentielle est [20]:

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

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*).

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

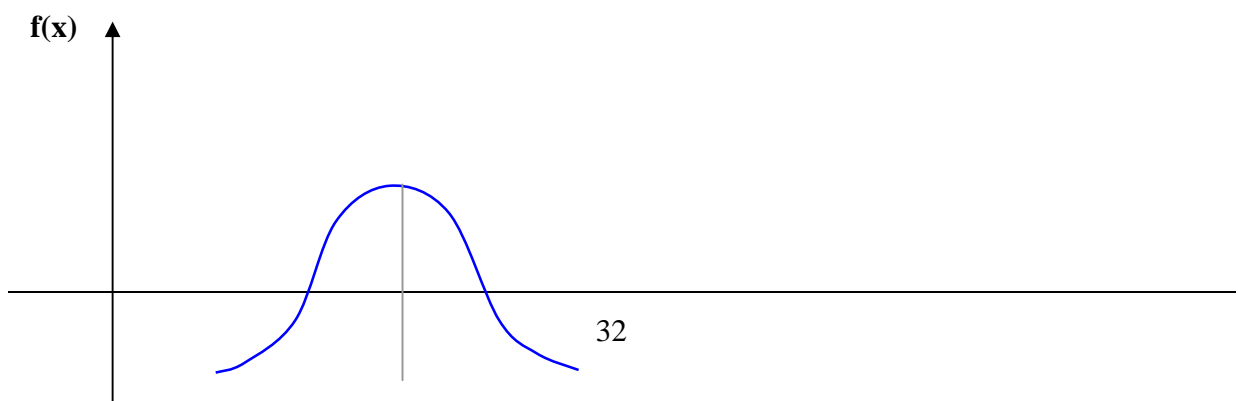
Calculons la probabilité qu'un échantillon de la distribution gaussienne fera partie d'un écart type simple σ du moyen μ :

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

De même, la probabilité que l'échantillon est à moins de deux écarts type moyen (dans " 2σ ") 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 σ , et plus de 95% des échantillons fera partie de deux σ du moyen μ .



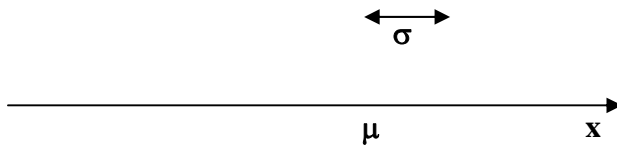


Figure (II.4): fonction de distribution gaussienne.

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 [20].

II.2.3.3. Intégration de Monte Carlo:

Nous voudrions évaluer l'intégrale définie suivante:

$$I = \int_a^b g(x) dx \quad (\text{II-28})$$

Nous supposons que $g(x)$ est une valeur réelle sur $(-\infty, \infty)$. La figure (II.5) représenté une intégrale typique à évaluer.

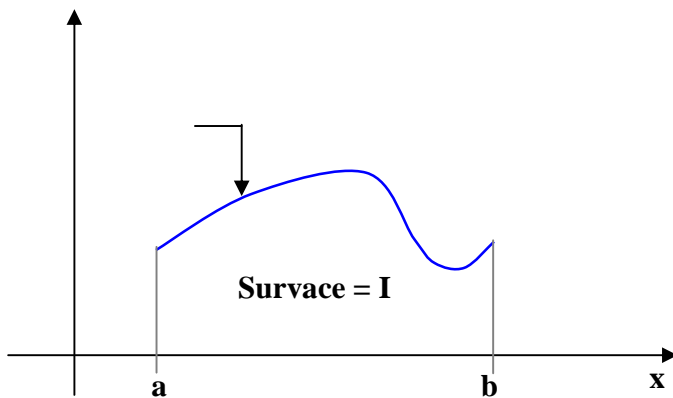


Figure (II.5): Intégration de Monte Carlo.

L'idée est de manoeuvrer l'intégrale définie dans une forme qui peut être résolue par Monte Carlo. Pour faire ceci, nous définissons la fonction suivante sur $[a, b]$,

$$f(x) = \begin{cases} 1/(b-a), & a \leq x \leq b \\ 0 & \text{pour les autres cas} \end{cases} \quad (\text{II-29})$$

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

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

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 $g(x)$:

$$I = \frac{1}{b-a} \int_a^b g(x)f(x)dx = \frac{1}{b-a} \bar{g} \quad (\text{II-31})$$

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. Transformation des fd:

Afin d'avoir une discussion complète d'échantillonnage, nous devons expliquer les règles de transformation pour des **fd** c'est-à-dire, donné une fonction de distribution $f(x)$, on définit une nouvelle variable $y = y(x)$, et le but est de trouver la **fd** de $g(x)$ qui décrit la probabilité que le v.a y se produit.

Tout d'abord, nous devons limiter la transformation $y = y(x)$ pour être une transformation unique, parce qu'il doit y avoir un rapport 1 à 1 entre x et y afin de pouvoir déclarer qu'une valeur indiquée de x correspond clairement à une valeur de y , Donné que $y(x)$ est 1 à 1, puis ça doit être monotone croissante ou monotone décroissante. D'abord supposons que la transformation $y(x)$ est monotone croissante, qui résulte dedans $dy/dx > 0$ pour tous les x . Physiquement, la transformation mathématique doit conserver la probabilité, c.-à-d., la probabilité de la v.a x' apparent dans dx qui concerne x doit être identique que la probabilité de la v.a. y' se produisant dedans dy environ y , depuis si x se produit, du rapport 1 à 1 entre x et y rend nécessaire qui y apparaît. Mais par la définition des **fd** de $f(x)$ et $g(y)$.

$$f(x) dx = prob(x \leq x' \leq x + dx)$$

$$g(y)dy = \text{prob}(y \leq y' \leq y + dy)$$

La transformation physique implique que ces probabilités doivent être égales. Le figure (II.6) illustre ceci par exemple une transformation $y = y(x)$ (transformation de l'égalité de ces rendements différentiels de probabilité).

$$f(x)dx = g(y)dy \quad (\text{II-32})$$

et on peut alors résoudre pour: $g(y)$

$$g(y) = f(x) / [dy/dx] \quad (\text{II-33})$$

Ceci se tient pour la fonction croissante monotone $y(x)$.

Il est facile de prouver que la fonction $y(x)$ monotone décroissante pour $dy/dx < 0$ où pour tous x , le fait que $g(y)$ doit être positif (par définition de la probabilité) mène à l'expression suivante:

$$g(y) = f(x) / [-dy/dx] \quad (\text{II-34})$$

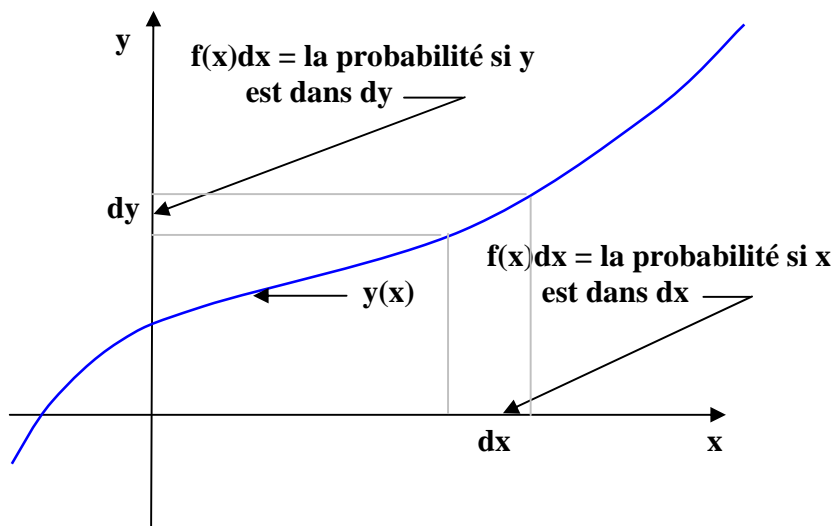


Figure (II.6): Transformation des fonctions de distributions.

La combinaison des deux dernier eq. Mène à la règle simple suivante pour transformer des fd [20]:

$$g(y) = f(x) / |dy/dx| \quad (\text{II-35})$$

II.3.2. l'échantillonnage par l'intermédiaire de l'inversion du *fdc* :

Lorsque la v.a x et la *fdc* de $F(x)$ avoir un rapport 1 à 1, on peut prélever x le premier prélèvement $y = F(x)$ et puis en résolvant par inverser $F(x)$, où $x = F^{-1}(x)$. La *fdc* est uniformément distribuée à l'intervalle $[0,1]$, qui est dénotée $U[0,1]$. Par conséquent, nous utilisons simplement un générateur à nombre aléatoire (*RNG*) qui produit des nombres dans $U[0,1]$, pour produire d'un échantillon ξ provenant de la *fdc* $F(x)$. Alors la valeur de x est déterminée par l'inversion, $x = F^{-1}(\xi)$. Ceci est exposé graphiquement sur la figure (II.7). L'inversion n'est pas toujours possible, mais en beaucoup de cas importants l'inverse est facilement obtenu.

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, june 1987]. Ce s'appelle parfois « la règle d'or pour l'échantillonnage ». Les étapes pour prélever par l'inversion de la *fdc* [20]:

Étape 1: prélevez un nombre aléatoire $\xi \in U[0,1]$

Étape 2: Egalisez ξ avec la *fdc* : $F(x) = \xi$

Étape 3: pour Inversez la *fdc* et la résoudre pour x : $x = F^{-1}(\xi)$

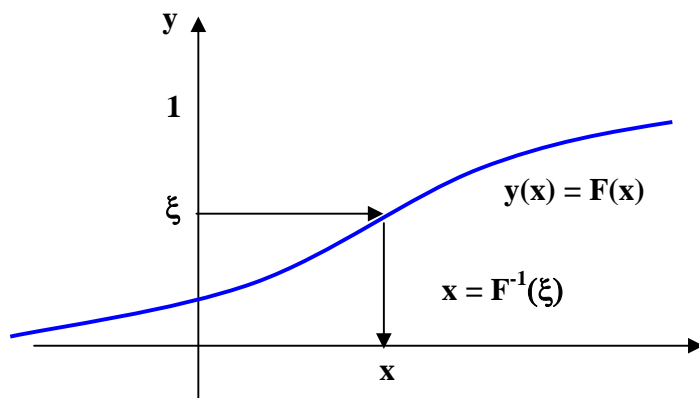


Figure (II.7): l'échantillonnage en utilisant l'inverse de la *fdc*.

Chapitre III

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

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

III.1.Introduction:

Les formalismes de **Monte Carlo** pour un programme qui calcule le ralentissement et la dispersion des ions dans des cibles amorphes sont présentés par l'analyse des formules fondées sur la théorie du transport.

