

Annexe 2

RBS

Principes

Nous rappellerons ici les grandeurs fondamentales de la RBS ainsi que les équations qui les régissent.

1 Le facteur cinématique

Soit une particule de masse M_1 , de vitesse v_0 et d'énergie E_0 , et une particule de masse M_2 considérée au repos dans le référentiel du laboratoire. L'interaction peut être décrite comme une collision élastique entre deux corps isolés si :

- l'énergie E_0 de la particule incidente est supérieure à l'énergie de liaison de l'atome cible dans le réseau (10 eV) ;
- l'énergie E_0 est suffisamment faible pour négliger la probabilité d'interaction nucléaire entre les deux noyaux (< 1 MeV pour des protons ou < 3 MeV pour des α).

Les forces coulombiennes étant conservatives on peut exprimer le principe de conservation de l'impulsion et de l'énergie cinétique de la façon suivante :

$$\frac{1}{2}M_1v_0^2 = \frac{1}{2}M_1v_1^2 + \frac{1}{2}M_2v_2^2 \quad (1)$$

$$M_1v_0 = M_1v_1\cos\theta + M_2v_2\cos\varphi \quad \text{et} \quad 0 = M_1v_1\sin\theta - M_2v_2\sin\varphi$$

avec v_1 vitesse de la particule de Masse M_1 après la collision, θ et φ les angles formés par les directions respectivement des particules M_1 et M_2 après la collision avec la direction de la particule M_1 avant la collision (projection des grandeurs vectorielles).

Si $M_1 \leq M_2$ on peut définir le *facteur cinématique* K qui est égal au rapport de l'énergie du projectile avant et après la collision sous la forme :

$$K = \frac{E_1}{E_0} = \left[\frac{(M_2^2 - M_1^2 \sin^2\theta)^{1/2} + M_1 \cos\theta}{M_2 + M_1} \right]^2 \quad (2)$$

Cette dernière équation explique comment, par la mesure à un angle θ connu de l'énergie E_1 des particules renvoyées par la cible, connaissant les caractéristiques M_1 et E_0 du faisceau incident, on peut identifier la masse M_2 des atomes composant la cible.

Considérons à présent une cible composée de plusieurs atomes :

pour chacun des atomes on peut calculer un facteur cinématique et donc calculer à partir de l'équation (1) la différence en énergie ΔE_1 en fonction de la différence des masses ΔM_2

$$\Delta E_1 = E_0 \frac{dK}{dM_2} \Delta M_2 \quad (3)$$

Cette relation montre que l'on peut identifier les atomes de la cible si et seulement si la différence d'énergie ΔE_1 est suffisamment grande c'est-à-dire si dK/dM_2 est suffisamment

grand. Or la relation (1) montre que pour M_1 et θ fixé dK/dM_2 diminue avec M_2 ce qui implique qu'il sera plus difficile de différencier les éléments lourds entre eux, que les éléments légers.

D'autre part si on suppose $M_2 \gg M_1$ et $\theta = \pi - \delta$ avec δ petit on peut simplifier l'équation (3) de la façon suivante :

$$\Delta E_1 = E_0 (4 - \delta^2) \frac{M_1}{M_2} \Delta M_2 \quad (4)$$

La relation 4 démontre que la sélectivité (capacité à différencier les masses) augmente avec la masse du projectile, ce qui explique pourquoi les particules α sont souvent préférées pour les expériences de RBS.

On montre également que la résolution en masse augmente si δ est petit ce qui explique pourquoi les expériences sont souvent effectuées à des angles proches de 180° .

2 La section efficace de diffusion

On peut calculer, dans un modèle simple, la probabilité d'interaction de deux particules en traçant autour de chaque noyau de la cible, un disque de surface $\sigma = \pi(r_1 + r_2)^2$ qui représente la surface de chaque noyau vue par la particule incidente ; la probabilité d'interaction des deux particules est donnée par la fraction de la surface de la cible cachée par ces disques.

Si on considère une cible d'épaisseur t et qui contient N atomes par unité de volume (ce qui correspond à Nt atomes par unité de surface), un détecteur placé à un angle θ par rapport au faisceau incident, Q le nombre total de particules envoyées et dQ le nombre de particules détectées, alors on peut définir la section efficace différentielle de diffusion $d\sigma/d\Omega$ comme :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{Nt} \frac{dQ}{Q} \frac{1}{d\Omega} \quad (5)$$

On peut donc en intégrant la relation (5) sur Ω , l'angle solide défini par la surface active du détecteur, exprimer la section efficace de diffusion moyenne σ :

$$\sigma = \frac{1}{Nt} \int_{\Omega} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (6)$$

qui aboutit à la relation suivante :

$$A = \sigma \Omega Q N t \quad (7)$$

où A est le nombre total de particules vu par le détecteur. Comme Ω est souvent petit on a $\sigma \rightarrow d\sigma/d\Omega$, σ est souvent appelée *section efficace différentielle de diffusion*.

