

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

جامعة محمد البشير الابراهيمي - برج بوعرييج

Université Mohamed el Bachir el ibrahimi- BBA

Faculté des sciences et technologie

Département : Génie des procédés et de l'environnement

Spécialité : Génie des matériaux

Thèse de Doctorat

Par

Kribaa Baya

Titre

Contribution à l'étude de transport des positrons dans les solides

Devant le jury composé de :

N.Grar	Maitre de conférence à l'université de BBA	Présidente
Z.Rouabah	Professeur à l'université de BBA	Rapporteur
H.Choutri	Professeur à l'université de BBA	Co- Rapporteur
S.Daoud	Maitre de conférence à l'université BBA	Examineur
S.Saib	Professeur à l'université de M'sila	Examinatrice
F.Mezrag	Professeur à l'université de M'sila	Examinatrice
N.Bouarissa	Professeur à l'université de M'sila	Invité

Année universitaire 2022/2023

A mes très chers parents pour leurs soutien moral et financier

A mes frères

A mon marie pour son soutien et pour ses encouragements dans les moments les plus ardu.

A tous ceux qui m'ont aidé pour réaliser ce travail

Remerciements

Ce travail a été réalisé aux Laboratoire Matériaux et Système Electronique (LMSE) de l'université Mohamed El Bachir El Ibrahimi de Bordj Bou Arréridj (Algérie) sous la direction de Pr. Rouabah Zahir.

Je remercie dieu tout puissant pour m'avoir donnée la force, la patience et la volonté d'accomplir ce travail.

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements et mon profond respect à mon encadreur Monsieur Rouabah Zahir professeur à l'université Mohamed El Bachir El Ibrahimi de Bordj Bou Arréridj pour avoir d'abord proposé et diriger ce travail en mettant tous les moyens nécessaires au bon déroulement de la présente thèse en ne cessant de me donner de ses conseils précieux. Je lui exprime toute ma reconnaissance pour m'avoir encouragé et soutenue jusqu'au terme de ce travail.

Je remercie Mr. Bouarissa Nadir, professeur à l'université Mohamed Boudiaf de Msila, pour avoir beaucoup contribué à la concrétisation de ce travail en le dirigeant conjointement avec Mr Rouabah Zahir. Je lui en suis très reconnaissante pour m'avoir témoignée sa confiance et pour sa disponibilité permanente.

Je remercie le professeur Nacerdine Chellali directeur du laboratoire Matériaux et systèmes électroniques (LMSE) de l'université Mohamed El Bachir El Ibrahimi de Bordj Bou Arréridj pour m'avoir accueillie au sein du laboratoire et n'avoir épargné aucun effort pour m'aider à finaliser ce travail.

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements et mon profond respect au chef de département génie des procédés et de l'environnement Mr. Ayache Riad professeur à l'université Mohamed El Bachir El Ibrahimi de Bordj Bou Arréridj pour son aide, encouragement, sa gentillesse et pour avoir suivi le dossier administratif jusqu'à la soutenance de cette thèse.

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements et mon profond respect à Mme N. Grar professeur à l'université Mohamed El Bachir El Ibrahimi de Bordj Bou Arréridj pour sa disponibilité, sa modestie, ses remarques et pour avoir acceptée de présider le jury de ma soutenance.

Remerciements

Ma gratitude va également à Mr S. Daoud, maître de conférence à l'université Mohamed El Bachir El Ibrahimi de Bordj Bou Arréridj, Mme S. Saib professeur à l'université Mohamed Boudiaf de Msila, Mme F. Mezrag professeur à l'université Mohamed Boudiaf de Msila pour l'intérêt qu'ils ont accordé à ce travail en acceptant de l'examiner et pour m'avoir honoré de leurs participations aux jury.

Ainsi je tiens à remercier Mr N. Bouarissa professeur de l'université Mohamed Boudiaf de Msila pour avoir accepté d'être présent dans le jury de ma soutenance

Je viens exprimer mes vifs remerciements et mon profond respect à Pr T. Taybi, Dr A. Belkadi, et Dr M. Benrami qui ont suivi mon dossier et aidé pour la soutenance de cette thèse.

Je veux exprimer ma reconnaissance profonde à ma chère amie Loubna Rezgui pour ses encouragements, aide et soutien.

Je remercie l'ensemble de mes enseignants qui ont contribué à ma formation le long de mes études.

A toutes les personnes, qui ont contribué scientifiquement, moralement durant le travail de ce projet, qu'ils trouvent ici l'expression de ma reconnaissance.

Je remercie tous mes amis et collègues du département de génie de l'environnement.

Sommaire

Liste des tables

Liste des figures

Introduction générale.....1

Chapitre I : Interaction positron-matière

I.1.Introduction.....4

I.2.Notions générales sur les positrons.....4

I.2.1.Observation du positron.....4

I.2.2.Les source des positrons.....5

I.3.Le positron dans la physique des solides.....7

I.4.Comportement de positron dans la matière.....8

I.4.1. La durée de vie du positron.....8

I.4.2. Le positronium9

I.5. L'interaction des positrons avec la matière.....10

I.5.1.implantation.....12

I.5.2.Thermalisation.....13

I.5.3.Profile d'implantation.....14

I.5.4. Diffusion et piégeage des positrons.....14

I.5.4.1.La diffusivité de positrons.....14

I.5.4.2.Piégeage des positrons.....15

I.5.5. Phénomène supplémentaire pour les positrons : l'annihilation matière-antimatière.....15

I.5.5.1. Paramètres d'annihilation de positron.....17

I.5.6.Emission de photons par bremsstrahlung.....17

I.6.Etat de surface.....18

I.7.La rétrodiffusion (backscattering)-Théorie de rétrodiffusion.....18

I.7.1.L'approche d'Everhat.....19

I.7.2. L'approche d'Archard19

I.7.3. Le modèle de Kanaya et Okayama.....20

I.7.4. Le modèle de Dapor (1990)20

I.7.5. Le modèle de Tilinin.....22

I.7.6. Théorie de Vicanek et Urbassek.....	22
I.8.Conclusion.....	23

Chapitre II : Processus élastique et inélastique des positrons dans les solides

II.1.Introduction.....	24
II.2.Généralités et définitions.....	24
II.2.1.Collision élastique	26
II.2.2.Collision inélastique	26
II.3.Notion de section efficace.....	26
II.3.1. Définition de la section efficace.....	27
II.4.Processus de collision élastique (Calcul classique)	28
II.4.1Diffusion de Rutherford.....	29
II.4.2.La section efficace de Rutherford.....	30
II.5.Processus des collisions élastiques en mécanique quantique.....	31
II.5.1.La section efficace de Born	31
II.5.1.1. Potentiel de Yukawa.....	31
II.5.1.2. La section efficace de Born.....	31
II.5.1.3. Limite de validité de l'approximation de Born.....	33
II.6.La section efficace obtenue empiriquement.....	34
II.6.1. La section efficace de Kanaya Okayama.....	34
II.6.2. La section efficace de diffusion de Browning et al.....	34
II.7.Section efficace obtenue par la méthode des ondes partielles.....	35
II.8.Processus inélastiques des positrons dans la matière.....	38
II.8.1.Section efficace inélastique de Gryzinski.....	37
II.8.2.Approches de Vakealahti et Nieminen.....	38
II.8.3.Modèle d'Ashley	39
II.8.3.1Formalisme diélectrique.....	39
II.8.3.2. Fonction perte d'énergie	39
II.9. Ralentissement électronique.....	41
II.10. Pouvoir d'arrêt	42
II.11.Parcour électronique.....	42
II.12. Conclusion.....	45

Chapitre III : Présentation de la méthode de simulation Monte Carlo

III.1. Introduction.....	46
III.2. Historique	47
III.3. Principe de la méthode Monte Carlo	47
III.4. Générateur de nombres aléatoires.....	49
III.4.1. Distribution rectangulaire (distribution uniforme).....	49
III.4.1.1. Méthode de congruence (génération à récurrence linéaire modulo)...	49
III.4.2. Générateur non uniforme.....	51
III.4.2.1. Générateur congruent inverse.....	51
III.4.2.2. génération Gaussienne.....	51
III.4.2.3. Génération de Poisson.....	52
III.5. Simulation de l'histoire de positron par la méthode de Monte-Carlo	52
III.6. Calcul des trajectoires du positron.....	59
III.7. Application de Monte Carlo.....	60
III.8. Efficacité de la méthode Monte Carlo.....	61
III.9. Les principaux codes utilisent la méthode Monte Carlo.....	61
III.10. Conclusion.....	63

Chapitre IV : Résultats et discussion

IV.1. Introduction.....	65
IV.2. Calcul de la section efficace total	66
IV.2.1. Comparaison entre les sections efficaces totales.....	68
IV.3. Le libre parcours moyen de transport.....	70
IV.4. Etude des coefficients de rétrodiffusion.....	75
IV.5. la profondeur de pénétration moyenne.....	82
IV.5.1. Comparaison entre Al et Au.....	83
IV.6. La distance maximale du parcours de positron.....	85
IV.6.1. Comparaison entre les distances maximales parcourues.....	86
IV.6.3. Le nombre moyen de collision aux grands angles ν	88
IV.7. Le profil de stoppage	90
IV.8. Conclusion.....	94
Conclusion générale.....	97
Références.....	100

Listes des tables

<i>I.1. Caractéristiques des principaux scintillateurs utilisés en tomographie par émission de positrons</i>	(7)
<i>I.2. Durée de vie de positron τ (ps) dans les métaux et semi-conducteur</i>	(9)
<i>II.1. Valeur des fonctions pertes d'énergies ($eV.A^{-1}$) des électrons et positrons</i>	(40)
<i>II.2. Libre parcours moyen inélastique (A°) des électrons et positrons</i>	(41)
<i>III.1. Les valeurs de A, n et ρ fit de 1- 10 Kev</i>	(58)
<i>IV.1. Section efficace totale (A^{o2}) en fonction de l'énergie de positron pour le Carbone (C) et Nyon (Ne)</i>	(67)
<i>IV.2. Section efficace totale (A^{o2}) en fonction de l'énergie de positron pour l'Aluminium (Al) et le cuivre (Cu)</i>	(67)
<i>IV.3. Section efficace totale (A^{o2}) en fonction de l'énergie de positron pour l'Argent (Ag) et l'Or (Au)</i>	(68)
<i>IV.4. Section efficace totale (A^{o2}) en fonction de l'énergie de positron pour l'Argon (Ar) et le Germanium (Ge)</i>	(68)
<i>IV.5. Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron pour Al</i>	(78)
<i>IV.6. Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron pour Cu</i>	(78)
<i>IV.7. Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron (Be+Si)</i>	(79)
<i>IV.8. Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron (Ti+Fe)</i>	(79)
<i>IV.9. Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron (Zn+Sn)</i>	(80)
<i>IV.10. Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron (Au)</i>	(80)
<i>IV.11. Les coefficients $a(E)$, $b(E)$, $c(E)$ et $d(E)$ pour une énergie de positron 1-4keV</i>	(83)
<i>IV.12. La profondeur de pénétration moyenne des positrons dans Al, Au en fonction de leur énergie incidente</i>	(83)
<i>IV.13. La profondeur de pénétration moyenne des positrons dans Be, Si, Cu en fonction de leur énergie incidente</i>	(84)
<i>IV.14. Distances maximale des parcours de positron en fonction de l'énergie de positron pour Be, Al, Si</i>	(86)

<i>IV.15. Distances maximale des parcours de positron en fonction de l'énergie de positron pour Ti, Fe, Cu.....</i>	<i>(86)</i>
<i>IV.16. Distances maximale des parcours de positron en fonction de l'énergie de positron pour Zn, Sn et Au.....</i>	<i>(87)</i>
<i>IV.17. Nombre moyen de collision aux grands angles en fonction de l'énergie de positron pour Al, Cu.....</i>	<i>(90)</i>
<i>IV.18. Nombre moyen de collision aux grands angles en fonction de l'énergie de positron pour Au, Si.....</i>	<i>(90)</i>

Listes des figures

I.1.L'un des photographies originales d'Anderson (1933) illustrant la découverte historique du positron.....	(5)
I.2. La production des positrons.....	(6)
I.3.Répartition de la durée de vie de positons dans un film de silice Si.....	(8)
I.4.Schéma processus des positrons; en rouge les positrons ralentir et formation de positronium.....	(10)
I.5. Les interactions possibles de positrons dans un solide.....	(11)
I.6. Différents processus de l'interaction du positron avec la matière.....	(11)
I.7. Deux photons d'annihilation de positons.....	(16)
I.8.Emission de photons par bremsstrahlung.....	(18)
I.9.Modèle sphérique d'une pénétration du faisceau d'électrons dans une cible solide.....	(21)
II.1.Différents processus de l'interaction du positron avec la matière.....	(25)
II.2. Schéma illustrant les collisions élastiques et inélastiques.....	(25)
II.3. Diffusion de particules par une cible.....	(27)
II.4. Diffusion d'une particule d'impulsion p par un centre de force répulsif centré en O	(29)
II.5. Section efficace élastique différentielle de diffusion polaire de 100eV et 1 keV positron pour Cu.....	(30)
III.1. Schéma de principe des méthodes de Monte Carlo (Mazurier 1999).....	(48)
III.2. Schéma de l'histoire de collision.....	(53)
III.3. Organigramme du schéma de Monte- Carlo.....	(57)
III.4. Le rôle des méthodes de Monte Carlo dans les sciences appliquées.....	(60)
III.5.Représentation des angles θ et φ d'un vecteur de direction.....	(60)
IV.1. La section efficace totale de l'aluminium et le cuivre.....	(69)
IV.2. La section efficace totale de l'aluminium et l'Argent.....	(69)
IV.3. Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [keV] pour le Be.....	(71)
IV.4. Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [keV] pour Al.....	(71)

IV.5. Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [keV] pour le Si.....	(72)
IV.6. Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [keV] pour le Ti.....	(72)
IV.7. Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [keV] pour le Fe.....	(73)
IV.8. Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [keV] pour le Cu.....	(73)
IV.9. Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [keV] pour le Zn.....	(74)
IV.10. Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [keV] pour le Sn.....	(74)
IV.11. Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [keV] pour le Au.....	(75)
IV.12. Coefficient de rétrodiffusion (Bsc) des positrons en fonction de numéro atomique	(81)
IV.13. La profondeur de pénétration moyenne de positron pour Al et Si.....	(85)
IV.14. La profondeur de pénétration moyenne de positron pour Al et Au.....	(85)
IV.15. Les distances maximales parcourue dans Be, Al, Si, Ti, Fe, Cu, Zn, Sn, Au en fonction de l'énergie incidentes des positrons.....	(88)
IV.16. Les distances maximales parcourue dans Be, Au en fonction de l'énergie incidentes des positrons.....	(88)
IV.17. Le profil de stoppage de positron dans le Be en fonction de $Z(A^\circ)$	(91)
IV.18. Le profil de stoppage de positron dans le Al en fonction de $Z(A^\circ)$	(92)
IV.19. Le profil de stoppage de positron dans le Cu en fonction de $Z(A^\circ)$	(92)
IV.20. Le profil de stoppage de positron dans le Au en fonction de $Z(A^\circ)$	(93)
IV.21. Le profile de stoppage de positron dans le Zn en fonction de $Z(A^\circ)$	(93)
IV.22. Le profile de stoppage de positron dans le Sn en fonction de $Z(A^\circ)$	(94)
IV.23. Le profile de stoppage de positron dans le Ti en fonction de $Z(A^\circ)$	(94)
IV.24. Le profile de stoppage de positron dans le Fe en fonction de $Z(A^\circ)$	(95)

Introduction Générale

L'interaction des particules chargées ralenties dans les solides, comme les positrons, est d'une importance primordiale dans beaucoup de domaines de la physique de solide, des études en surface et en microélectronique. Ce domaine de recherche qui a commencé avec les travaux et les expériences de Debenedetti (Debenedetti et al. 1940), a suscité une attention particulière pendant ces deux dernières décades vu son importance et son utilité dans une large variété de technique comme : **ACAR** (angular correlation of annihilation radiation), **PLMT** (positron life time measurement techniques), **LEPB** (low energy positron beam), **PRM** (positron reemission microscopy) ...etc.

Le développement rapide de ces techniques a favorisé la nécessité du développement de l'outil théorique pour faire une description du comportement des positrons dans les solides. Les positrons émanant d'une source radioactive ont une caractéristique de spectre d'énergie continue d'une désintégration bêta, avec un point final d'énergies de l'ordre du MeV. Il existe maintenant des techniques disponibles (Schultz and Lynn 1988) où les positrons de haute énergie provenant des sources radioactives où la production de paires peuvent être modérés à un faisceau monochromatique avec des énergies cinétiques contrôlables de quelques eV à la région KeV. Dans les deux cas, les positrons perdent rapidement leur énergie dans la matière condensée. Au plus hautes énergies de positrons le processus le plus important est l'ionisation ; à savoir, le positron excite les électrons de base dans les collisions avec les atomes (Perkins and Carbotte 1970).

L'étude de l'interaction des positrons avec la matière joue un grand rôle dans divers champs d'applications pour les informations qu'elle peut donner sur la structure atomique et électronique du matériau.

Dans le code Monte Carlo utilisé dans le présent travail, la simulation des trajectoires des positrons dans les solides, est basée sur la section efficace élastique écrantée et modifiée de Rutherford et la section efficace totale de Dapor (Dapor et al.2004) pour simuler les collisions élastiques, alors que la fonction d'excitation de Gryzinski (Gryzinski 1965) et le modèle optique d'Ashley (Ashley et al.1988) sont utilisés pour simuler les collisions inélastiques.

Ce choix est justifié par le fait que, les processus se manifestant lors de la pénétration des positrons, d'énergie de l'ordre de KeV, sont les collisions élastiques et inélastiques.

L'objectif principal de notre travail est donc d'étudier le transport des positrons dans les solides à basse énergies 1-5keV. Cette étude consiste essentiellement d'une part à calculer quelques paramètres de transport des positrons comme la section efficace totale où nous avons utilisé le modèle Dapor (Dapor et al.2004) avec l'introduction de l'expression analytique de la section efficace de transport de Rouabah (Rouabah et al.2010). Cette expression nous a permis d'obtenir des valeurs plus précises pour quelques éléments du tableau périodique allant de Be ($z=4$) - Au ($z=79$). D'autre part et à l'aide de l'expression de section efficace de transport précédente on a calculé le libre parcours moyen de transport (LPMT) qui est relié à la section efficace de transport et le nombre moyen de collision aux grands angles.

Le coefficient de rétrodiffusion, un autre paramètre de transport est calculé dans cette étude à l'aide de la simulation Monte Carlo, où nous avons utilisé différentes approches basées sur un traitement classique et quantique. A cet égard, nous avons provisoirement suggéré des expressions qui donne la dépendance du coefficient de rétrodiffusion BSC des positrons au numéro atomique Z pour toutes les cibles solides, ce qui ne nécessite aucun recours aux calcul Monte Carlo.

La profondeur de pénétration et la distance maximale du parcours des positrons sont aussi calculés en fonction de l'énergie incidente toujours dans la gamme d'énergie 1-5keV à l'aide de la simulation Monte Carlo. Le profil de stoppage qui constitue un paramètre très important dans la compréhension de l'interaction positron-matière est aussi calculé par la méthode de simulation Monte Carlo pour différentes énergies incidentes des positrons.

L'organisation de ce manuscrit est scindée en quatre chapitres :

Dans le premier, nous allons présenter brièvement les bases théoriques nécessaires à la compréhension des mécanismes d'interaction des positrons avec la matière et dont la maîtrise est indispensable pour pouvoir faire des mesures expérimentales ou bien des calculs numériques par la voie de la simulation.

Le second chapitre sera consacré à la distribution des collisions élastiques et inélastiques des positrons dans la matière, nous aborderons également les diverses méthodes et approches décrivant les collisions élastiques et inélastiques des positrons incidents avec les électrons et les noyaux de l'atome cible.

Dans le troisième chapitre, une description générale des méthodes de simulation Monte Carlo (MC) utilisées dans le présent travail est fournie. Ceci est accompagné des bases physiques et statistiques qui sont prises en considération dans toutes les méthodes de simulation (MC). Ensuite on donne quelques applications de cette méthode suivie d'une comparaison avec d'autres méthodes de simulations.

L'accent sera mis sur le code MC utilisé dans ce travail, basé sur la section efficace écrantée de Rutherford et la section efficace élastique obtenue par le rapport de Dapor (Dapor et al.2004) ou on a utilisé la section efficace de transport obtenue par Rouabah (Rouabah et al.2010) pour simuler les collisions élastiques. Pour simuler les collisions inélastiques on s'est basé sur la fonction d'excitation de Gryzinski (Gryzinski 1965) et le modèle optique d'Ashley (Ashley et al. 1988).

Le dernier chapitre, comporte nos résultats de calcul concernant différents paramètres de transport des positrons dans la matière discutés et comparés à ceux d'autres auteurs.

Notre étude est achevée par une conclusion générale où on retrace les principaux résultats obtenus par rapport aux objectifs consignés à ce présent travail.

I.1.Introduction

L'étude de l'interaction des particules chargées comme les positrons avec la matière a une grande importance grâce aux informations obtenues par les différents signaux obtenus.

Ces différentes particules apportent différents types d'informations sur la matière dont est constitué l'échantillon. Elles sont analysées par différents détecteurs qui permettent de reconstruire une image en trois dimensions de la surface.

L'étude du transport des positrons dans les matériaux nécessite une profonde compréhension des paramètres qui caractérisent ce phénomène c'est pour cette raison qu'on se focalise sur l'échelle théorique. Le but d'une telle étude est de déterminer les interactions qui existent entre les diverses particules intervenant dans la collision. Dans ce chapitre on revient sur les notions de base se rapportant aux positrons et les différentes formulations analytiques, et modèles empiriques consacrés aux calculs.

I.2.Notions générales sur les positrons

Les électrons et les positrons produisent les mêmes interactions électromagnétiques dans la matière. Ils perdent leur énergie par ionisation et excitation sensiblement de la même façon que les particules chargées lourdes, avec cependant trois différences importantes :

- La perte d'énergie par ionisation doit être traitée de façon spéciale puisque les masses de la particule incidente et de l'électron-cible sont identique.
- Alors que le parcours des particules chargées lourdes peut être décrit par une droite ; les électrons pouvant subir des déviations importantes de leur trajectoire par collisions élastiques, leur parcours est assimilé à une ligne brisée.
- Les particules aussi légères que les électrons et les positrons peuvent perdre une partie de leur énergie par émission de rayonnement (appelé rayonnement de freinage).

I.2.1. Observation du positron

Notre étude est portée sur le positron qui a été postulée par Dirac (1930) (Dirac 1930 ; Anderson 1932), le positron est l'antiparticule de l'électron (figure I.1) qui possède les mêmes caractéristiques :

même masse ($9.1 \times 10^{-27} \text{ kg}$) et spin (1/2), excepté le signe de la charge et le moment magnétique. Les positrons sont stables dans le vide (durée de vie au moins $> 2 \times 10^{21}$ année); (Belotti et al. 1983) mais thermalisent rapidement et s'annihilent avec des électrons dans les matériaux, principalement par l'intermédiaire désintégration 2γ ($\approx 511 \text{ KeV}$) généralement en quelques centaines de picosecondes.

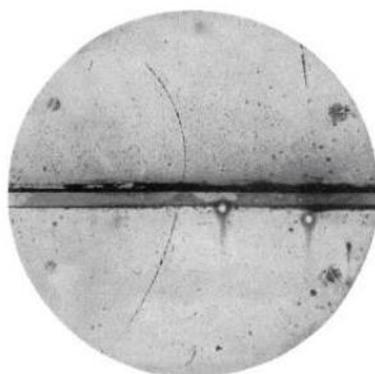


Figure I.1 : L'un des photographies originales d'Anderson (1933) illustrant la découverte historique du positron.

I.2.2. Les sources des positrons

L'intérêt des émetteurs de positrons est connu depuis plusieurs années (Bendriem et al. 1998). Les émetteurs de positrons sont des isotopes radioactifs (^{11}C , ^{13}N , ^{15}O , ^{18}F) qui peuvent facilement être incorporés aux molécules, sans altérer leurs propriétés biologiques. Les premières molécules marquées au ^{18}F ont été ainsi synthétisées. On construisit alors les premiers tomographes à émission de positrons (caméras TEP) utilisables dans un environnement clinique.

Un faisceau de positrons mono énergétiques de haute intensité est d'un intérêt majeur en physique atomique et des particules, ainsi que dans la science des matériaux. Sur une échelle microscopique en particulier dans la région proche de la surface des échantillons, l'investigation de la structure et des défauts par des faisceaux lents de positrons jouent un rôle fondamental en physique de l'état solide.

Ces dernières années, de grands efforts ont été entrepris pour développer des systèmes pour la production de positrons modérés de haute intensité (figure I.2), il existe un nombre remarquable de source de positron on cite :

- ❖ Sources de positons à base d'isotopes radioactives
- ❖ Source de Gallium (Ga) : énergie maximale des positrons est égale à 1.88MeV
- ❖ Source de Sodium (Na) : énergie maximale des positrons est égale à 0.54MeV
- ❖ Source de Cuivre (Cu) : énergie maximale des positrons est égale à 0.65MeV

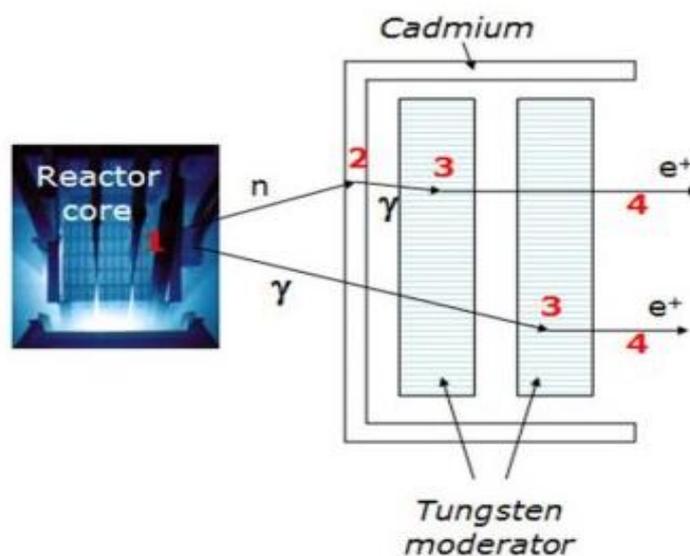


Figure I.2 : Production des positrons ; 1 : Le neutron n et les rayons gamma γ sont émis à partir des réactions de fission du cœur du réacteur, 2 : Neutrons réagissent dans le carénage de cadmium produisant des rayons gamma supplémentaires, 3 : Les rayons gamma interagissent par paire de production dans le tungstène modérateur à partir du positron, 4 : Le positron thermalise et émet de la surface du tungstène avec des énergies de quelques électrons volts (eV).

La production de positrons par la production de pair de rayons gamma (Peter et al. 1988 ; Hugenschmidt et al. 1999), une autre idée récemment suggérée par Skalsky et Van house (Van House and Arthur 1988) implique la production de source intense du I^{126} par irradiation neutronique du ^{124}Xe dans un réacteur assez typique ($\approx 10^{14}$ n/Sec Cm^2). Les caractéristiques physiques des principaux isotopes utilisés en TEP sont résumées dans le tableau I.1. Les émetteurs de positrons les plus utilisés en TEP peuvent être répartis en trois groupes, en fonction de leurs caractéristiques physiques et de leur période radioactive (Pagani et al. 1997). La période radioactive ou demi-vie correspond à la durée nécessaire pour que l'activité d'une source soit divisée par deux.

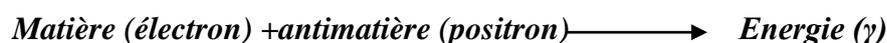
On distingue tout d'abord l'oxygène 15 (^{15}O), l'azote 13 (^{13}N) et le carbone 11 (^{11}C), de période respective 2,10 et 20 minutes. Ces isotopes, constitutifs de l'ensemble des composés biologiques, permettent de réaliser des marquages efficaces pour un grand nombre de molécules. Compte tenu de leur courte durée de vie, la production des isotopes et la synthèse du traceur doivent être réalisées rapidement, et à proximité immédiate de lieu de réalisation des examens TEP (Saha et al.1992). L'utilisation de ces isotopes est limitée aux centres de recherche multidisciplinaires, disposant de radiochimistes assurant la production du traceur, d'ingénieurs et de médecins.