Cette méthode consiste de suivre l'histoire d'un grand nombre d'ions individuels ou de particules dans une cible. Chaque histoire commence avec une énergie, une position et une direction donner à la particule. La particule est supposée changer de direction à la suite de Collisions nucléaires binaires et de passer directement en libre parcours entre les collisions. L'énergie est réduite à la suite des pertes d'énergie nucléaires et électroniques, et l'histoire est terminée lorsque l'énergie descend en dessous d'une valeur préétablie, ou lorsque la position de la particule est en dehors de la cible. La cible est considérée comme amorphe, avec des endroits des atomes au hasard, 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. Aussi, les réactions nucléaires ne sont pas incluses [22].

Les pertes d'énergie nucléaire et électronique ou pouvoirs d'arrêt sont supposées être Indépendants. Ainsi, les particules perdent de l'énergie en quantités discrètes dans les collisions nucléaires et perdent de l'énergie d'une façon continue pour des interactions électroniques. Pour les faibles énergies, où la dispersion nucléaire et la perte d'énergie sont particulièrement importantes, le programme utilise le modèle analytique mentionné ci-dessus base sur le Potentiel interatomique de Molière [23]. Le potentiel de Coulomb non écranté a été suffisant pour cette diffusion à hautes énergies. A faible énergie, la perte d'énergie électronique est basée sur la vitesse de traitement dépendant de Lindhard et Scharff [24], et à hautes énergies utilisant la formulation de Bethe-Bloch. Le modèle d'interpolation de Biersack [25,26] est utilisé pour combler l'écart entre les régions (zone) à basses et à hautes énergies.

III.2. Le potentiel interatomique:

La reproduction de l'interaction entre deux atomes chargés Z_1e et Z_2e a donné lieu à différentes formulations mathématiques. Une méthode consiste à donner une forme générale au potentiel, son expression comportant des paramètres ajustables. Nous nous limitons dans cette thèse au cas d'une collision binaire. Parmi les potentiels existants répondant à ce critère, se distinguent le groupe des potentiels écrantés de Coulomb, le plus communément employé, mais également les potentiels répulsifs de type Born-Mayer [27].

III.2.1. Potentiels de Born-Mayer :

Ils se présentent sous la forme suivante :

$$V(r) = C_{BM} e^{-r/a_{BM}}$$

où C_{BM} est une constante d'énergie, et a_{BM} un rayon d'écrantage. Andersen et Sigmund ont proposé un ensemble « universel » de paramètres tels que :

$$a_{BM} = 0.219 \text{ \AA} , C_{BM} = 52(Z_1 Z_2)^{3/4} eV$$

Les potentiels de type Born-Mayer ont été si souvent utilisés [27].

III.2.2. Potentiels écrantés de Coulomb :

Le potentiel coulombien écranté est le produit entre le potentiel coulombien et la fonction de Thomas-Fermi d'écrantage. Il a été calculé numériquement. Des expressions empiriques ont été proposées pour son utilisation (Gombas, Firsov, Lindhard, Molière, ZBL (Ziegler, Biersack et Littmark)...).

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

où $V\left(\frac{r}{a}\right)$ Le potentiel coulombien écranté , $\Phi\left(\frac{r}{a}\right)$ la fonction d'écrantage , « a » est le rayon d'écrantage.

Φ est souvent approximée par:

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^n c_i \exp\left(-d_i \frac{r}{a}\right) \quad (*)$$

a dépend de Z_1 et Z_2 , il s'écrit:

$$a = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} a_0 (Z_1^x + Z_2^x)^{-\frac{y}{3}}$$

Où a_0 est le rayon de la première orbitale électronique de l'atome d'hydrogène (0.0529 nm). Selon le modèle de Thomas-Fermi $x,y=1$. Firsov(a_F) utilise $x = 1/2$, $y = 2$, tandis que Bohr(a_B) et Lindhard-Scharff (a_{LS})proposent $x = 2/3$, $y = 3/2$:

$$a_B = a_0 \left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$a_F = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} a_0 \left(Z_1^{\frac{1}{2}} + Z_2^{\frac{1}{2}} \right)^{-\frac{2}{3}}$$

$$a_{LS} = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{\frac{2}{3}} a_0 \left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

On utilise l'équation (*) pour calculé **Le potentiel de Molière**:

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = 0.35 \exp\left(-0.3 \frac{r}{a}\right) + 5.5 \exp\left(-1.2 \frac{r}{a}\right) + 0.1 \exp\left(-6 \frac{r}{a}\right)$$

III.3. Dispersion et perte d'énergie nucléaire:

La dispersion 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 dispersion:

Figure (III.1) représente la dispersion, 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 dispersion" 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 . Appartit du triangle de dispersion, on trouve que [22]:

$$\cos \frac{\theta}{2} = \frac{\rho + b + \delta}{\rho + r_0}, \quad \text{avec:} \quad \begin{cases} \rho = \rho_1 + \rho_2 \\ \delta = \delta_1 + \delta_2 \end{cases} \quad (\text{III.1})$$

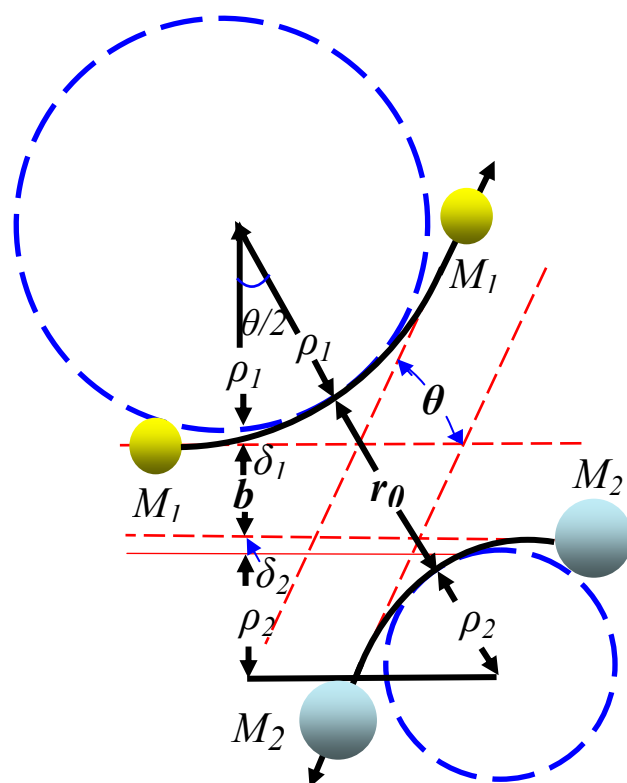


Figure (III.1): Les trajectoires des particules dans le système de CM avec le "triangle de dispersion".

La distance minimale d'approche r_0 est obtenue par la relation:

$$1 - \frac{V(r_0)}{E_c} - \left(\frac{b}{r_0}\right)^2 = 0 \quad (\text{III-2})$$

Où $E_c = E/(1 + M_1/M_2)$ est l'énergie dans le système de CM et $V(r)$ est le potentiel d'interaction entre l'ion incident et l'atome cible. Le rayon de courbure dans le système de CM est obtenu simplement en appliquant la règle élémentaire de la force centrifuge f_c . Donc; pour des particules avec des vitesses V_1 et V_2 dans le système de CM on trouve :

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 = (M_1 v_1^2 + M_2 v_2^2) / f_c \quad (\text{III-3})$$

Où l'énergie cinétique et la force peuvent être exprimées en termes de E_c et V comme suit :

$$\rho = \frac{2[E_c - V(r_0)]}{-V'(r_0)} \quad (\text{III-4})$$

Où $V'(r_0)$ est la dérivé spatial du potentiel évalué à r_0 .

Il est convenable d'exprimer l'énergie E_c en unités de $Z_1 Z_2 e^2 / a$ et la longueur en unités de a . Ainsi, nous introduisons l'énergie réduite ε (sans dimension):

$$\varepsilon = \frac{aE_c}{Z_1 Z_2 e^2} \quad (\text{III-5})$$

Où Z_1 et Z_2 sont les nombres atomiques de la particule incidente et de la cible, respectivement, e est la charge électronique, et a est le rayon d'écrantage, il dépend de Z_1 et Z_2 . (Voir (III.2.2))

On utilise le rayon d'écrantage de Firsov [28], nous définissons :

$$B = b/a, \quad R_0 = r_0/a, \quad R_c = \rho/a \quad (\text{III-7})$$

et $\Delta = \delta/a$

donc, l'éq.1 devient :

$$\cos \frac{\theta}{2} = \frac{B + R_c + \Delta}{R_0 + R_c} \quad (\text{III-8})$$

III.3.2. Formule d'ajustement (fitting) pour Δ :

Dans la limite de haute énergie, les collisions atomiques peuvent être décrites selon le potentiel interatomique de Coulomb non écranté, c-à-d dispersion de Rutherford. Par conséquent, quand ε devient grand la formule de Δ devrait approcher au résultat de Rutherford.

$$\Delta = A \frac{R_0 - B}{1 + G} \quad (\text{III-9})$$

avec

$$A = 2\alpha\varepsilon B^\beta \quad \text{et} \quad G = \gamma \left[(1 + A^2)^{1/2} - A \right]^{-1} \quad (\text{III-10})$$

ou

$$\alpha = 1 + C_1 \varepsilon^{-1/2}, \quad \beta = \frac{C_2 + \varepsilon^{1/2}}{C_3 + \varepsilon^{1/2}}, \quad \gamma = \frac{C_4 + \varepsilon}{C_5 + \varepsilon} \quad (\text{III-11})$$

C_1 - C_5 sont les paramètres d'ajustement à déterminer pour le potentiel d'intérêt. L'équation (III-9) n'est pas une expression unique pour Δ , mais elle a été trouvée dans la procédure d'ajustement dont cette forme contient le facteur $(R_0 - B)$ qui donne le meilleur ajustement et le résultat le plus stable.

on utilise le potentiel écranté de coulomb (chapitre III.2.2) avec $\frac{r}{a} = R$

$$V(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(R) \quad (\text{III-12})$$

Le potentiel de Molière:

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = 0.35 \exp\left(-0.3 \frac{r}{a}\right) + 5.5 \exp\left(-1.2 \frac{r}{a}\right) + 0.1 \exp\left(-6 \frac{r}{a}\right) \quad (\text{III-13})$$

Notez que, comme ε devient suffisamment grand α , β et γ approche de l'unité ($Z_1 Z_2 e^2 / a$) et l'équation (III-9) reproduit la dispersion de Rutherford que l'on désire [22].

$$\sin^2(\theta/2) = [1 + (2\varepsilon B)]^{-1} \quad (\text{III-14})$$

III.3.3. La perte d'énergie nucléaire et la transformation angulaire:

La perte d'énergie nucléaire ou le transfert d'énergie T à l'atome cible dans une seule collision est proportionnel à $\sin^2(\theta/2)$ et est donné par :

$$T = 4M_1 M_2 (M_1 + M_2)^{-2} E \sin^2(\theta/2) \quad (\text{III-15})$$

Le formalisme précédant pour la dispersion nucléaire fournit l'angle de dispersion θ dans le système CM. L'angle de dispersion dans le système de laboratoire est donné par la relation suivante:

$$\psi = \arctan\left\{\left(\sin \theta / [\cos \theta + (M_1 / M_2)]\right)\right\} \quad (\text{III-16})$$

