

I-1. Introduction :

Le terme "INTERACTION" a été largement étudié depuis des années 60, grâce à sa nécessité dans les recherches scientifiques. L'importance d'étudier ce phénomène dans les processus mécaniques, chimiques et technologique était engendrée essentiellement par son fonctionnalisation pour les matériaux et améliorer leur caractéristiques.

Ce terme se compose plusieurs branches secondaires, comme se présenter sur la figure suivante :

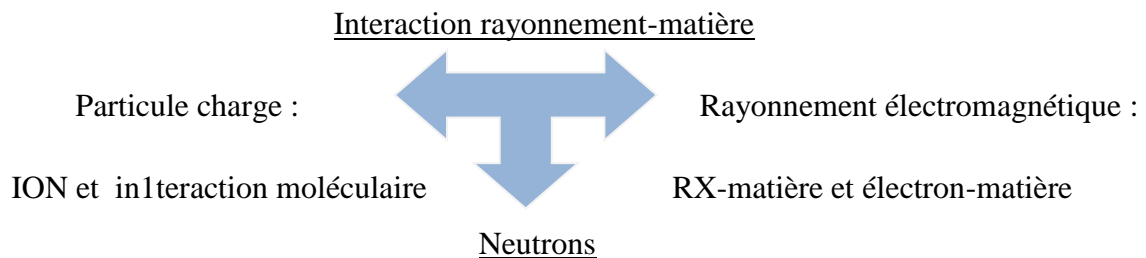


Figure I-1: Les types d'interaction rayonnement-matière.

Le dépôt [1] d'un matériau par des particules chargés fait que les petites boules [2] à déchargé se métallisaient, cette métallisation était due au 'bombardement'. Les cascades de collisions d'atomes à l'intérieur d'un matériau causaient "l'érosion" et conduit à la projection d'atome de la surface du matériau, l'inter-agissement est alors caractérisée par : l'énergie de bombardement, l'incidence de la colonne ionique, l'implantation des ions et le taux d'érosion.

Ce contexte comme objectif de présenter une description du contact entre ion-cible en détaillant le principe générale menant l'érosion et nous verrons quelques détails de la physique à l'échelle de l'atome mise en jeu autour cette interaction.

I-2. Théorie de ralentissement dans la matière :

I-2-1. Interaction ion-cible :

Quand une particule assez énergétique atteint une cible constituée d'atomes, il interagit par répulsion électrostatique avec des atomes cible. En outre, pendant un choc, des cheminements mono électroniques comme: l'excitation, l'ionisation et la cristallisation (capture d'un électron intervenant) seront apparaître de façon instantané.

Toute fois, les atomes heurtés par l'ion reçoivent une grande d'énergie pour abandonner leur site .L'effet de cette énergie est de provoquer un échauffement de la cible (phonons) , ainsi que l'ion donne de l'énergie thermique , et finit par y être implanté[3].

I-2-2. Cascade de collisions :

On sait que les chocs élastiques créent le déplacement des atomes cible et par la suite ces atomes entrent en impact, ce qui conduire à un nombre de déplacements successives. Ces déplacements sont connus sous : cascade de collisions, la cascade de collisions évolue jusqu'à ce que l'atome atteint une faible énergie suite a un ensemble de collisions.