Isotopes	^{11}C	^{13}N	^{15}O	^{18}F	^{76}Br
Energie cinétique maximale des β^+ (MeV)	0.98	1.19	1.72	0.63	3.98
Energie cinétique la plus probable des β^+ (MeV)	0.39	0.49	0.73	0.25	1.2
Libre parcours maximal dans l'eau (nm)	3.9	5	7.9	2.3	20
Libre parcours moyen dans l'eau (nm)	1.1	1.5	2.7	0.6	5
Période des radioéléments (min)	20.4	10.0	2.1	109.8	972

Tableau I.1 : Caractéristiques des principaux scintillateurs utilisés en tomographie par émission de positrons (Dreuille et al.2002)

I.3.Le positron dans la physique des solides

L'importance du positron dans la physique de solide réside dans son interaction avec la matière (électron) qui se présente comme suit :



L'intérêt du positron en métallurgie est apparu en 1964, lorsque Berko remarqua que le temps de vie du positron dans l'aluminium était augmenté si celui-ci était écroui.

Cette expérience suivie d'autres sur les lacunes, a montré la propriété du positron à être piégé par des défauts "creux". On s'est rapidement rendu compte de l'intérêt du positron en physique des solides. Si l'on ajoute que :

- ❖ Le positron n'est pas piégé par les défauts "pleins" tels que les interstitiels et les amas d'interstitiels.
- ❖ L'échantillon peut se présenter sous forme industrielle (les informations sont obtenues malgré un fort taux d'érouissage, une forte teneur en impuretés ou en présence d'ordre à courte ou longue distance).
- ❖ Les mesures peuvent se faire à n'importe quelle température. On comprendra ainsi pourquoi cette technique s'est rapidement répandue en métallurgie car elle permet l'étude d'échantillon dans des conditions réalistes.

I.4. Comportement de positron dans la matière

Le positron est indéfiniment stable dans le vide, bien que dans les métaux, il thermalise rapidement et s'annihile avec un électron principalement par 2 photon décroissants avec une durée de vie moyenne en générale quelque picoseconde (ps).

I.4.1. La durée de vie du positron

Dans un solide la durée de vie du positron est très courte, à cause de la forte densité électronique, par exemple dans le silicium elle est égale à 222 ps (figure I.3), et dans le fer de 110 ps. Etant donné que la durée de vie du positron dans les métaux est de l'ordre de 10^{-10} S. Si on prend une source du positron par exemple le sodium, son activité est de $7\mu\text{c}$, cela signifie que $3 \cdot 10^5$ positrons sont émis par seconde.

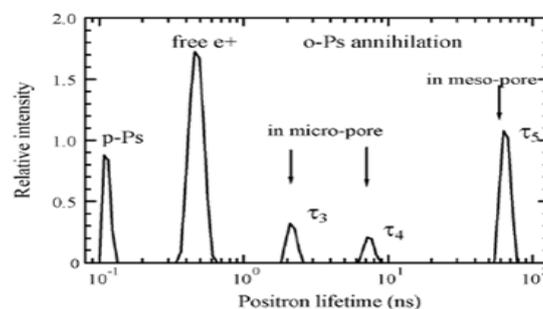


Figure I.3 : Répartition de la durée de vie des positrons dans un film de silicium Si

La description en particulier du niveau fondamental faisant intervenir le couplage des spins totaux de l'électron et du positron sera totalement différente de celle de l'hydrogène. L'étude expérimentale du positronium apparaît donc extrêmement importante comme test d'une théorie souvent très complexe (Cagnac 1971).

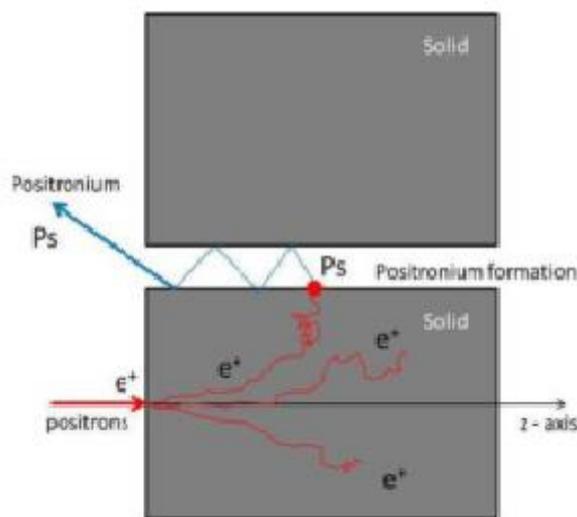


Figure I.4 : Schéma processus des positrons ; en rouge les positrons ralentir et formation de positronium. En bleu la thermalisation de positronium dans l'ordre nano canaux

1.5. L'interaction des positrons avec la matière

L'interaction des positrons avec la matière joue un rôle très importance dans le domaine de la transmission conventionnelle, de la micro et de l'optoélectronique. L'étude de la transmission des positrons et de rétrodiffusion à partir des solides est importante. La rétrodiffusion des positrons à partir de solide à un impact sur toute une gamme de techniques de la science des surfaces (Aydın 2005).

Lorsque le positron provenant de certaines sources radioactives entrer dans le solide, il perd rapidement son énergie cinétique ($\sim 10\text{PS}$), plusieurs processus peuvent se produire (figure I.5). En dehors d'une fraction qui rétrodiffuse à la surface, les positrons soumis à des processus liés à plusieurs mécanismes de perte d'énergie d'arrêt et sont enfin thermalisé (Walker et al.1990).

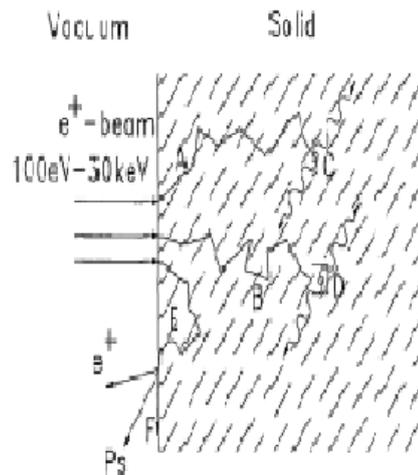


Figure I.5 : Les interactions possibles de positron dans un solide.

A : arrêt et thermalisation ; arrêt des positons implantés ; B : diffusion des positons thermalisés ; C : annihilation des positons ; D : piégeage des positons ; E : rétrodiffusion à l'interface du solide ; F : piégeage et la destruction dans une surface.

Le bombardement d'un matériau par un faisceau positrons donne naissance à divers phénomènes (collisions élastiques et/ou inélastiques) qui in fine, se traduisent par l'existence d'électrons absorbés, d'électrons rétrodiffusés, d'électrons transmis, d'électrons secondaires, d'électrons Auger, d'annihilation, d'émission Bremsstrahlung et de rayon X (Figure I.6)

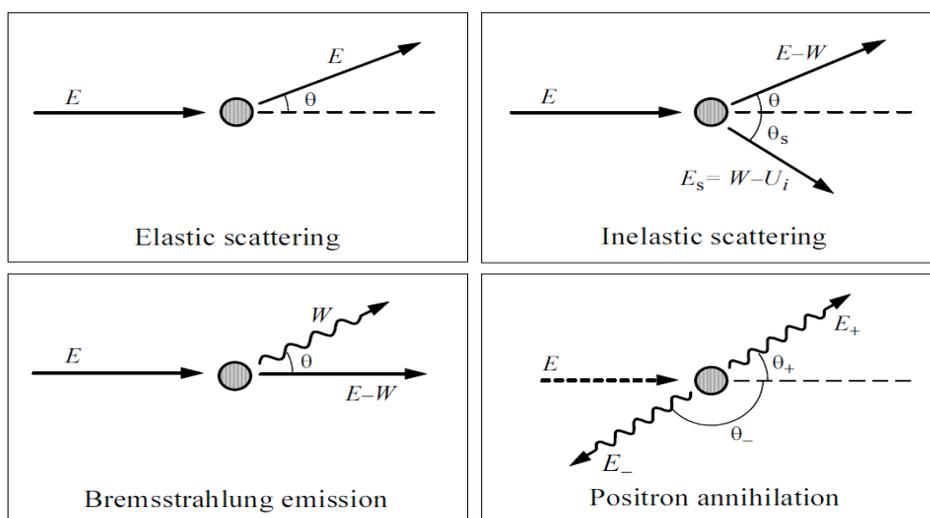


Figure I.6 : Différents processus de l'interaction du positron avec la matière

I.5.1. Implantation

Dans les études positron-annihilation, les positrons sont implantés dans l'échantillon avec des énergies cinétiques qui dépassent considérablement l'énergie thermique $K_B T$. Après l'implantation le positron perd son énergie en raison d'une variété d'interactions avec le réseau (diffusion, électron / phonon, excitation, ...etc.). L'interaction d'un faisceau de positron avec une surface solide est différente de celle des électrons.

La principale raison est la différence de charge, mais l'absence d'une mer de Fermi pour les positrons dans l'échantillon joue également un rôle. En outre, dans la plupart des faisceaux de positrons, il y a à tout moment en moyenne un seul positron présent dans le solide, afin d'interdire le transfert d'énergie cinétique à partir du positron aux autres positrons dans l'état solide, de sorte que ces particules comptent pour la diffusion ultérieure, comme cela pourrait être le cas avec des électrons. Ces raisons combinées représentent le fait que, par exemple, la section efficace de diffusion (et rétrodiffusion) est significativement plus grande pour les électrons que pour les positrons (Massoumi et al. 1992; Schultz and Lynn 1988; Valkealahti and Nieminen 1984).

Le processus d'arrêt de positrons très énergétiques (domaine de MeV) est comme les électrons s'arrêtant dominé par la masse d'arrêt radiatif (bremsstrahlung). Le positron interagit dans un champ coulombien du noyau ou de l'un des électrons orbitaux atomiques par l'émission d'un photon. Par rapport aux électrons cette perte d'énergie est moins efficace pour les positrons (Schultz and Campbell 1985; Schultz and Lynn 1988). À des énergies de quelques KeV, les positrons induisent l'émission des électrons Auger (Schultz and Lynn 1988).

Le profil d'arrêt des positrons émis par des sources radioactifs (β^+) est exponentiel (Brandt and Paulin 1977).

$$P(x) = \alpha \exp(-\alpha x),$$

$$\alpha \approx 16 \frac{\rho [g / cm^3]}{E_{\max}^{1.4} [MeV]} cm^{-1} \quad (I.1)$$

Où ρ est la densité de solide et E_{\max} est l'énergie maximale, énergie du spectre continu de rayonnement (β^+).

Pour un faisceau mono énergétiques de positons obtenus à partir d'une faible énergie (énergies typiques sont inférieurs à 50 KeV), le profil d'arrêt peut être décrit par (Valkealahti and Nieminen 1984).

$$P(x) = -\frac{d}{dx} \exp[-((x - \bar{x})/x_0)^2] \quad (\text{I.2})$$

Où x_0 donne la position de pic du profil, alors que la profondeur moyenne d'arrêt est $\bar{x} \approx 0.886x_0$, en raison de l'asymétrie du profil.

La profondeur d'arrêt moyenne est donnée par :

$$\bar{x} = ZE^n [\text{keV}] \quad (\text{I.3})$$

$$Z \approx 4 \cdot 10^{-6} / \rho [\mu\text{g}/\text{cm}^2] \text{ et } n \approx 1.6.$$

Cette description est très adaptée aux simulations Monte Carlo pour les profils d'arrêt des électrons de faible énergie (Shimizu and Ze-Jun, 1992; Ghosh and Aers 1995; Dapor 1996; Denison and arrell 2004; Nyka'nen et al 2012).

La profondeur moyenne d'arrêt varie de quelques nanomètres jusqu'à un quelques micromètre. Par conséquent les positrons de basse énergie peuvent être utilisés pour étude près de la surface des couches et des couches minces. L'arrêt et la thermalisation des positrons sont des processus rapides, en prenant seulement 1-3 ps dans les métaux (Jensen and Walker 1990) et les semi-conducteurs (Lynn and Mullen 1984).

I.5.2. Thermalisation

Un positron qui pénètre dans un métal est ralenti par arrêt électronique jusqu'à ce que son énergie soit réduite à quelques électronvolts. Le temps de ralentir un positron aux énergies quasi-thermiques revient à moins d'une picoseconde, le temps d'arrêt d'un phonon (pour une thermalisation complète du positon) est d'ordre de 10 PS (Carbott and Arora 1967; Schultz and Lynn 1988).

Dans les semi-conducteurs et des solides ioniques, les positrons arrêtés dans les métaux par la création électron-trou cesse d'être possible lorsque l'énergie des positrons devient inférieure à la bande interdite, ainsi une région plus large de l'énergie doit être perdue par les modes de phonons dans l'absence de mécanismes plus efficaces, ce qui donne plus de thermalisation dans les métaux et les isolants, cet effet est encore plus prononcé.

La perte d'énergie de positron dans de nombreux isolants implique la formation de positronium d'une manière ou d'une autre (Schultz and Lynn 1988).

I.5.3. Profile d'implantation

Une description mathématique du profil d'implantation de positrons, notée $P(E,z)$ obtenu à partir des calculs Monte-Carlo (Valkealahti and Nieminen, 1983,1984)

$$P(E, z) = \frac{mz^{m-1}}{z_0^m} \exp \left[- \left(\frac{z-\bar{z}}{z_0} \right)^m \right] \quad (I.4)$$

Où $P(E, z) dz$ est défini comme étant la fraction des positrons introduits dans le solide avec une énergie initial E qui sera arrêté à une profondeur comprise entre z et $z + dz$.

Le paramètre m est considéré comme étant constante (≈ 1.9), légèrement décroissante en fonction du numéro atomique positrons.

Le paramètre de pénétration z_0 est liée à la profondeur d'implantation moyenne \bar{z} par la relation suivante (Nielsen et al. 1990) :

$$\bar{z} = \frac{A}{\rho} E^n \quad (I.5)$$

E est en KeV et ρ est la densité de l'échantillon [g/cm^3].

A et n sont des constantes déterminées expérimentalement (Valkealahti and Nieminen 1983, 1984).

I.5.4. Diffusion et piégeage des positrons

I.5.4.1. La diffusivité de positrons

Le mouvement des positrons thermalisées peut être caractérisé par une diffusivité D_+ et mobilité μ . Ces deux grandeurs sont liées par l'équation d'Einstein :

$$eD_+ = K_B T \mu \quad (I.6)$$

Avec K_B est la constante de Boltzman ($K_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{J/K}$) et e est la charge élémentaire de positron ($1.6 \cdot 10^{-19} \text{C}$). La diffusivité de positons détermine la vitesse à laquelle le positron thermalisé atteint les pièges.

D_+ est le coefficient de diffusion de positron (dans les semi-conducteurs $D_+=1-2 \text{ cm}^2/\text{V}$)
La longueur caractéristique de diffusion pendant la durée de vie de positons τ est
(Tuomisto and Makkonen 2013)

$$L_+ = (D_+ \tau)^{1/2} = (D_+ / \lambda_b)^{1/2} \quad (\text{I.7})$$

λ_b est le taux d'annihilation de positron. On notera que les longueurs de diffusion sont de l'ordre de 100 nm, à savoir faible par rapport à la profondeur de l'implantation (Nielsen et al, 1985a; J. Makinen et al.1990,1991; Schultz et al.1988).

I.5.4.2. Piégeage des positrons

Lors de sa diffusion dans un solide, et avant son annihilation, le positron peut interagir avec un volume important ($\approx 10^6$ sites). N'importe quel défaut chargé négativement, vide, neutre ou volume ouvert présente un puits de potentiel ou le positron peut être piégé. Cette très grande interaction dans le volume est responsable de la haute sensibilité de la détection des défauts.

Dans le cas des matériaux ayant une distribution uniforme des défauts, à cause du piégeage dans les défauts, la longueur de diffusion de positron est $L_{+,eff}$

$$L_{+,eff} = \left(\frac{D_+}{\lambda_b + k_t} \right)^{1/2} \quad (\text{I.8})$$

Avec le taux de piégeage de positons dans des défauts K_t , défini comme :

$$k_t = \nu_t n_t \quad (\text{I.9})$$

ν_t représente le taux de piégeage de positron pour un certain défaut et n_t la concentration des défauts (Nieminen and Manninen 1979).

I.5.5. Phénomène supplémentaire pour les positrons : l'annihilation

Les positons, injectés dans un solide, perdent leur énergie dans quelques picosecondes et, après une certaine diffusion, annihilent principalement en deux quanta gamma 511KeV avec un électron du milieu (Dupasquier and Mills 1995 ; Brusa et al.2002).

En raison de leur charge positive, les positons sont efficacement piégés par des défauts de volume ouverts.

Un positron pénétrant un milieu de numéro atomique Z avec l'énergie cinétique peut s'annihiler avec un électron par émission de deux photons (Dupasquier 1985 ; Eldrup 1981), ce phénomène se produit le plus souvent lorsque le positron a perdu son énergie cinétique quand il est au repos (Figure I.7).

Par conservation de l'énergie, $E_{\text{avant}} = E_{\text{après}}$ ($2m_e c^2 = 1.022 \text{ MeV} = E_\gamma + E_\gamma$). Nous supposons que les électrons cibles sont libres et au repos, sans tenir compte ainsi des effets d'électrons de liaison, qui permettent à un photon d'être absorbé (Heitler 1954). Lorsque l'annihilation se produit en vol, l'énergie cinétique E du positron est plus grande que l'énergie d'absorption, les photons ont des énergies différentes E^- et E^+ (Laricchia et al. 2003).

La section efficace de 2γ annihilation $\sigma_{2\gamma}$ de libre de positrons non-relativiste donné par : (Stevens, 1980)

$$\sigma_{2\gamma} = \pi r_0^2 c / v_c \quad (\text{I.10})$$

Le paramètre $r_0 = e^2 / m_e c^2 = 2.8 \times 10^{-15} \text{ m}$ est le rayon classique de positron.

La section efficace d'annihilation de trois photons est un facteur constant pour la structure fine de l'ordre de ($\approx 1/137.036$) (Mills 1992).

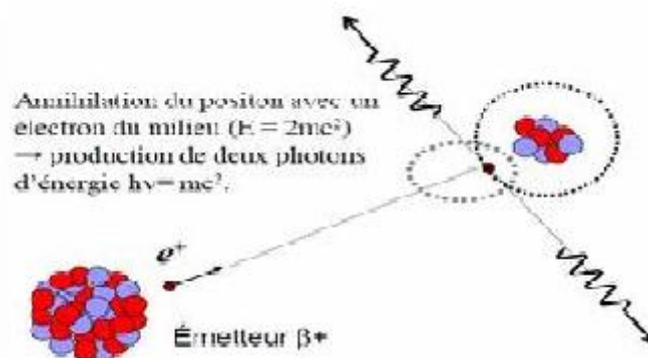


Figure I.7 : Deux photons d'annihilation de positrons

I.5.5.1. Paramètres d'annihilation de positons

Pour les densités d'électrons et de positons données, le taux d'annihilation de positons λ et la durée de vie moyenne peut être calculé par la formule (Boronski and Nieminen, 1986)

$$\lambda = \frac{1}{\tau} = \pi r_e^2 c \int dr n_+(r) n_-(r) g(r, r; [n_+, n_-]) \quad (\text{I.11})$$

Où r_e est le rayon classique de l'électron, c est la vitesse de la lumière. $g(r, r, [n_+, n_-])$ est le facteur que l'on appelle la mise en valeur, la valeur de la fonction de corrélation de paires électron-positron $g(r, r, [n_+, n_-])$ à distance zéro.

Le facteur d'amélioration tient compte de courte sélection du positron par des électrons non pris en compte dans la densité moyenne d'un corps $n_-(r)$ et $n_+(r)$.

L'énergie de corrélation électron-positron est de relation avec la paire électron-positron en fonction de distribution par l'intermédiaire (Jensen and Walker 1988).

$$E_c^{e-p} [n_+, n_-] = - \int_0^1 d\lambda \int dr dr' \times \frac{n_-(r) n_+(r') \{g(r, r'; [n_+, n_-], \lambda) - 1\}}{|r - r'|} \quad (\text{I.12})$$

Typiquement le taux d'annihilation est

$$\lambda = \pi r_e^2 c \int dr n_+(r) n_-(r) \gamma(n_-(r)) \quad (\text{I.13})$$

Avec $\gamma(n_-(r))$ est le facteur de rehaussement zéro- positon densité.

I.5.6. Emission de photons par bremsstrahlung

Toute particule chargée rapide peut perdre une partie de son énergie en interagissant avec le champ coulombien des noyaux du milieu traversé car elle est soumise à une accélération et est déviée de sa trajectoire initiale. Ce phénomène s'accompagne d'émission de photons dite photons de freinage (figure I.8) et on parle d'émission d'un rayonnement de freinage (dont le terme allemand "bremsstrahlung" est

souvent employé), ce qui se traduit par une perte d'énergie cinétique $\frac{-dE}{dX}$ pour la particule.

On constate que la masse des particules intervient ici (en $1/m^2$) ; le rayonnement de freinage est important pour des électrons et positrons (Seltzer and Berger 1985).

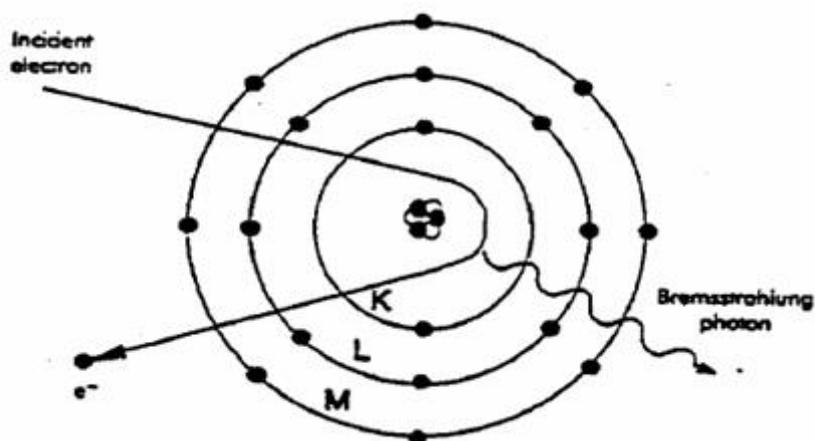


Figure I.8 : Emission de photons par bremsstrahlung

Lors de l'émission de rayonnement, l'énergie de l'électron (ou positron) est diminuée de l'énergie $h\nu$ du photon émis suivant la conservation de l'énergie et sa direction de propagation est modifiée suivant la conservation de l'impulsion. Ce rayonnement est continu et se situe dans le domaine des rayons X.

I.6. Etat de surface

Les positrons comme, particules chargées, ressentent une interaction image attractive du solide semi-infinie. Cette attraction image peut être suffisamment forte pour que les positrons soient localisés dans la surface (Valkealahti and Nieminen 1984).

I.7. La rétrodiffusion - Théorie de rétrodiffusion

Les positrons sont rétrodiffusés suivant les mêmes lois que les électrons négatifs. Le nombre de positrons est cependant notablement inférieur à celui des électrons rétrodiffusés dans les mêmes conditions (Danguy and Quivy 1956 ; Seliger, 1950). La fraction des particules rétrodiffusées est un facteur primordial dans la détermination de la validité du modèle utilisé dans la simulation, et il nous renseigne sur la fraction des particules implantées. Plusieurs modèles et approches ont été proposés pour le calcul de la fraction d'électron rétrodiffusé. La méthode de Monte Carlo est considérée parmi les méthodes les plus utilisées dans ce calcul.

Néanmoins, ils existent d'autres méthodes qui se basent sur des formulations semi-empirique et analytique dont on va citer quelques-unes.

I.7.1. L'approche d'Everhart

Everhart a proposé une expression semi empirique à une incidence normale

$$BSC = \frac{a-1+0.5^a}{a+1} \quad (I.14)$$

$$a=0.045Z$$

Z est le nombre atomique de la cible.

Cette expression a été évaluée à partir de la section efficace de Rutherford combinée avec la relation de la perte d'énergie de Thomson-Whiddington

$$(E_0^2 - E^2 = k\rho z) \quad (I.15)$$

Ou E est l'énergie probable dans une profondeur z, ρ est la densité de la cible et k est une constante. Ce modèle est valide seulement pour des énergies supérieures à 10 KeV et pour des élément de nombre atomique $Z \approx 40-45$ (Adesida et al.1980 ; Everhart 1960).

I.7.2. L'approche d'Archard

Supposant que la particule implantée dans le matériau parcourt un chemin droit en profondeur jusqu'à la première diffusion, puis il se déplace dans toutes les directions.

La distribution des particules incidentes peut être représentée par une sphère.

Archard suppose que la partie supérieure de cette sphère (au-dessus de la surface de la cible) contient les électrons rétrodiffusés et la partie inférieure contient les électrons absorbés.

Le BSC par la formule d'Archard (Archard 1961 ; Dapor1990) est donné par :

$$BSC = \frac{7Z-80}{14Z-80} \quad (I.15)$$

L'expression d'Archard donne des bons résultats pour les éléments lourds.

I.7.3. Le modèle de Kanaya et Okayama

Pour les éléments légers (de faible Z) et pour les éléments lourds, on peut supposer comme en première approximation que les électrons dispersés à partir de point qui coïncident avec des profondeurs maximales de dissipation d'énergie, alors le coefficient de rétrodiffusion peut être obtenu par le modèle de Kanaya et Okayam suivant (Kanaya and Okayam 1972) :

$$B_{sc} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\theta_0} 2\pi \sin \theta d\theta = \frac{1}{2}(1 - \cos \theta_0) \quad (\text{I.16})$$

$$\tan \theta_0 = \frac{2.2\gamma(1 + \gamma)}{1 + 2\gamma - 0.21\gamma^2} \quad (\text{I.17})$$

Où γ est un paramètre lié au nombre atomique de la cible donné par l'équation suivante:

$$\gamma = \frac{2.97}{5 \times 2^{5/3}} Z^{2/3} = 0.187 Z^{2/3} \quad (\text{I.18})$$

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

I.7.4. Le modèle de Dapor (1990)

En se basant sur le modèle sphérique de la pénétration des électrons dans le solide (Dapor, 1990) suppose que :

- 1- La distribution des électrons peut être représentée par une sphère (Figure I.9).
- 2- Le nombre des électrons rétrodiffusés est proportionnel au volume de la portion de la sphère en dehors de la cible tandis que le nombre des électrons absorbés est proportionnel au volume de la portion de la sphère dans la cible.
- 3- La somme des fractions de la rétrodiffusion et électrons absorbé est égal à 1.
- 4- La fraction des électrons rétrodiffusés dépend du numéro atomique Z et de l'énergie incidente E_0 , $BSC = BSC(Z, E_0)$.

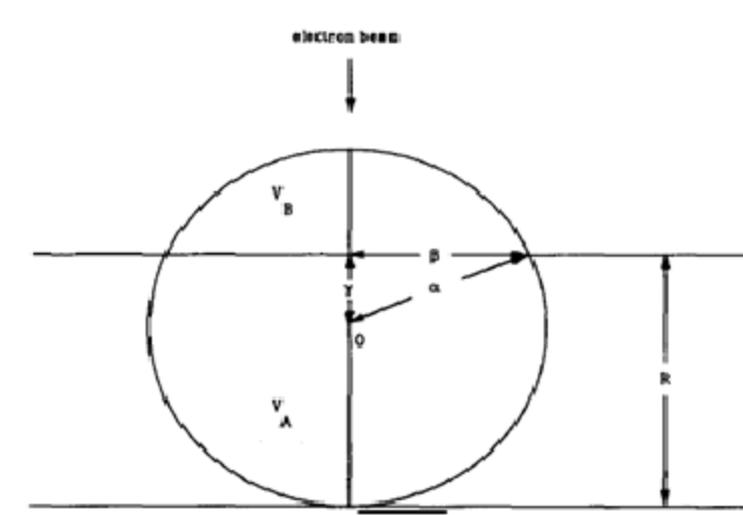


Figure I.9 : Modèle sphérique d'une pénétration du faisceau d'électrons dans une cible solide.

Avec α , β et γ représente rayons de la sphère, le coefficient de rétrodiffusion et la profondeur de diffusion respectivement. V_A et V_B volume de la sphère à l'intérieure et à l'extérieure de la cible.

R est la distance maximale parcourue.

Le BSC du modèle de Dapor est donné par :

$$BSC(Z, E_0) = 1 - \frac{1+3P(E_0)\sqrt{Z-1}}{(1+P(E_0)\sqrt{Z-1})^3} \quad (I.19)$$

Ou E_0 est l'énergie primaire incidente et $P(E_0)$ est un paramètre empirique déterminé à partir d'un ajustement linéaire par rapport à des données expérimentales (Dapor 1990, 1991).