L'angle de dispersion azimutale ϕ est choisi au hasard en utilisant la relation

$$\phi = 2\pi R_n \quad (\text{III-17})$$

où R_n est 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 [22].

$$\cos \alpha_i = \cos \alpha_{i-1} \cos \psi_i + \sin \alpha_{i-1} \sin \psi_i \cos \phi_i \quad (\text{III-18})$$

III.3.4. Distance entre les collisions et la sélection du paramètre d'impact:

• *A hautes énergies*, $\varepsilon \gg 10$ seules quelques interactions dans la cible cause 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 est sélectionne le plus petit paramètre d'impact qui se produit sur la longueur du parcours L , et de négliger les autres collisions ayant des grandes 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 :

$$W_1(b)\delta b = NL2\pi b \delta b \quad (\text{III-19})$$

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

$$W_2(b)\delta b = e^{-NL\pi b^2} \delta b \quad (\text{III-20})$$

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 (a condition aucun atome n'est plus proche), le produit devient:

$$W(b)\delta b = W_2(b)W_1(b)\delta b = e^{-NL\pi b^2} NL2\pi b \delta b \quad (\text{III-21})$$

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

$$b = [-\ln(R_n / \pi NL)]^{1/2} \quad (\text{III-22})$$

à partir des nombres aléatoires R_n qui sont uniformément distribué 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.

$$\frac{M_2}{M_1} \frac{\Delta E_n}{E} = \frac{M_2}{M_1} \frac{LS_n(E)}{E} = \text{constant} \quad (\text{III-23})$$

selon la règle de Bohr [29] et Williams [30]. 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-23) de telle sorte que la déviation moyenne est d'environ 5° par intervalle de parcours L , nous obtenons de l'équation (III-23)

$$L = \frac{0.02[1 + (M_1 / M_2)]^2 \varepsilon^2 + 0.052\varepsilon^{1.32}}{4\pi\alpha^2 N \ln(1 + \varepsilon)} \quad (\text{III-24})$$

• **Pour les faibles énergies**, l'équation (III-24) 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.

$$W(b)\delta b = \begin{cases} 2\pi N^{2/3} b \delta b & \text{for } b < \pi^{-1/2} N^{-1/3} \\ 0 & \text{for } b > \pi^{-1/2} N^{-1/3} \end{cases} \quad (\text{III-25})$$

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-25), conduit à la détermination des paramètres d'impact [22].

$$b = [R_n / (\pi N^{2/3})]^{1/2} \quad (\text{III-26})$$

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 de la 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:

$$\Delta E_e = LNS_e(E) \quad (\text{III-27})$$

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

$$S_L = kE^p \quad (\text{III-28})$$

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

$$k = k_L = \frac{1.21Z_1^{7/6}Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}M_1^{1/2}} eV^{1/2} \text{ \AA} \quad (\text{IV-29})$$

Pour des énergies non relatives cette section d'arrêter peut être exprimé sous la forme.

$$S = \frac{8\pi Z_1^2 e^4}{I_0 \varepsilon_B} \ln \varepsilon_B \quad \text{et} \quad \varepsilon_B = \frac{2m_e v^2}{Z_2 I_0} \quad (\text{III-30})$$

Où m_e est la masse d'électrons et $Z_2 I_0$ est la moyenne d'énergie d'excitation. Le constant de Bloch I_0 peut être représenté par

$$I_0 = \begin{cases} 12+7Z_2^{-1} \\ 9.67+58.5Z_2^{-1.19} \end{cases} \quad \text{pour } z_2 \begin{cases} <13 \\ \geq 13 \end{cases} \quad (\text{III-31})$$

Afin de combler le gap entre les régions de hautes et basses énergies, nous appliquons le modèle d'interpolation proposé par Biersack.

$$S_e = (S_L^{-1} + S_B^{-1})^{-1} \quad (\text{III-32})$$

Avec S_L donnée dans l'équation (III-28) et S_B légèrement différente de l'équation (III-30). Afin d'obtenir un ensemble suffisant approprié aux données expérimentales dans la région de transition:

$$S = \frac{8\pi Z_1^2 e^4}{I_0 \varepsilon_B} \ln(\varepsilon_B + 1 + C / \varepsilon_B), \quad C = 5 \quad (\text{III.33})$$

Pour $Z_1 < 3$, $C = 100Z_1 / Z_2$ est utilisé Dans le programme qui permet d'obtenir un meilleur ajustement aux données expérimentales. La valeur de C n'est pas très critique, car elle entre en jeu seulement à basses énergies. En pourrait envisager d'utiliser la perte électronique, qui

est corrélé avec le paramètre d'impact de chaque collision. Les expressions pour la perte d'énergie électronique en fonction du paramètre d'impact b ou de la distance minimale d'approche r_0 ont été fournies par Firsov [31] et par Oen et Robinson[32]. La dérivation de Firsov assume a peu près la même taille de l'ion et de l'atome cible, et est donc limitée à la validité de $1/4 < Z_1 / Z_2 < 4$

$$\Delta E_e = \frac{4.3 \times 10^{-8} (Z_1 + Z_2)^{5/3} v}{\left[1 + 0.31b(Z_1 + Z_2)^{1/3}\right]^5} \quad (\text{III-34})$$

Où v (cm / s) est la vitesse des ions et b (Å) le paramètre d'impact. Le formalisme Oen et Robinson ont suggéré.

$$\Delta E_e = \frac{0.045k\sqrt{E}}{\pi\alpha^2} e^{-0.3r_0/a} \quad (\text{III-35})$$

Où $K\sqrt{E}$ est la section transversale d'arrêt électronique dans le régime de faible énergie, et le facteur K est choisi, au plus hautes énergies, quand $r_0 \rightarrow b$, tous les arrêts électronique sont récupérés. L'Equation (III-35) a été mise à la disposition comme option dans le programme TRIM.

On préfère le formalisme de Oen et Robinson pour les raisons suivantes:

- Il n'a pas de restrictions dans le rapport Z_1 / Z_2 .
- Il représente la trajectoire réelle d'ions par l'examen d'une approche minimale r_0 plutôt que b
- Il a été constaté que le rendement sur la quantité exacte de straggling électronique total, par rapport aux prédictions théoriques actuelles. En appliquant cette option aux ions légers de faible énergie.

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

IV.5.1 Introduction :

Plusieurs logiciels de simulation numérique sont utilisés pour calculer les phénomènes cinétiques associés aux pertes d'énergie des ions. L'un d'entre eux, SRIM.

- **SRIM** (The Stopping and Range of Ions in Matter): l'arrêt et l'étendue de pénétration des ions dans la matière.

Dont la version accessible sous DOS est appelée TRIM:

- **TRIM** (Transport of Ions in Matter):transport des ions dans la matière.

Ce logiciel (SRIM) est un ensemble de programmes qui permettent de calculer l'arrêt et l'étendue de pénétration des ions dans la matière (jusqu'à 10 GeV). En supposant que l'atome en mouvement est un ion, et que tous les atomes de la cible sont des atomes [33].

Dans ce programme, développé par Ziegler et Biersack [34], le matériau est supposé amorphe. Les calculs sont effectués selon une simulation de type Monte-Carlo, consistant à suivre individuellement un grand nombre des collisions au hasard d'ions. Un ion incident à une trajectoire rectiligne avec des pertes d'énergies électroniques, puis change de direction sous l'influence des collisions nucléaires. Lorsque l'énergie de l'ion est inférieure à son énergie de déplacement E_d , il s'arrête et il y a dissipation d'énergie sous forme de phonons.

Ce programme permet de calculer différents paramètres liés au rayonnement d'ions dans une cible, entre autres :

- la distribution spatiale des ions implantés (profondeur moyenne, dispersion, 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 [35].
- 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 spéciales de TRIM:

On parle de deux discussions séparées:

- Des ions départ avec des énergies, des angles et des profondeurs Variables.
- Le calcul d'endommagement de rayonnement des neutrons/électrons/photons.

III.5.2.1. Des ions départ avec des énergies, des angles et des profondeurs variables:

- a) Calcul des ions de plasma frappant un solide.
- b) Calcul d'un retrait de la surface de pulvérisation.
- c) Calcul des endommagements (dégât) de rayonnement dans les réacteurs en métaux.

Parfois, les utilisateurs souhaitent envisager des ions d'incident avec diverses énergies, divers angles d'incidence et commencer possiblement par des diverses profondeurs. Pour cette application le fichier de données, *TRIM.DAT*, est utilisé. Il peut être employé pour simuler les ions d'un plasma frappant une surface (de divers angles et énergies), par exemple les effets de vent solaire sur les matériaux planétaires. Il peut être utilisé pour simuler une surface de recul avec les ions à partir des profondeurs croissantes, comme les effets de pulvérisation ionique.

III.5.2.2. Endommagement de rayonnement des neutrons/électrons/photons:

TRIM peut être employé pour calculer les cascades de recul en solides excités par les neutrons, les électrons ou les photons (que nous appellerons des particules de NEP). Ces cas sont traités identiquement, avec TRIM évaluant seulement les endommagements de cascade sans n'importe quels endommagements de particules d'incident.

Une nécessité d'obtenir un autre programme pour le transport des particules de NEP par la matière. Les codes employés couramment sont « les séries intégrées de TIGRE », (code de ITS) pour des électrons et photons, ou « le programme de neutron de Monte Carlo » (code de MCNP) pour des neutrons dans la matière. Tous les deux programmes sont fournis par le centre d'information (*the Radiation Shielding Information Center, Oak Ridge National Laboratory*). Les programmes séparés de transport de NEP sont employés pour calculer les collisions qui sont faites dans la cible, et pour donner la position, et les statistiques de recul pour chaque collision atomique. Alors TRIM peut être employé pour calculer toutes les cascades de cible de recul qui se produit de chaque collision atomique de NEP.

Chapitre IV

**Résultat,
Discussions et Conclusions**

Chapitre IV

Résultat, Discussions et Conclusions

IV.1. Présentation de notre travail :

Dans tout ce travail les résultats sont obtenus par le logiciel *SRIM 2006* (une représentation de l'interaction au fond de la cible dans la figure IV.1) et les graphes sont élaborés par le programme originPro 7.5.

On utilise l'ion d'hydrogène H^+ (proton) pour l'interaction avec les composés semi conducteur suivant:GaAs, GaP, InP, InAs, InSb et SiC.

- Les semis conducteurs ont des différentes densités (tableau IV.1).
- Les protons ont des énergies cinétiques de [1à1000] MeV.
- Le nombre des protons incidents est 10^4 .
- La largeur de la cible est infini (100 mètre).
- L'angle incident égal à 0° .
- L'énergie est cinétique dans tout ce chapitre.
- L'unité de Range est en cm.
- $1\text{GeV}=10^3\text{MeV}=10^6\text{KeV}=10^9\text{eV}$.