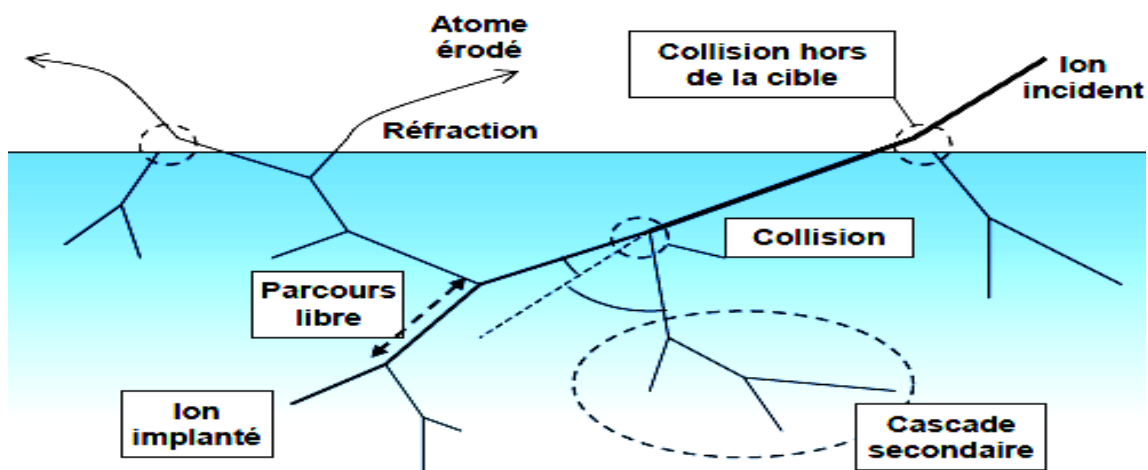


Figure I-2: Modélisation de la cascade de collisions[4].

I-2-3. Description générale :

Le protocole I-3 représente tous les cas possibles pour la description d'une cascade de collisions, aussi le faisceau d'ions incident a une énergie et un angle d'incidence initial, tel qu'il avant la diffusion dans la cible peut faire des heurtés avec lui même, en aboutissant il cède une partie de son énergie a un atome de la cible .Cet atome déplacés par la suite et produit ce qu'on aura définie **une cascade secondaire**. Puisqu'un ion ressort de la cible,il Transfert alors très peu d'energie après un ensemble de collisions.L'échelle énergétique considéré dans les modèles présentés est de qq (ev), le bombardement des ions lourds sont fonctionnels à des chocs élastiques(l'érosion,l'oxydation,...) et l'implantation ionique nécessite des hautes énergies, d'environ de 50 keV à 6 MeV. [4]

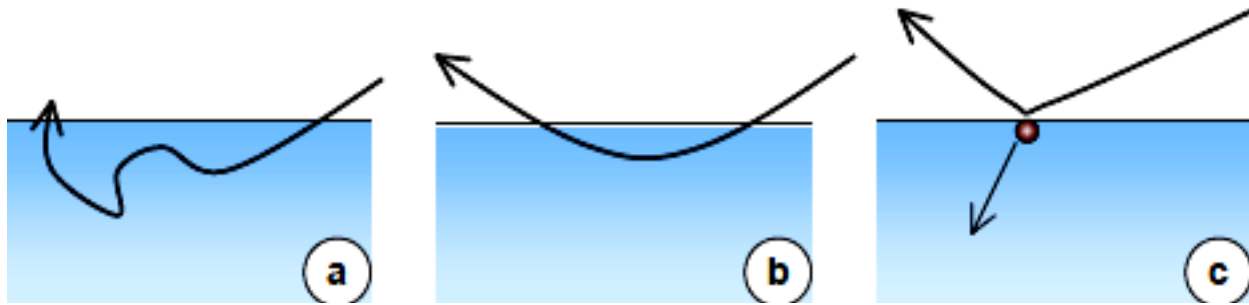


Figure I-3: Représente tous les cas possibles pris en compte pour lesquels toute l'énergie de l'ion ne dépose pas dans la cible[4].

- 1^E cas** Désigne l'émission d'un ion, après un grand nombre de déviations arbitraires pendant les chocs, tel qu'il quitte de la cible en ayant déposé un trop peu de son énergie dans la cible.
- 2^E cas** Dépend à une unique trajectoire à l'intérieur de la cible qui fait qu'en quelques chocs. Donc l'ion sera redirigé vers l'extérieur de la cible.
- 3^E cas** L'ion est extrêmement rebondit sans diffusion dans la cible en entre tenant une grande fraction de son énergie. C'est le cas d'un choc particulier.

Pour les incidences rasantes, en considérant que l'interaction Ion-Atome réduit à un seule heurt, ce qui signifié que la cible reçoit une énergie isolé, donc l'ion a une probabilité croissante pour qu'il ne perde pas totalement son énergie.