Pour calculer la section efficace de collision élastique entre un projectile (de masse M_1 et de charge Z_1) et le noyau d'un atome (de masse M_2 et de charge Z_2) on considère que :

- l'interaction entre les noyaux est purement coulombienne ;
- l'influence des électrons sur la trajectoire de la particule incidente est négligeable.

Le problème peut être alors traité de façon classique :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}_R = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16E_0^2} \frac{4}{\sin^4\theta} \frac{\left\{ \left[1 - \left(\frac{M_1}{M_2} \sin\theta \right)^2 \right]^{1/2} + \cos\theta \right\}^2}{\left[1 - \left(\frac{M_1}{M_2} \sin\theta \right)^2 \right]^{1/2}} \quad (8)$$

où $(d\sigma/d\Omega)_R$ est appelée *section efficace différentielle de Rutherford* et est exprimée en barn/stéradian (1barn= 10^{-24} cm²).

Cette équation permet de montrer que la section efficace

- est proportionnelle à Z_1^2 ce qui implique que le rendement est 4 fois supérieur avec un faisceau d'hélium qu'avec un faisceau de protons ;
- est proportionnelle à Z_2^2 ce qui implique que le rendement est d'autant plus important que la cible est lourde ;
- est proportionnelle à $1/E_0^2$ ce qui implique que le rendement augmente quand on utilise des faisceaux de plus faibles énergies.

Cependant quand l'énergie E_0 devient grande et pour les noyaux de faible Z , la particule incidente peut alors surmonter la barrière coulombienne des noyaux et pénétrer dans les champs de forces nucléaires et produit des excitations des niveaux du noyau qui conduisent à des résonances ou des réactions nucléaires. Dans ce cas la section efficace devient beaucoup plus grande que la section efficace Rutherford.

Des études ont montré (Bozoian *et al.* 1990, Bozoian 1991) que ces déviations commencent à apparaître pour des protons de 1 MeV sur des noyaux cibles de $Z < 15$ et pour des hélium de 2 MeV pour des noyaux cibles de $Z < 6$.

Ces déviations mettant en jeu des interactions de type nucléaire, les sections efficaces ne peuvent plus être calculées analytiquement même si quelques tentatives ont eu lieu au moyen de la mécanique quantique (Berthoumieux *et al.* 1998) pour la diffusion $^{16}\text{O}(\alpha, \alpha)^{16}\text{O}$ par exemple. Il faut donc se servir de bases de données expérimentales regroupant des sections efficaces mesurées à différentes énergies et à différents angles pour la majorité des éléments légers.

Ces déviations peuvent être mises à profit car les interactions concernées permettent d'augmenter considérablement la sensibilité de cette technique aux éléments légers comme nous le verrons par la suite.

3 Les spectres expérimentaux

Considérons une cible composée d'une couche mince contenant les éléments A et B déposée sur un substrat plus léger que A et B.