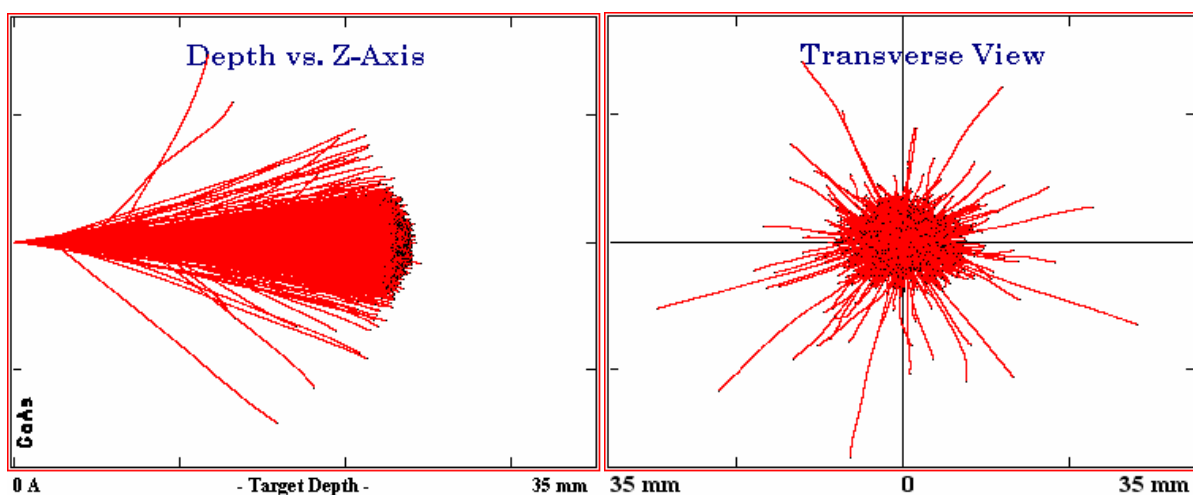


Figure IV.1: une représentation de l'interaction au fond de la cible faite avec le logiciel *SRIM* [rayonnement de proton (avec une énergie= 10^5) sur le GaAs donné des résultats: Parcours d'arrêt moyen $R_m=23,077\text{mm}$, la densité des défauts $D=5,5623.10^2$].

Composés	Densités (g/cm ³)
GaAs Arsénure de Galium	5,3176
GaP Phosphore de Galium	4,1380
InP Phosphore d'Indium	4,8100
InSb Antimoine d'Indium	5,6670
InAs Arsenure d'Indium	5,7747
SiC Carbure de Silicium	3,1660

Tableau IV.1: densités des différents composés [17].

IV.1.1. 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 a la suite de collisions électroniques et nucléaires jusqu'à son implantation, donc le range est la distance parcourue.

- **Parcours d'arrêt moyen R_m (mean Range):** La somme des Parcours d'arrêt par le nombre des ions incidents (pour une énergie donné):

$$R_m = \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{N}, \quad N: \text{le nombre des ions incidents}$$

- **D :** le nombre total des lacunes créées par N ions incidents par unité de parcours d'arrêt moyen par ion incident :

$$D = L / R_m$$

$$\text{où } L = \left(\frac{\text{nombre total de lacune}}{N} \right)$$

- La résistance au rayonnement est exprimée par D où la résistance a une relation inverse avec D .

IV.1.2. 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 ce titre par deux mots **type de cascade (T_c)**, dans tout ce 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)**].

Après, les calculs effectués on trouve que tous les graphes sont généralement de la même forme, donc, pour éviter les répétitions on est obligé de parler globalement des résultats (des graphes).

IV.2. Résultat :

Le calcul commence par une énergie, une position et une direction donnée à la particule incidente (proton) qui interagit avec des cibles composés de type GaAs, GaP, InP, InAs, InSb et SiC. Parmi les paramètres que nous avons calculé le Range et la lacune afin de trouver D pour les deux types de calcul, T_c et T_p (voir figure IV.2, IV.3), avec:

$$D_T = D_c + D_p$$

D_T : la densité totale des défauts.

D_c : la densité des défauts de T_c .

D_p : la densité des défauts de T_p .

L'interaction des protons, de l'énergie environ de un MeV 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, est pour cela D déminée avec l'augmentation de l'énergie et toutes les graphes ont des pentes décroissantes.

IV.2.1 Calcul détaillé des endommagements avec toutes les cascades (T_c):

Les composés représentés par des densités D_c avec une pente décroissante (figure IV.2).

Le composé GaP est le plus résistant que tous les autres composés dans un large intervalle [5 à 1000] MeV et le InP est le plus résistant dans l'intervalle [1 à 2] MeV.

IV.2.2. Distribution des Ions par un calcul rapide d'endommagement (T_p):

Les composés représentés par des densités D_p avec une pente décroissante (figure IV.3).

Le composé SiC est le plus résistant que tous les autres composés dans un large intervalle [20 à 1000] MeV et le InP est le plus résistant dans l'intervalle [1 à 10] MeV.

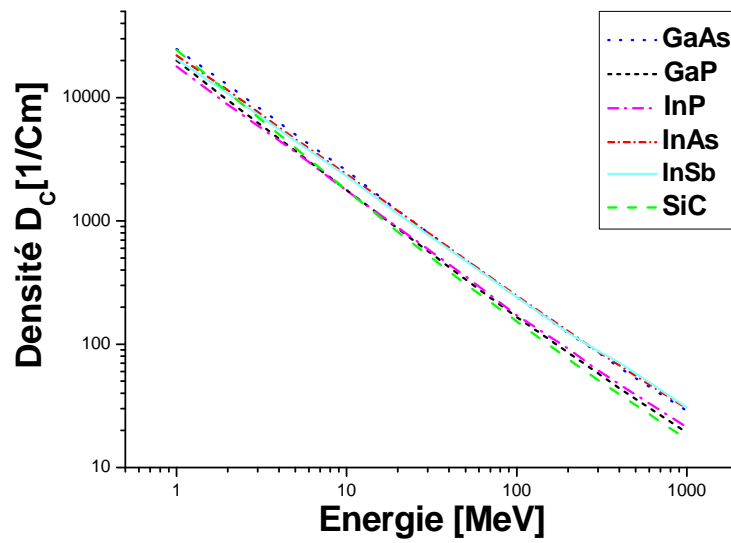


Figure IV.2: La variation de la densité D_c en fonction de l'énergie cinétique des protons pour tous les composés (T_c).

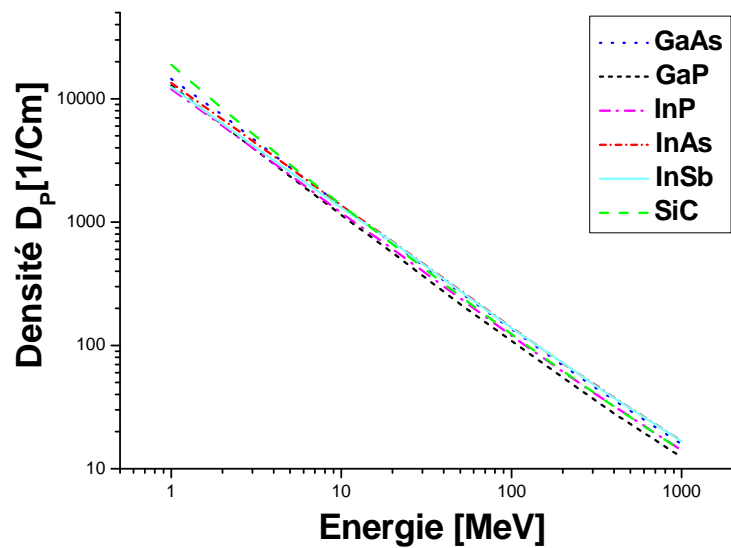


Figure IV.3: La variation de la densité D_p en fonction de l'énergie cinétique des protons pour tous les composés (T_p).

IV.2.3. L'endommagement total:

En réalité les deux types d'endommagement se réalisent en même temps donc, il faut associer les résultats des deux types:

$$D_T = D_p + D_c$$

Après les calculs on obtenu que les graphes des composés représentés par des densités D_T ont des pentes décroissantes et ajustées logarithmiquement (figure IV.4 et IV.5) avec une fonction de la forme:

$$\log(D_T) = A + B \cdot \log(E).$$

E : l'énergie cinétique.

A : l'ordonnée à l'origine.

B : le coefficient directeur.

- A et B sont des grandeurs mesurables (paramètres) permettant de présenter les défauts lacunaires de façon simple.
- L'erreur de A est de 0,9 % à 2.35% et L'erreur de B est de 0,49 % à 1.28%.

Tableau IV.2: Les paramètres A et B pour tous les composés.

Composés	Paramètre A	Paramètre B
GaAs	4,58279	-0,99216
GaP	4,48808	-1,01228
InP	4,54273	-0,96918
InAs	4,46033	-0,98452
InSb	4,51073	-0,95582
SiC	4,57869	-1,05324

Les résultats obtenus:

La résistance du composant SiC est la meilleure à très haute énergie dans un large intervalle d'énergie [102 à 1000] MeV, le GaP est le plus résistant dans l'intervalle [6 à 102[MeV et le InP est le plus résistant dans un intervalle [1 à 6[MeV.

Le InSb est le plus sensible dans l'intervalle [200 à 1000], le InAs est le plus sensible dans l'intervalle [20 à 100], le GaAs est le plus sensible dans l'intervalle [2 à 10], et le SiC est le plus sensible au tour de l'énergie de un MeV (Tableau de classement IV.3).

Ce que attire notre attention c'est que le composant (SiC) est le très sensible aux environs de l'énergie de un MeV qui devient le très résistant à très haute énergie.

Tableau IV.3: Classement des composés par ordre décroissant de résistance de 1 à 6 en fonction de différentes énergies.