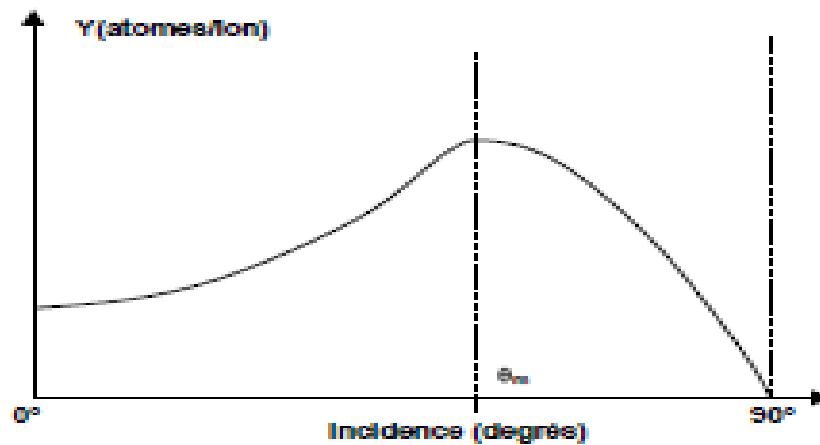


Figure I-4: Forme générale de la courbe du taux d'érosion Y en fonction de L'angle d'incidence θ [5].

On y observe un minimum local d'érosion à incidence nul jusqu'à une incidence de 40° et qu'elle croît ensuite rapidement. On atteint ainsi une incidence d'érosion maximale θ_m à partir duquel le flux de la pulvérisation commence à diminuer jusqu'à s'annuler à incidence 90° . [5]

I-3. Les collisions binaires et le programme TRIM :

Pour une maîtrise parfaite de la collision binaire, on introduit le programme de simulation **TRIM** qui modélise tous les paramètres mise en jeu dans les cascades de collisions, et bien plus avantageuse. Ce type de collision est définie dans un référentiel barycentrique et dans un référentiel du laboratoire [6], en effet, l'utilité de l'énergie et la quantité de mouvement contribuent d'acquérir les nouvelles directions et l'énergie de deux fermions de système d'interaction 'ION-ATOME', les collisions binaires fait que toutes les heurtés sont indépendamment gérés. Concernant le référentiel barycentrique les notation de la masse, l'angle et la vitesse coïncide avec ceux du référentiel du laboratoire et sont notés avec une barre, par contre le référentiel de laboratoire, la masse des atomes est notée M , les vitesses incidentes et les vitesses réfléchies durant un choc sont respectivement v, v' , ainsi que les angles de déflexion θ_1 et θ_2 .

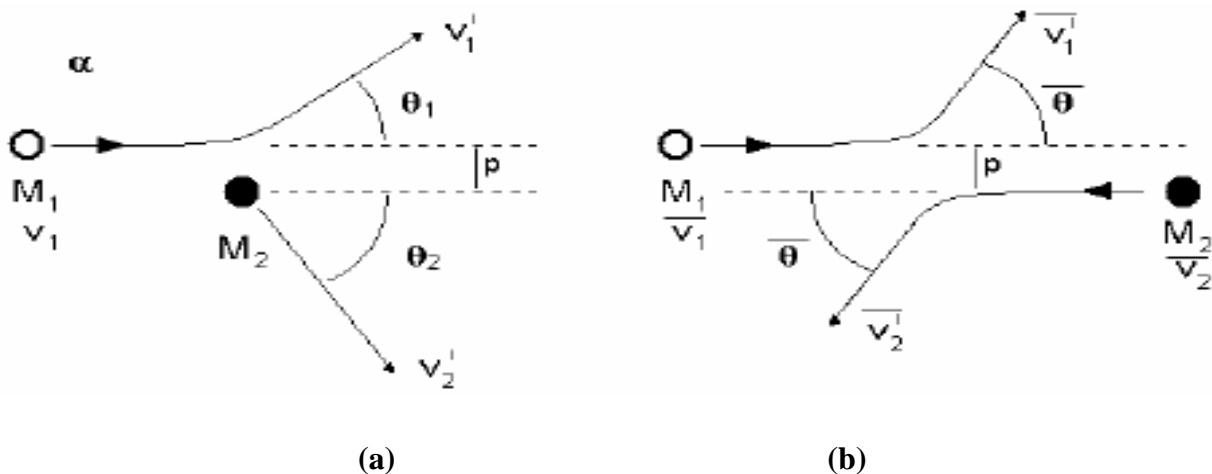


Figure I-5 : Représentation d'une collision binaire dans un référentiel du laboratoire (a) et dans le référentiel barycentrique (b) [6].