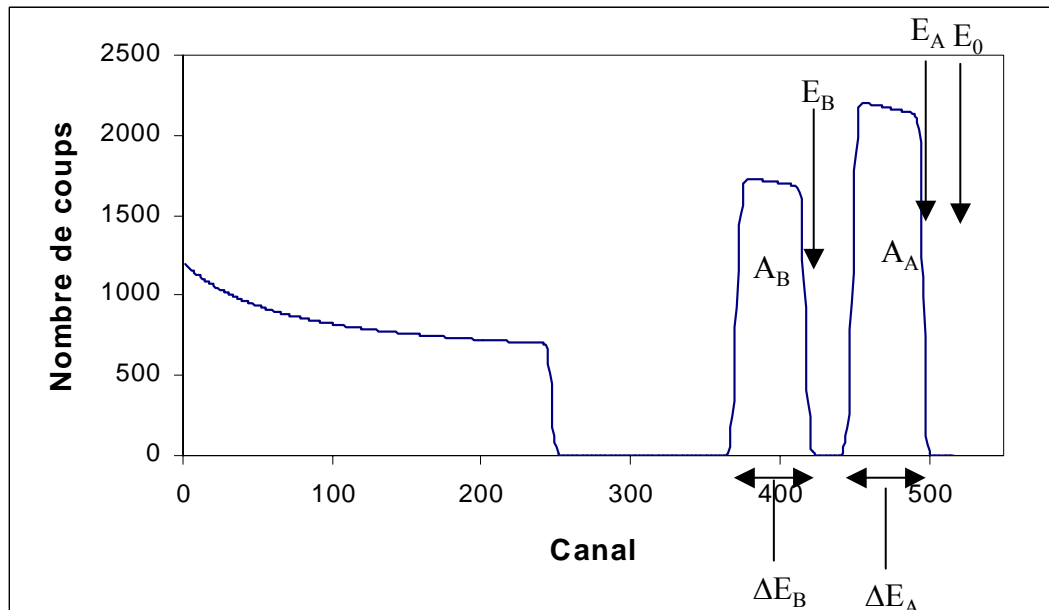


Figure 1 : Spectre d'une cible composée d'une couche mince constituée d'un alliage $A_n B_m$ bombardée par un faisceau incident d'énergie E_0

Soit E_0 l'énergie du faisceau incident, l'énergie détectée d'une particule ayant rebondi sur des atomes de la surface sera :

$$E_A = K_A E_0 \text{ ou } E_B = K_B E_0 \quad (9)$$

Avec K_A et K_B les facteurs cinématiques des éléments A et B. Pour des particules ayant été diffusées par des atomes de surface, le facteur cinématique dépendant de la masse de l'atome cible, les énergies de rétrodiffusion seront d'autant plus faibles que l'atome cible est léger.

Si la collision se produit à une épaisseur z , l'énergie E' à laquelle a lieu la collision est égale à :

$$E' = E_0 - \left(\frac{dE}{dz} \right)_{in} \cdot z \cdot \cos\theta \quad (10)$$

avec θ_1 angle du faisceau incident avec la normale à l'échantillon.

L'énergie après la collision sera :

$$E'_A = K_A E' \quad (11)$$

Enfin l'énergie détectée sera

$$E^n = E'_A \left(\frac{dE}{dz} \right)_{out} \cdot z \cdot \cos\theta_2 \quad (12)$$

avec θ_2 angle de rétrodiffusion.

La différence entre l'énergie d'une particule rétrodiffusée par le noyau A à la surface ou à une profondeur z de la cible est donc :

$$\Delta E = [S]_z \quad (13)$$

avec

$$[S] = K_A \left(\frac{dE}{dz} \right)_{in} \cdot \cos\theta_1 + \left(\frac{dE}{dz} \right)_{out} \cdot \cos\theta_2 \quad (14)$$

où S est le facteur de perte d'énergie pour l'élément A. L'équation 13 montre que si on connaît pour l'ensemble des éléments de la cible les pouvoirs d'arrêt on peut donc déduire des spectres la profondeur à laquelle s'est produite une collision et donc dans le cas de couches minces l'épaisseur de la couche.

D'autre part on peut démontrer que le nombre de particules détectées à une énergie donnée est proportionnel à la concentration de l'élément considéré si les facteurs d'arrêt sont connus et l'on peut donc remonter ainsi à la stœchiométrie de la cible.

Pour des cibles simples, l'analyse qualitative à semi quantitative du spectre est réalisable et relativement simple, dans le cas des cibles plus complexes l'utilisation d'un logiciel de traitement est indispensable pour une exploitation quantitative des données. En effet on voit à partir de l'exemple fourni que si les couches sont plus épaisses ou si les éléments qui les composent ont des facteurs cinématique plus proches, il y aura superposition des signaux et il faudra donc identifier chaque contribution.

Nous avons utilisé tout au long de ce travail le logiciel SIMNRA (Mayer 1997-1998), qui en fonction de toutes les données expérimentales et des banques de données de facteurs d'arrêt ainsi que des sections efficaces de rétrodiffusion expérimentale (dans les cas évoqués plus haut où elles dévient de la section efficace Rutherford) et d'une cible virtuelle donnée par l'utilisateur, simule un spectre de rétrodiffusion. C'est à l'utilisateur de modifier la cible virtuelle jusqu'à ce que le spectre simulé corresponde le mieux possible avec le spectre expérimental.

Références

- Berthoumieux E., Berthier B., Moreau C., Gallien J. P. and Raoux A. C. (1998)** - Parameterization of nuclear reactions cross section using R-matrix theory, *Nucl. Instr. and Meth. B* 136-138, 55-59
- Bozoian M. (1991)** - Deviations from Rutherford backscattering for $Z=1,2$ projectiles, *Nucl. Instr. and Meth. B* 58, 127-131
- Bozoian M., Hubbard K. and Nastasi M. (1990)** - Deviations from Rutherford-scattering cross sections, *Nucl. Instr. and Meth. B* 51, 311-319
- Mayer M. (1997-1998)** - SIMNRA ©, v5.0, Max-Planck-Institut für Metallphysik, www.rzg.mpg.de/~mam/