L'ordre	1	2	3	4	5	6
Energie du proton(MeV)						
1	InP	GaP	InSb	InAs	GaAs	SiC
2	InP	GaP	InSb	InAs	SiC	GaAs
5	InP	GaP	SiC	InSb	InAs	GaAs
10	GaP	InP	SiC	InSb	InAs	GaAs
[20 à 100]	GaP	SiC	InP	InSb	GaAs	InAs
[100 à 1000]	SiC	GaP	InP	GaAs	InAs	InSb

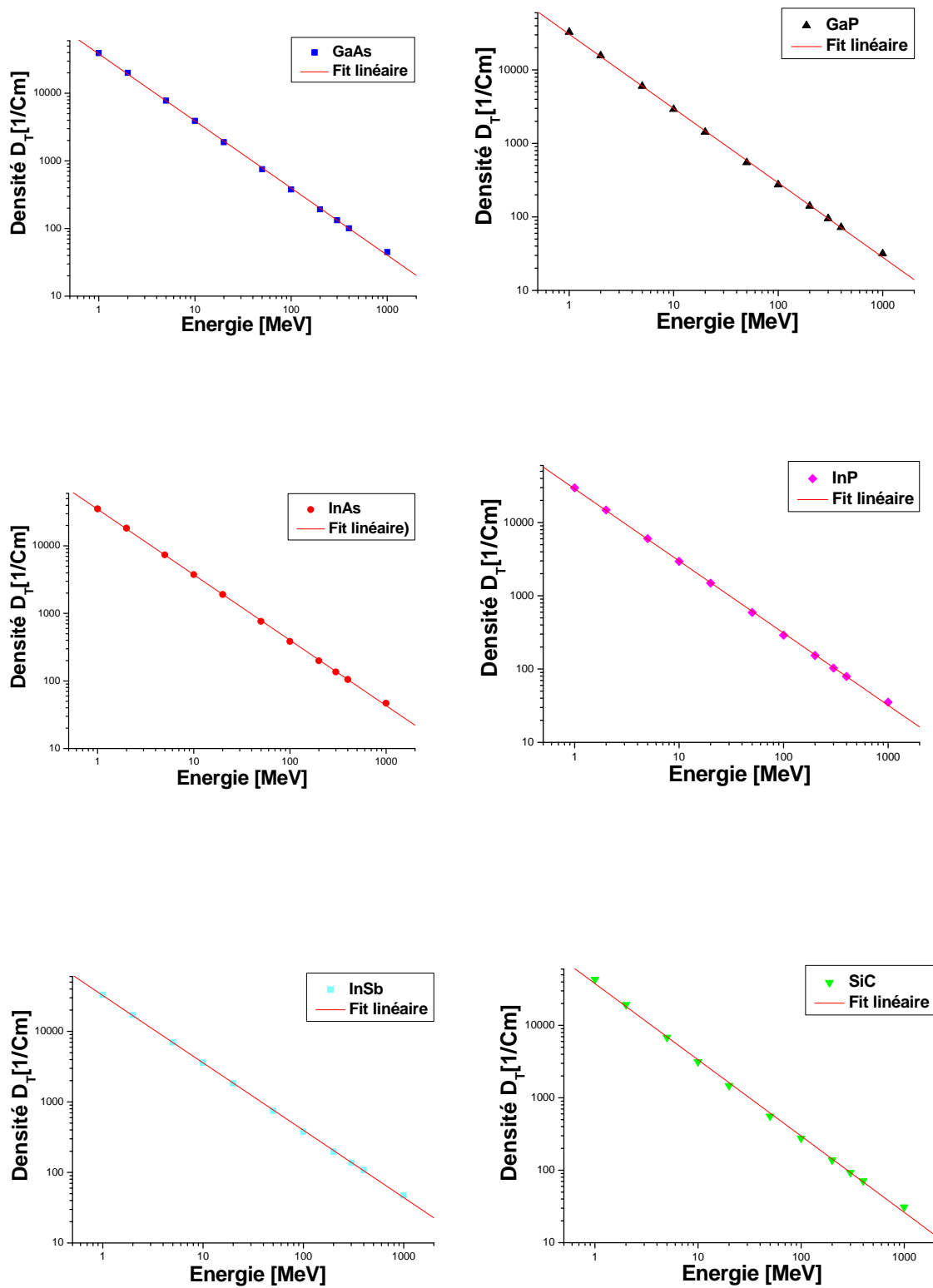


Figure IV.4: Une représentation de la variation de densité D_T par rapport aux énergies cinétique des protons avec une ajustement (endommagement total).

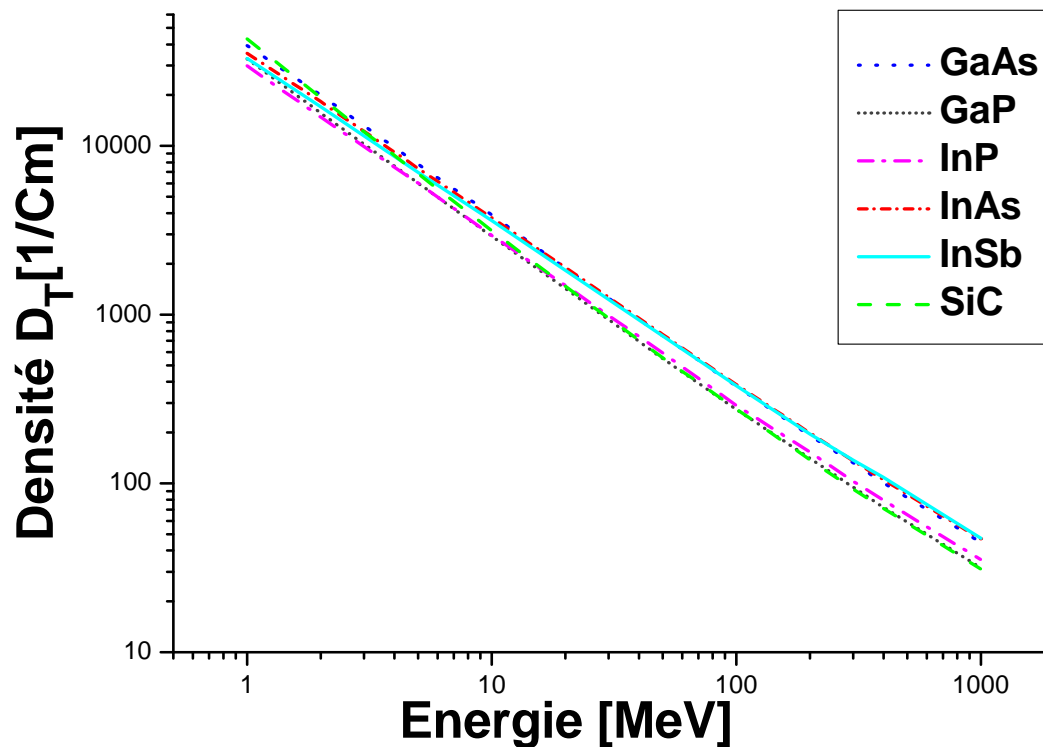


Figure IV.5: Une représentation de la variation de densité D_T en fonction de l'énergie cinétique des protons (endommagement total).

Note:

- A partir des résultats obtenues dans notre travail on suppose qu'on peut utiliser les composés les plus résistants aux rayonnements dans les domaines Sciences et Technologies.

IV.3. Discussion:

IV.3.1. Comparaison entre les résultats trouvés par Les modèles CPD et SRIM:

Après avoir achevé notre travail, on a trouvé une étude analytique appelée CPD. Cette étude est concernée par le calcul des concentrations des défauts des deux composés SiC et Si [40]. Donc on est obligé de comparer les résultats du modèle **CPD** avec ceux obtenus par le code **SRIM** dans le cas du *type de défaut primaire* (T_p).

IV.3.1.1. Le modèle analytique CPD (Concentration of Primary Defects) [41]:

Le traitement de l'interaction entre les particules incident et le matériau peut être effectué du point de vue du projectile (*type de défaut primaire*), ou de la cible (*type de*

cascade). Dans le premier cas, la quantité relative est la perte d'énergie et dans le second cas, les effets des interactions sont décrits par de différentes quantités physiques caractérisant la dégradation des matériaux. Il n'existe pas une quantité physique dédiée à la caractérisation globale des effets des rayonnements dans le domaine des semi-conducteurs. Un choix possible est la concentration des défauts primaires (CPD) par unité de flux de particules incidentes, avec l'introduction des réactions nucléaires [42].

La concentration des défauts primaires a été calculée à partir de l'équation suivante:

$$CPD(E) = \frac{1}{2E_d} \int \sum_i \frac{d\sigma_i}{d\Omega} L(E_{Ri}) d\Omega$$

Où E est l'énergie cinétique de la particule incidente, E_d le seuil d'énergie pour les déplacements dans le réseau, E_{Ri} l'énergie de recul du noyau résiduel, $d\sigma_i/d\Omega$ la section efficace différentielle du processus responsable dans la production du défaut et $L(E_{Ri})$ le facteur de Lindhard = l'énergie déposée par noyau de recul / l'énergie déposée par un électron en ionisation [43].

IV.3.1.2. La comparaison entre les deux modèles pour le cas de Silicium (Si):

Les deux graphes (D_p et CPD) (figure IV.6) ont la même forme mais sont distant l'un par rapport à l'autre. A basse énergie, le D_p a une pente plus décroissante que celle du CPD et à haute énergie, les deux modèles ont des pentes presque plates, donc la question qui se pose est: pourquoi y a-t-il un écart entre ces deux graphes?

- On sait que CPD tient compte des réactions nucléaires alors que SRIM n'en tient pas compte du tout. On veut inclure les défauts créés par les réactions purement nucléaires avec un calcul direct.
- On sait aussi que la section efficace est une grandeur physique, correspondant à la probabilité qu'une interaction se produise pour une réaction donnée de la physique nucléaire ou de la physique des particules.

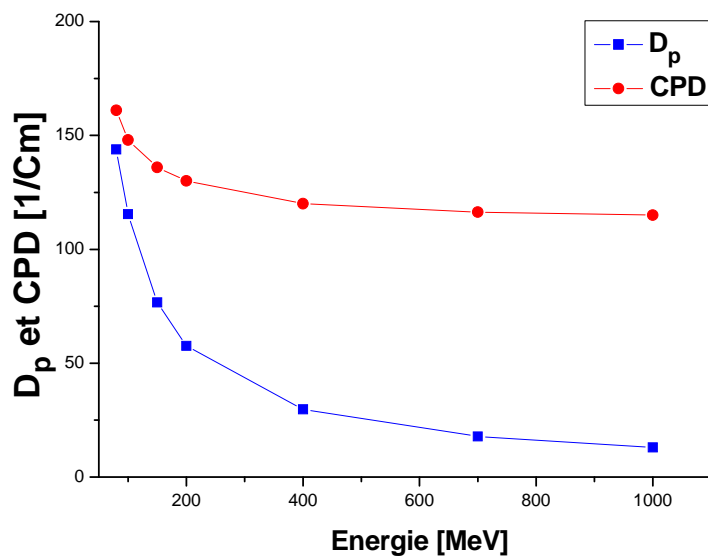


Figure IV.6: Une représentation de la variation de D_p et CPD en fonction de l'énergie cinétique des protons (pour Si)

2.1. Calcul direct de la densité des défauts purement nucléaires D_n :

Pour évaluer la densité des défauts D_n on a besoin de calculer l'intensité et la section efficace (il y a une relation entre la section efficace et l'intensité selon la loi de Berr-Lambert).

L'expérience montre que $-dI$ (figure IV.7) est proportionnel à l'intensité incidente et à l'épaisseur x : $-dI = \mu(E, Mi)I dx$. Le coefficient de proportionnalité $\mu(E, Mi)$, appelé *coefficient d'atténuation linéaire*, dépend de l'énergie E de faisceau incident et du milieu Mi . L'intégration de la dernière relation donne la loi d'atténuation d'un faisceau parallèle en

fonction de l'épaisseur x : $\frac{I(x)}{I_0} = e^{-\mu(E, Mi)x}$ (Loi de Berr-Lambert) [44].