Pour $2 \leq E_0 \leq 6.7$ keV

$$P(E_0) = 0.0811 + 0.0037E_0 \quad (I.20)$$

Pour $6.7 \leq E_0 \leq 45$ keV

$$P(E_0) = 0.1051 + 1.078 \times 10^{-4} E_0 \quad (I.21)$$

Cette expression valide dans l'intervalle d'énergie $2 \leq E_0 \leq 45$ KeV, mais elle est recommandée particulièrement pour des énergies comprises $6.7 < E_0 < 10$ KeV.

I.7.5. Le modèle de Tilinin

Tilinin a appliqué l'équation cinétique de type Boltzmann pour calculer le coefficient de rétrodiffusion. Dans ce cas le coefficient de rétrodiffusion est une fonction du rapport :

$$\sigma = \frac{R}{\lambda_{tr}} \quad (\text{I.22})$$

σ est un paramètre de rétrodiffusion (Tilinin 1982 ;Tilinin and Werner1990),

R est la distance maximale de parcours.

λ est le libre parcours moyen de transport

Le coefficient de rétrodiffusion pour le modèle de Tilinin s'écrit comme suit :

$$BSC = \frac{(\sigma+1)^{1/2}-1}{(\sigma+1)^{1/2+h}} \quad (\text{I.23})$$

Avec $h=1.908$

I.7.6. Théorie de Vicanek et Urbassek

Vicanek-Urbassek ont montré que le coefficient de rétrodiffusion est fortement lié au nombre moyen des collisions aux grands angles ν , subies par la particule avant de ralentir. Dans la théorie de Vikanek et Urbassek. L'expression du coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'angle d'incidence θ (Chaoui and Bouarissa 2004) est donnée par :

$$BSC = \left(1 + a_1 \frac{\mu_0}{\nu^{1/2}} + a_2 \frac{\mu_0^2}{\nu} + a_3 \frac{\mu_0^3}{\nu^{3/2}} + a_4 \frac{\mu_0^4}{\nu^2} \right)^{-1/2} \quad (\text{I.24})$$

$$\mu_0 = \cos(\theta)$$

$$a_1 = \frac{6}{\sqrt{\pi}} \approx 3.39$$

$$a_2 = \frac{27}{\sqrt{\pi}} \approx 8.59$$

$$a_3 = \frac{27}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{4}{\pi} - 1 \right] \approx 4.16$$

$$a_4 = \left[\frac{3}{2} - \sqrt{2} \right]^{-2} \approx 135.9$$

ν est le nombre moyen de collisions aux grands angles (mean number of wide angle collisions) donné par :

$$\nu = NR\sigma_{tr} \quad (\text{I.25})$$

Où σ_{tr} est la section de transport, N est le nombre d'atome par unité de volume donnée par la relation suivante :

$$N = \frac{N_A \rho}{A} \quad (\text{I.26})$$

N_A : Le nombre d'Avogadro, ρ : La densité de masse du matériau et A le numéro atomique.

N est le nombre d'atome par unité de volume, et σ_{tr} est la section efficace de transport (Rouabah et al.2009 ; Vicanek and Urbassek 1991).

I.8.Conclusion

La diffusion des particules ainsi que leur transport dans la matière sont un thème d'une importance considérable en physique moderne. En effet la démarche habituelle dans la recherche des propriétés microscopiques des corps consiste souvent à utiliser un faisceau des particules projectiles de caractéristiques physique bien connus comme les positrons pour explorer une cible inconnue.

A ce propos, la diffraction des positrons a été largement utilisée pour étudier la structure périodique des atomes sur la surface des matériaux.

Dans ce chapitre nous avons présentés une description des différents processus de transport des positrons dans la matière ainsi les paramètres qui caractérisent ce phénomène comme le coefficient de rétrodiffusion (BSC) que l'on va calculés en quatrième chapitre par l'utilisation de la méthode de simulation Monté Carlo.

II.1. Introduction

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

Le bombardement d'un solide avec un faisceau de positron donne naissance à divers phénomènes. D'un point de vue globale on peut les diviser en deux volets collision élastiques avec les noyaux atomiques ou les positrons incidents diffusent sans que leur énergie change provoquant des déviations successives des trajectoires et collisions inélastiques avant la thermalisation ou les positrons perdent leur énergie.

Les mécanismes électroniques incluent l'excitation des électrons du cœur ainsi que les électrons de valence et l'excitation collective des particules individuelles de la bande de conduction. Les diffusions inélastiques transfèrent l'énergie des positrons incidents au solide par chocs avec les électrons (choc collisionnel) et par un processus radiatif (Bremstrahlung). A des énergies supérieures à 1 MeV, le positron peut interagir avec le noyau, le Bremstrahlung spectre continue de RX, apparait lorsque les positrons incidents sont freinés par les noyaux atomiques. Dans ce chapitre nous allons étudier les interactions possibles des positrons avec la matière.

II.2. Généralités et définitions

Dans ce chapitre, on considère les interactions des positons d'énergie cinétique E avec la matière. Supposant que les particules déplacent dans une cible de numéro atomique Z et de la densité ρ , avec des atomes N par unité de volume. Les interactions possibles des positrons avec la matière sont :

- ❖ Les diffusions élastiques par les noyaux atomiques
- ❖ Diffusions inélastiques par les électrons atomiques
- ❖ Émission Bremstrahlung (rayonnement de freinage)
- ❖ L'annihilation des positrons avec les électrons (figure II.1) (Salvat et al. 2003).

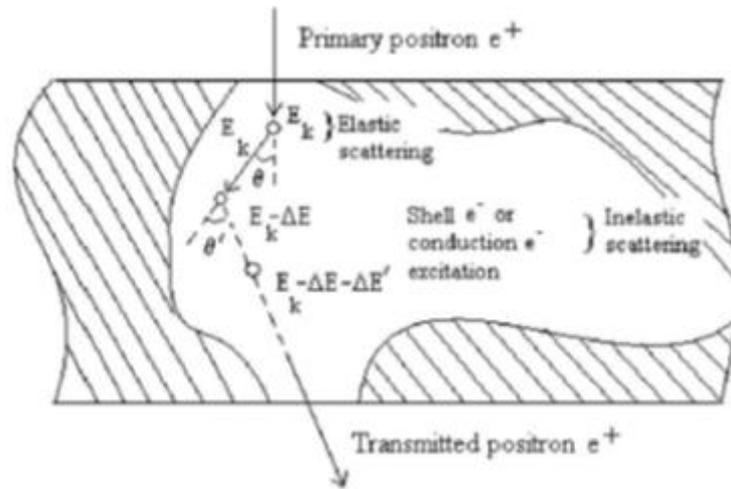


Figure. II.1 : Différents processus de l'interaction du positron avec la matière.

On appelle diffusion dans un champ de force de symétrie centrale la déviation des particules incidentes de leur direction initiale de mouvement (figure II.2), par suite d'interaction avec un centre diffusant (Yavorski and Detlaf 1986).

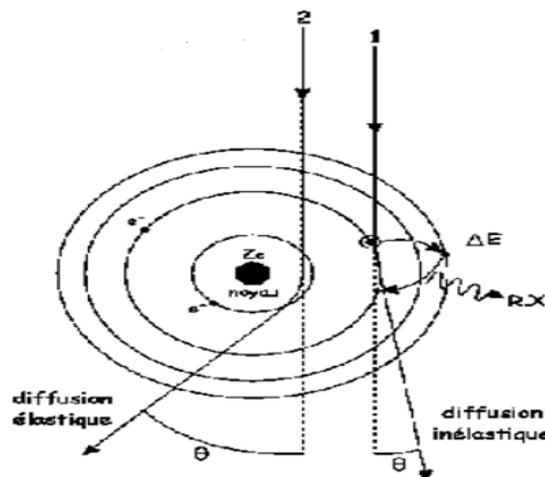


Figure II.2 : Schéma illustrant les collisions élastiques et inélastiques.

II.2.1. Collision élastique

On dit qu'il y a collision élastique lorsque le nombre de particules reste constant et que l'énergie interne de chaque particule reste inchangée avant et après le choc. En d'autres termes, les particules ne se déforment pas ni ne changent de nature. Ce processus a également une contribution négligeable au pouvoir d'arrêt total, mais ce type de collision peut provoquer des déplacements atomiques et donc créer des défauts (Juillard 1999).

II.2.2. Collision inélastique

On dit qu'une collision est inélastique lorsqu'une partie de l'énergie cinétique initiale du système s'est transformée en d'autres formes d'énergie. La collision s'accompagne alors d'une variation d'énergie interne et/ou d'une modification du nombre de particules, certaines pouvant être créées par fragmentation ou par équivalence masse-énergie. Les réactions nucléaires (désintégration, fusion et fission) sont également des processus inélastiques. En général, ces réactions dégagent une énergie considérable. Le caractère inélastique de la collision est mesuré par la quantité d'énergie. Avant d'étudier les collisions élastiques et les collisions inélastiques des positrons, nous allons donner la définition de la section efficace de diffusion.

II.3. Notion de section efficace

Classiquement, l'exploration d'un champ de forces s'effectue en étudiant la famille des trajectoires d'une particule qui s'y trouve soumise. La très faible portée des forces nucléaires, et l'effacement par la mécanique quantique du concept même de trajectoire à cette échelle, impose une méthode d'approche différente tant techniquement que conceptuellement.

L'analyse repose sur une méthode statistique qui fait intervenir la notion de section efficace. Le principe consiste à bombarder de façons aléatoire une cible par un faisceau monocinétique de particules-projectiles et analyser la distribution énergétique et angulaire des produits finaux. Le concept de section efficace garde sa pleine validité en mécanique quantique.

II.3.1. Définition de la section efficace

La notion de section efficace est avant tout expérimentale. Partons d'une expérience de collision typique :

Des particules incidentes d'impulsion p , dont le flux est F , arrivent sur une cible et sont diffusées (produisent un ensemble de particules finales).

Un détecteur compte les particules finales qui parviennent dans un angle solide $d\Omega$ au voisinage de la direction Ω . On suppose les particules de la cible suffisamment éloignées les unes des autres pour qu'une particule incidente n'interagisse qu'avec une seule particule cible à la fois (figure II.3).

On suppose que la cible est suffisamment mince pour qu'une particule n'interagisse qu'une fois au plus (par diffusions multiples).

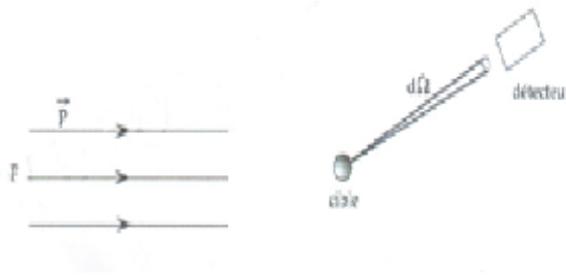


Figure II.3 : Diffusion de particules par une cible

Soit N le nombre de particules de la cible, F est le flux de la particule, le nombre moyen dn de la particule détectée par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega$ est proportionnelle à N , à $d\Omega$ et à F . on note $d\sigma/d\Omega$ le coefficient de proportionnalité.

$$dn = NF \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega \quad (\text{II.1})$$

La quantité $d\sigma/d\Omega$ a la dimension d'une aire (par stéradian). Elle est appelée section efficace différentielle de diffusion dans la direction Ω .

Le nombre moyen total n de particules diffusées par unité de temps dans toutes les directions est :

$$n = NF\sigma \quad (\text{II.2})$$

Où σ est la section totale de diffusion.

$$\sigma = \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega \quad (\text{II.3})$$

II.4. Processus de collision élastique en mécanique classique-Calcul classique

Les sections efficaces se calculent en mécanique classique à partir de la connaissance des trajectoires. Soit une particule cible fixe sur laquelle arrive un flux F de particules incidentes d'impulsion p . Pour chacune de ces particules, on peut calculer la trajectoire en fonction du paramètre d'impact b .

On suppose que le potentiel d'interaction, de portée finie, est à symétrie sphérique $V(r)$; θ l'angle de diffusion. L'intégration des équations de mouvement permet de calculer la relation $b(\theta)$ entre le paramètre d'impact b et l'angle de diffusion θ . Les particules diffusées entre θ et $\theta+d\theta$ (ou dans l'angle de solide correspondant ; Nous avons supposé une symétrie de révolution autour de la direction OO'), sont celles dont le paramètre d'impact est compris entre b et $b+db$. Le nombre dn de de particules passant dans l'angle solide $d\Omega$ par unité de temps est égal aux nombres de particules initiales traversant la couronne de rayon compris entre $b+db$, d'air $2\pi b db$.

Par définition du flux F , il passe F par unité de temps et de surface, par conséquence

$$dn=2\pi bdbF \quad (\text{II.4})$$

D'où la section efficace différentielle :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \left| \frac{b(\theta)}{\sin \theta} \cdot \frac{db}{d\theta} \right| \quad (\text{II.5})$$

La connaissance de $d\sigma/d\Omega$ donne la relation $b(\theta)$ qui est porteuse d'information sur le potentiel V . Les expressions de diffusions donnent, par conséquent, des renseignements sur la structure des forces.

II.4.1. Diffusion de Rutherford

Une particule de charge Z_1e et d'énergie cinétique $E_c=1/2mv^2$ diffuse sur un centre fixe de charge Z_2e situé à l'origine (Potentiel $V(r)=Z_1Z_2e^2/r$). Dans ce mouvement (hyperbolique) képlérien, la relation entre le paramètre d'impact b et l'angle de diffusion θ est :

$$b = \left(Z_1 Z_2 e^2 / 2E_c \right) \cot(\theta/2)$$

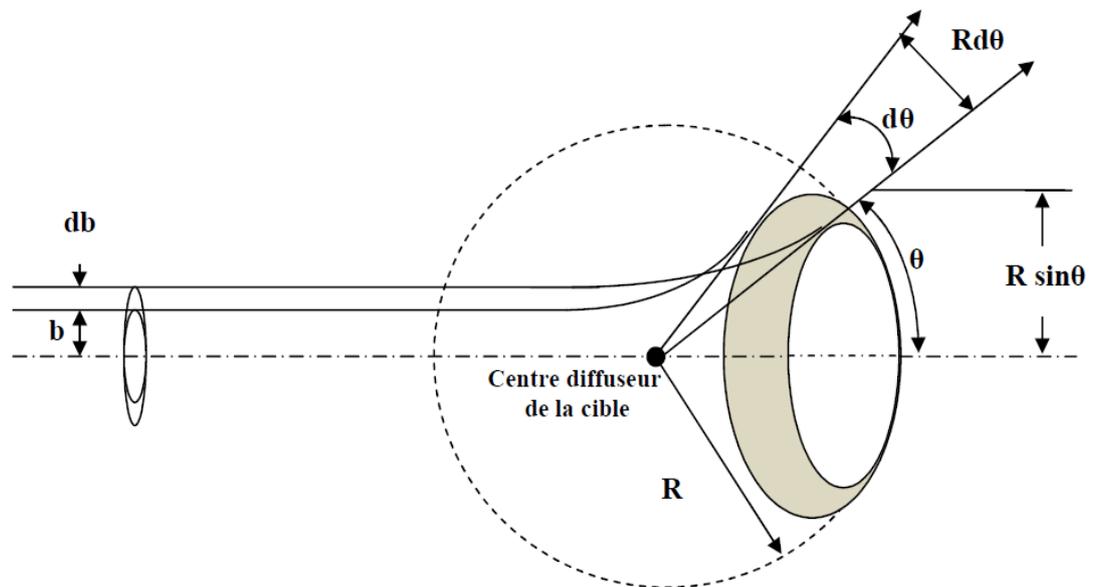


Figure II.4 : Diffusion d'une particule p par un centre de force répulsif centré en O

Où E_c est l'énergie cinétique de la particule.

D'où une section efficace différentielle (Figure II.4)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_c} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \theta/2} \quad (\text{II.6})$$

On notera que dans ce cas la section efficace totale est

$$\sigma = \int (d\sigma / d\Omega) d\Omega \quad (\text{II.7})$$

C'est toujours le cas en mécanique classique si les forces ne s'annulent pas au-delà d'un rayon R fini ; cette raison se rajoute au fait que la portée de l'interaction coulombienne est infinie (figure II.5).

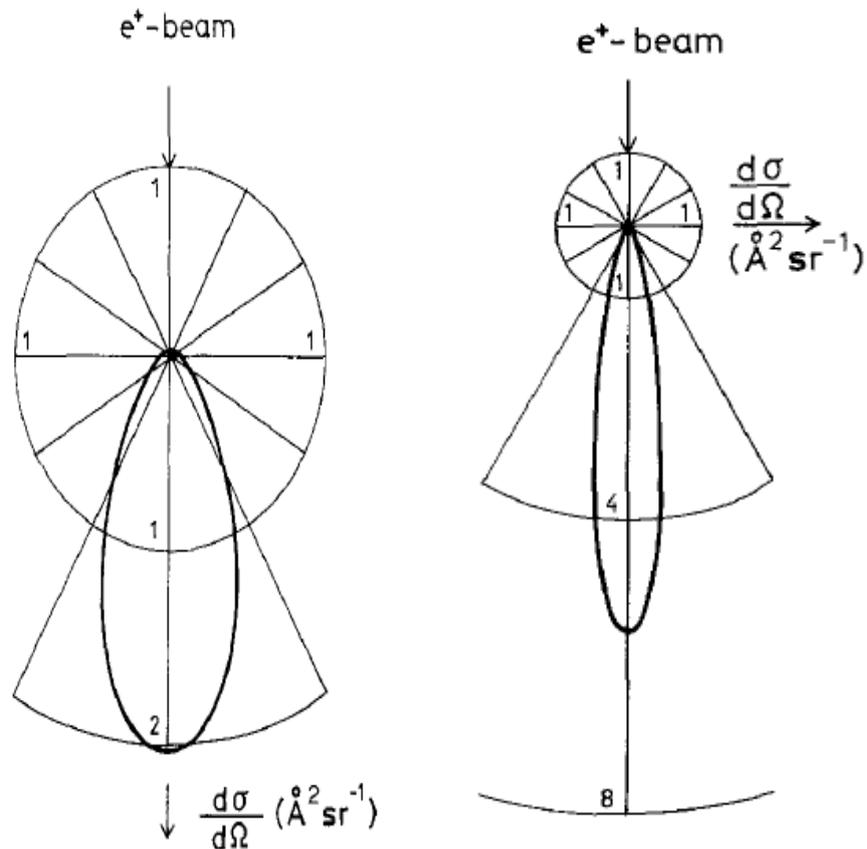


Figure II.5 : Section efficace élastique différentielle de diffusion polaire de 100eV et 1 keV positron pour Cu.

II.4.2. La section efficace de Rutherford

Soit la diffusion coulombienne d'une particule de charge Z_1e sur une charge fixe Z_2e , la section efficace élastique de Rutherford est donnée par la formule (II.6).

Dans la limite non-relativiste, on retrouve identiquement la formule classique de Rutherford. Remarquons que la section efficace ne dépend pas du signe du potentiel et qu'elle diverge fortement lorsque l'angle de diffusion tend vers zéro (Rouabah 2009).

II.5. Processus des collisions élastiques en mécanique quantique

Le faisceau incident est composé de particules indépendantes, envoyées un grand nombre de fois dans la même expérience sur une particule dont l'état est à chaque fois le même. Si cet état est $\psi_k(r)$, on conçoit que le flux incident est F_i soit proportionnel au flux de vecteur \vec{J} , à travers une surface unité. Le nombre dn des particules qui frappent par unité de temps l'ouverture utile de détecteur, est aussi proportionnel au flux du vecteur \vec{J} à travers la surface limitant cette ouverture :

$$dn = (J)_r r^2 d\Omega \quad (\text{II.9})$$

$$(J)_r = \frac{\hbar k}{\mu r^2} |f(\theta, \varphi)| \quad (\text{II.10})$$

J_θ et J_φ sont négligeable devant $(J)_r$, pour $r \rightarrow r$

La section efficace peut s'écrire sous la forme incidente (Tanoudji 1993)

$$\sigma(\theta, \varphi) = dn / F_i = |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (\text{II.11})$$

II.5.1. La section efficace de Born

II.5.1.1. Potentiel de Yukawa

La forme générale des potentiels provenant des interactions fondamentales est le potentiel de Yukawa

$$V_\mu(r) = g \left(\frac{\hbar c}{r} \right) e^{-\mu r} \quad (\text{II.12})$$

Où μ reliée à la masse M de la particule échangée par $\mu = Mc / \hbar$, et g est une constante de couplage sans dimension.

II.5.1.2. La section efficace de Born

Ce cas correspond à une diffusion élastique et s'étend à certaines réactions inélastiques grâce au formalisme de l'isospin. Dans ce cas, l'amplitude de diffusion coulombien est donnée par

$$f_k^{(B)} = -\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \cdot \frac{4\pi}{|K|} \int_0^\infty r dr \sin|K|r \cdot \frac{e^{-\alpha r}}{r} \quad (\text{II.13})$$

Où μ est reliée à la masse m de la particule échangée par $\mu=1/m_1+1/m_2$ et K est l'impulsion transférée dans la direction (θ,φ) . Après le calcul on trouve :

$$f_k^{(B)}(\theta, \varphi) = -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{\alpha^2 + |K|^2} \quad (\text{II.14})$$

Où k est le module du vecteur d'onde incidence et θ l'angle de diffusion. On peut montrer que

$$|k| = 2.k.\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{II.15})$$

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

$$\sigma_d^B(\theta) = \frac{2\mu^2 V_0^2}{\hbar^4} \cdot \frac{1}{(\alpha^2 + 4k^2 \sin^2(\theta/2))^2} \quad (\text{II.16})$$

Il est clair que la section efficace différentielle ne dépend pas de l'angle azimutal φ , ceci est évident car on suppose que les centres diffuseurs (potentiel) possèdent la symétrie de révolution cylindrique autour du faisceau incident (Tanoudji 1993).

Ainsi la formule de Rutherford écrantée n'est pas valable pour les électrons de faibles énergies (Valkealahti and Nieminen 1984).Enfin, la section efficace totale est donnée par intégration, soit

$$\sigma_T = \int d\Omega \sigma_d^{(B)} = \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4} \cdot \frac{1}{\alpha^2(\alpha^2 + 4k^2)} \quad (\text{II.17})$$

$$\sigma_d(\theta) = \frac{Z^2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot 4E^2(1 - \cos(\theta) + 2B_N)^2} \quad (\text{II.18})$$

Où B_N est le coefficient d'écrantage atomique proposé par Nigam (Nigam et al. 1980) et modifié par Adesida (Adesida et al. 1980).

$$\beta_N = \frac{\mu \cdot Z^{2/3}}{E} \quad (\text{II.19})$$

Ou μ est une constante égale à 5.43 suggéré par Nigam (Nigam et al. 1959) par une autre valeur μ obtenue généralement, en faisant une interpolation par rapport aux sections efficace obtenue par la méthode des ondes partielles, (Adeiseda et al. 1980) sont les premiers auteurs qui ont utilisé cette modification et ont trouvé dans le cas de l'aluminium la valeur $\mu=2.61$ ou ils ont multiplié μ par un facteur $\mu=0.48$. Cette suggestion a été utilisée, par la suite par plusieurs auteurs (Valkealahti and Nieminen 1983, Ghosh and Aers 1995).

Enfin Bouarissa (Bouarissa et al. 2002) ont suggéré pour leur part que μ_N n'était pas une constante mais qu'elle dépendait plutôt de l'énergie E de l'électron. En tenant compte de la formule de B_N ,

Par conséquent la section efficace totale est donnée par :

$$\sigma_d(\theta) = \frac{\pi Z^2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot 4E^2 B_N (B_N + 1)} \quad (\text{II.20})$$

En remplace k par sa valeur en fonction de l'énergie $k=p/\hbar$ la formule (II.16) devient

$$\frac{d\sigma_e(\theta)}{d\Omega} = \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4} \cdot \frac{e^4 Z_1^2 Z_2^2}{16k^4 \sin^4(\theta/2)} = \frac{e^4 Z_1^2 Z_2^2}{16E^2 \sin^4 \theta/2} \quad (\text{II.21})$$

On voit clairement que la section efficace différentielle obtenue par la première approximation de Born dans un champ coulombien pur est identique à l'expression de Rutherford (II.8) obtenue en mécanique classique (Dapor 1992).

II.5.1.3. Limite de validité de l'approximation de Born

Si V_0 est l'ordre de grandeur $V(r)$ et b sont rayon d'action, on a pour que l'approximation soit valable, il faut que (Tannoudji et al. 1977)

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \gg V_0^2 \mu b^2 / 2\hbar^2 \quad (\text{II.22})$$

II.6. La section efficace obtenue empiriquement

II.6.1. La section efficace de Kanaya Okayama

Dans cette théorie Kanaya et Okayama ont proposé une section efficace totale semi-empirique utilisées dans le domaine de diffusion des particules (Dapor 1991 ; Kanaya and Okayama 1972). Cette dernière est donnée par la formule suivante :

$$\sigma_n = \frac{K_n Z^{14/9}}{E^{5/3}} \quad (\text{II.23})$$

Où

E : est l'énergie de l'électron ou positron

Z : le nombre atomique

Si E est exprimée en eV et σ_n en cm^3 , $K_n = 1.12 \times 10^{-14} \text{eV}^{5/3} \text{cm}^2$

II.6.2. La section efficace de diffusion de Browning et al.

L'expression de la section efficace totale empirique de Browning et al. 1995 est donnée sous la forme d'une fraction (σ_R/σ_T) entre l'expression mathématique de la section efficace écrantée de Rutherford (σ_R) et la distribution isotropique (σ_T).

$$\sigma_T = \frac{3 \times 10^{-18} Z^{1.7}}{(E + 0.005 Z^{1.7} E^{0.5} + 0.0007 Z^2 / E^{0.5})} \text{cm}^2 \quad (\text{II.24})$$

$$\alpha = 7.0 \times 10^{-3} / E \quad (\text{II.25})$$

Avec E est l'énergie de l'électron ou de positron

$$\cos(\theta) = 1 - \frac{2\alpha R}{1 + \alpha - R} \quad (\text{II.26})$$

R est un nombre aléatoire entre 0 et 1. L'angle θ pour la distribution isotropique est donnée par :

$$\cos(\theta) = 1 - 2R \quad (\text{II.27})$$

Les deux Quantités sont obtenues par un ajustement aux valeurs de la section efficace différentielle de Mott dans l'intervalle d'énergie 100eV- 30 keV, soit :

$$\left(\frac{\sigma_{\text{Rutherford}}}{\sigma_{\text{Isotropic}}} \right) = \frac{300 E^{1-Z/2000}}{Z} + \frac{Z^3}{3 \times 10^5 \times E} \quad (\text{II.28})$$

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

II.7. Section efficace obtenue par la méthode des ondes partielles

Le processus de collision élastique représente l'interaction principale, à basse énergie, du ralentissement des particules chargées dans les solides (Massoumi et al. 1992). Pour ce rang d'énergie (<10keV), les sections efficaces de collision élastique ne peuvent être évaluées en utilisant de simple expressions (Dapor 2003 ; Shimzu and Ichimura 1983).

En fait le traitement quantique est plus adéquat, et l'interaction est traité comme diffusion d'ondes planes, représentant les particules, par le potentiel électrostatique de l'atome, c'est ce qui constitue la méthode des ondes partielles. Dans cette méthode les sections efficaces sont évaluées par la connaissance de déphasages entre l'onde incidente et diffusée.

En tenant compte, du fait que lorsque le potentiel est central, l'équation de Dirac est séparée en deux fonctions (une fonction radiale et une fonction angulaire). La section efficace différentielle s'écrit :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2 \quad (\text{II.29})$$

Où $f(\theta)$ et $g(\theta)$ sont les amplitudes respectivement directes et avec inversion du spin, données par :

$$\begin{cases} f(\theta) = \frac{1}{2iK} \sum_{i=0}^{\infty} \{ (l+1) [\exp(2i\delta_i^-) - 1] + l [\exp(2i\delta_i^+) - 1] \} \\ g(\theta) = \frac{1}{2iK} \sum_{i=1}^{\infty} \{ \exp(2i\delta_i^-) + \exp(2i\delta_i^+) \} P_l^1(\cos \theta) \end{cases} \quad (\text{II.30})$$

Dans ces équations P_l représente le polynôme de Legendre donné par :

$$P_l^1 = (1-x^2)^{1/2} dP_l(x) / dx \quad (\text{II.31})$$

δ^\pm les déphasages donnés par l'expression

$$\tan \delta_l^\pm = \frac{Kj_{l+1}(Kr) - j_l(Kr) \left[\zeta \tan \phi_l^\pm + (1+l+k^\pm)/r \right]}{kn_{l+1}(Kr) - n_l(Kr) \left[\zeta \tan \phi_l^\pm + (1+l+k^\pm)/r \right]} \quad (\text{II.32})$$

j_l et n_l sont les fonctions de Bessel sphériques régulières et irrégulières respectivement, et ϕ_l^\pm pour $r \rightarrow \infty$ est la limite de $\phi_l^\pm(r)$.