La description d'une collision élastique dans un référentiel de laboratoire facilite la compréhension du mouvement entre deux masses, alors que le référentiel du centre de masse facilite les calculs, ainsi que cette particularité inclut des aspects remarquables dans cette dernière référence.

I-4. Les collisions binaires et les pertes élastiques:

La figure I-6 qualifie un choc, où nous verrons que le lieu de déviation de la trajectoire initiale était limité par la perpendiculaire du trajet incident et passe de l'atome déplacé. [7]

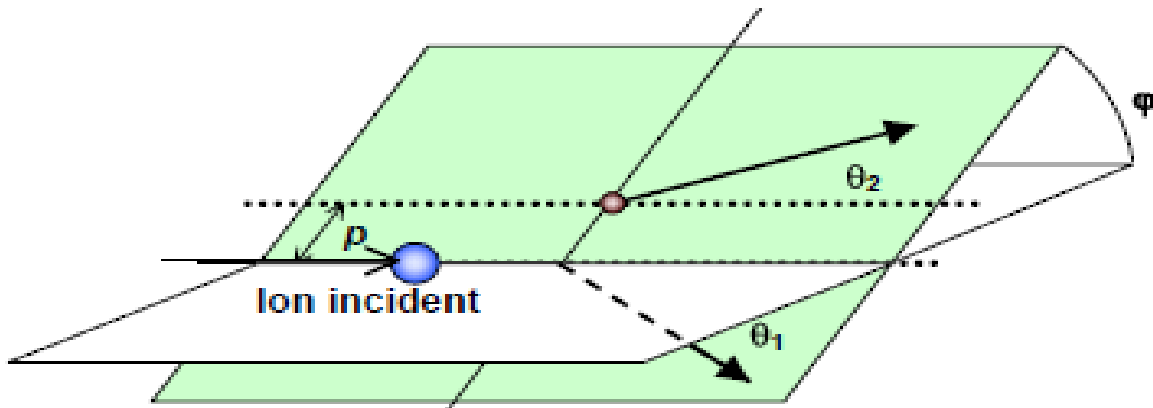


Figure I-6: Description d'une collision binaire[7].

Dans cet état de collision, les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie permettent de relier les angles de déviation dans le plan du laboratoire à la déviation dans le référentiel barycentrique.

Sachant que :

$$\theta_2 = \pi/2 - \theta'/2 \text{ et } \tan(\theta_1) = M_2 \sin(\theta') / (M_1 + M_2 \cos(\theta')) \quad (\text{i-1})$$

Donc:

Le transfert d'énergie T de l'atome cible en fonction de l'énergie de l'ion E_0 est défini par la relation: $T = y \cos^2(\theta_2)$ (i-2)

y est représenté le transfert maximum d'énergie, et définie par la relation ci-dessous:

$$y = 4M_1M_2 / (M_1 + M_2)^2 \quad (\text{i-3})$$

Aux conditions initiales d'une collision, toutes les inconnus qui sont les angles de déviation et la vitesse des deux particules en fonction de la vitesse incidente dans le centre de masse, sont données par la connaissance de l'angle θ' :

$$V_{\text{ion}} = V_0 - V_c = V_0 * M_T / M_1 \quad (\text{i-4})$$

$$V_{\text{atome}} = V_c = V_0 * M_T / M_2 \quad (\text{i-5})$$

tel que : M_T est inféré "la masse réduite", $M_T = M_1 * M_2 / (M_1 + M_2)$. (i-6)

$$\theta_{\text{max}} = \arctan[M_1 * M_2 * \sin(\arccos(-M_2 / M_1)) / (M_{12} - M_{22})] \quad (\text{i-7})$$

RAPPEL:

θ_{max} est l'angle de déviation maximale d'une collision entre deux masses M_1, M_2 respectivement d'un atome lourd ,atome plus léger.