$I(x)$ est l'intensité du faisceau après avoir traversé une épaisseur x de matière et I_0 l'intensité du faisceau incident $I_0 = I(x = 0)$ (figure IV.7).

Une partie de l'intensité du faisceau est réfléchiée, une partie est diffusée, une partie est absorbée et une dernière partie I est transmise et mesurée par le récepteur.

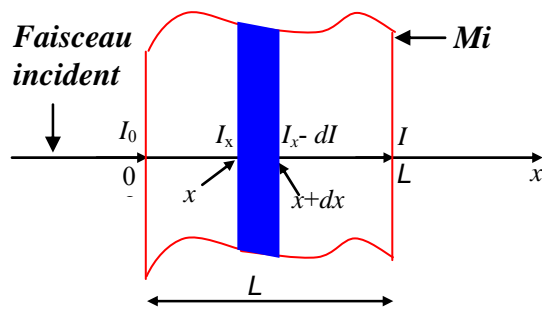


Figure IV.7 : Représente l'intensité du faisceau incident (I_0) et l'intensité résiduelle du faisceau après un parcours de longueur L (I) dans le milieu absorbant [45].

Pour les interactions fortes (à haute énergie) chaque interaction entre particule incidente est matière crée un défaut, et la loi de Berr-Lambert est applicable à condition que:

$$x = R_m \text{ et } \mu = \sigma_n N \text{ où}$$

R_m : le parcours d'arrêt moyen.

N : la densité atomique (nombre d'atomes/cm³).

σ_n : La section efficace totale (nucléaire), avec une unité de surface s'appelle le barn (b) :
 $1 \text{ b} = 10^{-24} \text{ cm}^2$.

$$N = \frac{\rho Na}{M} = 4,98 \cdot 10^{22} \text{ at/cm}^3 \text{ où la densité } \rho = 2,3212 \text{ (gr/cm}^3\text{),}$$

nombre d'Avogadro $Na = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ at/mol}$ et la masse atomique $M = 28 \text{ gr/mol}$

2.1.1. Calcul de la section efficace :

La section efficace a été évaluée par JENDL (numerical data, descriptions, figures and tables of cross sections) [46]. Les résultats de σ_n sont presque constantes (tableau IV.4 et figure IV.8) parce que le rayon de σ_n (R_N) et le rayon de noyau du Si (R_{Si}) sont eux aussi presque égaux. Avec le modèle sphérique du noyau $R_{Si} = R_0 A^{1/3}$ on peut calculer R_{Si} :

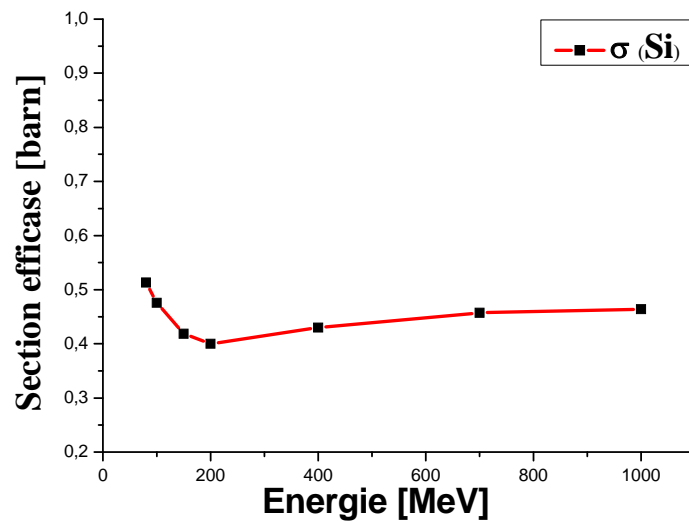
$$\text{Le rayon de Bohr } R_0 = 1,35 \text{ Fermi (F), } A = 28 \text{ gr/mol} \Rightarrow R_{Si} = 4,10 \text{ F,}$$

$$\sigma_n = \pi R_N^2 \Rightarrow R_N = \left(\frac{\sigma_n}{\pi} \right)^{1/2} \text{ Les valeurs de } R_N \text{ sont entre } 3,56 \text{ F et } 4,04 \text{ F (tableau IV.4)}$$

Donc, à hautes énergies, la valeur de la section efficace est très proche de la valeur de la surface (disque) de noyau.

Tableau IV.4: Représente des valeurs de I/I_0 , σ_n et R_N pour des différentes énergies.

Energie (MeV)	I/I_0	σ_n (barn)	R_N (Fermi)
80	0,06953	0,51319	4,04273
100	0,09433	0,47588	3,893
150	0,16227	0,4187	3,65163
200	0,24218	0,4001	3,56961
400	0,60844	0,42993	3,70027
700	0,90537	0,45743	3,8168
1000	0,98139	0,46409	3,84446

Figure VI.8: une représentation de section efficace σ_n en fonction des différentes énergies

2.1.2. Calcul direct d'intensité :

Dans le domaine d'interaction forte l'intensité I est le nombre des ions qui n'interagissent pas avec les atomes cibles (les ions qui ne créent pas des défauts) alors que le reste I' est l'intensité des ions qui interagissent avec le matériau où chaque interaction crée un défaut : $\frac{I'}{I_0} + \frac{I}{I_0} = 1$ et d'après la loi de Berr-Lambert on obtient:

$$\frac{I'}{I_0} = 1 - e^{-\sigma_n N R_m} \quad (\text{tableau VI.4})$$

$\frac{I}{I_0}$: Le rapport de transmission

$\frac{I'}{I_0}$: Le rapport d'absorption ou le rapport des ions qui créent des défauts (tableau IV.4)

2.1.3. Les résultats obtenus:

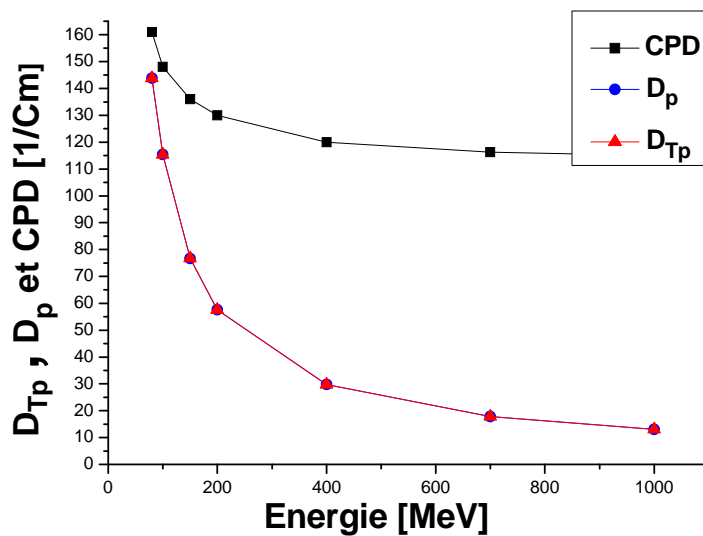
La densité totale des défauts est la somme des deux densités D_p et D_n (figure IV.9 et tableau IV.5) :

$$D_n = \frac{I'}{I_0} / R_m \quad \text{et} \quad D_{Tp} = D_n + D_p \quad (D_{Tp}: \text{la densité totale des défauts primaire})$$

Après les calculs on a trouver que les densités des défauts (D_n) sont négligeable donc, les résultats ne change pas c-à-d les deux graphiques D_{Tp} et D_p sont identiques ($D_{Tp} \approx D_p$) (Tableau IV.5 et figure IV.9). C'est pour cela que SRIM n'a pas inclut D_n dans ses calculs. Les résultats des deux modèles sont différents surtout à haute énergie.

Tableau IV.5: Représente les différentes densité de défaut pour le Silicium.

E (MeV)	CPD [1/cm]	D_p [1/cm]	D_n [1/cm]	D_{Tp} [1/cm]
80	161	143,81775	0,02471	143,84246
100	148	115,3931	0,02261	115,41571
150	136	76,71175	0,01915	76,7309
200	130	57,59577	0,01744	57,6132
400	120	29,74828	0,01392	29,76221
700	116,3	17,86987	0,00877	17,87863
1000	115	13,07505	0,0057	13,08075

Figure IV.9: Une représentation de la variation de D_{Tp} , D_p et CPD en fonction de l'énergie cinétique des protons (pour le Si).

IV.3.1.3. La comparaison entre les deux modèles pour le cas de carbure de Silicium (SiC):

A basse énergie, le graphe D_p a une pente plus décroissante que ce du CPD. Puis, les deux graphes sont croisés. Ensuite, à haute énergie, les deux graphes ont des pentes presque plates (figure IV.10). Donc, il existe une différence entre les deux graphes.

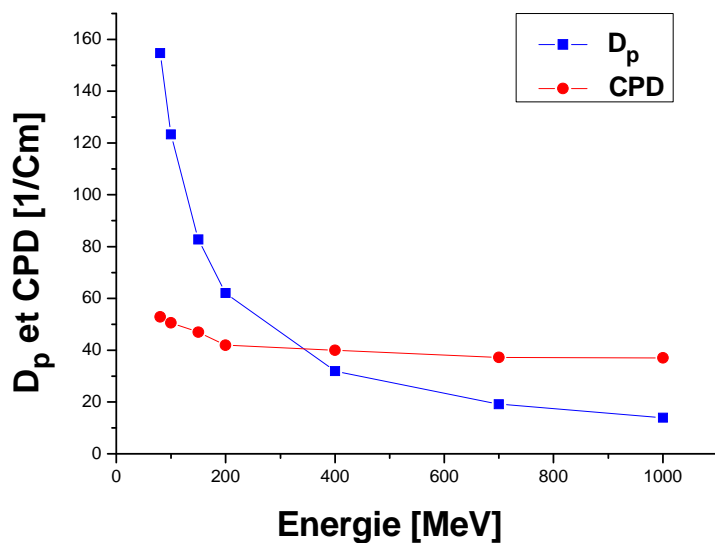


Figure IV.10: Une représentation de la variation de D_p et CPD en fonction de l'énergie cinétique des protons (pour SiC)

A fin de comprendre cette différence entre ces deux graphes de SiC, on a suivi les mêmes étapes effectuées pour Si. On a trouvé que, la densité des défauts nucléaires D_n pour SiC est aussi négligeable (σ_n évaluée par JENDL/HE-2007[47]). Les résultats ne change pas, c-à-d les deux graphes D_{Tp} et D_p sont identiques (tableau IV.6 et figure IV.11).

Tableau IV.6: Représente les différentes densité de défaut et de σ_n (pour le SiC).