Pour déterminer $\phi_l^\pm(r)$, Dapor (Dapor 1996) a utilisé une méthode basée sur l'intégration numérique de l'équation de Dirac donnée par :

$$\frac{d\phi_l^\pm(r)}{dr} = \frac{k^\pm}{r} \sin(2\phi_l^\pm(r)) - \cos(2\phi_l^\pm(r)) + W - V(r) \quad (\text{II.33})$$

W est l'énergie total exprimée en unité (mc^2)

Le rayon r est exprimé en unité $\frac{\hbar}{mc}$

Le symbole \pm désigne le spin haut (+) et le spin bas (-), V_r est le potentiel de diffusion.

Dapor (Dapor 1992) a suivi les étapes suivantes pour déterminer $V(r)$ en tenant compte de l'état solide :

1. détermination du potentiel atomique $V(r)$ en utilisant la méthode de Hartree –Fock pour les atomes de nombre atomique $Z < 18$, et la méthode de déterminant de Slater de Dirac Hartree –Fock pour les atomes de nombre atomique $Z > 18$.
2. Le potentiel d'échange $V(r)$ est donné par :

$$V_{ex} = \frac{1}{2}(E - V_s) - \frac{1}{2} \left[(E - V_s)^2 + 4\pi\rho \cdot e^4 \cdot a_0 \right]^{1/2} \quad (\text{II.34})$$

Avec E est l'énergie incidente, V_s est l'énergie du potentiel électrostatique, ρ est la densité électronique de l'atome, e est la charge de l'électron ou positron et a_0 est le rayon de Bohr.

A très basse énergie et pour les petits angles l'introduction des effets échanges a augmenté l'exactitude du calcul de section efficace différentielle, et par conséquent le calcul de section efficace totale.

3. Dapor 1992 a supposé que l'atome est altéré seulement par les plus proches voisins et a utilisé pour $V_{\text{solide}}(r)$ la formule :

$$V_{solide}(r) = V(r) + V(2r_{ws} - r) - 2V(r_{ws}) \quad (\text{II.35})$$

Cette formule est utilisée par plusieurs auteurs (Salvat and Moyel 1993) Ou r_{ws} est le rayon de Wigner-Seitz donné par :

$$r_{ws} = 0.7346(A/\rho)^{1/3} A^\circ \quad (\text{II.36})$$

Ou A est la masse atomique et ρ est la masse volumique (g/cm^3)

II.8. Processus inélastiques des positrons dans la matière

II.8.1. Section efficace inélastique de Gryzinski

Les chocs inélastiques peuvent avoir lieu avec les électrons du cœur ou les électrons de valence, ces phénomènes sont décrits par les fonctions d'excitations de Gryzinski. La fonction d'excitation de Gryzinski est donnée par (Gryzinski^a 1965 ; Gryzinski^b1965) :

$$\frac{d\sigma_{inel}(\Delta E)}{d(\Delta E)} = \pi \frac{(e^-)^4}{(\Delta E)^3} \frac{E_B}{E_0} \left(\frac{E_0}{E_0 + E_B} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{\Delta E}{E} \right)^{[E_B/(E_B + \Delta E)]} \times \left\{ \frac{\Delta E}{E_B} \left(1 - \frac{E_B}{E_0} \right) + \frac{4}{3} \ln \left[2.7 + \left(\frac{E_0 - \Delta E}{E_B} \right)^{1/2} \right] \right\} \quad (\text{II.37})$$

Ou ΔE , E_b et E sont respectivement, la perte d'énergie, l'énergie de liaison des électrons du cœur ou de valence et l'énergie incidente (initiale).

L'angle de diffusion θ après un choc $e^\pm - e^-$ est donnée par l'approximation du modèle binaire comme :

$$\sin \theta = (\Delta E/E)^{1/2} \quad (\text{II.38})$$

La section efficace inélastique totale d'ionisation est donnée par la relation suivante :

$$\sigma_{inel} = \frac{\pi e^4 N_s}{E_0 E_B} \left(\frac{E_0 - E_B}{E_0 + E_B} \right)^{3/2} \left\{ 1 + \frac{2}{3} \left(1 - \frac{E_B}{2E_0} \right) \ln \left[2.7 + \left(\frac{E_0 - E_B}{E_B} - 1 \right)^{1/2} \right] \right\} \quad (\text{II.39})$$

Cette expression est utilisée dans plusieurs travaux (Adesida et al.1980 ; Aydön 2001 ; Vakealahti and Nieminen 1983,1984 ; Bakri et al. 1975 ; Samoto et al. 1983 ; Shimizu and Ichimura 1983 ; Bouarissa et al. 2002 ; Rouabah et al.2009 ; Hannachi et al.2014).

N_s est le nombre d'électrons contribuant à un type déterminé de choc inélastique de collision (valence ou cœur). Cette équation donne des résultats exacts lorsque la perte d'énergie ΔE est beaucoup plus petite que l'énergie primaire. Pour les petites énergies incidentes (primaires) cette équation perd de son exactitude mais ceci n'influe pas vraiment sur les résultats (Vakealahti and Nieminen 1983).

II.8.2. Approches de Vakealahti et Nieminen

L'expression (II.39) ne tient pas en compte des collisions inélastique des électrons pour lesquels leurs pertes d'énergie est inférieure à l'énergie de liaison de l'électron comme par exemple l'excitation des électrons du cœur entre deux niveaux atomiques. Ces processus ont également leurs influences sur le ralentissement des électrons et devraient être pris en compte. Partant de ces données, Vakealahti et Nieminen ont proposés une approximation dans laquelle la fonction d'excitation (I.29) est constante pour les petites énergies, et s'écrit

$$\left. \frac{d\sigma(\Delta E)}{d\Delta E} \right|_{\Delta E \leq E_B} = \left. \frac{d\sigma(\Delta E)}{d\Delta E} \right|_{\Delta E = E_B} \quad (\text{II.40})$$

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

$$\sigma_{ine} = \int_0^{E_{\max}} \frac{d\sigma(\Delta E')}{d(\Delta E')} d(\Delta E') \quad (\text{II.41})$$

Avec E_{\max} est l'énergie maximale des positrons avant collision. Plus tard et afin d'améliorer beaucoup plus les résultats, Vakealahti et Nieminen ont proposé une autre approche qui considère que les collisions inélastiques se font avec tous les électrons de l'atome et pas seulement avec les électrons de cœur et de valence.

Par conséquent, la section efficace inélastique devient une série de sections efficaces (Vakealahti and Nieminen 1984).

$$\sigma_{inel} = \sum_{i=1}^m \sigma_{inel,i} \quad (\text{II.42})$$

II.8.3. Modèle d'Ashley

II.8.3.1. Formalisme diélectrique

Pour décrire le processus inélastique des collisions des positrons dans les solides, on a utilisé les fonctions pertes d'énergie (dE/dS). Les fonctions pertes d'énergie sont basées principalement sur les fonctions diélectriques qui caractérisent un milieu.

On considère que $p(E, \hbar\omega)$ est la probabilité pour qu'un positron d'énergie E perde l'énergie ($\hbar\omega$) par unité de longueur, donc la fonction perte d'énergie est donnée par (Dapor 2002)

$$-\frac{dE}{dS} = \int \hbar\omega p(E, \hbar\omega) d\hbar\omega \quad (\text{II.43})$$

L'intégration se fait sur toutes les valeurs possibles de l'énergie de transfert ($\hbar\omega$),

$p(E, \hbar\omega)$ est liée à la fonction diélectrique $\varepsilon(q, \hbar\omega)$ avec q est le moment de transfert par la relation :

$$\tau(E, \omega) = \frac{1}{\pi E} \int_{q_-}^{q_+} \frac{dq}{q} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \hbar\omega)} \right] \quad (\text{II.44})$$

$$\text{Avec } q_{\pm} = (2)^{1/2} \left[(E)^{1/2} \pm (E - \omega)^{1/2} \right] \quad (\text{II.45})$$

II.8.3.2. Fonction perte d'énergie

On a adopté le modèle d'Ashley (Ashely 1989,1990) qui nous permet de calculer les fonctions perte d'énergie et le libre parcours moyen des positrons pour des énergies $\leq 10\text{keV}$ dans différentes cibles (Al, Cu, Au).

Les équations (II.43), (II.44), (II.45) constituent le modèle optique d'Ashley. En effet la détermination de $\varepsilon(0, \hbar\omega)$, fonction diélectrique pour $q=0$ à partir des résultats optiques permet de calculer les fonctions pertes énergie.

Pour ce faire Ashley (Ashley 1989) utilise les résultats expérimentaux de référence (Shiles et al. 1980 ; Smith et al.1983 ; Hagemann et al. 1971). Pour les positrons le libre parcours moyen inélastique et les fonctions perte d'énergie donné par les formules :

$$(\lambda_{\text{inel}}^{-1})_p = \frac{me^2}{2\pi\hbar^2 E} \int_0^{E/2} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \hbar\omega)} \right] L_P \left(\frac{\hbar\omega}{E} \right) d(\hbar\omega) \quad (\text{II.46})$$

$$\left(-\frac{dE}{ds} \right)_p = \frac{me^4}{2\pi\hbar^2 E} \int_0^{E/2} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(0, \hbar\omega)} \right] \times G_p \left(\frac{\hbar\omega}{E} \right) \hbar\omega d(\hbar\omega)$$

Avec

$$G_p(x) = \ln \left(\frac{1-x+\sqrt{1-2x}}{1-x-\sqrt{1-2x}} \right) \quad (\text{II.48})$$

Et

$$L_p(x) = \ln \left(\frac{1-x/2+\sqrt{1-2x}}{1-x/2-\sqrt{1-2x}} \right) \quad (\text{II.49})$$

Les résultats des électrons et positrons d'énergie 40eV-10000eV pour Al, Cu, Ag, Au sont reportés dans le tableau (II.1) et le tableau (II.2)

$E - E_f$ (eV)	Al		Au		Ag		Cu	
	S_e	S_p	S_e	S_p	S_e	S_p	S_e	S_p
40	4.25	6.65	0.864	1.32	0.902	1.36	1.86	2.90
60	4.53	6.45	1.85	2.92	1.76	2.75	2.87	4.39
80	4.37	5.92	3.39	5.44	2.89	4.54	3.52	5.26
100	4.12	5.42	4.82	7.67	3.97	6.17	3.97	5.81
150	3.55	4.49	7.29	11.1	6.19	9.37	4.61	6.55
200	3.26	4.12	8.30	12.1	7.46	11.0	5.01	7.02
300	2.99	3.82	8.36	11.4	7.60	10.4	5.39	7.41
400	2.80	3.58	7.85	10.4	7.07	9.30	5.43	7.31
500	2.64	3.36	7.35	9.51	6.51	8.36	5.27	7.00
600	2.49	3.14	6.94	8.87	6.03	7.60	5.13	6.71
800	2.22	2.77	6.26	7.90	5.29	6.54	4.71	6.03
1000	2.01	2.47	5.79	7.22	4.86	5.99	4.31	5.44
1500	1.62	1.95	4.93	6.11	4.11	5.06	3.55	4.35
2000	1.36	1.62	4.36	5.35	3.59	4.38	3.03	3.64
3000	1.04	1.22	3.57	4.32	2.89	3.47	2.43	2.90
4000	0.859	0.992	3.04	3.64	2.43	2.88	2.06	2.45
6000	0.649	0.741	2.39	2.83	1.87	2.18	1.60	1.88
8000	0.527	0.598	2.02	2.37	1.53	1.77	1.32	1.54
10000	0.446	0.504	1.75	2.05	1.31	1.51	1.13	1.31

Tableau II.1: Valeur des fonctions pertes d'énergies (eV. A⁻¹) des électrons et positrons (Ashley et al. 1988,1990).

$E - E_F$ (eV)	Al		Au		Ag		Cu	
	λ_e	λ_p	λ_e	λ_p	λ_e	λ_p	λ_e	λ_p
40	4.94	3.54	18.3	14.3	15.0	11.8	9.49	7.14
60	4.73	3.76	13.3	10.0	11.8	9.05	7.86	6.06
80	4.99	4.19	9.83	7.24	9.58	7.31	7.39	5.86
100	5.37	4.65	8.20	6.08	8.43	6.48	7.29	5.92
150	6.43	5.83	6.84	5.32	7.26	5.73	7.59	6.40
200	7.46	6.88	6.72	5.45	7.07	5.75	8.08	6.96
300	9.39	8.80	7.40	6.36	7.81	6.74	9.23	8.16
400	11.2	10.6	8.34	7.42	8.87	7.92	10.4	9.41
500	13.0	12.4	9.33	8.47	9.99	9.11	11.7	10.7
600	14.7	14.1	10.3	9.49	11.1	10.3	12.9	11.9
800	18.0	17.4	12.3	11.5	13.3	12.5	15.4	14.4
1000	21.3	20.6	14.1	13.3	15.4	14.7	17.8	16.9
1500	29.0	28.4	18.6	17.8	20.5	19.7	23.7	22.8
2000	36.4	35.8	22.9	22.1	25.3	24.5	29.3	28.4
3000	50.5	49.9	31.0	30.2	34.4	33.7	40.0	39.1
4000	64.0	63.5	38.8	38.0	43.2	42.4	50.1	49.3
6000	89.9	89.4	53.6	52.8	59.9	59.2	69.6	68.7
8000	115	114	67.7	67.0	76.0	75.2	88.2	87.4
10000	139	138	81.4	80.7	91.5	90.8	106	105

Tableau II.2 : Libre parcours moyen inélastique (\AA) des électrons et positrons

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

II.9. Ralentissement électronique

Le ralentissement électronique, assimilable à des frottements est dû aux pertes énergétiques dues à l'ensemble des chocs avec les électrons (libres ou de liaison) du matériau. Le ralentissement électronique est responsable de l'excitation des atomes, et donc du réchauffement de l'échantillon. L'atome est à l'état excité pendant un temps très court.

II.10. Pouvoir d'arrêt

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

Il existe plusieurs formulations exprimant le pouvoir d'arrêt et la distance maximale de parcours, la formule générale du TLE est donnée par

$$TLE = \left| \frac{dE}{ds} \right| \quad (\text{II.50})$$

Où $\frac{dE}{ds}$ est le pouvoir d'arrêt qui désigne la perte d'énergie par unité de distance parcourue. La distance parcourue par la particule est donnée par la formule

$$s = \int_{E_0}^E \frac{dE}{dE/ds} \quad (\text{II.51})$$

Avec E l'énergie initiale de la particule incidente.

II.11. Parcours électronique

Le parcours ("range" en anglais) peut se définir comme la distance parcourue par la particule entre le point d'entrée dans la matière et le point d'arrêt ($E_{\text{cinétique}} = 0$). Il dépend de l'énergie cinétique initiale de la particule, les électrons & positrons sont fortement déviés sans pratiquement perdre d'énergie, leur trajectoire est une suite de tronçons, surtout aux faibles énergies, où les angles de diffusion peuvent devenir extrêmement importants \Rightarrow leur parcours est toujours inférieur à la longueur de la trajectoire.

La distance maximale de parcours d'une particule d'énergie initiale E dans un matériau est donnée en fonction du pouvoir d'arrêt correspondant comme suit :

$$R = \int_{E_0}^0 \frac{dE}{dE/ds} \quad (\text{II.52})$$

Les chocs inélastiques des positrons incidents avec les électrons des couches profondes et de valence des atomes, engendrent une perte d'énergie des électrons incidents au cours de leur trajectoire (Shimizu and Jun, 1992) ; Ce processus statistique, peut être décrit de façon continue par la formule de Bethe (1933) (Yacobi and Holt, 1990 ; Bishop 1967 ; Everhart and Hoff, 1971). Cette formule traduit la perte d'énergie moyenne dE par unité de longueur dS .

Bethe a exprimé le pouvoir d'arrêt par la relation :

$$\frac{dE}{dS} = -2\pi e^4 N_A \frac{\rho Z}{AE} \cdot \ln\left(\frac{1.166E}{j}\right) \quad (\text{II.53})$$

Où e est la charge électronique, N_A est nombre d'Avogadro, ρ est la densité, A est le poids atomique, E est l'énergie moyenne d'électron, et J est le potentiel moyen d'ionisation. Ce dernier est la dissipation d'énergie moyenne par interaction (pour indisposer les processus possibles de dissipation d'énergie) est donné par:

$$\begin{cases} j = 9.76Z + 58.8Z^{-0.19} (\text{keV}) \dots\dots (\text{pour } Z \geq 10) \\ j = 13.6Z \text{eV} \dots\dots\dots (\text{pour } Z < 10) \end{cases} \quad (\text{II.54})$$

L'expression de Bethe modifiée est changée par Joy and Luo et elle est donnée par :

$$\left| \frac{dE}{ds} \right|_B = \frac{2\pi e^4 N_a Z}{E} \cdot \ln(1.166(E + 0.85I) / I) \quad (\text{II.55})$$

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

$$R_B = \int_E^0 \frac{dE}{dE/ds} = E^2 / 4\pi e^4 N_a \cdot \ln(1.166(E + 0.85j) / j) \quad (\text{II.56})$$

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

$$\left| \frac{dE}{ds} \right|_{K-O} = \frac{K_e N Z^{8/9}}{E^{2/3}} \quad (\text{II.57})$$

Où N est le nombre d'atomes par unité de volume, dE / ds est exprimé en eV/cm, et $K_e = 3.60 \times 10^{-14} \text{eV}^{5/3} \text{cm}^2$. A partir de cette expression, la distance parcourue s'écrit sous la forme :

$$S_{K-O} = \int_{E_0}^E \frac{dE}{dE/ds} = \frac{3(E_0^{5/3} - E^{5/3})}{5K_e N Z^{8/9}} \quad (\text{II.58})$$

Une expression plus générale dérivé par Kanaya et Okayama (Kanaya and kayama ,1972) s'est avérée pour être bien conforme bien aux résultats expérimentaux. D'après Kanaya et Okayama (Kanaya and kayama 1972 ; Yacobi and Holt1990), est :

$$R_{K-O} = \frac{3E_0^{5/3}}{5K_e NZ^{8/9}} \quad (\text{II.59})$$

Où

$$R_{K-O} = \frac{0.0276 \times A \times E_0^{5/3}}{Z^{8/9}} \quad (\text{II.60})$$

Avec R est exprimé en μm , E_0 en keV, A le poids atomique en g/mol et ρ est la densité atomique en g/cm^3 . Les résultats de la distance maximale de parcours obtenus par l'expression de Kanaya et Okayamma sont en bon accord avec les résultats expérimentaux de Cosslet-Thomas (Dapor 1991 ; Cosslet and Thomas 1964).

$$R_G = 45.7 \frac{E_b^{1.75}}{\rho} \quad (\text{II.61})$$

R_G est en nm, E_b en keV et ρ en g/cm^3 . Cette expression est valide uniquement pour l'intervalle d'énergie $5\text{keV} < E_b < 25\text{keV}$.

Selon Everhart et Hoff qui ont corrigé la formule de Gruen et en proposant l'expression suivante :

$$R_G = 40 \frac{E_b^{1.75}}{\rho} \quad (\text{II.62})$$

Pour sa part, Ashley a proposé un modèle décrivant le pouvoir d'arrêt de positron en tenant compte de l'effet d'échange entre la particule incidente et l'électron cible

$$\left| \frac{dE}{ds} \right|_A = \frac{1}{\pi E} \int_0^{E/2} dw' w' \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(0, w')} \right] G_e \left(\frac{w'}{E} \right) \quad (\text{II.63})$$

Où E est l'énergie incidente, w' l'énergie de transfert et $\varepsilon(0, w')$ la fonction diélectrique complexe. (Ashley 1988,1990).

II.12. Conclusion

Pour l'interaction positron –matière les différents phénomènes qui résultent de collisions élastique et inélastique ont été approchés.

La section efficace représente un paramètre de grande importance dans l'étude du transport des positrons dans les matériaux ; elle est utilisée pour calculer différents paramètres de transport des positrons comme le coefficient de rétrodiffusion, le libre parcours moyen...etc. Nous avons présenté le calcul classique (model de Rutherford), et le calcul quantique (model Born – section efficace obtenue par la méthode des ondes partielles) de ce paramètre important. Il est à noter que dans notre simulation de Monte Carlo utilisée dans le présent travail, l'expression de la section efficace élastique écranter modifié de Rutherford est utilisée pour simuler les collisions élastiques alors que pour les collisions inélastiques nous avons utilisé les fonctions de Gryzinski.

III.1. Introduction

Les méthodes dites Monte Carlo consistent en des simulations expérimentales de problèmes mathématiques et physiques dans lesquelles des nombres aléatoires ou pseudo-aléatoires sont utilisés pour trouver des solutions qui peuvent ne pas être aléatoires.

Le nom Monte Carlo a été introduit en 1940 par des scientifiques travaillant sur un projet d'arme nucléaire à Los Alamos pour désigner la classe des méthodes numériques basées sur l'utilisation de nombres aléatoires. De nos jours les méthodes de Monte Carlo sont largement utilisées pour résoudre des problèmes physiques et mathématiques complexes (James, 1980 ; Rubinstein, 1981 ; Kalos and Whitlock 1986), en particulier celles impliquant plusieurs variables indépendantes où des méthodes numériques plus classiques exigeraient des quantités énormes de mémoire et de temps d'ordinateur.

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

Les simulations Monte Carlo sont utilisées dans de nombreux domaines aussi variés que la finance (places boursières.), l'environnement (gestion de flux autoroutiers...) mais aussi dans la physique des particules avec notamment des applications en physique médicale et plus particulièrement en radiothérapie. En effet, elles peuvent être d'un grand secours pour le radio biologiste ou encore le médecin désireux d'appréhender une dimension encore aujourd'hui très peu accessible expérimentalement, le nanomètre.

Dans ce dernier domaine, on dénombre plusieurs types de codes Monte Carlo suivant, d'une part, l'échelle à laquelle la description est considérée (échelle moléculaire, cellulaire ou au niveau de l'organe), et d'autre part la spécificité des codes et leurs applications (dosimétrie, treatment-planning (hadrothérapie), imagerie médicale...). En effet l'analyse de beaucoup de résultats expérimentaux ne trouve pas un support théorique pour être expliquée, et en parallèle la simulation a pris naissance pour compléter l'expérience dans le but principal de caractériser l'interaction positron-surfaces de la cible et consiste un calcul statistique dans la simulation des propriétés des positrons. Pour le calcul statistique la méthode MC reste l'outil le plus performant dans la caractérisation des phénomènes aléatoires, elle permet de construire les trajectoires d'un nombre important de positrons depuis l'entrée de chaque positron par la surface de la cible jusqu'à sa thermalisation.

III.2. Historique

Les travaux les plus anciens font état des premiers succès qui ont établi la simulation comme un outil majeur d'investigation de la physique de la matière condensée. La méthode de Monte Carlo (MC) fut développée par Von Neumann, Ulam et Metropolis, à la fin de la seconde guerre mondiale, pour l'étude de la diffusion des neutrons dans un matériau fissile.

Metropolis et al. 1953 furent les pionniers de l'investigation de la matière par simulation à l'ordinateur. Ils réalisèrent la simulation d'un liquide simple (disques durs se déplaçant en deux dimensions) par la méthode de MC, ils proposèrent ce qui porte désormais le nom de MC ,Metropolis et qui est devenu la base des simulations MC des systèmes de particules en interaction.

III.3. Principe de la méthode Monte Carlo

Dans la méthode Monte Carlo, il est nécessaire que chaque interaction soit décrite par une fonction mathématique issues d'un modèle physique. Le phénomène de transport de la particule est reproduit en réalisant, comme dans la réalité une succession de ces interactions. Cela revient, pour la méthode Monte Carlo à effectuer une multitude d'échantillonnage pour que la méthode soit correct, deux choses sont nécessaire.

D'abord, le nombre de tirages réalisés doit être grand afin de couvrir l'ensemble des probabilités offertes par la fonction densité de probabilité. Ensuite, il est nécessaire que ces tirages soient tous indépendants, c'est-à-dire issus d'un processus unique d'échantillonnage. C'est donc sur la génération des nombres aléatoires que repose l'intégrité de l'échantillonnage, et plus précisément sur l'unicité de chacun des nombres ainsi générés.

L'interaction particule-matière est un processus aléatoire, le traitement de ce dernier peut donc s'effectuer en faisant appel aux principes des méthodes Monte Carlo. Les méthodes Monte Carlo consistent à corréler un processus aléatoire avec un processus physique, de manière plus précise on cherche à reproduire un phénomène physique en supposant qu'il est le résultat d'une succession d'événements probabilistes (figure III.1).

Chaque événement peut donc être obtenu selon la probabilité d'occurrence, permettant ainsi de déterminer le prochain. Physiquement, on interprète comme une suite d'événements microscopiques qui se manifestent par le déroulement du phénomène physique. Le caractère aléatoire permet d'envisager l'ensemble des possibilités pour chacun des événements, ce qui rend la méthode comme une des plus précises quant à la reproduction d'un phénomène. On distingue en outre les méthodes Monte Carlo, où l'on parle d'événement, et les méthodes déterministes, où le modèle décrit plutôt un <<phénomène physique>>, chacune possède bien sûr ses avantages et ses inconvénients, selon le champ d'application et la complexité du problème.

De manière générale, la simulation permet d'étudier et d'expérimenter un système donné dont on connaît les interactions complexes, de mesurer les effets de certains changements dans les interactions sur le comportement du système, et d'expérimenter de nouvelles situations.

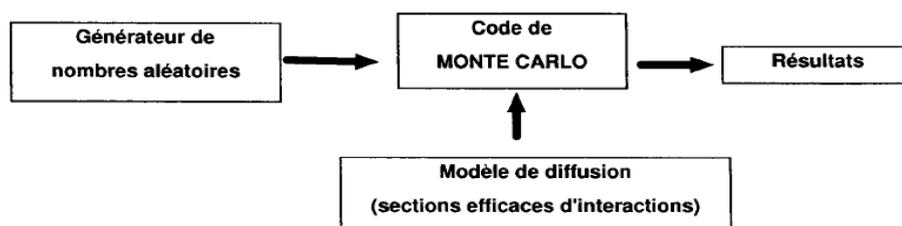


Figure III.1 : Schéma de principe des méthodes de Monte Carlo (Mazurier 1999).

III.4. Générateur de nombres aléatoires

L'efficacité d'un code de Monte Carlo dépend en grande partie de la qualité de son générateur de nombres aléatoires, une séquence de nombres aléatoires de haute qualité doit être telle que l'occurrence de chaque nombre est imprévisible. La génération de nombres aléatoires se situe en amont de toute application Monte Carlo. Dans le cas d'un tirage par un système informatique, on parle communément de générateur <<aléatoire>> mais la nature exacte de ceux-ci est pseudo-aléatoire.

On utilise en effet un algorithme mathématique qui va produire des séquences de nombre en suivant une loi de récursivité déterministe, autrement dit si l'on lance le générateur à partir d'une même valeur deux fois de manière indépendante on aura par la suite la même série de nombres. En parallèle du caractère pseudo-aléatoire on doit donc vérifier une période la plus longue possible pour la séquence du générateur afin de ne pas corréler un même événement avec un même nombre. On remarquera que plus l'événement possède de variables moins il y a de chances de corrélation, ce qui réduit finalement l'importance de la période. C'est surtout la puissance de calcul acquise grâce aux nouvelles technologies qui tend à envisager l'ensemble des éventualités.

Un générateur de nombres réellement aléatoires peut être imaginé en analysant, par exemple, la décroissance radioactive d'un élément. Dans un tel système il existe inévitablement une partie d'acquisition (électronique et informatique) qui doit être pris en compte.