On conclura l'énergie résiduelle de l'ion : $E_r = E_i - T - \Delta E_p$ (i-8)

Où ΔE_p représente la perte d'énergie inélastique.

Par ailleurs, cette interaction doit être corrigée par la fonction d'écran causée par l'interpénétration des cortèges électronique .Ainsi, toute la description de la collision est également répartir sur la description de l'ecrantage.

I-5. Le potentiel d'interaction:

La formule du potentiel d'interaction entre deux particules de numéros atomiques Z_1 et Z_2 s'écire:

$$V(r) = [Z_1 Z_2 e^2 / r] \phi(r) \quad (\text{i-9})$$

ϕ : est la fonction d'écran qui défini comme le référence entre le potentiel réel et le potentiel colombien sans effet des nuages d'électrons :

$$\phi_u(x) = v(x) / (Ze/r) \quad (\text{i-10})$$

Avec: e la charge de l'électron $1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ c}$.

Actuellement, il existe différentes types de potentiel d'interaction $V(r)$: Thomas-Fermi;Bohr;Molière et Lorentz-Jonser décrivons de façon satisfaisante par un grand nombre de théorie. Le programme TRIM utilise un potentiel universel qui est représenté par la fonction d'écrantage $\phi_u(x)$, ainsi que :

$$\phi_u(x)=0.1818\text{Exp}(3.1998x)+0.5099\text{Exp}(0.94229x)+0.2802\text{Exp}(0.4029x)+0.2817\text{Exp}(0.2016x). \quad (\text{i-11})$$

I-6. L'expression de pouvoir d'arrêt :

Toutefois, dans le domaine d'énergie qui nous intéresse, la connaissance de l'expression de pouvoir d'arrêt repose sur la connaissance de : pouvoir d'arrêt nucléaire et le pouvoir d'arrêt électronique.Ce pouvoir d'arrêt noté $S(E)$ et définie par :

$$S(E)=(1*dE)/Ndx = S_n + S_e \quad (\text{i-12})$$

Comme le montre dans la figure(I-6) représente l'allure générale de la variation du pouvoir d'arrêt en fonction de la vitesse du projectile, et possède trois zones différentes.

D'une part, on y observe dans la première zone qui est limitée par $V_0 Z_1$ une augmentation progressive de pouvoir d'arrêt nucléaire à la vitesse de l'ion, ainsi qu'il est proportionnel à la masse ionique.

Et d'autre part, le pouvoir d'arrêt électronique peu Concordance avec la vitesse de l'ion, et soit la racine de l'énergie initiale.

Ensuite, la 2^{ème} zone était caractérisée par le pouvoir d'arrêt électronique qui atteint le maximum à partir duquel la vitesse fixe à la valeur $(2Z_1)$,au-delà , l'ionisation d'un ion sera plus probable et le taux de collision électronique commence a diminuer jusqu'à où l'entrée de 3^{ème} zone 'la zone de Bethe blook' tel que le pouvoir d'arrêt chute également trop vite pour les forts énergies.

Important: cette courbe produit une 4^{ème} zone liée aux énergies relativistes pour lequel le pouvoir d'arrêt électronique S_e sera linéaire à la vitesse incidente résultant de libération de photons par la cible. Ces conséquents relativistes ont des vitesses ioniques de 10^7ev/amu .