E (MeV)	CPD [1/cm]	D _p [1/cm]	Dn [1/cm]	D _{Tp} [1/cm]	σ_n barn
80	154,69112	52,9	0,02525	52,92525	0,38061
100	123,36636	50,6	0,02329	50,62329	0,35443
150	82,78023	47	0,02065	47,02065	0,32395
200	62,14276	42	0,01852	42,01852	0,3003
400	31,96048	40	0,01561	40,01561	0,31391
700	19,16666	37,1	0,01113	37,11113	0,34152
1000	13,99023	37	0,00769	37,00769	0,34634

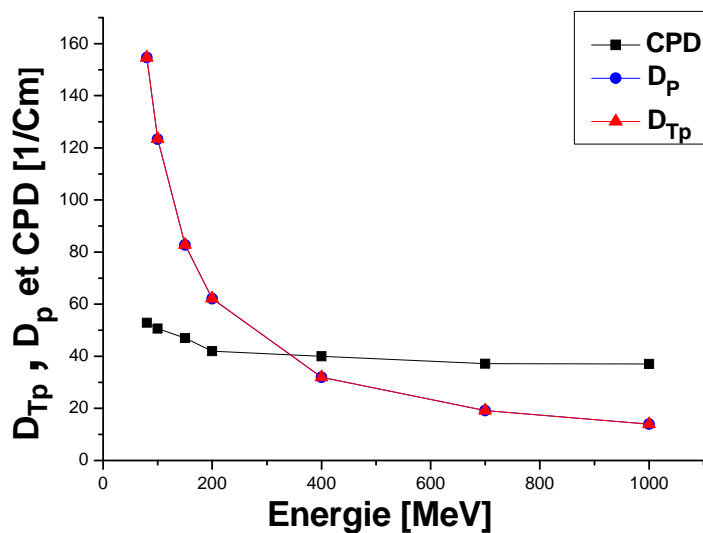


Figure IV.11: Une représentation de la variation de D_T, D_p et CPD en fonction de l'énergie cinétique des protons (pour le SiC).

IV.4. Conclusions:

L'étude des effets induits par un rayonnement intense de particules élémentaires tel que les protons et les neutrons 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, tous utilisent des systèmes électroniques basés sur des composants à base de semi-conducteurs soumis à des rayonnements intenses de particules tel que les réacteurs et accélérateurs nucléaires, le rayonnement cosmique pour les satellites et les ordinateurs, 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.

Parmi les cristaux les plus prometteurs sont ceux de type $A^{III}B^V$ [43] sur lesquels nous avons concentré nos efforts dans le présent travail. Nous nous sommes intéressés aux particules chargées qui ont la caractéristique de perdre toute leur énergie sur des distances très petites comparées aux particules neutres tel que le neutron pour lesquels une grande épaisseur de matériau est nécessaire pour les arrêter pour une énergie équivalente. Ces particules neutres interagissent avec le cristal par le biais de réactions nucléaires et ce sont les noyaux de recul - 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. C'est pourquoi nous concentrons notre étude sur les protons.

Le ralentissement d'un proton avec un matériau se divise en deux parties. La première consiste en un freinage électronique dû aux électrons existant dans le cristal. C'est un effet continu du fait que le proton lors de son déplacement à l'intérieur du cristal observe une densité électronique qui peut être considérée comme constante. Le proton subit donc un nombre très grand et continu de collisions avec ces électrons ce qui constitue le facteur principal de ralentissement, mais sans altérer ni la direction du proton incident ni la structure du cristal du fait que l'électron est 1836 fois plus léger que le proton et que les électrons déplacés lors de ces collisions se recombieront éventuellement avec les sites chargés positivement du fait que le cristal a une charge électrique totale constante. La deuxième partie représente les collisions du proton avec les noyaux des atomes qui sont plus lourds que le proton et donc sont capables de changer sa direction lors de collisions dites primaires sans pour autant absorber beaucoup de son énergie sauf lors de collisions quasi-frontales. L'effet net de

ce type de collision est de causer un déplacement du noyau hors de son site cristallin et donc de créer une lacune primaire. Le noyau de recul peut, si son énergie est suffisante, causer d'autres collisions à son tour, pour un créer un effet de cascade de collisions dites secondaires. Ce sont ces types de collisions proton-noyau qui nous intéressent dans la présente étude et qui sont responsables de la dégradation du cristal. Le but de la présente étude est de quantifier cette dégradation du cristal en estimant le nombre moyen de défauts créés par unité de parcours pour un le cas d'un rayonnement de protons.

Nous avons calculé le nombre moyen de défauts ou lacunes créés par bombardement de protons mono énergétiques sur divers composants en utilisant le programme SRIM (The Stopping and Range of Ions in Matter) qui est un programme de transports d'ions dans la matière basé sur les techniques statistiques de Monte Carlo. Il est possible de calculer avec ce programme les effets induits par les protons sur les cristaux de type $A^{III} B^V$ (GaAs, GaP, etc...). Les défauts et lacunes causés par les collisions primaires ainsi que celles induites par cascades ont été calculées pour ces composés et comparées entre elles.

On a associé les résultats du deux types d'endommagement (type de défaut primaire et type de cascade) est après interprétation on a trouvé que:

La résistance du composant SiC est la meilleure à très haute énergie dans un large intervalle d'énergie [102 à 1000] MeV, le GaP est le plus résistant dans l'intervalle [6 à 102] MeV et le InP est le plus résistant dans un intervalle [1 à 6].

On a aussi démontré avec un calcul direct que la densité des défauts créée par des réactions purement nucléaires est négligeable.

Appendice

Section efficace

Appendice

Section efficace

I.1. Définitions et notations:

Pour explorer les propriétés du noyau on fait généralement des expériences de diffusion (collision) de particules d'un faisceau qu'on envoie sur une cible et on observe la diffusion derrière la cible. Ce qui intéresse en général le physicien c'est la probabilité qu'une « réaction se produise ». En fait la mesure consiste à faire un grand nombre de mesures entre un grand nombre de particules incidentes et un grand nombre de noyau cibles et de mesurer les particules diffusées par un détecteur. On s'intéresse à une moyenne de mesures. La probabilité est représentée par une quantité qu'on appelle la section efficace exprimée en unités adéquates et qu'elle est indépendante des variables du faisceau et de la cible: la géométrie, la densité, et l'intensité du faisceau [38].

D'un point de vue corpusculaire classique, en effet, si les particules cibles sont au repos et ont un rayon R et si les particules incidentes ont des dimensions négligeables devant R alors $\sigma = \pi R^2$ représente la section offerte aux particules incidentes par les particules cibles, encore appelée section efficace géométrique. En d'autre termes on peut dire schématiquement que la section efficace d'un processus est l'air qu'il faut associer à une particule cible pour que la particule incidente induise se processus au rythme observé.

I.2. Mesure des sections efficaces:

Dans les expériences de collision, on utilise trois ensembles statistiques discernables : un faisceau, une cible, un détecteur. Le dispositif vu a la « loupe » nucléaire dans les conditions idéales nécessaires :

1. Les particules identiques du faisceau incident doivent être isolées dans le temps (sens longitudinal) et dans l'espace (sens transversal). C'est dans ces conditions que l'on peut être certain que les particules interagissent l'une après l'autre et de façon isolée. De même, cette condition est nécessaire pour que le détecteur n'enregistre qu'une particule à la fois. Le faisceau est focalisé de façon à être plus étroit que la cible, ceci afin de s'assurer que

toutes les particules incidentes rencontrent la cible.

2. La cible doit être suffisamment pure pour être considérée comme contenant N centres diffuseurs identiques/cm². Les centres diffuseurs doivent être isolés dans l'espace pour qu'une particule du faisceau n'interagisse qu'avec l'un d'entre eux à la fois. Dans le cas nucléaire et d'un point de vue corpusculaire classique, les noyaux ne sont jamais en contact puisqu'ils sont isolés par des distances atomiques, ce qui est « astronomique » à l'échelle nucléaire : la surface présentée par le noyau est de l'ordre de 10^{-24} cm², alors que la surface atomique est de l'ordre de 10^{-16} cm².

L'analyse du phénomène de collisions multiples est difficile, donc la cible doit être d'épaisseur x , faible pour que chaque particule détectée à l'angle θ provient d'une interaction unique avec un noyau de la cible. Les conditions précédentes sont un gage nécessaire de linéarité de la réponse aussi bien par rapport à Φ (est l'intensité incidente, c'est-à-dire le nombre de particules incidentes par unité de temps) que par rapport à N (est le nombre de particules cibles par unité de surface). La méthode de mesure de la réponse consiste à enregistrer le nombre dn des particules diffusées par unité de temps qui traversent le détecteur délimitent un angle solide $d\Omega$ autour de la direction définie par θ . Les conditions de linéarité permettent d'écrire la relation [39]:

$$dn = \sigma(\theta)N\Phi d\Omega$$

I.3. Calcul de la section efficace coulombienne (de Rutherford):

Avant tout calcul, évaluons la distance minimale à laquelle un alpha d'énergie cinétique E_α peut s'approcher d'un noyau. Cette distance, a , dite distance minimale d'approche est fixée par la relation :

$$E_\alpha = \frac{zZe^2}{a} \quad (I.1)$$

Tant que la particule ne pénètre pas dans le noyau. Le calcul classique des paramètres de la diffusion coulombienne peut être effectué comme si la charge nucléaire était ponctuelle (Théorème de Gauss). Dans ce cadre considérons une particule α de masse m et d'énergie cinétique E se dirigeant vers un noyau de masse M initialement au repos. Après l'interaction, la particule prend la direction définie par les angles θ et φ et le noyau recule, en respectant les lois de conservation de l'énergie, de l'impulsion et du moment angulaire.

Le mouvement d'une particule dans un potentiel central en $1/r$ a été étudié en mécanique classique (en particulier lois de Kepler). L'application des lois de conservation du moment angulaire et de l'énergie permet de montrer que le mouvement est plan, que la trajectoire est une hyperbole dans le cas d'un état non lié et que l'on a la relation :

$$\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = \frac{a}{2b} = \frac{zZe^2}{2E_\alpha b} \tag{I.2}$$

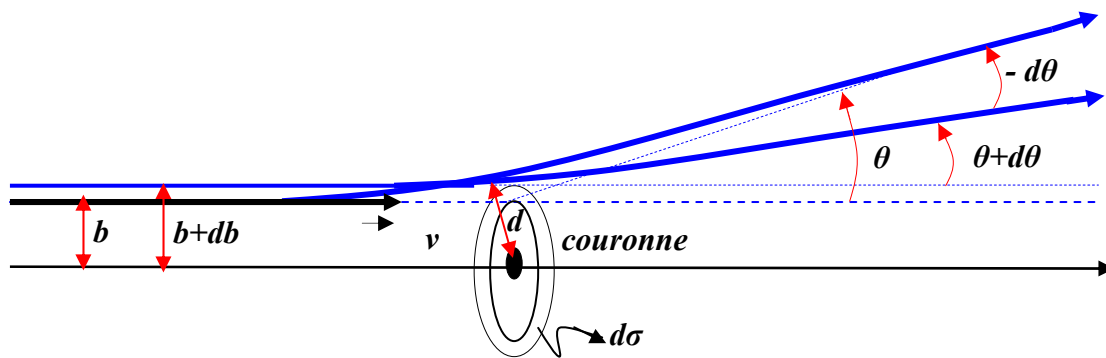


Figure I.1: Le paramètre d'impact est la distance b entre la trajectoire initiale de la particule incidente et la parallèle à cette trajectoire passant par le centre du noyau cible. La distance d'approche, d , en dépend. Toute particule passant à l'intérieur d'une couronne circulaire de rayon b et d'épaisseur db , située loin en avant du centre diffuseur, est diffusée à un angle compris entre θ et $\theta + d\theta$. L'écran est situé loin derrière le centre diffuseur.