III.4.1. Distribution rectangulaire (distribution uniforme)

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

III.4.1.1. Méthode de congruence (génération à récurrence linéaire modulo)

Les nombres pseudo-aléatoires x_i de la séquence (x_i) sont obtenus depuis le prédécesseur x_{i-1} . Une des formules les plus utilisées pour engendrer des nombres pseudo aléatoires à distribution uniforme, est donnée par la relation congruentielle suivante (Rouabah 2009, Nacheb 2003) :

$$x_i = a * x_{i-1} + c \pmod{m} \quad (\text{III.1})$$

Où Les nombres m (le module), a (le multiplicateur) et c (l'incrément) sont des constantes entières avec $m > a$ et $x_0 > 0$, $a > 0$, $c > 0$.

Cependant, la périodicité de la séquence limite la validité du générateur de variables aléatoires. On a donc intérêt à ce que cette période soit très grande. Pour cela, on prend $c=0$ et $m=2^N$ ou N est généralement de l'ordre 30 ou 40.

Les nombres obtenus ont une distribution uniforme. Pour obtenir ces nombres dans l'intervalle $[0,1]$, on divise les x_i par $(m-1)$ et on obtient la relation d'échantillonnage suivante :

$$r_i = x_i / (m-1) \quad r_i \in [0,1] \quad (\text{III.2})$$

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

$$\xi = a + (b - a)r \quad (\text{III.3})$$

Lehmer eut l'idée de conserver uniquement les chiffres de poids faible et proposé les paramètres suivants (Heermann 1989)

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

Sedgewick a proposé les choisis suivant (Lapeyer et al. 1998)

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

Cette méthode permet de simuler des entier pseudo aléatoires entre 0 et $m-1$; pour obtenir un nombre réel aléatoire entre 0 et 1 on divise l'entier aléatoire générée par m . Ce générateur fournit des résultats acceptables dans les cas courants, cependant sa période (ici $m=10^8$) peut se révéler parfois insuffisante. On peut alors obtenir des générateurs de nombres aléatoire de période arbitrairement longue en augmente m (Lapeyre 1998).

III.4.2. Générateur non uniforme

III.4.2.1. Générateur congruent inverse

En utilisant la transformée inverse, la simulation de la loi exponentielle du paramètre λ de densité $f(x) = \lambda.e^{-\lambda x}$, sa fonction de répartition est :

$$F(x) = P(X \leq x) = \int_0^x \lambda.e^{-\lambda x} dx = 1 - e^{-\lambda x} \quad (\text{III.4})$$

On calcule l'inverse de F

$$F^{-1}(U) = -\frac{\ln(1-U)}{\lambda} \quad u \in [0,1[\quad (\text{III.5})$$

Soit U une variable aléatoire de loi uniforme sur $[0,1[$, on génère n réalisation de U à partir d'un générateur et on pose :

$$X = -\frac{\ln(1-U)}{\lambda} \quad (\text{III.6})$$

On obtient un échantillon de n valeurs de X.

La méthode de la transformée inverse permet aussi de simuler plusieurs lois comme lois Beta, la loi de Cauchy standard, la loi logistique standard, la loi de Laplace... etc (Rouabah 2009, Fishman 1997).

III.4.2.2. Génération Gaussienne

Dans une méthode classique pour simuler les nombres aléatoires, souvent, nous avons besoin de générer des valeurs aléatoires de la distribution normale (ou gaussienne) :

$$P_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2 / 2) \quad (\text{III.7})$$

Comme La fonction de distribution gaussienne n'accepte pas un inverse analytique afin de générer des nombres aléatoires. Le plus facile et simple (mais pas le plus rapide) méthode pour échantillonner de la distribution normale consiste à générer deux variables aléatoires indépendantes x_1 et x_2 à la fois, comme suit :

$$x_1 = \sqrt{-2 \ln \xi_1} \cos(2\pi\xi_2) \quad (\text{III.8})$$

$$x_2 = \sqrt{-2 \ln \xi_1} \sin(2\pi\xi_2) \quad (\text{III.9})$$

Avec ζ_1 et ζ_2 sont deux nombres aléatoires indépendants appartenant à l'intervalle $[0, 1]$. Ce procédé est connu sous le nom « méthode Box-Muller », elle a l'avantage d'être précise et facile à programmer comme une déclaration Fortran (Salvat et al. 2003).

III.4.2.3. Génération de Poisson

La distribution de Poisson est une distribution importante en simulation Monte Carlo (Rouabah 2009). Cette distribution est définie par la densité de probabilité suivante :

$$P_x(x) = \frac{1}{\lambda} \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right) \quad (\text{III.10})$$

Où le paramètre λ représente le libre parcours moyen

$$x = -\lambda \ln(1 - \xi) \quad (\text{III.11})$$

($1 - \xi$) est un nombre aléatoire variable défini dans l'intervalle $[0, \infty]$

On peut donc générer x la loi exponentielle. La densité de probabilité est la distribution de poisson, obtenue par la solution de l'équation suivante :

$$\mu = \int_0^x \frac{1}{\lambda} \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right) dx \quad (\text{III.12})$$

III.5. Simulation de l'histoire de positron par la méthode de Monte-Carlo

Dans cette partie nous allons donner une description détaillée de la méthode MC de transport des positrons dans les solides qui sera utilisée dans le présent travail. Dans notre simulation, on considère que l'incidence du faisceau de positron sur la cible est oblique et on prend l'incidence perpendiculaire (normale) comme cas particulier et l'axe Z est pris suivant la direction des positrons incidents. On rappelle que dans notre travail, la simulation MC utilise, la section efficace élastique écrantée de Rutherford et la section efficace totale en fonction de section efficace de transport de Dapor (Dapor 2003) pour simuler les collisions élastiques, et la fonction de Gryzinski et Ashley pour simuler les collisions inélastiques.

La présente méthode MC associe chaque nombre aléatoire aux cinq événements aléatoires appartenant à l'intervalle $[0,1]$ et qui sont (Figure III.2) :

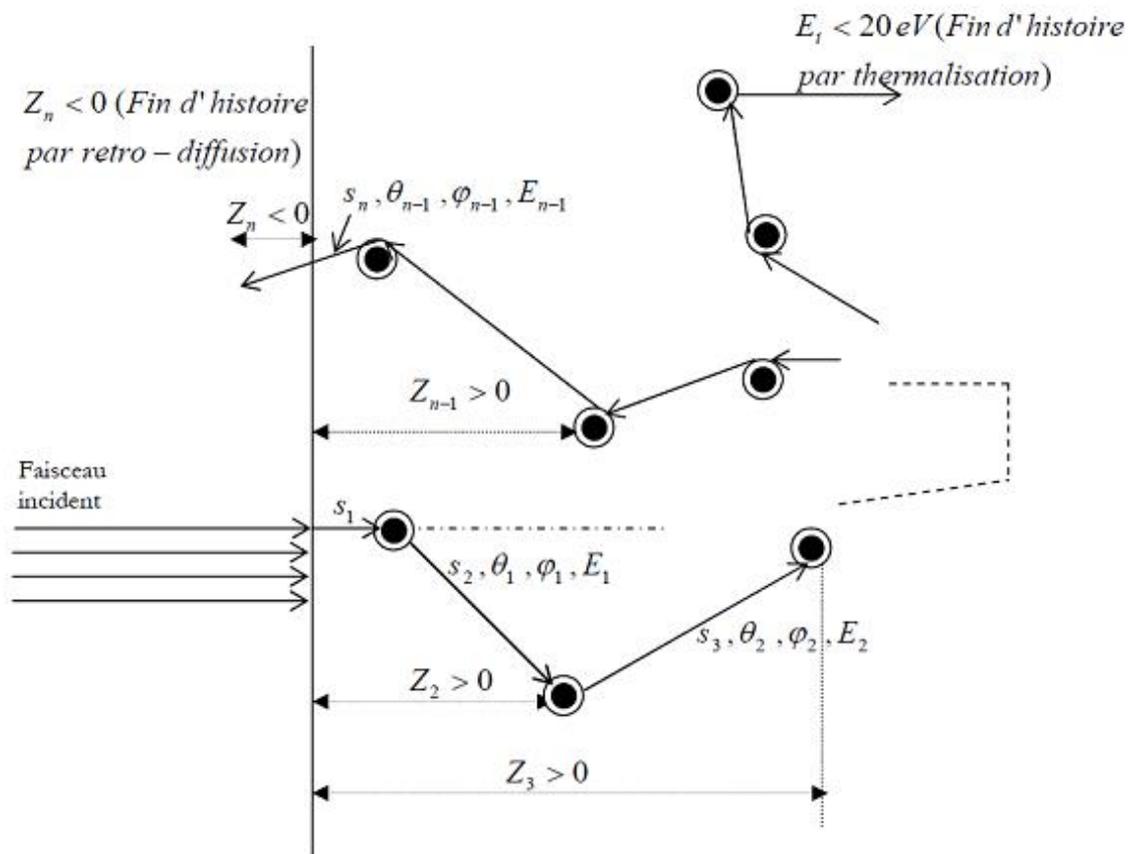


Figure III.2 : Schéma de l'histoire de collision

La méthode de Monte Carlo consiste à associer à chaque événement aléatoire un nombre aléatoire appartenant à l'intervalle $[0,1]$. Ce nombre aléatoire doit être uniforme, pour parcourir tous les cas possibles, et le nombre d'histoire doit être grand pour avoir une meilleure moyenne statistique. Dans ce présent travail les événements aléatoires sont :

- i) La distance entre deux chocs successifs notée "S".
- ii) La probabilité de type de collision.
- iii) L'angle de diffusion après chaque choc élastique " θ ".
- v) L'angle azimutal " φ " après chaque chocs.

Dans la méthode Monte Carlo utilisée dans notre travail, les nombre aléatoires associés à ces évènements aléatoires sont inclus comme suit :

1- La distance entre deux chocs successifs est donnée par :

$$S = -\lambda_T \ln(I(Z)/I_0) \quad (\text{III.13})$$

Le nombre $(I(Z)/I_0)$ est un nombre aléatoire appartenant à l'intervalle $[0,1]$, donc on peut le remplacer par un nombre T_1 .

2- Soit λ_{el} , λ_c , λ_v et λ_T les libres parcours moyens : élastique, inélastique du cœur, inélastique de la valence et le libres parcours moyens totale où :

$$\lambda_T = (1/\lambda_{el} + 1/\lambda_c + 1/\lambda_v)^{-1} \quad (\text{III.14})$$

La probabilité pour que le type de collision soit élastique, ou inélastique (soit avec les électrons de cœur ou de valence) est un nombre aléatoire appartenant à l'intervalle $[0,1]$ que l'on note T_2 . Posons :

$$P_1 = [(1/\lambda_{el})/(1/\lambda_T)] \quad (\text{III.15})$$

$$P_2 = [(1/\lambda_{el} + 1/\lambda_c)/(1/\lambda_T)] \quad (\text{III.16})$$

Si $T_2 \leq P_1$ La collision est élastique.

Si $P_1 < T_2 \leq P_2$ La collision est inélastique avec les électrons de cœur.

Si $P_2 < T_2 \leq 1$ La collision est inélastique avec les électrons de valence.

3- Pour calculer l'angle de diffusion θ après chaque collision, nous avons la relation suivante :

$$T_3 = \int_0^\theta \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega / \sigma_{el} \quad (\text{III.17})$$

Alors T_3 est un nombre aléatoire appartenant à l'intervalle $[0,1]$, on introduit T_3 ,

$\frac{d\sigma_{el}(\theta)}{d\Omega}$ à la section efficace différentielle.

En déterminant la relation entre T_3 et θ à partir de l'équation (III-21) en utilisant la section efficace de Rutherford, la relation est :

$$\theta = \ar \cos \left(\frac{1 + B_n - T_3 - 2T_3 B_n}{1 + B_n - T_3} \right) \quad (\text{III.18})$$

4- Pour la perte d'énergie X est calculée pour chaque événement inélastique à partir de la relation suivante :

$$T_4 = \frac{\int_X^E \frac{d\sigma_{inl} d(\Delta E)}{d(\Delta E)}}{\sigma_{inl}} \quad (\text{III.19})$$

T_4 est un nombre aléatoire appartenant à l'intervalle [0,1]

L'angle de diffusion sera donc :

$$\theta = \arcsin \left[(X / E)^{1/2} \right] \quad (\text{III.20})$$

5- Pour l'angle " φ " cet angle est supposé uniforme et appartenant à l'intervalle [0,2 π], pour cela nous pouvons écrire :

$$T_5 = \varphi / 2\pi \quad (\text{III.21})$$

Où T_5 est un nombre aléatoire appartenant à l'intervalle [0,1], la relation cherchée est :

$$\varphi = T_5 \cdot 2\pi \quad (\text{III.22})$$

L'histoire des positrons dans la matière par la méthode de Monte Carlo suit les étapes suivantes :

- 1- La particule projectile va parcourir une certaine distance S (avant le choc).
- 2- La sélection de type de collision.
- 3- La particule projectile va diffuser par un angle θ , dépendant de type de collision, et un angle φ qui est supposé uniforme.

Ces trois étapes construisent l'histoire de schéma de Monte-Carlo cet histoire se répète au sein du cristal avec des nouvelles valeurs décrites par des nombres aléatoires.

La fin de ces histoires est repérée dans notre simulation par :

1-L'énergie d'arrêt dans notre simulation est 20ev (pour une particule implanté) Le critère d'arrêt est justifié par le fait que l'électron va parcourir une distance qui varie entre 1Å et 2Å pour une énergie allant de 100ev à 20eV (Valkealahti and Nieminen 1983 ; Adesida et al 1980).

2- $Z < 0$ (pour une particule rétrodiffusée), Z est la distance normale séparant le projectile et la surface délimitant le métal.

La figure (III.3) représente l'organigramme du schéma de Monte – Carlo où :

E_0 est l'énergie incidente de la particule projectile.

θ_0 et φ_0 représentent les angles d'incidence oblique, on a pris ($\theta_0 = \varphi_0 = 0$) incidence normale.

θ_1 et φ_1 représentent les angles de la particule diffusée dans le référentiel (X, Y, Z).

N_g est le nombre des particules incidentes.

N_b est le nombre des particules rétrodiffusées.

N_i est le nombre des particules implantées au sein du métal avec une énergie $< 20\text{ev}$

X est la perte d'énergie.

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

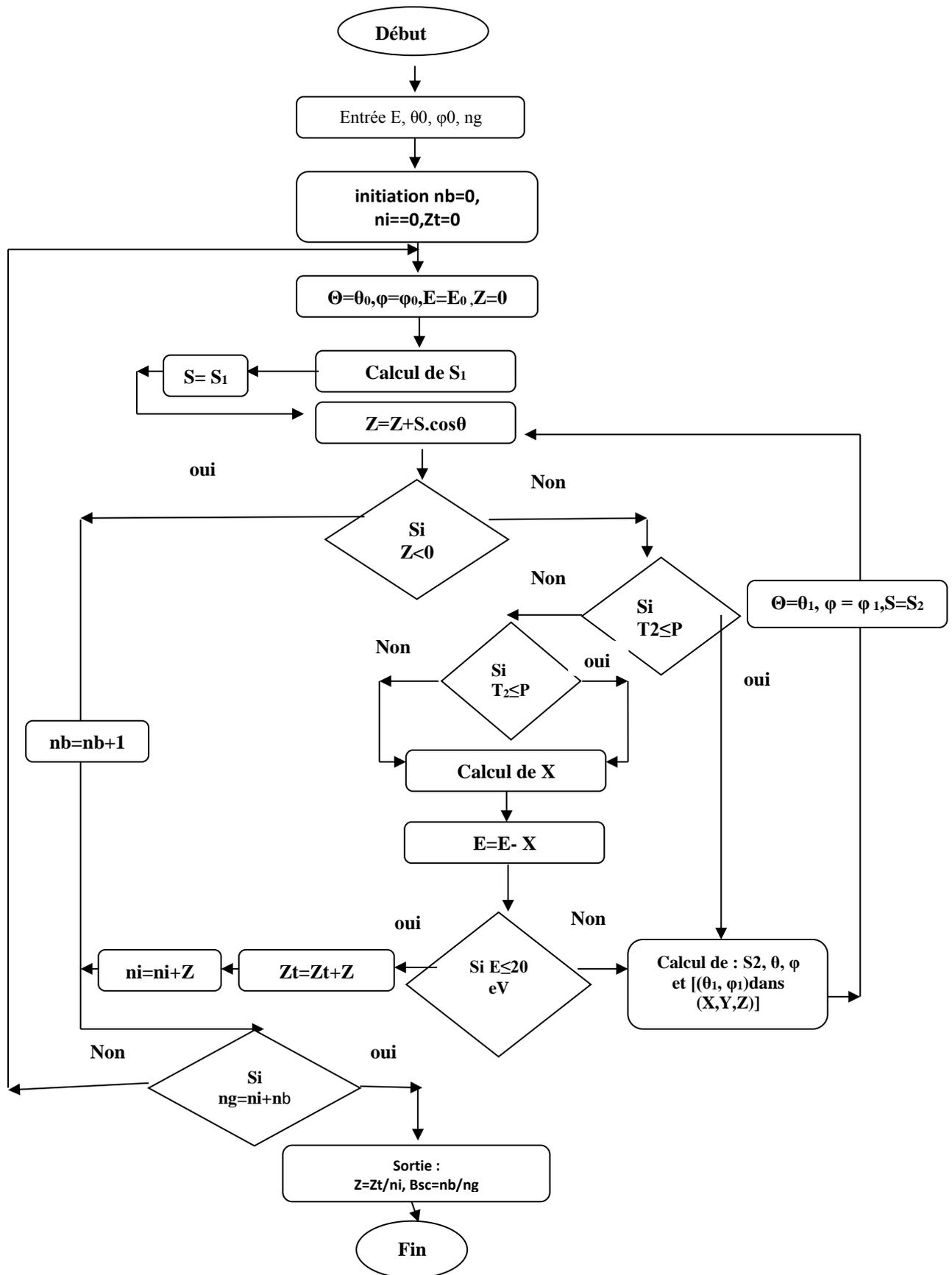


Figure III.3. Organigramme du schéma de Monte- Carlo

Le coefficient de rétrodiffusion (BSC : Backscattering coefficient) est déterminé par la méthode Monte Carlo à partir de la relation suivante :

$$BSC = \frac{n_{g(z_{1/2} < 0)}}{n_i} \quad (III.23)$$

n_g : le nombre des particules rétrodiffusées.

n_i : le nombre des particules incidentes.

La profondeur de pénétration moyenne $Z_{1/2}$ est donnée par:

$$Z_{1/2} = \frac{\sum_{i=1}^{N_i} Z_i}{N_i} \quad (III.24)$$

Où n_i est le nombre des particules implantées dans le cristal (ont une énergie $E \leq E_{\text{arrêt}}$ et une coordonnée $Z_i > 0$). L'indice i indique la particule implantée dans le cristal.

Par définition, la profondeur de pénétration moyenne $Z_{1/2}$ est la distance moyenne parcourue par la particule incidente avant de perdre totalement son énergie cinétique E , dans les processus inélastiques possibles.

La profondeur de pénétration moyenne peut être présentée selon plusieurs auteurs par la relation suivante :

$$Z_{1/2} = (A / \rho) \cdot E^n \quad (III.25)$$

Où $Z_{1/2}$ est en \AA , E est en KeV et ρ est la densité de l'échantillon [g/cm^3]. A et n sont des constantes déterminées expérimentalement (Valkealahti and Nieminen 1983, 1984). Les valeurs de A et N sont énumérés dans le tableau ci-dessous.

Élément	A	n	ρ
Be	349.95	1.656	1.85
Al	324.41	1.558	2.701
Si	326.36	1.555	2.33
Cu	322.30	1.481	8.90
Au	750.3	1.299	19.30

Table III.1 : Les valeurs de A , n et ρ fit de 1- 10 KeV (Ghosh 1995).

III.6. Calcul des trajectoires du positron

Tous les problèmes de diffusion sont reliés à des trajectoires de particules subissant des collisions avec d'autres particules. Une particule (le positron dans notre cas) suit pendant un court intervalle de temps une trajectoire déterministe éventuellement dans un champ de force, puis à un instant aléatoire subit une collision qui fait passer sa vitesse v à une valeur aléatoire v' , ainsi la trajectoire de la particule devient un caractère fortement aléatoire. La méthode Monte Carlo est généralement utilisée pour traiter ce type de problème, elle consiste à décomposer la trajectoire d'une particule en un grand nombre de séquence, chaque séquence comprenant un choc élastique, et un choc inélastique avec les électrons de valence et les électrons du cœur.

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

$$\widehat{k}_f = \cos \theta (1 - \cos \phi) \widehat{k}_i + \cos \phi \widehat{k}_0 + \sin \phi \widehat{k}_0 \cdot \widehat{k}_i \quad (\text{III.26})$$

Avec \widehat{k}_0 est un vecteur unité lié dans le plan normal au plan (x,y) qui contient \widehat{k}_i et sur le cône de semi-angle θ où son axe est \widehat{k}_i (figure III.4).

Les vecteurs $\widehat{k}_i, \widehat{k}_0$ peuvent s'écrire en termes d'angle que fait \widehat{k}_i avec les axes z et x.

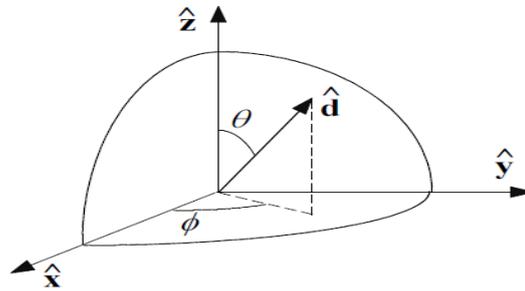
θ_1 et ϕ_1 respectivement, l'angle θ et les vecteurs unités $\widehat{x}, \widehat{y}, \widehat{z}$ le long des axes x, y et z.

$$\widehat{k}_i = \sin \theta_1 \cos \phi_1 \widehat{x} + \sin \theta_1 \sin \phi_1 \widehat{y} + \cos \theta_1 \widehat{z} \quad (\text{III.27})$$

$$\widehat{k}_0 = \sin(\theta + \theta_1) \cos \phi_1 \widehat{x} + \sin(\theta + \theta_1) \sin \phi_1 \widehat{y} + \cos(\theta + \theta_1) \widehat{z} \quad (\text{III.28})$$

$$\widehat{k}_i \cdot \widehat{k}_0 = \sin \theta \sin \phi_1 \widehat{x} - \sin \theta \cos \phi_1 \widehat{y} \quad (\text{III.29})$$

Typiquement 1000-2000 trajectoires positroniques ou électroniques sont poursuivies pour produire un histogramme statique raisonnable de profile d'arrêt, pour une énergie incidente E.

Figure.III.4 : Représentation des angles θ et φ d'un vecteur de direction

II.7. Applications de Monte Carlo

De très nombreux secteurs scientifiques et technologiques ont désormais adopté ce type d'approche connue sous le nom « méthode de Monte Carlo », c'est en fait la puissance accrue des ordinateurs qui a permis à ces méthodes de devenir opérationnelles et de se répandre dans des secteurs aussi variés (figure III.5) que la physique, la biologie moléculaire et génétique, les télécommunications, les réseaux, la recherche opérationnelle, la finance, et bien d'autres encore (Zaoui 2006).

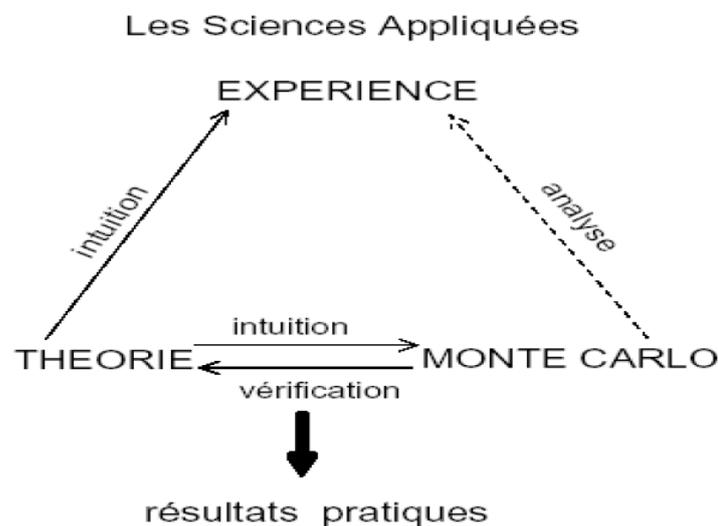


Figure III.5 : Le rôle des méthodes de Monte Carlo dans les sciences appliquées (Bielajew 2001).

III.8. Efficacité de la méthode Monte Carlo

L'implémentation de n'importe quelle méthode passe par la création d'opérations dans la cascade d'évènement. On comprend donc aisément la présence d'un compromis entre gain sur la valeur d'intérêt et temps de simulation. Ce compromis s'exprime par l'efficacité ε , définie comme suit (Carlson et al 1979)

$$\varepsilon = \frac{1}{\sigma^2 T} \quad (\text{III.30})$$

Où σ est la variance des estimations de la simulation Monte Carlo et T le temps de simulation (le temps de calcul ou d'exécution). Il peut ainsi aider à prévoir le temps de simulation nécessaire pour obtenir une variance donnée. Pour peu que l'on connaisse déjà l'efficacité approximative des paramètres alloués, on peut aisément prévoir que la réduction par 2 de la variance nécessite un temps 4 fois plus long, en outre cette valeur va permettre de déterminer la qualité de chaque méthode vis-à-vis du problème étudié. Il existe différentes méthodes de réduction de variance. On peut distinguer globalement 3 catégories : les premières qui vont obliger l'utilisateur à jauger un paramètre physique (range rejection), les secondes auxquelles sera liée une pondération inhérente afin de ne biaiser aucun évènement (russian roulette, splitting, interaction forcing), et enfin les plus générales qui vont toucher la simulation elle-même (phase space file, geometry equivalence) dans son protocole ou son organisation périphérique.

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

III.9. Les principaux codes utilisent la méthode Monte Carlo

Les codes de Monte Carlo deviennent un outil essentiel en physique de l'interaction rayonnement-matière (Daures and al.1991). Dans le domaine de la physique des rayonnements l'emploi des codes de Monte Carlo est fondé sur le choix aléatoire de l'interaction du rayonnement avec la matière.

Dans la littérature on trouve plusieurs codes de simulations Monte Carlo traitant des problèmes de transport et de diffusion des particules chargées ou non chargées dans les matériaux (Hirayama et al.2005 ;Jamil et al. 2008 ; Kawrakow 2003 ,2006 ; Mangiarotti et al.2008 ; Mazurier 1999 ; Salvat et al. 2002 ; Zhenyu and Hankai 1988) ou on peut citer :

EGS4/EGSnrc (Electron Gamma Shower)

Le code de Monte Carlo EGS4 (Nelson and Hirayama ,1985) est l'un des premiers codes mis à la disposition des chercheurs à avoir simulé le transport du couple électron/phonon dans la matière. Il a été utilisé et testé avec succès dans un grand nombre d'utilisations en métrologie des rayonnements. Néanmoins, dans certaines situations, comme la mesure dans une chambre à ionisation, le code ne délivre pas des résultats suffisamment fiables.

Une version plus récente, connue sous le nom EGSnrc (Kawrakow et al.2002), répond partiellement à ces problèmes. Notons également que la source écrite en langage FORTRAN, basé sur l'utilisation de macro-instructions, doit être systématiquement compilée en Fortran. L'avantage de cette approche est l'obtention d'un code plus compact et plus facile à manipuler pour l'utilisateur.

MCNP4 (Monte Carlo N particles)

Ce code (Breisemeister et al., 2000) suit les particules neutres (photons et neutrons), les électrons et les positrons et est étendu à certaines particules lourdes chargées dans sa version MCNPX. Ce n'est que par la suite, que le transport des particules chargées y a été intégré. Il fait l'objet d'un développement continu depuis les années quarante soutenu par une politique d'assurance qualité. Au delà de la modélisation de l'interaction du rayonnement avec la matière, il dispose d'outils statistiques pour tester la convergence mathématique du résultat obtenu et de techniques de réduction de variance intégrées. Il ne nécessite pas une re-compilation du code pour chaque cas à traiter comme dans EGS.

Le code GEANT 4.0

Développé au sein du CERN se présente sous la forme d'une bibliothèque de données et d'outils que l'utilisateur peut assembler selon ses besoins spécifiques (object-oriented technology). La dernière version est écrite en C++ au lieu du Fortran. Il est très complet en ce qui concerne les types de particules qui sont suivies : photons, électrons et ions.