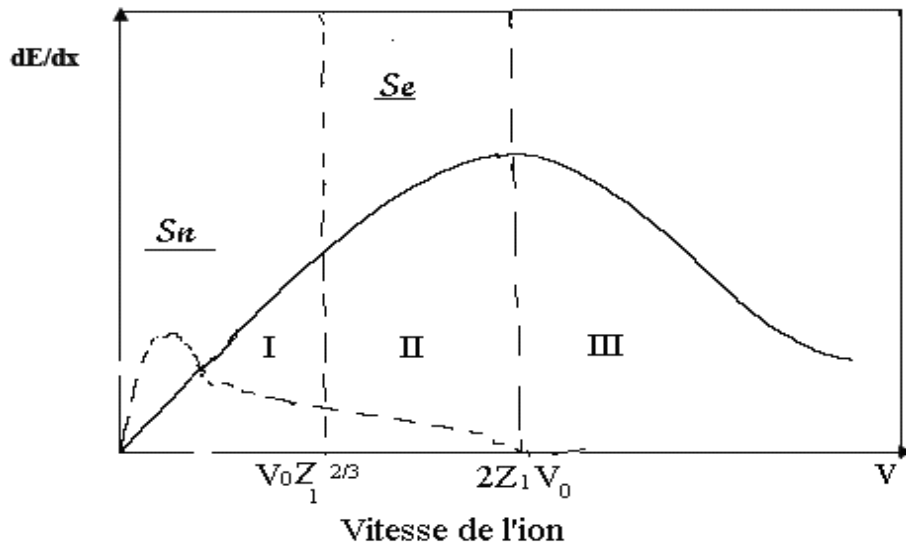


Figure. I-6: Composantes nucléaires et électroniques du pouvoir d’arrêt en fonction de la vitesse de l’ion incident[1].

I : arrêt nucléaires – II : arrêt électroniques – III : Zone de Bethe-Block

I-7. L’implantation ionique :

En réalité, les ions soient implantés dans la cible considérablement ils peuvent modifier la nature de la surface d’érosion ainsi que les cascades de collision, par effet, l’émission et le taux d’érosion sont sensibles à l’implantation ionique, c-à-d. des effets relatifs comme : amorphisation, diffusion et pulvérisation.

La répartition finale des ions est bien représentée par une courbe de Gauss, caractérisée par la position R_p de son maximum et sa demi-largeur à mi-hauteur ΔR_p .

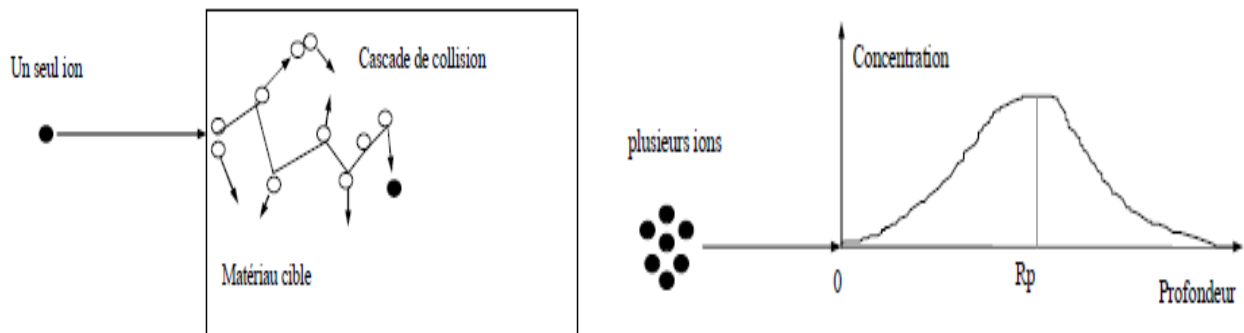


Figure I.8. Principe de l’implantation ionique[8].

I-8. Les lacunes et les défauts dans une cible:

Les lacunes, interstices et les impuretés introduisent librement dans la structure cristalline "défauts de Schottky et Frenkel", ainsi qu'ils ont identifiés par l'existence d'une paire de Frenkel ; des déplacements atomiques avaient lieu quand l'énergie transmise aux atomes de la cible est satisfaisante.

Durant un choc, si l'atome est transporté regagnée une certaine valeur d'énergie, il y a une probabilité de céder cette dernière énergie à des autres atomes voisins afin de créer des paires de Frenkel. Donc, nous avons la puissance d'évaluer le nombre d'atomes déplacés par un ion d'énergie dans la cible [8] :

$$N(E) = (0.8(dE/dX)n*\Phi_0) / 2Na . \quad (i-13)$$

Avec:

- $(dE/dX)n$ La perte d'énergie nucléaire.
- Φ_0 est le quanta d'implantation.
- Na densité atomique du réseau.