Où b , appelé paramètre d'impact, est défini sur la figure (I.1). Cette relation entraîne que plus b est faible, plus θ est élevé, ce qui est intuitivement clair : plus une particule s'approche du centre diffuseur, plus elle ressent fortement l'effet du potentiel en $1/r$. En particulier, toute particule passant à l'intérieur d'un cercle de rayon b , centre sur un noyau cible (symétrie cylindrique) sera diffusée par ce noyau à un angle supérieur à θ et de même, toute particule passant à l'intérieur d'une couronne circulaire de rayon h et d'épaisseur db sera diffusée à l'angle θ , à $d\theta$ près. Si l'on suppose que chaque particule du faisceau incident n'interagit qu'une seule fois avec l'un des noyaux de la cible, alors le nombre de diffusions qui s'effectue par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ est donné par :

$$dn = N2\pi b \cdot db \cdot \Phi \tag{I.3}$$

Où Φ est le nombre de particules incidentes traversant la cible par unité de temps. Ainsi, lorsque dans la pratique on effectue une mesure avec un détecteur (ou sur une portion de l'écran) centre a l'angle θ et délimites un angle solide $\Delta\Omega$, le nombre d'événements enregistrés par unité de temps dans ce détecteur est donné par :

$$\Delta n = N 2\pi b \cdot db \cdot \Phi \frac{\Delta\Omega}{d\Omega} = N\Phi(\Delta\Omega) \left(\frac{2\pi b \cdot db}{d\Omega} \right) \quad (I.4)$$

Utilisant la relation (I.2) on obtient [a,1]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\Delta n}{N\Phi(\Delta\Omega)} = \frac{2\pi \cdot db}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{1}{4} \left(\frac{zZe^2}{2E_\alpha} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \theta / 2} \quad (I.5)$$

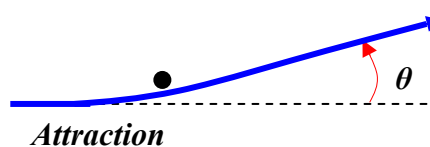
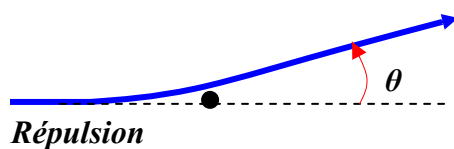
Cette formule est la formule de section efficace différentielle de Rutherford, obtenue ici de la façon classique [39].

Avec : a un faisceau de particules incidentes

Tableau I.1: Inventaire des types de sections efficaces [1].

Section efficace	Symbole	Technique	Application possible
Totale	σ_T	Atténuation du faisceau	Blindage
Réaction	σ	Intégrer sur tous les angles et énergies de a	Production de radio-isotopes
Différentielle (angulaire)	$d\sigma / d\Omega$	Observer a vers (θ, φ) et intégrer sur E	Formation d'un faisceau dans une direction donnée
Partielle (énergie)	$d\sigma / dE$	a n'est pas observée, mais on observe l'excitation du noyau Y par l'émission de rayons γ	Étude des modes de désintégration de Y
Différentielle partielle	$d^2\sigma / d\Omega dE$	Observer a dans la direction (θ, φ) et à une énergie spécifique	Information sur les niveaux excités de Y

Note: la section efficace ne dépend pas des signes des charges, on ne peut pas dire si le projectible et la cible sont de mêmes signes ou de signes opposés par une simple expérience de diffusion [1].



Références :

1. Diffusion coulombienne (suite)
http://lphe.epfl.ch/~physgenOS/cours/19_avr_2007_2up.pdf. (2007).
2. Luc. Louys. Interactions fondamentales et particules élémentaires. <http://www.jeunesse-et-science.be/Doc/Interactions.pdf>.
3. "Interaction fondamentales"
<http://www.al.lu/physics/Downloads/Deuxi%C3%A8me/Cours%202005/Interactions%20fondamentales.pdf>. (2005).
4. Catherine Sabathier. Thèse de doctorat. Effets de l'irradiation dans une Perovskite : utilisation de cette matrice pour un conditionnement des actinides. Université Paris Orsay (2003).
5. Mihia Bogdan Lazar. Thèse de Doctorat .Etude du dopage par implantation Ionique d'Aluminium dans le Carbure de Silicium pour la réalisation de composants de puissance. Centre de Génie Electrique de Lyon (CEGEL) (2002)
6. V.V. Balashov Interaction of particles and radiation with matter, Springer, (1997).
7. Balanzat E., Bouffard S., Solid State Phenomena, 31-32 (1993) 7.
8. "Implantation ionique"
http://www.cemes.fr/Ecoles_Doctorales/site_web-ed/cours/Cours_Lithographie_7.pdf.
9. Abdellatif Nachab. Thèse de Doctorat. "Etudes expérimentales et modélisations Monte Carlo de l'auto-absorption gamma et de la dosimétrie active par capteurs CMOS" Université Louis Pasteur (2003).
10. Marta Szachowicz. Thèse de doctorat "Réalisation et études spectroscopiques de guides d'ondes monocristallins de Y3Al5O12 et YAlO3 dopés terres rares pour la conversion de fréquence"Université Claude Bernard (2002).
11. Lindhard J., Scharff M. and Shiott H. E., Mat. Phys. Medd., 33 (1963), 14, Range concepts and heavy ion ranges.
12. 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.
13. Malika Çaçoui. Les grandes catégories de rayonnements.
<http://www.medramo.ac.ma/fmp/docm/Interactions.pdf>
14. Françoise Mulhauser. Constituants de la matière Méthodes expérimentales.
<http://www.unifr.ch/physics/me/cours/methodes/node3.html>, (2001).

Références

15. J. F. Ziegler, M.D. Ziegler et j. p. Biersack, SRIM 2006, SRIM help.
16. Nicolas Dély. THESE de Doctorat de l'université de CAEN. Radio-oxydation d'un élastomère de type EPDM lors d'irradiations faiblement ou fortement ionisantes: mesure et modélisation de la consommation de dioxygène (2005).
17. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953). Equation of state calculations by fast computing machines.
18. Marc Hayoun. La méthode de Monte Carlo Metropolis. Laboratoire des Solides Irradiés Paris 2002.
19. Bance, J-L. Dekeyser, R. Fauquembergue. Parallélisation d'une méthode de Monte Carlo pour la simulation de composants semi- conducteurs.
20. The Computational Science Education Project, Introduction to Monte Carlo Methods <http://www.utdallas.edu/~cantrell/ee6481/MC.pdf>.
21. Variable aléatoire <http://www.iumsp.ch/Unites/us/Alfio/polybiostat/ch06.pdf>
22. 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).
23. G. Molière, *Z. Naturforsch. A2* (1947) 133.
24. J. Lindhard and M. Scharff, *Phys. Rev.* 124 (1961) 128.
25. [12] J. P. Biersack and D. Fink, in *Ion implantation in semiconductors* (ed. S. Namba; Plenum Press, N.Y., 1974) p.211.
26. J. P. Biersack and D. Fink, in *Atomic collisions in solids*, Vol. 2 (Plenum Press, N.Y., 1975) p. 737.
27. René Vascon Cascades de déplacement atomiques dans le Fer- α simulation par dynamique moléculaire (1997).
28. O. B. Firsov, *Zh. EKsp. Teor. Fiz.* 33 (1957) 696 [*Sov. Phys.-JETP* 6 (1958) 534].
29. N. Bohr, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Mat.-Fys. Medd.* 18, no. 8 (1948).
30. E. J. Williams, *Proc. Roy. Soc. (London)* 169 (1939); *Phys. Rev.* 58 (1940) 292.
31. O. B. Firsov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 36 (1959) 1517 [*Sov. Phys.-JETP* 36 (1959) 1076].
32. O. S. Oen and M.T. Robinson, *Nucl. Instr. and Meth.* 132 (1976) 647.
33. Hasnaa Faik-Etienne, Thèse de doctorat. Etude de l'implantation ionique dans les miroir multicouche M_0/Si : Application aux optiques diffractives. Institut national des sciences appliquées de toulouse (2005)
34. J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids*, volume I and II. 1980.

Références

35. M. J. Norgett, M. T. Robinson, and I. M. Torrens. Nucl. Eng. and Design, 33:50, 1974.
36. Landolt-Börnstein group III Condensed Matter
<http://www.springerlink.com/content/j6q060/>, Volume:41A1b.
37. Kalyana N'Guy-Maréchal, Thèse de doctorat. Tenue sous irradiation de supermirrors pour guides de neutrons. Université de Paris XI. <http://ipnweb.in2p3.fr/rayonnements-energie/cours/cours%20UE1/Trans-sect.pdf>
38. Notions de section efficace, <http://ipnweb.in2p3.fr/rayonnements-energie/cours/cours%20UE1/Trans-sect.pdf>
39. Luc Valentin. Physique Subatomique noyaux et particules 1. Approche élémentaire. Office des publications universitaires (1988).
40. I. Lazanu, S. Lazanu, Lindhard factors and concentrations of primary defects in semiconductor materials for uses in HEP. University of Bucharest, Romania.
41. I. Lazanu, S. Lazanu, Physica Scripta. Vol. 66, 125–132, 2002.
42. I. Lazanu, S. Lazanu, E. Borchi, M. Bruzzi, Nucl. Instr. and Meth. Phys. Research, A 406 (1998) 259.
43. I. Lazanu, S. Lazanu Predictions about the behaviour of diamond, silicon, SiC and some $A^{III}B^V$ semiconductor materials in hadron fields. University of Bucharest, Romania.
44. Rayons X. http://ipn.epfl.ch/webdav/site/ipn/shared/import/migration/ARx_1.pdf.
45. Complément. Les techniques d'absorptiométrie : colorimétrie et spectrophotométrie (comp.A1). nte-serveur.univ-lyon1.fr/tribollet/RegionR-A/Rubriques/ac-Versailles/ressources/TS/chimie/compA1.rtf
46. Sun Weili and Y. Watanabe. Evaluated Nuclear Data File (ENDF), JENDL/HE-2007 E=3000MeV. Lab=KYUSHU Japan. <http://www-nds.iaea.org/exfor/servlet/E4sSearch2>
47. Y. Watanabe. Evaluated Nuclear Data File (ENDF), JENDL/HE-2007 E=3000MeV. Lab=Kyushu U Japan. <http://www-nds.iaea.org/exfor/servlet/E4sGetTabSect?SectID=439203&req=2256&PenSectID=400839>