PENELOPE (Penetration and Energy Loss of Positrons and Electrons)

Penelope (Salvat et al.2001) a été développée par l'équipe de F.Salvat (université de Barcelone) dans le but de suivre dans un premier temps uniquement les électrons et les positrons. Le transport des phonons fut ajouté par la suite. L'un des avantages de ce code sur les précédents est sa réalisation récente qui incorpore un certain nombre de concepts physiques plus modernes et plus précis avec une unité de conception plus grande et rigoureuse. Comme la plupart de ces codes il est écrit en FORTRAN.

Le grand avantage des codes généraliste est leur grande souplesse d'adaptation aux caractéristique et matérielles du problème à résoudre.

III.10. Conclusion

Le parcours d'une particule chargée (électron, positron...etc) dans la matière ne peut être quantifié de façon déterministe ; il revêt un caractère de probabiliste nécessitant le calcul de probabilités d'interaction appelées sections efficaces pour l'ensemble des phénomènes collisionnels induits. On ne parle donc d'interactions successives dans le suivi pas à pas de la particule qu'en termes de probabilités de diffusion suivant un potentiel donné ou en termes de probabilités d'éjection d'un positron dans une direction donnée et avec une énergie donnée. Cela nécessite donc une méthode de calcul des probabilités d'interaction puissante pour déterminer l'historique de la particule tout au long de son parcours.

La méthode Monte Carlo reproduit fidèlement l'aspect stochastique caractéristique de l'interaction d'une particule avec le milieu traversé, est de ce point de vue, la plus adaptée pour rendre compte de la trajectoire ainsi que de l'effet d'une particule chargée dans la matière. Elle est basée sur la génération des nombres aléatoires.

Le grand avantage de la méthode est sa simplicité, elle permet de visualiser l'effet de différents paramètres et de donner ainsi des orientations qui auraient été a priori écartées et de trouver facilement des structures que l'on n'aurait pas pu aussi bien optimiser par les méthodes analytiques.

IV.1. Introduction

Quand un faisceau de positrons pénètre dans le solide massif, une partie sera absorbée par ce dernier et l'autre sera rétrodiffusé vers l'extérieur avec dissipation d'énergie, en raison de leurs pénétrations en surface et la perte de petite quantité d'énergie par ionisations (Dapor 2003).

La fraction de particule réémise (rétrodiffusée) par la cible est très importante à mesurer, en effet la variation de cette fraction avec l'énergie incidente des particules (positrons) représente un test crucial pour la simulation. C'est sur cette base de mesure que beaucoup d'informations concernant la nature de l'interaction ont été déduite à partir de la modélisation des processus de l'interaction des positrons à l'intérieur de la cible. Cette interaction est traduite par les processus élastiques et inélastiques, les seuls processus responsables du ralentissement jusqu'à la diffusion des positrons à basse énergie ($<10\text{KeV}$).

Le calcul du coefficient de rétrodiffusion BSC a été entrepris par plusieurs chercheurs utilisant différentes méthodes : soit par la simulation de la trajectoire de positron par la méthode Monte Carlo, soit par des calculs à partir des formulations analytique ou semi empirique de la théorie de transport. L'étude des paramètres de transport joue un rôle très important dans différents domaines et techniques expérimentaux. Dans ce chapitre nous allons étudier quelques paramètres de transport à savoir la section efficace totale nous allons utiliser la nouvelle correction de la section efficace de transport dérivée par Jablonski (Jablonski, 1998), et modifiée par Rouabah (Rouabah et al. 2010) permettent d'obtenir des résultats plus précis, le coefficient de rétrodiffusion (BSC), le libre la distance maximale (R), le profil de stoppage, le parcours des positrons suites à leurs interactions avec le matériau ainsi que leurs profondeurs de pénétration variant avec l'énergie de ces positrons dans l'ordre de prévoir les paramètres responsables de cette variation et leurs influences. On présentera les résultats de la simulation basés sur notre modèle et afin de valider ce dernier nous avons fait une comparaison avec les résultats expérimentaux et théoriques reportés dans la littérature.

IV.2. Calcul de la section efficace totale

Dans notre étude, nous avons calculé la section efficace totale en fonction de la section efficace de transport ou nous avons introduits la nouvelle correction pour la section efficace de transport de Rouabah et al.2010 pour les éléments (Carbone, Néon, Argon, Aluminium, cuivre, Argent, Germanium, et l'Or). Ces valeurs sont obtenues on utilise l'expression suivante :

$$\sigma_T = \sigma_{tr} \left[\frac{\gamma(\gamma+2)}{2} \ln \frac{\gamma+2}{\gamma} - \gamma \right] \quad (IV.1)$$

$$\gamma = 2\beta_N = \frac{e^2 Z^{2/3}}{4a_0 E} \quad (IV.2)$$

σ_{tr} est la section efficace de transport dérivée par Jablonski (1998), et modifié par Rouabah et al.2010, donné par la formule :

$$\sigma_{tr}^c = \frac{32\pi Z^2}{a_0^2 \mu^\infty \varepsilon_0^2} \left[\ln(1 + \varepsilon_0) - \frac{\varepsilon_0}{1 + \varepsilon_0} \right] \quad (IV.3)$$

a_0 est rayon de Bohr , ε_0 est l'énergie réduite et Z est le numéro atomique de la cible. Rouabah et al.2010 expriment le facteur μ en fonction de numéro atomique Z de la cible par la formule suivante :

$$\mu^\infty(Z) = 5.07 - 4.3 \exp\left(-\frac{z}{39.17}\right) \quad (IV.4)$$

Et

$$\mu^\infty(Z) = 0.785 + 0.106Z - 1.14 \times 10^{-3} Z^2 + 4.93 \times 10^{-6} Z^3 \quad (IV.5)$$

Sur les tableaux (IV.1), (IV.2), (IV.3), (IV.4) on reporte, respectivement nos résultats (pw : dont le détail sera donné plus loin) concernant les sections efficace élastique totale des positrons incidents d'énergie 1-4KeV aux cible solide C, Ne, Al, Cu, Ag et Au en comparaison avec d'autres résultats (Dapor 1996 ; Dapor 1998). On note que les sections efficaces totales représentées sur les tableaux ci-dessus possèdent approximativement le même comportement dans l'intervalle 1-4keV, où ils décroissent avec l'augmentation de l'énergie incidente des positrons.

Une décroissance rapide dans l'intervalle 1-2keV, cela montre clairement qu'à basse énergie, les collisions élastiques sont plus probables.

Nos résultats de section efficace totale sont en bon concordance avec ceux reportés par Dapor pour la majorité des éléments. Notons que Dapor (Dapor 1996) utilise un traitement relativiste (l'équation de Dirac).

Energie (KeV)	C			Ne	
	$\sigma_{(pw)}$	$\sigma_{(theo(a))}$	$\sigma_{(Dapor98)}$	$\sigma_{(pw)}$	$\sigma_{(Dapor98)}$
1	0.474	0.292	0.461	0.740	0.391
2	0.251	0.161	0.261	0.414	0.251
3	0.171	0.120	0.183	0.289	0.186
4	0.130	0.092	0.141	0.226	0.149

Tableau IV.1 : Section efficace totale ($A^{\circ 2}$) en fonction de l'énergie de positron pour le Carbone (C) et Nyon (Ne).

Energie (KeV)	Al			Cu		
	$\sigma_{(pw)}$	$\sigma_{(theo(a))}$	$\sigma_{(Dapor98)}$	$\sigma_{(pw)}$	$\sigma_{(theo(a))}$	$\sigma_{(Dapor98)}$
1	0.855	0.852	1.08	1.32	1.099	1.07
2	0.511	0.535	0.654	0.807	0.798	0.755
3	0.366	0.397	0.480	0.631	0.648	0.606
4	0.286	0.317	0.381	0.521	0.552	0.515

Tableau IV.2 : Section efficace totale ($A^{\circ 2}$) en fonction de l'énergie de positron pour l'Aluminium (Al) et le cuivre (Cu).

Energie (KeV)	Ag			Au		
	$\sigma_{(pw)}$	$\sigma_{(theo(a))}$	$\sigma_{(Dapor98)}$	$\sigma_{(pw)}$	$\sigma_{(theo(a))}$	$\sigma_{(Dapor98)}$
1	1.687	1.859	1.72	0.956	2.203	1.99
2	0.901	1.394	1.27	0.949	1.682	1.51
3	0.761	1.151	1.05	0.885	1.411	1.27
4	0.664	0.993	0.911	0.816	1.233	1.12

Tableau IV.3 : Section efficace totale ($A^{\sigma 2}$) en fonction de l'énergie de positron pour l'Argent (Ag) et l'Or (Au).

Energie (KeV)	Ar		Ge	
	$\sigma_{(pw)}$	$\sigma_{(Dapor98)}$	$\sigma_{(pw)}$	$\sigma_{(Dapor98)}$
1	1.035	1.18	1.188	1.44
2	0.644	0.783	0.832	0.992
3	0.473	0.599	0.661	0.785
4	0.377	0.489	0.550	0.660

Tableau IV.4 : Section efficace totale ($A^{\sigma 2}$) en fonction de l'énergie de positron pour l'Argon (Ar) et le Germanium (Ge).

Theo (a) : Dapor (1996).

IV.2.1. Comparaison entre les sections efficaces totales

Les figures (IV.1), (IV.2) représentent, respectivement les sections efficace totale de l'aluminium (Al) en comparaison avec les sections efficace totale de cuivre (Cu) et l'argent (Ag), ou on remarque que les sections efficace de l'aluminium sont légèrement inférieure à celles du cuivre et d'argent, cela revient au fait que le nombre atomique de cuivre Cu et l'argent Ag est plus grand que celui de l'aluminium Al, puisque la section efficace totale augmente avec l'augmentation de nombre atomique Z de la cible.

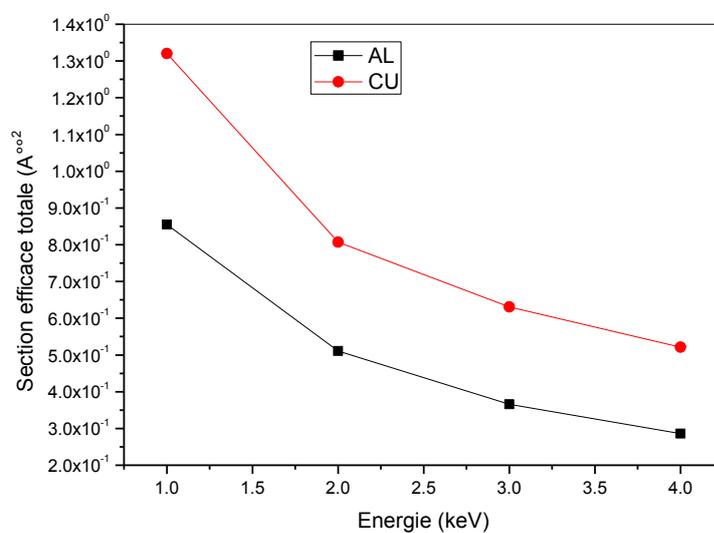


Figure IV.1 : La section efficace totale de l'aluminium et le cuivre

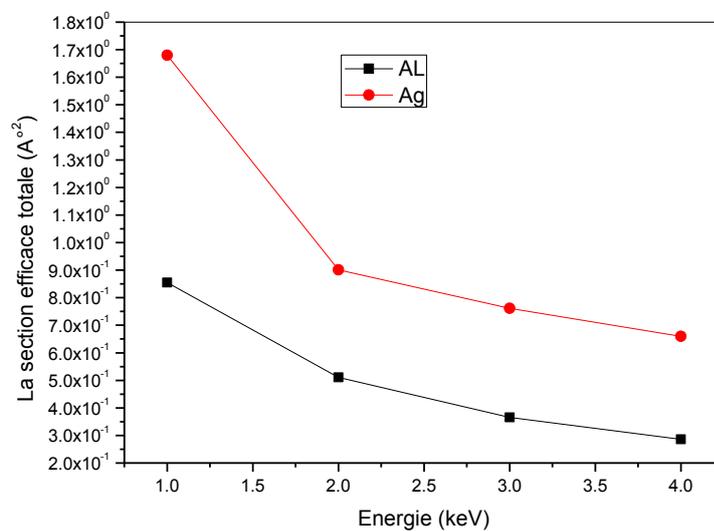


Figure IV.2 : La section efficace totale de l'aluminium et l'Argent.

IV.3. Le libre parcours moyen de transport

Le libre parcours moyen de transport (LPMT) est défini comme étant la distance entre deux collisions consécutives, c'est un paramètre crucial dans l'étude de transport des particules dans la matière (Jablonski 1998). Il est défini comme étant la distance Caractéristique du processus de relaxation. On rappelle qu'il est relié à la section efficace élastique de transport (Jablonski and Powell 2007 ; Werner 2001)

$$\lambda_{tr} = \frac{1}{N\sigma_{tr}} \quad (IV.6)$$

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

$$N = \frac{N_A \rho}{A} \quad (IV.7)$$

Avec N_A : le nombre d'Avogadro, ρ la densité du matériau, et A est le poids atomique. Pour des composés ou des alliages constitués de n éléments, le libre parcours moyen de transport est lié à la section efficace de transport d'atomes constitutifs par :

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

Où X_K est la fraction atomique des espèces K (Jablonski and Powell 2007; Jablonski 1998).

Les figures (IV.3), (IV.4), (IV.5), (IV.6), (IV.7), (IV.8), (IV.9), (IV.10), (IV.11) illustrent le libre parcours moyen de transport calculé λ_{tr} (λ_{tr}^1 calculé à partir de σ_{tr} de Jablonski (Jablonski 1998) et λ_{tr}^2 calculé à partir de σ_{tr} de Rouabah et al.2010) en fonction de l'énergie de positron pour les éléments Be-Au . Il est à noter qu'on a utilisé la section efficace de transport des positrons de Rouabah et al. 2010.

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

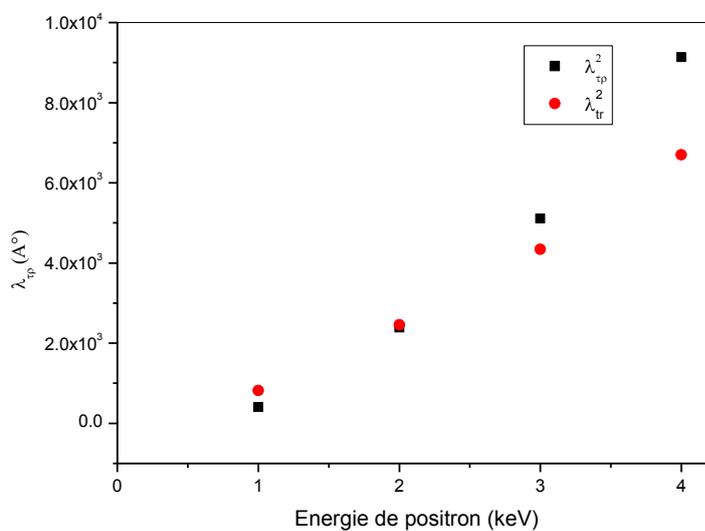


Figure IV.3 : Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [KeV] pour le Be.

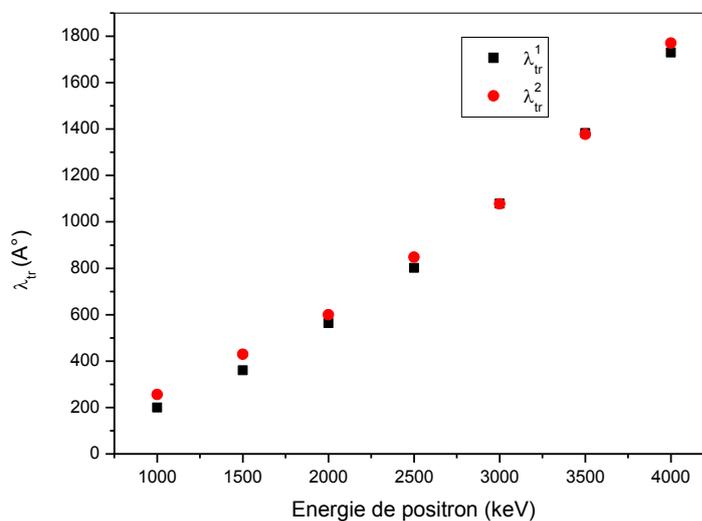


Figure IV.4 : Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [KeV] pour Al

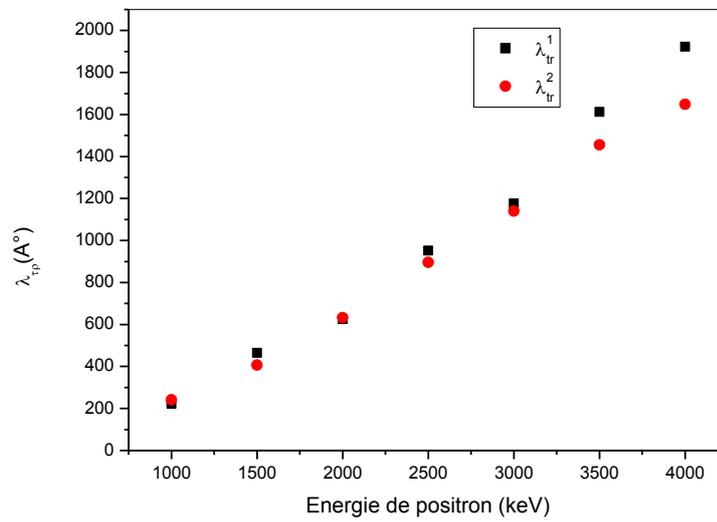


Figure IV.5 : Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [KeV] pour le Si.

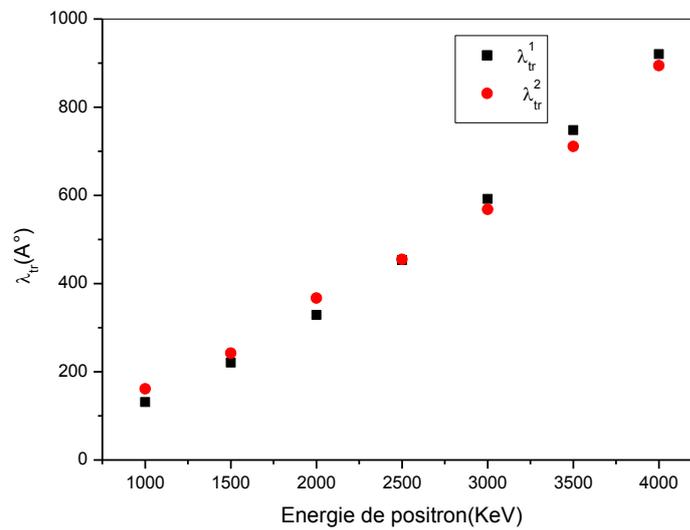


Figure IV.6 : Libre parcours moyen de transport [Å] en fonction de l'énergie incidente [KeV] pour le Ti.

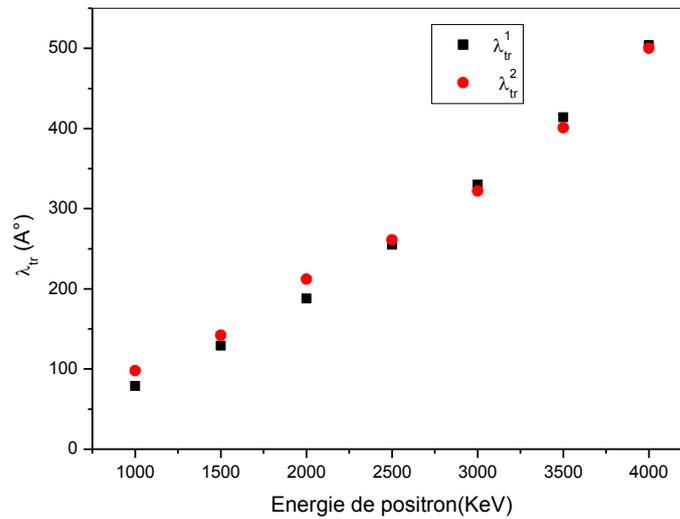


Figure IV.7 : Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [KeV] pour le Fe.

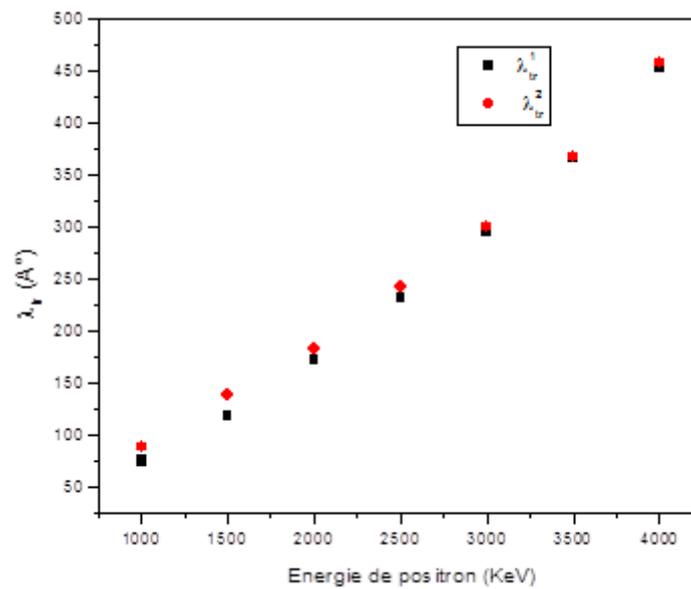


Figure IV.8 : Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [KeV] pour le Cu.

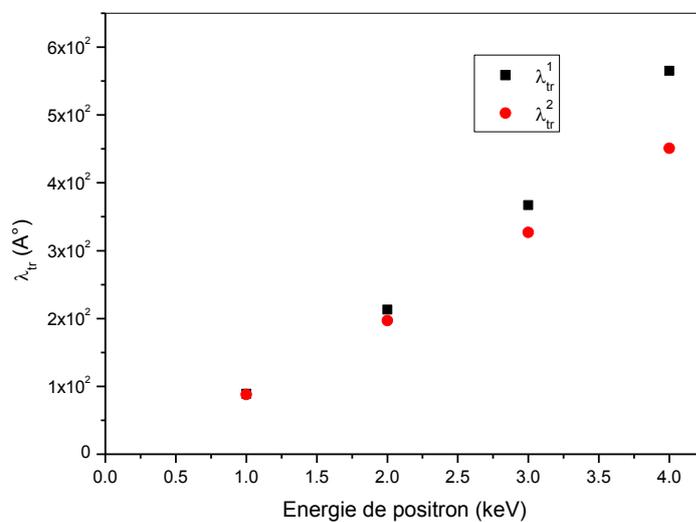


Figure IV.9 : Libre parcours moyen de transport [Å°] en fonction de l'énergie incidente [KeV] pour le Zn.

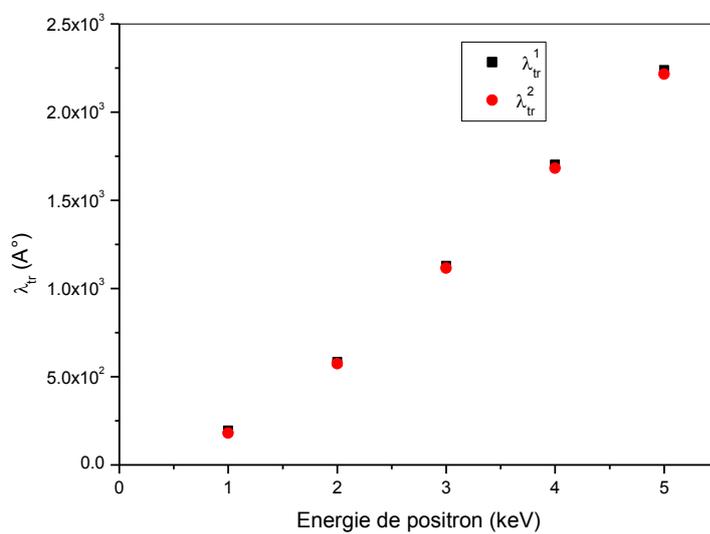


Figure IV.10 : Libre parcours moyen de transport [Å°] en fonction de l'énergie incidente [KeV] pour le Sn.

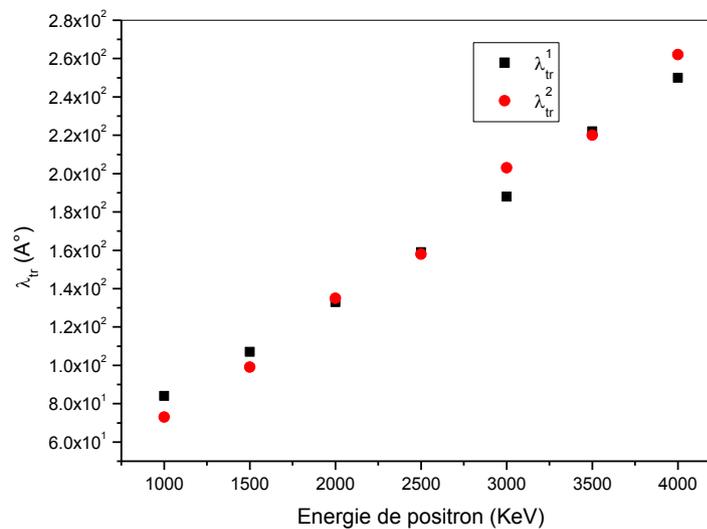


Figure IV.11 : Libre parcours moyen de transport [A°] en fonction de l'énergie incidente [KeV] pour le Au.

IV.4. Etude des coefficients de rétrodiffusion

Dans l'étude de la diffusion des électrons et positrons dans l'aluminium, Bouarissa et al. 1998 ont montré que μ ne peut pas être une constante, mais une variable qui dépend de l'énergie incidente, contrairement à Nigam et al. qui ont utilisé $\mu=5.43$ (une valeur trouvée empiriquement). Adeiseda et al. (1978) qui avaient été les premiers auteurs qui ont utilisé cette modification pour l'aluminium ou ils ont trouvé une valeur $\mu=2.61$. Cette hypothèse basée sur le fait que la particule incidente perde successivement son énergie lors des collisions inélastiques dans la matière qui permet de conclure que la valeur constante de μ n'est valable que pour une seule valeur d'énergie. En définitive il s'agit de prendre le coefficient μ comme fonction de l'énergie pour chaque élément ; donc nous avons utilisé l'expression de ce dernier à partir de l'interpolation par rapport aux sections efficaces trouvées par Dapor (Dapor and Miotello1998).

Nous avons déterminé μ à partir de la relation suivante :

$$\sigma_{el} = \frac{\pi \cdot e^4 \cdot Z^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 4E^2} \cdot \frac{1}{\beta_N(\beta_N+1)} \quad (\text{IV.8})$$

$$\beta_N = \frac{\mu \cdot Z^{2/3}}{E} \quad (\text{IV.9})$$

Où σ_{el} est la section efficace élastique totale obtenue par Dapor (Dapor and Miotello1998)

A partir de l'équation précédente, il est facile de montrer que :

$$\mu = \left[\left(\frac{\pi Z^2 e^4}{\sigma_{el} (4\pi\epsilon_0)^2 4E^2} \right)^{1/2} - 1/2 \right] \frac{E}{Z^{2/3}} \quad (\text{IV.10})$$

Nous avons conclu que μ peut être écrite, en faisant une interpolation polynomiale de troisième ordre de l'énergie.

Lors de la simulation Monte Carlo nous introduisons les expressions du paramètre μ du coefficient d'écrantage pour chaque élément :

$$\mu(E) = -0.305 \times 10^{-10} E^3 + 0.2517 \times 10^{-6} E^2 - 0.0007E + 3.258 \quad \text{Pour Be} \quad (\text{IV.11})$$

$$\mu(E) = -1.44 \times 10^{-10} E^3 + 1.32 \times 10^{-6} E^2 - 0.0042E + 9.23 \quad \text{Pour Al et Si} \quad (\text{IV.12})$$

$$\mu(E) = -1.82 \times 10^{-10} E^3 + 1.586 \times 10^{-6} E^2 - 0.00488E + 9.455 \quad \text{Pour Ti} \quad (\text{IV.13})$$

$$\mu(E) = -2.49 \times 10^{-10} E^3 + 2.285 \times 10^{-6} E^2 - 0.00745E + 14.27 \quad \text{pour Fe} \quad (\text{IV.14})$$

$$\mu(E) = -3.35 \times 10^{-10} E^3 + 3.20 \times 10^{-6} E^2 - 0.011E + 22.26 \quad \text{pour Cu} \quad (\text{IV.15})$$

$$\mu(E) = -1.9 \times 10^{-10} E^3 + 1.94 \times 10^{-6} E^2 - 0.00754E + 17.83 \quad \text{pour Zn} \quad (\text{IV.16})$$

$$\mu(E) = -1.69 \times 10^{-10} E^3 + 0.459 \times 10^{-6} E^2 - 0.00336E + 14.97 \quad \text{pour Sn} \quad (\text{IV.17})$$

$$\mu(E) = -1.46 \times 10^{-10} E^3 + 1.82 \times 10^{-6} E^2 - 0.009E + 23.18 \quad \text{Pour Au} \quad (\text{IV.18})$$

Sur les tableaux (IV.5), (IV.6), (IV.7), (IV.8), (IV.9), (IV.10) on reporte nos résultats pw1, pw2, pw3 et pw4 basé du coefficient de rétrodiffusion BSC des positrons dans la bande d'énergie entre 1 et 4 KeV pour Be, Al, Si, Ti, Fe, Cu, Sn, Zn et Au ($Z=4-92$), comparés aux résultats de l'expérience (Coleman et al.1992) et des résultats théorique (Dapor 1996 ; Jensen and Walker 1993).