I-9. Dynamique moléculaire :

La modélisation par la dynamique moléculaire demande l'utilisation d'une cible avec des dimensions finies. Pour les systèmes atomiques en consistant sur un potentiel de Lennard-Jones, et les temps de ralentissement des phénomènes sont très inférieures à 10^{-8} s et la dynamique moléculaire serait très bon outil.

I-9-1. Modèle des sphères dures

Ce modèle est représenté par le Hamiltonien suivant :

$$H = \sum (1/2mv^2 + u(r_i - r_j)) \quad (i-14)$$

$$u(r_i - r_j) = \begin{cases} +\infty & |r_i - r_j| \leq \sigma \\ 0 & |r_i - r_j| > \sigma \end{cases} \quad (i-15)$$

Tel que: σ le diamètre des deux sphères.

Ce mode couvre un vaste domaine, soit sur le plan théorique, soit sur le plan statistique. Lorsque nous avons interprété dans un milieu peu condensé, le modèle des sphères dures inélastiques est un bon outil, dont les interactions entre particules dépendent a des collisions instantanées.

Entre deux collisions, les particules sont déplacés suivant un trajet rectiligne et la probabilité que trois sphères soumissent à un choc instantané est infinitésimale, alors la dynamique moléculaire serait retourné a une chaine de collisions binaires.

Tenir compte, deux sphères de même masse et de vitesses respectivement V_1, V_2 avant le collision puis V_1', V_2' , après la collision.

$$\text{Sachant qu'on a : } |V_1|^2 + |V_2|^2 = |V_1'|^2 + |V_2'|^2 \quad (\text{i-16})$$

d'ou: la conservation de quantité de mouvement donne :

$$V_1 + V_2 = V_1' + V_2' \quad (\text{i-17})$$

$$\text{En notant: } \Delta V_i = V_i - V_i' \quad (\text{i-18})$$

$$\text{Donc: } \Delta V_1 = - \Delta V_2 \quad (\text{i-19})$$

Nous allons valider que la composantes normale de la vitesse est inversement proportionnel avec la collision: $(V_2' - V_2) \cdot (r_2 - r_1) = -(V_1' - V_1) \cdot (r_2 - r_1)$ (i-20)

De plus, on a entre les deux particules i et j, les équations de mouvement ci-dessous:

$$r_i = r_i^0 + v_i t \quad (\text{i-21})$$

$$r_j = r_j^0 + v_j t \quad (\text{i-22})$$

où: t c'est le temps de collision et r_i et r_j sont les positions des particules i et j après la dernière collision, cette condition s'est vérifié, la solution retenue est celle qui donne double produit.

$$(r_i^0 - r_j^0) \cdot (v_i - v_j) < 0 \quad (\text{i-23})$$

Références

- [1] H.LADJEL Thèse magistère 2005 'Université des sciences et de la technologie d'Oran 'Mohamed Boudiaf'.
- [2] Thomas Tondou Thèse doctorat Étude de la pulvérisation ionique Applications aux effets de jet de la propulsion plasmique 2005 École Doctorale : Matériaux -Structures- Mécanique de l'ONERA -centre de Toulouse.
- [3] J.F.Ziegler ,J.P.Biersach ,U.Liittmark,"the Stopping and Range of Ions in Solids" Vol 1 of the Stopping and ranges of Ions of Ions in Matter ,Ed J.F .Ziegler ,pergamon press ,New York (1985).
- [4] Lindard J.,Scharff M.and Shiott H. E.,Mat .Phys.Medd., 33 (1963), 14,Range,concepts and heavy ion ranges.
- [5] J.P.Biersack and L.G.Haggmark,Nucl Inst Meth 174,257 1980.
- [6] M.Bertin,J.P.Faroux et J. Renault, Mecanique Classique de Systèmes de Points et Notions de Relativité,Dunod Université, I, (1985).
- [7] Balanzat E., Bouffard., Solid State Phenomena, 31-32 (1993) 7.
- [8] H. kinchin, R. S. Pease, Rep. Progr. Phys, 18, 1, (1955).