Dans la première approche utilisée dans le présent travail noté PW1, la diffusion élastique est modélisée en utilisant la section efficace de Rutherford (équation II.20), ou le coefficient d'écrantage μ est considéré comme une variable qui dépend de l'énergie des positrons avant chaque collision, comme suggéré par Bouarissa et al. 1998. Le coefficient d'écrantage μ a été déterminé pour plusieurs cibles solides allant de Be - Au dans la gamme d'énergie primaire des positrons de 1-4KeV (équations (IV.11), (IV.12), (IV.13), (IV.14), (IV.15), (IV.16), (IV.17), (IV.18)).

Pour les collisions inélastiques, nous avons utilisé l'expression (II.37) d'excitation de Gryzinski (Gryzinski,1965) et le procédé de Bouarissa (Bouarissa, 1987).

Dans la deuxième approche noté PW2, nous avons modélisés les collisions élastiques par l'approximation analytique développée par Bar et al. (1994,1995) et par Miotello and Dapor (1997), dans cette approximation la section efficace de transport a été calculée pour chaque cible solide par l'utilisation de l'approximation de Rouabah et al. 2009. De la même manière à la première approche de la présente contribution, la diffusion inélastique a été traitée à l'aide de la fonction d'excitation de Gryzinski telle que décrites par Bouarissa (1987).

Dans la troisième approche noté PW3, nous avons utilisé pour les collisions élastiques la même méthode utilisée dans PW2 pour cette contribution. Alors que la collision inélastique a été traitée en substituant la formule de Gryzinski dans notre code Monte Carlo avec celle d'Ashley (Ashley 1988,1990).

Enfin la quatrième approche utilisée dans le présent travail noté PW4 est basée sur le code PENELOPE. Ce dernier est un code Monte Carlo à usage général qui permet de simuler des positrons dans la matière avec une très bonne précision aux basses énergies (Salvat et al.,2006, Sempau et al., 2003).

Energie (KeV)	Al						
	pw1	pw2	pw4	pw3	Exp ^a	Theo ^b	Theo ^c
1	0.0697	0.076	0.0814	0.078	0.069	0.086	0.109
2	0.076	0.081	0.076	0.0965		0.099	
3	0.0779	0.085	0.088	0.108	0.086	0.107	0.115
4	0.093	0.0852	0.111	0.113		0.112	

Tableau IV.5: Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron pour Al.

a :Coleman et al. (1992).

b :Jensen and Walker (1993).

C : Dapor (1996).

Energie (KeV)	Cu					
	pw1	pw2	pw3	pw4	Exp ^a	Theo ^c
1	0.150	0.172	0.184	0.0895	0.135	0.156
2	0.150	260.1	730.1	0.138		
3	0.151	10.16	680.1	0.160	0.194	0.1194
4	0.179	170.0	720.1	0.179		

Tableau IV.6: Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron pour Cu

a :Coleman et al. (1992).

C : Dapor (1996).

Energie (KeV)	Be			Si	
	pw1	pw4	Theo ^c	Bsc ^{pw1}	Bsc ^{pw4}
1	0.0408	0.3460	0.420	0.0871	0.088
2	0.0312	0.3260		0.0992	0.107
3	0.0470	0.3510	0.380	0.126	0.116
4	0.0310	0.3010		0.141	0.125

Tableau IV.7: Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron
(Be et Si)

C : Dapor (1996).

Energie (KeV)	Ti		Fe	
	pw1	pw4	BSC ^{pw1}	BSC ^{pw4}
1	0.108	0.104	0.109	0.096
2	0.150	0.160	0.163	0.141
3	0.201	0.191	0.211	0.155
4	0.231	0.223	0.234	0.170

Tableau IV.8: Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron
(Ti et Fe)

Energie (KeV)	Zn		Sn		
	pw1	pw4	Exp ^a	Bsc ^{pw1}	Bsc ^{pw4}
1	0.090	0.0925	0.089	0.120	0.108
2	0.116	0.131		0.189	0.151
3	0.132	0.156	0.125	0.218	0.187
4	0.155	0.174		0.221	0.241

Tableau IV.9: Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron
(Zn et Sn)

a :Coleman et al. (1992).

Energie (KeV)	Au						
	pw1	pw2	pw3	pw4	Exp ^a	Theo ^b	Theo ^c
1	0.160	0.090	0.105	0.154	0.123	0.111	0.168
2	0.159	0.142	0.152	0.174		0.156	
3	0.195	0.167	0.195	0.196	0.186	0.186	0.240
4	0.238	0.190	0.221	0.208		0.208	

Tableau IV.10: Coefficient de rétrodiffusion en fonction de l'énergie de positron (Au)

a :Coleman et al. (1992).

b :Jensen and Walker (1993).

C : Dapor (1996).

Lorsque l'on compare entre les différentes approches utilisées dans la présente contribution, on peut noter que les valeurs des coefficients de rétrodiffusion des positons obtenues à partir des approches PW1, PW2 et PW3 basé sur le traitement classique sont généralement proches de celles calculées à partir du PW4 approche basée sur le traitement quantique.

En outre les valeurs PW1, PW2 et PW3 sont meilleures que celles des PW4 certains cas par rapport à l'expérience, démontre la puissance du calcul par la méthode de simulation Monte Carlo et de l'utilisation de nouvelle formule de $\mu(E)$. Ceci suggère que les approches utilisées dans le calcul des sections efficaces élastique et inélastique et la description stochastiquement des transports des positrons implicites par la méthode de Monte Carlo sont compatibles avec les expériences.

Noter que pour certaines cibles solides, où aucune comparaison n'a été faite avec dans la littérature (pour le rang des basses énergies où peu de résultats existent), dans ces cas nos résultats sont des prévisions et peuvent servir de référence pour les travaux futurs. Il est intéressant aussi de noter que le coefficient de rétrodiffusion dépend de la nature de la particule, de son énergie primaire E et de nombre atomique de la cible Z . En général le coefficient de rétrodiffusion augmente avec l'augmentation de son énergie primaire pour tous les éléments d'intérêt. Le comportement est presque général pour toutes les approches utilisées (classiques et quantiques). Par ailleurs, il est compatible avec les résultats des modèles théoriques précédents de (Dapor, 1996; Jensen et Walker, 1993), ainsi que les données expérimentales rapportées dans la littérature (Coleman et al, 1992). Il est à noter que le coefficient de rétrodiffusion des positrons est beaucoup plus petit que le coefficient de rétrodiffusion des électrons (Hannachi et al. 2014), cela est dû à la différence de section efficace élastique pour les positrons et les électrons.

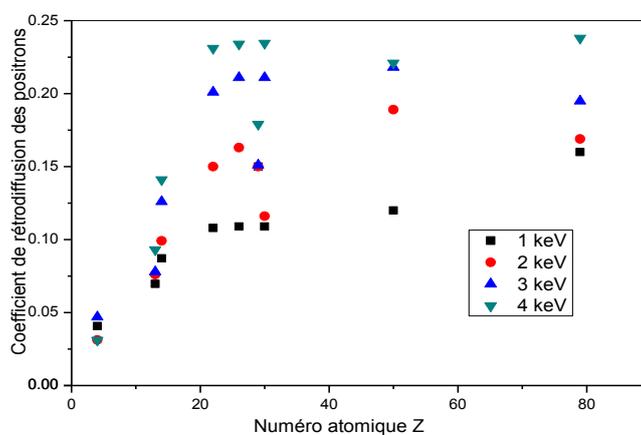


Figure IV.12 : Coefficient de rétrodiffusion (BSC) des positrons en fonction de numéro atomique Z .

Nous montrons sur la figure (IV.12) la variation des coefficients de rétrodiffusion de positons désignés par η par rapport au numéro atomique Z des cibles solides d'intérêt pour diverses énergies primaires de positrons dans la gamme 1-4KeV obtenue à partir de l'approche pw4.

À cet égard, nous avons provisoirement suggéré des expressions qui donnent à la dépendance du coefficient de rétrodiffusion des positons noté η en fonction de numéro atomique Z pour toutes les cibles solides sous la form suivante :

$E=1\text{KeV}$

$$\eta(Z) = 7.79 \times 10^{-7} Z^3 - 1.17 \times 10^{-4} Z^2 + 0.55 \times 10^{-2} Z + 0.022 \quad (\text{IV.19})$$

$E=2\text{KeV}$

$$\eta(Z) = 1.48 \times 10^{-6} Z^3 - 2.24 \times 10^{-4} Z^2 + 1.04 \times 10^{-2} Z + 0.002 \quad (\text{IV.20})$$

$E=3\text{KeV}$

$$\eta(Z) = 1.51 \times 10^{-6} Z^3 - 2.33 \times 10^{-4} Z^2 + 1.15 \times 10^{-2} Z - 0.004 \quad (\text{IV.21})$$

$E=4\text{KeV}$

$$\eta(Z) = 1.73 \times 10^{-6} Z^3 - 2.72 \times 10^{-4} Z^2 + 1.37 \times 10^{-2} Z - 0.017 \quad (\text{IV.22})$$

Les équations 9-11 sont généralisées et exprimé comme :

$$\eta(Z, E) = a(E) \times Z^3 + b(E) \times Z^2 + c(E) \times Z + d(E) \quad (\text{IV.23})$$

Les coefficients $a(E)$, $b(E)$, $c(E)$ et $d(E)$ déterminés sont résumés dans le tableau (IV.11)

En vue sur cette table il semble que les coefficients $a(E)$ et $c(E)$ augmentent avec l'augmentation de l'énergie primaire positon entre 1 et 4 KeV ce qui n'est pas le cas de $b(E)$ et $d(E)$ qui diminuent lorsque l'on augmente l'énergie primaire des positrons.

Les équations (IV.19), (IV.20), (IV.21), (IV.22), (IV.23) donne à la dépendance du coefficient de rétrodiffusion BSC pour un grand ensemble de solides de cibles solides allant de Be ($Z = 4$) - Au ($Z = 79$) sans nécessiter de recourir aux calculs de Monte Carlo.

Energies incidente des positrons (KeV)	a(E)	b(E)	c(E)	d(E)
1	7.79×10^{-7}	-1.17×10^{-4}	0.55×10^{-2}	0.022
2	1.48×10^{-6}	-2.24×10^{-4}	1.04×10^{-2}	0.002
3	1.51×10^{-6}	-2.33×10^{-4}	1.15×10^{-2}	-0.004
4	1.73×10^{-6}	-2.72×10^{-4}	1.37×10^{-2}	-0.017

Tableau IV.11: Les coefficients a(E), b(E), c(E) et d(E) pour une énergie de positron 1-4KeV.

IV.5.la profondeur de pénétration moyenne

La profondeur de pénétration est aussi calculée en fonction de l'énergie incidente toujours dans la gamme d'énergie de 1 à 4 KeV. Les tableaux ci-dessous présentent la profondeur de pénétration moyenne des positrons dans les solides obtenus par la méthode Monte Carlo qui a donné des coefficients de rétrodiffusions plus proches aux ceux de l'expérience (Ghosh et al. 1995).

Nos résultats ont le même ordre de grandeur que ceux calculés par Ghosh et al. 1995, surtout à basse énergie. L'absence des résultats expérimentaux pour la profondeur de pénétration moyenne dans Be, Si et Cu dans la bande d'énergie 1-4KeV ne nous permet pas de tester la validité de nos calculs.

Energies incidente des positrons (KeV)	Al ^{Pw}	Exp ^a	Au	Exp ^a
1	176	150	54	47
2	486	-----	136	----
3	917	756	242	185
4	1469	-----	366	-----

Tableau IV.12: La profondeur de pénétration moyenne des positrons dans Al, Au en fonction de leur énergie incidente.

a : Ghosh et al. 1995

Energies incidente des positrons (KeV)	Be	Si	Cu
1	246	174	89
2	743	477	123
3	1456	894	376
4	1456	1424	576

Tableau IV.13: La profondeur de pénétration moyenne des positrons dans Be, Si, Cu en fonction de leur énergie incidente.

Les figures (IV.13) et (IV.14) représentent respectivement, la profondeur de pénétration moyenne du positron dans l'aluminium et le silicium, ainsi que ceux de l'aluminium et l'or en fonction de l'énergie incidente des positrons.

On remarque que la profondeur de pénétration moyenne augmente avec l'augmentation de l'énergie des positrons, cela veut dire que la pénétration de positron dans les matériaux est plus profonde lorsque son énergie incidente est grande cela revient au fait que le libre parcours moyen augmente proportionnellement à l'augmentation de l'énergie. La similitude du comportement de la profondeur de pénétration moyenne des positrons dans l'Al et le Si est due au fait que le Si vient juste après l'Al dans le tableau périodique des éléments.

IV.5.1. Comparaison entre Al et Au

La figure (IV.14) représente la profondeur de pénétration moyenne des positrons dans l'Al et Au en fonction de l'énergie incidente des positrons. On observe que la profondeur de pénétration moyenne dans l'Al est très grande que celle dans l'Au, cela revient à la grande différence entre le libre parcours moyen de l'Al et l'Au qui est inversement proportionnelle à la probabilité de diffusion. En effet si le libre parcours moyen augmente, la profondeur de pénétration moyenne augmente.

D'autre part, les atomes lourds comme l'Au possèdent un grand nombre d'électrons de valence et du cœur. Ceci augmente le nombre des collisions inélastiques d'une façon significative, ce qui diminue la vitesse des positrons plus rapidement dans ces matériaux. On note aussi que les atomes lourds possèdent une large section efficace élastique, et aussi une large probabilité pour faire des collisions avec des larges angles lors des collisions élastiques.

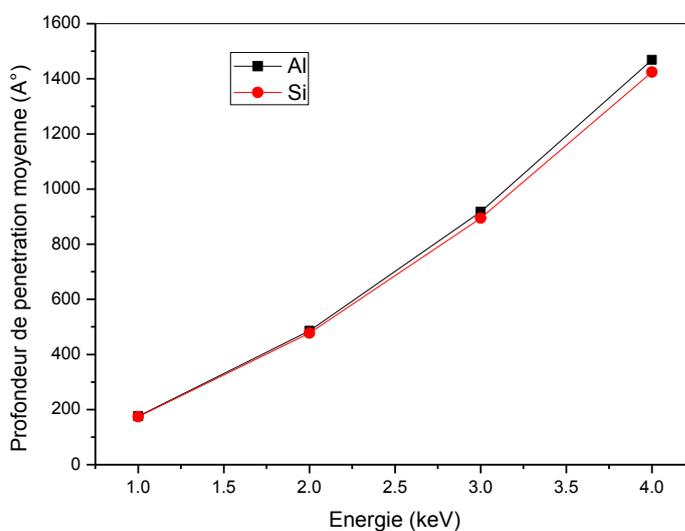


Figure IV.13 : La profondeur de pénétration moyenne de positron pour Al et Si.

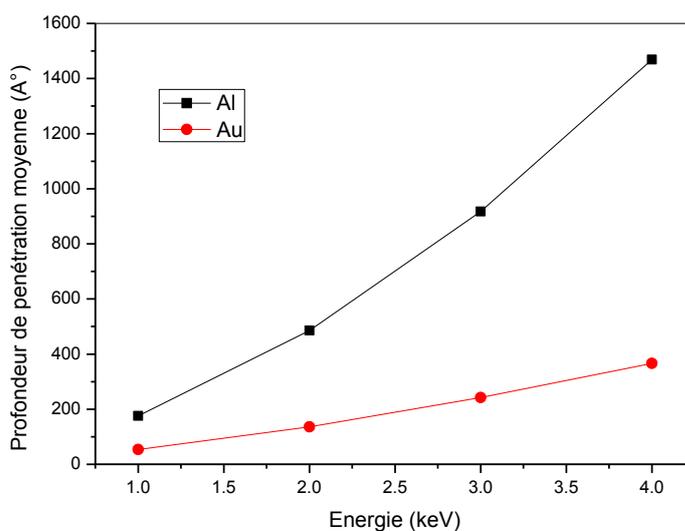


Figure IV.14 : La profondeur de pénétration moyenne de positron pour Al et Au.

IV.6. La distance maximale du parcours de positron

L'utilisation de la simulation Monte Carlo nous a permis de calculer la distance maximale de parcours des éléments précédents pour la bande d'énergie 1-4 KeV. Rappelons que la distance maximale est donnée par plusieurs expressions proposées par différents auteurs.

La distance maximale de parcours est donnée par la relation suivante :

$$R = \int_{E_0}^E \frac{dE}{dE/dS} \quad (\text{IV.24})$$

Avec E_0 : est l'énergie initiale de positron et E : l'énergie minimale, cependant dans notre simulation MC cette énergie considérée comme critère d'arrêt est choisie inférieure à 20eV. Les résultats obtenus sont présentés dans les tableaux ci-dessous

E (KeV)	Be	Al	Si
1	457.45	401.126	389.39
2	1402.5	1157.65	1055.019
3	2871.79	2111.25	1874.43
4	4339.09	3234.61	2924.64

Tableau IV.14: Distances maximale des parcours de positron en fonction de l'énergie de positron pour Be, Al, Si.

E (KeV)	Ti	Fe	Cu
1	202.84	116.924	180.21
2	563.4	314.565	471.58
3	1015.39	576.19	861.043
4	1581.84	898.226	1285.68

Tableau IV.15: Distances maximale des parcours de positron en fonction de l'énergie de positron pour Ti, Fe, Cu.

E (keV)	Zn	Sn	Au
1	344.42	195	122.07
2	778.04	584	357.008
3	1361.188	1128	647.97
4	2049.7	1702	982

Tableau IV.16: Distances maximale des parcours de positron en fonction de l'énergie de positron pour Zn, Sn et Au

IV.6.1. Comparaison entre les distances maximales parcourues

La figure (IV.15) représente les distances maximales parcourues en fonction de l'énergie incidente des positrons dans Be, Al, Si, Ti, Fe, Cu, Zn, Sn, Au obtenues par la simulation Monte Carlo. On constate pour tous les éléments que l'augmentation de l'énergie des positrons a pour effet l'augmentation de la distance maximale parcouru cela nous a permis de dire que la distance maximale est une fonction croissante de l'énergie. Cette augmentation peut être expliquée par la proportionnalité qui existe entre le libre parcours moyen et l'énergie incidente.

En observant aux figure (IV.15) que la distance maximale parcourue des positrons dans le Berinium (Be : matériau léger) est très grande par rapport aux autres éléments, cela est traduit par le faible nombre d'électrons de valence (faible Z) dans ce cas, les collisions inélastiques sont moins probables, c'est-à-dire, on a un grand libre parcours moyen et une grande distance parcourue par le positron. D'autre part, l'Or (Au : matériau lourd) possède un grand nombre d'électrons de valence, (grand Z) donc le nombre des collisions inélastiques sera grand, ce qui diminue la vitesse des positrons, le libre parcours moyen et la distance parcourue par le positron figure (IV.16).

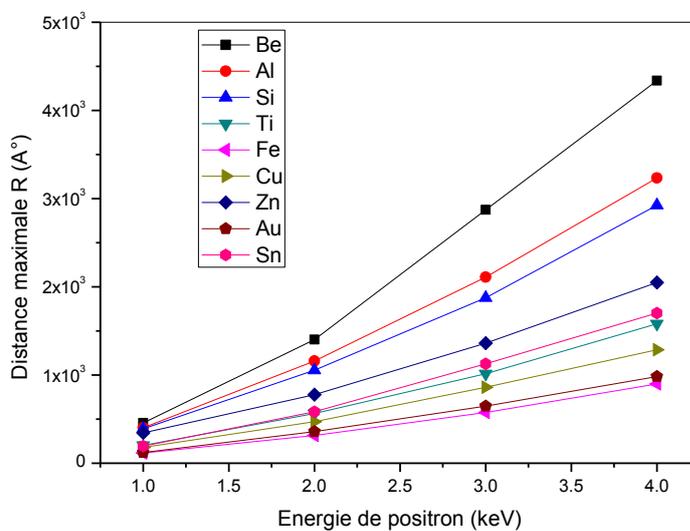


Figure IV.15 : Les distances maximales parcourue dans Be, Al, Si, Ti, Fe, Cu, Zn, Sn, Au en fonction de l'énergie incidentes des positrons.

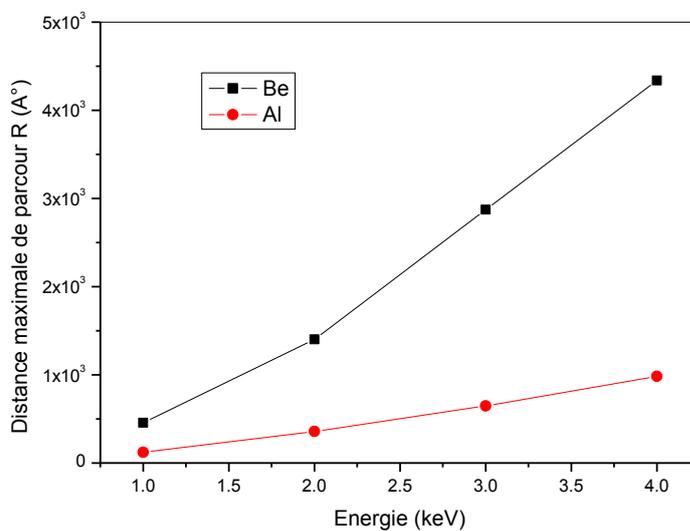


Figure IV.16 : Les distances maximales parcourue dans Be, Au en fonction de l'énergie incidentes des positrons.

IV. 6.2. Le nombre moyen de collision aux grands angles ν :

Vicanek-Urbassek ont montré que le coefficient de rétrodiffusion est fortement lié au nombre moyen des collisions aux grands angles, ν et la distance maximale parcouru R subies par la particule avant de ralentir (expression I.24)

Le nombre moyen de collisions aux grands angles (mean number of wide angle collisions) donné par :

$$\nu = NR\sigma_{tr} \quad (\text{IV.25})$$

Où σ_{tr} est la section efficace de transport

N est le nombre d'atome par unité de volume donnée par la relation suivante :

$$N = \frac{N_A \rho}{A} \quad (\text{IV.26})$$

N_A : Le nombre d'avogadro

ρ : La densité de masse du matériau

A le numéro atomique

N est le nombre d'atome par unité de volume

σ_{tr} est la section efficace de transport (Rouabah et al.2009 ; Vicanek and Urbassek 1991).

Les valeurs du nombre moyen de collisions aux grands angles ν pour Al, Si, Cu, Au sont regroupés dans les tableaux (IV.17), (IV.18) On constate que les résultats obtenus ν^{PW} sont en bonne concordance avec ceux de Dapor (1996).

E(KeV)	Al		Cu	
	ν^{pw}	Ref ^a	ν^{pw}	Ref ^a
0.5	-	0.84	-	1.06
1	1.9	1.06	0.937	1.40
1.5	1.8	1.17	1.119	1.63
2	1.7	1.25	1.245	1.83
2.5	1.7	1.30	1.331	1.98
3	1.68	1.35	1.415	2.11
3.5	1.69	1.38	1.467	2.22
4	1.68	1.42	1.526	2.31

Tableau IV.17 : Nombre moyen de collision aux grands angles en fonction de l'énergie de positron pour Al, Cu

E(KeV)	Au		Si	
	ν^{pw}	Ref ^a	ν^{pw}	Ref ^a
0.5	-	0.93	-	-
1	1.23	1.40	1.74	-
1.5	1.74	1.78	1.415	-
2	2.17	2.06	1.559	-
2.5	2.55	2.31	1.4346	-
3	2.85	2.53	1.523	-
3.5	3.12	2.72	1.426	-
4	3.35	2.89	1.496	-

Table IV.18 : Nombre moyen de collision aux grands angles en fonction de l'énergie de positron pour Au , Si.

a : Dapor 1996

IV.7. Le profil de stoppage

Le profil de stoppage constitue un paramètre très important dans la compréhension de l'interaction des particules avec la matière, il donne des informations nécessaires concernant la distribution des particules thermalisées au sein du solide dans une direction définie. On peut définir le profil de stoppage par la formule (Valkealahti and Nieminen 1983)

$$P(Z) = dF(Z) / dZ \quad (IV.27)$$

Le profil de stoppage est calculé par la méthode de Monte Carlo. Sur les figures (IV.17), (IV.18), (IV.19), (IV.20), (IV.21), (IV.22), (IV.23), (IV.24). On représente le profil de stoppage pour différentes énergies incidentes des positrons dans Be, Al, Si, Ti, Fe, Cu, Zn, Sn, Au respectivement pour une gamme d'énergie de 1-5KeV. On trouve que la distribution gaussienne peut décrire convenablement l'implantation suivant l'axe (Z).

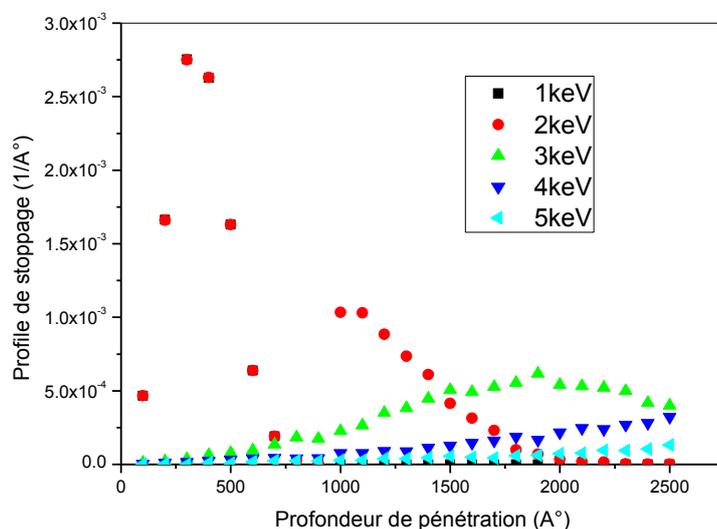


Figure IV.17 : Le profil de stoppage de positron dans le Be en fonction de Z(A°)

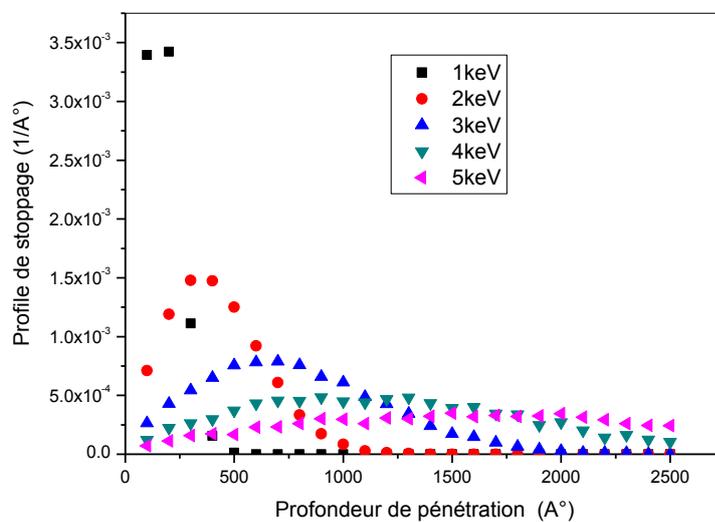


Figure IV.18 : Le profil de stoppage de positron dans le Al en fonction de Z(A°)

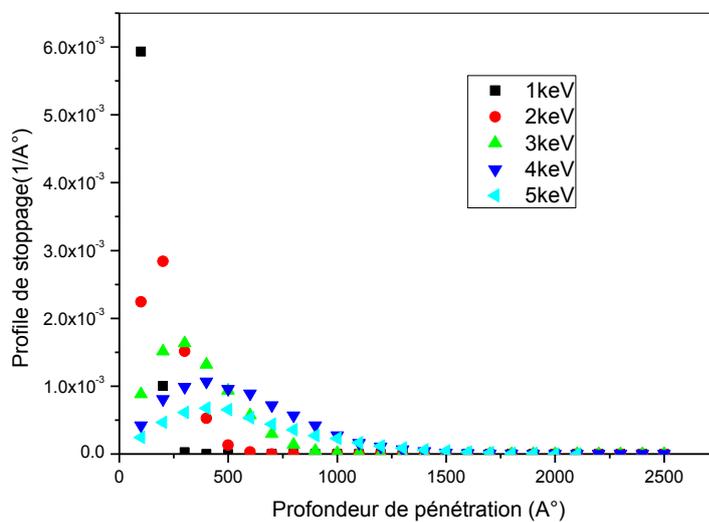


Figure IV.19 : Le profil de stoppage de positron dans le Cu en fonction de Z(A°)

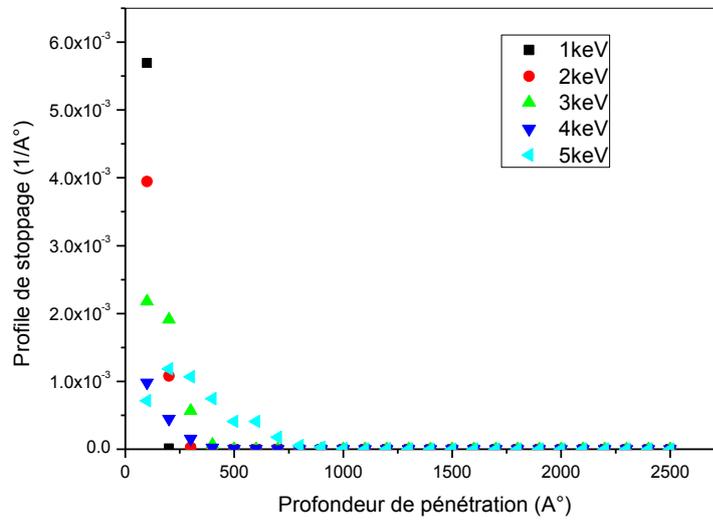


Figure IV.20 : Le profil de stoppage de positron dans le Au en fonction de Z(A°)

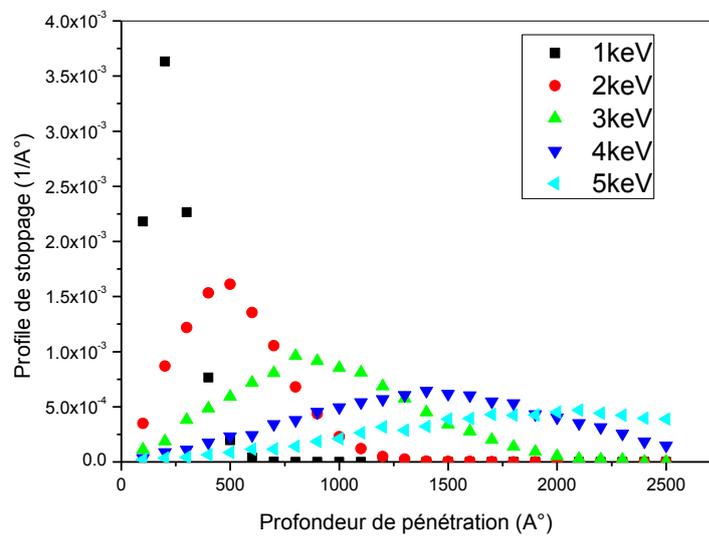


Figure IV.21 : Le profil de stoppage de positron dans le Zn en fonction de Z(A°)

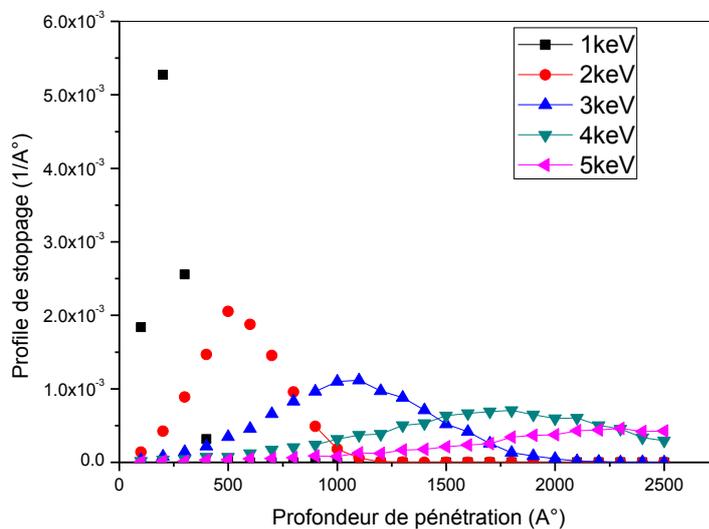


Figure IV.22 : Le profil de stoppage de positron dans le Sn en fonction de Z(A°)

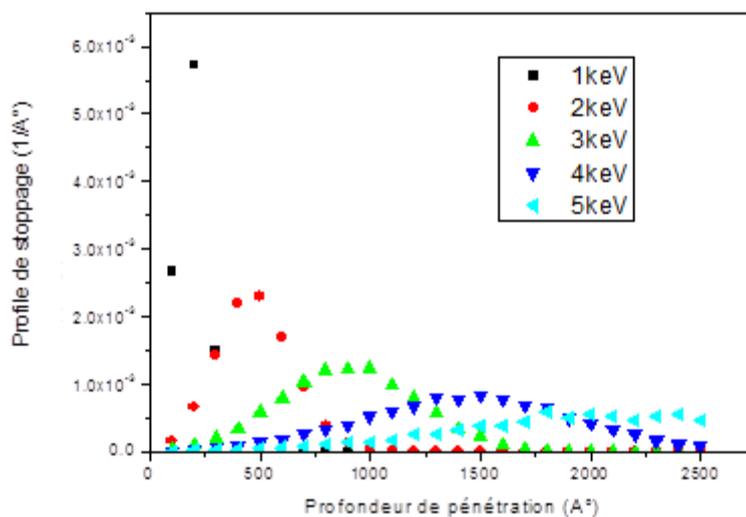


Figure IV.23 : Le profil de stoppage de positron dans le Ti en fonction de Z(A°)

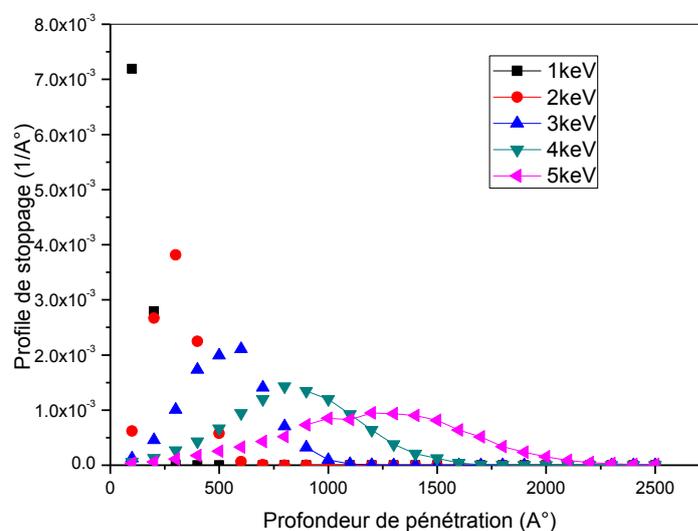


Figure IV.24 : Le profil de stoppage de positron dans le Fe en fonction de $Z(A^\circ)$

On voit clairement pour chaque matériau, les courbes ont des maxima différents (leur position est sensible à l'énergie incidente des positrons), cela montre que les positrons pénètrent plus profondément lorsque leur énergie est plus élevée. Nous avons trouvé que l'amplitude de la distribution de l'implantation suivant l'axe Z diminue avec la croissance de l'énergie, cela peut être justifié par l'augmentation de la profondeur moyenne de pénétration en fonction de l'énergie.

Par comparaison du profil de stoppage entre l'aluminium (Al) et l'or (Au), il apparaît que les électrons sont accumulés plus dans la surface des matériaux condensés (lourd) comme l'or Au que dans les matériaux dont la densité volumique est faible comme l'aluminium Al. Ce comportement revient au libre parcours moyen qui est inversement proportionnel à la densité volumique ρ du matériau.

IV.8. Conclusion

Dans ce chapitre un modèle de calcul basé sur la méthode Monte Carlo est présenté, l'élaboration de ce modèle est basée sur la section efficace de Rutherford et celle Dapor pour simuler les collisions élastiques et la fonction d'excitation de Gryzinski, et le modèle optique d'Ashley pour simuler les collisions inélastiques. Ce modèle inclus l'influence du paramètre d'écrantage μ en fonction de l'énergie.

En premier pas, nous avons calculé la section efficace totale des positrons en fonction de la section efficace de transport ou nous avons introduits la nouvelle correction de la section efficace de transport de Rouabah et al.2010 pour 8 éléments particuliers, répartis le long du tableau périodique (éléments légers, intermédiaires et lourds), et ce pour un intervalle d'énergie de 1KeV-4KeV. Nos résultats de section efficace totale sont en bon concordance avec ceux reportés par Dapor (Dapor 1990) pour la majorité des éléments. La substitution de l'expression (IV.1) ou des valeurs de section efficace totale des positrons obtenus dans la simulation Monte Carlo, nous a permis de calculer le coefficient de rétrodiffusion BSC pour plusieurs éléments de différente numéro atomique Z dans la gamme d'énergie allant de 1-5KeV. Nous avons provisoirement suggéré des expressions qui donnent la dépendance du coefficient de rétrodiffusion positons sur z pour toutes les cibles solides.

La simulation Monte Carlo nous a permis aussi de calculer d'autres paramètres de transport comme la distance maximale du parcours et la profondeur de pénétration moyenne.

Le nombre moyen de collisions aux grands angles (mean number of wide angle collisions) est aussi calculé pour Al, Si, Cu et Au en se basant sur l'expression de la section efficace de transport de Rouabah et al. 2010.

En fin le profil de stoppage est calculé par la méthode de Monte Carlo pour différentes énergies incidentes des positrons où on trouve que la distribution gaussienne peut décrire convenablement l'implantation suivant l'axe (Z).

Nos résultats sont comparés à ceux de l'expérience, disponible dans la littérature, ainsi que d'autres résultats théoriques et ils sont en bon accord.

Cette comparaison a permis de déduire des valeurs pour les paramètres physiques d'une part, et de faire une correspondance entre des paramètres physiques introduits dans différents modèles et de faire d'autre part le rapprochement cohérent entre différents modèles. Ce qui nous a permis de constater que malgré la simplicité du modèle élaboré, ce dernier est fiable pour la description de l'interaction des positrons avec la matière.

Conclusion générale

Durant ces années de travail nous nous sommes attachés d'abord à la compréhension des phénomènes liés à l'interaction positrons-matière. Cette interaction est traduite par les processus élastiques et inélastiques, les seuls processus responsables du ralentissement jusqu'à la diffusion des positrons à basse énergie ($<10\text{keV}$). L'étude de la fraction rétrodiffusée des positrons est de ce fait très importante.

Nous avons reporté les résultats de la simulation du transport des positrons implantés dans les solides par la méthode Monte Carlo dans une gamme d'énergie 1-5KeV qui nécessite une connaissance précise des différents processus (élastiques, inélastiques, annihilation, Emission de photons par bremsstrahlung) que subissent les positrons lors de leur transport à l'intérieure du solide. A cette effet, nous avons proposé un modèle de simulation Monte Carlo qui est une technique puissante pour décrire les phénomènes aléatoires. Elle consiste à décomposer la trajectoire d'une particule (positron) en un grand nombre de séquence, chaque séquence comprend, en utilisant des nombres aléatoires soit un choc élastique soit un choc inélastique avec les électrons de valence ou les électrons du cœur.

Nos calculs ont été faits pour des différents matériaux légers, intermédiaires et lourds Be ($Z=4$) – Au ($Z=79$) dans une gamme d'énergie de 1-5KeV.

Le calcul du coefficient de rétrodiffusion a été entrepris par plusieurs chercheurs utilisant différente méthodes : soit par la simulation de la trajectoire de positron par la méthode de Monte Carlo, soit par des calculs à partir des formulations analytiques ou semi empiriques de la théorie de transport.

En premier lieu, nous avons calculé la section efficace totale des positrons pour 8 éléments du tableau périodique (Carbone, Nyon, Aluminium, Cuivre, Argent, Argon, Germanium et l'Or). Dans notre calcul nous avons utilisé la formule de la section efficace total décrit par Dapor et al.2004 avec l'introduction de l'expression de la section efficace de transport de Rouabah et al.2010 pour les positrons. Le facteur μ est exprimé en fonction de numéro atomique Z de la cible par des formules exponentielles ou polynomiales de troisième ordre, afin de comparer nos résultats obtenues pour ces éléments avec d'autres résultats existant dans la littérature.

On note que nos résultats sont en bonne concordance avec ceux rapportés par Dapor 1996 et Dapor 1998 pour la majorité des éléments. Cela montre que l'expression de la section efficace de transport de Rouabah et al.2010 est valide pour produire des valeurs de section efficace totale précise. En utilisant l'expression précédente de la section efficace de transport on a calculé :

- Le nombre moyen de collision aux grands angles (mean number of wide angle collisions) pour Al, Si, Cu, Au, ou on constate que nos résultats obtenus sont en bon accord avec ceux de Dapor 1996.
- Le libre parcours moyen de transport (LPMT), ce qui a permis de tracer les graphes de LPMT en fonction de l'énergie incidente de positron pour les éléments : Be, Al, Si, Ti, Fe, Cu, Zn, Sn, Au.

Le comportement du LPMT présente une croissance monotone avec l'augmentation de l'énergie de positron cela est justifié par le fait que le LPMT est inversement proportionnelle à la section efficace de transport.

Nous avons reporté les résultats obtenus par la méthode de simulation Monte Carlo du transport des positrons implantés dans les solides dans la gamme d'énergie 1-5KeV, afin de calculer le coefficient de rétrodiffusion BSC avec une angle d'incidence normale pour les éléments Be, Al, Si, Ti, Fe, Cu, Zn, Sn, Au. On a utilisé diverses approches (pw1, pw2, pw3, pw4) basées sur des calculs classiques et traitement de mécanique quantique.

Les valeurs obtenues du coefficient de rétrodiffusion BSC sont en bon accord avec ceux de l'expérience (Coleman et al. 1992) et d'autres résultats dans la littérature (Jensen and Walker 1993 ; Dapor 1996), cela montre la puissance du calcul Monte Carlo. Notons que le coefficient de rétrodiffusion dépend de la nature de la particule, de son énergie primaire E et de nombre atomique Z. On a montré que le coefficient de rétrodiffusion des positrons pour les matériaux augmente d'une façon monotone avec l'augmentation de l'énergie.

A cet égard, nous avons provisoirement suggéré des expressions qui donnent la dépendance du BSC des positrons en fonction du numéro atomique pour toutes les cibles solides (expression IV.23) ce qui ne nécessite aucun recours aux calculs Monte Carlo.

Le calcul de la fraction rétrodiffusée nous a également donné d'importantes informations sur le comportement des positrons dans les cibles solides considérés qui se traduit par la dépendance du coefficient de rétrodiffusion avec le nombre atomique et l'énergie incidente des particules.

La même procédure ci-dessus est utilisée une deuxième fois pour établir des résultats de la profondeur de pénétration moyenne et la distance maximale du parcours de positron R en fonction de l'énergie incidente. Nos résultats pour la profondeur de pénétration moyenne et la distance maximale du parcours des positrons dans les solides obtenues par la méthode de simulation Monte Carlo a donné des coefficients de rétrodiffusion plus proches de ceux de l'expérience de Ghosh et al.1995. En effet, plus la pénétration de positron à l'intérieur du solide est importante plus la probabilité de sa rétrodiffusion est grande.

Une autre étude a été effectuée sur le profil de stoppage qui constitue un paramètre très important dans la compréhension de l'interaction des particules avec la matière. Il donne des informations nécessaires concernant la distribution des particules thermalisées au sein du solide dans une direction définie. On représente le profil de stoppage pour différentes énergies incidentes des positrons dans Be, Al, Si, Ti, Fe, Cu, Zn, Sn, Au respectivement. On trouve que la distribution gaussienne peut décrire convenablement l'implantation suivant l'axe (Z) où nous avons trouvés que l'amplitude de la distribution de l'implantation suivant l'axe Z diminue avec la croissance de l'énergie, cela peut être justifié par l'augmentation de la profondeur de pénétration moyenne en fonction de l'énergie.

Néanmoins, l'étude des propriétés de transport des positrons dans les solides n'a pas été suffisamment approfondie. C'est pour cette raison qu'on a jugé nécessaire de mener des recherches complémentaires sur d'autres paramètres de transport des positrons comme le paramètre d'annihilation, la transmission ...etc et leurs influences sur le transport des particules dans les solides.

Références

- Adesida I., Shimizu R. and Everhart T. E., *J. Appl. Phys.* 51 (1980) 5962.
- Ashley, J. C., *Electron Spectros. Relat. Phenom.* 46 (1988) 199.
- Ashley, J. C. , *J. Electron Spectros. Relat. Phenom.* 50 (1990) 323.
- Aydin, A. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* 243 (2006) 272.
- Baker, J. A., N. B. Chilton, N. B., Jensen, K. O., Walker, A. B., Coleman, P. Gl, J. *Phys. Condens. Matter* 3 (1991) 4109.
- Baro, J., Sempau, J., Fernández-Varea, J. M., Salvat, F., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 84 (1994) 465.
- Baro, J., Sempau, J., Fernández-Varea, J. M., Salvat, F., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 100 (1995) 31.
- Belotti, E., M. Corti, E. Fiorini, C. Liguori, A. Pullia, A. Sarracino, P. Sverzellati, and L. Zanotti, *Phys. Lett. B*, 124 (1983) 435.
- Bendriem, B., De Dreuille O., *Rev Eur Technol Biomed* 7 (1998)114.
- Bishop, H.E. *Brit.J.Appl.Phys* (1967) 18.
- Bielajew, A.F., The University of Michigan, September 17, (2001)
- Boev, O. V., Puska, M. J., Nieminen, R. M, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 7786.
- Boron'ski, E., and R. M. Nieminen, *Phys. Rev. B* 34 (1986) 3820.
- Bouarissa N., These de doctorat, Université East Anglia, Norwich, UK (1987)
- Bouarissa N., Walker A. B. and Aourag H., *J. Appl. Phys.* 83 (1998) 3643.
- Bouarissa N. and Walker A. B., *Int. J. Mod. Phys. B* 14 (2000) 1603.
- Bouarissa, N., Al-Assiri, M. S., *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*191 (2013) 11.
- Brandt, W., and R. Paulin, *Phys. Rev. B* 15, (1977) 2511.
- Browning T. Z. LI., Chui B., Jun Ye, Pease R. F. W., Gzyzewki Z., and Joy D. C., *J. App.Phys.* 7 (1994) 2016.
- Brusa, B.S., Deng, W., Karwasz, G.P., Zecca, A., *Nucl. Instr. And Meth. in Phys. Res. B*194 (2002)519
- Carbotte, J.P., and ILL. Arora, *Can. J. of Phys.*, 45 (1967) 387.
- Carlson, D.E., Magee, C.W., *Proc. 2nd EC Photovoltaic Solar Energy conferene, Berli* (1979), P.312.
- Chaoui Z., Bouarissa N., *J. Phys. : Condens. Matter.* 16 (2004) 799.
- Chunqing, He., Muramatsu,M., Ohdaira, T., Kinomura,A., Suzuki, R., Kenji,I., Yoshinori,K. ,*Applied Surface Science* 252 (2006) 3221.

Cosslett, V.E., and Thomas, Br., J.Appl.Phys.15 (1964)

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

Danguy, L., Quivy, R., J.Phys. Radium 17 (1956)12.

Dapor M., Phys. Letters A, 151 (1990) 84.

Dapor, M., Phys.Lett. A 158 (1991) 425.

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

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

Dapor M., Springer (2003).

Debenedetti S, Cowan C E , and Konneker W R, Phys, Rev. 76 (1949) 440.

De Dreuille, O., Maszelin, P., Foehrenbach, H., Bonardel, G., Gaillard, J F., 35-310-A (2002)10

Denison, A. B., and H. H. Farrell, Phys. Rev. B 69 (2004), 104302.

Dupasquier, A., Mills Jr., A. P.IOS Press: Amsterdam (1995).

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

Everhart, T.E., Hoff, P.H., J. Appl. Phys. 42 (1971) 13.

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

Ghosh,V.J., Applied Surface Science. 85 (1995) 187

Gruen, A.E., Naturforsh, Z., 12A(1957) 89.

Gryzinskia M., Phys. Rev. 138 (1965) A305.

Gryzinski M., Phys. Rev. 138 (1965) A322.

Gryzinskic M., Phys. Rev. 138 (1965) A336.

Hakvoort, R.A., ISB N90-73861-15-2; 1993

Hannachi, M., Rouabah, Z., Champion, C., Bouarissa, N., J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 195 (2014) 155.

Hawari, A. , Gidley, D. , Xu, J., Moxom, J., Hathaway, A., Brown, B. , Vallery, R., 20th International Conference; 2009.

Heermann D. W., physics, Springer-Verlag, Second edition (1989).

Ishii, A. Trans. Tech. Publications: Switzerland (1992).

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

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

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

Jablonskia A., Tilinin I. S., *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena* 74 (1995) 207.

Jablonskib A., *Surface science* 151 (1995) 166.

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

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

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

Jensen, K. O., and Walker, A. B., *J. Phys. F* 18 (1988) 277.

Jensen, K. O., Walker, A. B. , Bouarissa, N., in: Schultz, P. J. , Massoumi, G. R. , Simpson, P. J. (Eds.), , *American Institute of Physics, New York, NY* (1990) 19.

Jensen, K. O., Walker, A. B., *Surf. Sci.* 292 (1993) 83.

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

Kribaa B., Rouabah Z., Le Loirec C., Champion C., Bouarissa N., *Micron* 87 (2016) 46-50

Lapeyre B., Pardoux E. et Sentis R., Springer, Allemagne (1998).

Makinen, S., II. Rajainmaki, and S. Linderoth, *Phys. Rev. B*, 42(1990) 11166.

Makinen, S., II. Rajainmaki, and S. Linderoth, *Phys. Rev. B*, 40(1991) 5510.

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

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

Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N. , Teller, A. H., Teller, E., *J. Chem. Phys.* 21, (1953) 1087

Mills, A.P., jr., *Mater. Sci. Forum*, 105-110 (1992) 101.

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

Moumen, M. Thèse doctorat 3^e cycle, université de Grenoble (1984).

P.Mostr, P. Remy et C.Martin, C.E.N.- Grenoble

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

Nielsen, Bent, K.G. Lynn, A. Vehanen, and P.J. Schultz, *Phys. Rev. B*, 32(1985) 2296.

Nicmincn, R.M., and J. Laakkonen, *Appl. Phys.*, 20 (1979)181.

Nicminen, R.M., and Manninen, M.J., *positrons in Solids*, ed. P. Hautojarvi, Springer-Verlag, Berlin (1979).

Nieminen, R. M. *Mat. Sci . Forum* 175-178 (1995) 279.

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

Nykanen, H., Suihkonen, S., Kilanski, L., Sopanen, M., and Tuomisto, F., *Appl. Phys. Lett.* 100 (2012)122105.

Pagani, M., Stone-Elander, S., Larsson, S., *Eur J Nucl Med* 24 (1997) 1301

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

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

Puska, M. J., Nieminen, R. M., *Rev. Mod. Phys.* 66 (1994) 841.

Rouabah, Z., Bouarissa, N., Champion, C., Bouaouadja, N., *Appl. Surf. Sci.* 255 (2009) 6217.

Rouabah, Z., Thèse de doctorat, université Farhet Abbas, Sétif (2009)

Rouabah, Z., Bouarissa, N., Champion, C., Bouzid, A., *Solid State Communications* 150 (2010) 1702.

Rouabah, Z., Hannachi, M., Champion, C., Bouarissa, N., *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenomena* 202 (2015) 7.

Salvat, F., Moyel, R. *comput. Phys. Commun.* 74 (1993) 385

Salvat F., Fernandez-Varea J. M., Acosta E and Sempau J., *Workshop proceeding Issy-Les-Moulineaux, France, 5-7 Novembre (2006).*

Schultz, P. J., Lynn, K. G., *Rev. Mod. Phys.* 60 (1988) 701.

Seltzer, S.M. and Berger, M.J., *Nucl. Instrum. Meth. B* 12 (1985) 95.

Sempau, J., Fernández-Varea, J. M., Acosta, E., Salvat, F., *Nucl. Instrum. Meth. Res. B* 207 (2003) 107.

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

Sobol, I. M., *The Monte Carlo Method*, MIR, Moscou, (1975) 38.

Stevens, J.R., *Methods Exper. Phys.*, 16A (1980) 371.

Tanoudji C. C., édition Fayard (1986).

Tannoudji C. C., édition Herman (1993).

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

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

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

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

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

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

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

Trezzi, D. Thèse de doctorat université de Milano ,2010.

Valkealahti, S., Nieminen, R. M., Appl. Phys. A 32 (1983) 95-106.
Valkealahti S. and Nieminen R. M., Appl. Phys. A 32 (1983) 95.
Valkealahti S. and Nieminen R. M., J. Appl. Phys. A: solids surf. 35, 51 (1984) 51.
Vicanek M. and Urbassek H. M., Phys. Rev. B 44 (1991) 7234.
Van House, J. and Rich, A., Phys. Rev. Lett. 60 (1988) 169
Saha GB., Macintyre, WJ., Semin Nucl Med 22 (1992) 150
Seliger, H., phys. Rev 78 (1950) 491.

Walker, A. B., Phys. Rev. Lett. 68 (1992) 3873
Yacobi, B.G., Holt, D.B., Edition Plenum Press, (1990) New York and London,
Zaoui, A., école d'été Boumerdesse (2002).

ملخص

في العمل الحالي نقلنا نتائج المحاكاة لطريقة المونتي كارلو لانغراس البوزيترونات البطيئة في المجال من 1-4 كيلو إلكترون فولط في المواد الصلبة و هذا من عنصر البيرينوم الى عنصر الذهب. تم نمذجة المقطع الفعال لانغراس البوزيترون المرين و غير المرين باستعمال عدة تقريبات اعتمدت على حسابات كلاسيكية و أخرى على الميكانيك الكمي و هذا من أجل حساب كل من معامل الحيود الارجاجي و معاملات أخرى لدراسة انتقال البوزيترونات في المادة حيث تم اقتراح استعمال دوال كثيرة الحدود من اجل حساب معامل الحيود الارجاجي دون الرجوع الى طريقة المونتي كارلو. النتائج المتحصل عليها تم مقارنتها مع النتائج النظرية والتجريبية الأخرى حيث انها تتفق بصورة كبيرة معها مما يوحي مدى صحة النموذج المعتمد.

الكلمات المفتاحية: معامل الحيود الارجاجي- المقطع الفعال المرين - المقطع الفعال غير المرين - طريقة المحاكاة المونتي كارلو

Abstract

Monte Carlo simulation of 1–4 keV positron from semi-infinite solid targets ranging from Be ($z = 4$) to Au ($z = 79$) with normal angle of incidence is here reported. In our study, the elastic and inelastic scattering cross sections are modeled by using various approaches based on either a classical or a quantum mechanical treatment for the calculations of positron backscattering coefficient. The dependence of the positron backscattering coefficient versus the atomic number of the solid target of interest has been investigated. In this respect, polynomial functions are proposed which does not require any recourse to Monte Carlo calculations.

Keywords: Positron backscattering coefficient, Elastic cross sections, inelastic cross sections, Monte Carlo simulation.

Résumé

Une simulation Monte Carlo des positrons (1-4keV) pour des cibles solides semi-infinies allant de Be ($z=4$) à Au ($z=79$) avec un angle d'incidence normale est ici rapporté. Dans notre étude les sections transversales de diffusion élastique et inélastique sont modélisées en utilisant diverses approches basées sur des calculs classiques ou traitement de mécanique quantique du coefficient de rétrodiffusion. La dépendance du coefficient de rétrodiffusion de positron par rapport au nombre atomique des cibles solides d'intérêt a été étudiée. Des fonctions polynomiales sont proposées, ce qui ne nécessite aucun recours aux calculs Monte Carlo.

Mots clés : Le coefficient de rétrodiffusion de positron, section efficace élastique, section efficace inélastique, simulation Monte Carlo