



HAL
open science

MÉCANISME DE FORMATION D'IONS POLYATOMIQUES SECONDAIRES. APPLICATIONS AUX IONS Cu^{+2} ET Cu^{+3}

P. Joyes

► **To cite this version:**

P. Joyes. MÉCANISME DE FORMATION D'IONS POLYATOMIQUES SECONDAIRES. APPLICATIONS AUX IONS Cu^{+2} ET Cu^{+3} . Journal de Physique Colloques, 1984, 45 (C2), pp.C2-129-C2-131. 10.1051/jphyscol:1984229 . jpa-00223942

HAL Id: jpa-00223942

<https://hal.science/jpa-00223942>

Submitted on 1 Jan 1984

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

MÉCANISME DE FORMATION D'IONS POLYATOMIQUES SECONDAIRES APPLICATIONS AUX IONS Cu_2^+ ET Cu_3^+

P. Joyes

*Laboratoire de Physique des Solides, Bât. 510, Université Paris-Sud,
91405 Orsay, France*

Résumé - La formation d'ions secondaires polyatomiques est décrite comme due à la capture par un ion secondaire monoatomique d'atomes émis à la suite du même impact primaire.

Abstract - The formation of secondary polyatomic ions is described as resulting from the nucleation on a monoatomic secondary ion of atoms emitted after same primary impact.

I - INTRODUCTION

La production d'ions moléculaires M_n^+ ou M_n^- lors du bombardement d'une cible [M] par un faisceau d'ions A^+ ayant une énergie de l'ordre de 10 keV est un phénomène qui a fait l'objet ces dernières années de nombreuses études expérimentales ou théoriques /1/. Souvent les intensités $I(M_n^+)$ ou $I(M_n^-)$ enregistrées dans le spectre de masse présentent un comportement en dent de scie extrêmement marqué avec renforcement systématique pour une parité donnée de n.

Ce phénomène a été utilisé d'abord comme une source d'information sur les amas. Dans ces études /2/ on postulait une règle de correspondance "intensité \leftrightarrow stabilité" selon laquelle les amas les plus abondants dans le spectre de masse étaient aussi les plus stables, puis on effectuait des calculs sur la structure électronique des amas concernés qui, en général, permettaient de comprendre ce point.

Plus récemment, on s'est orienté vers une meilleure compréhension du mécanisme d'émission lui-même, ceci pour tenter de relier par une formule ou une formulation mathématique les deux grandeurs physiques (intensité et stabilité) citées plus haut. Nous avons dans un travail précédent /3/ proposé un mécanisme de formation d'agrégats secondaires appliqué à l'émission d'ions Al_2^+ émis à partir de cibles d'aluminium. Nous nous proposons ici d'étendre ce travail à l'émission secondaire d'ions Cu_2^+ et Cu_3^+ à partir de cibles de cuivre. Ce système est choisi parce que, d'une part, l'intensité de Cu_3^+ est très élevée (c'est l'amorce d'un phénomène d'alternance pair-impair avec ions de rang impair plus abondants); d'autre part, les courbes de potentiel du système $\text{Cu}-\text{Cu}^+$ sont connues.

Dans le chapitre suivant nous exposerons notre modèle dans ses grandes lignes; nous donnerons ensuite et discuterons nos résultats.

II - FORMATION DE DIMERES ET DE TRIMERES

Après l'impact d'un ion incident il émerge d'une région, ayant approximativement quelques dizaines d'angströms de rayon, un nombre n_0 d'atomes neutres ($n_0 \sim 6$ pour le cuivre) et des ions monoatomiques des deux charges (10^{-1} à 10^{-2} par ion

incident). Toutes ces particules sortant presque simultanément (l'ensemble du phénomène se déroule en approximativement 10^{-13} s); le problème est de savoir avec quelle probabilité un ion M^+ peut d'abord capter un atome M (formation d'un dimère M_2^+) puis, éventuellement un deuxième atome M (formation d'un trimère M_3^+ , destruction d'un dimère M_2^+). On doit aussi tenir compte de l'accrochage direct d'un M_2 sur M^+ .

Le principe du calcul (lorsqu'on exclut la formation de trimères) est exposé en /3/ : pour une vitesse \bar{V} de M^+ donnée (énergie cinétique correspondante e) on évalue le nombre d'atomes secondaires M qui, au moment de leur émission (appelons ρ la distance $M^+ - M$ à cet instant) sont tels que l'énergie cinétique du système $M^+ - M$ dans le centre de masse soit inférieure à l'énergie potentielle d'attraction $E_d^{(2)}(\rho)$. Notons que l'on se restreint au cas des vitesses \bar{V} perpendiculaires à la surface de la cible. Le modèle nécessite la connaissance de la distribution énergétique et angulaire des M : on a pris pour le cuivre la même forme que pour l'aluminium (voir /3/, avec $E_b = 0,5$ eV). L'énergie $E_d^{(2)}(\rho)$ est aussi fixée comme en /3/ à partir des courbes de potentiels calculée par une méthode ab-initio :

$$E_d^{(2)}(\rho) = \begin{cases} -0,4853 \rho + 2,7357 & \rho < 5 \text{ \AA} \\ 38,625/\rho^3 & \rho > 5 \text{ \AA} \end{cases}$$

($E_d^{(2)}$ en eV, ρ en \AA).

Pour que le calcul de la formation de trimères (par accrochage d'un M sur M_2^+) reste simple tout en correspondant le mieux possible au phénomène physique réel, nous avons effectué deux hypothèses :

- (1) On suppose qu'il existe tout au cours du phénomène un centre de nucléation ponctuel de vitesse constante \bar{V} . On ne tient donc pas compte de la délocalisation de la charge. De plus, cette hypothèse revient à calculer la probabilité d'accrochage $M \rightarrow M_2^+$ comme si tous les M_2^+ avaient la vitesse \bar{V} de M^+ . Pour juger dans une certaine mesure de la validité de ce dernier point, nous avons calculé l'énergie cinétique moyenne des M_2^+ perpendiculairement à la surface et vérifié qu'elle est bien le plus souvent proche de la valeur $2e$ qu'implique notre hypothèse (le plus grand écart est pour $e \sim 3,3$ eV où l'on obtient $1,35 e$).
- (2) On n'introduit pour décrire l'accrochage $M \rightarrow M_2^+$ qu'une seule énergie potentielle $E_d^{(3)}(\rho)$. En l'absence de données sur les "surfaces du potentiel" du système nous avons utilisé l'hypothèse

$$E_d^{(3)}(\rho) = \alpha E_d^{(2)}(\rho)$$

où α est fixé par des arguments sur la stabilité des amas Cu_2^+ et Cu_3^+ . On sait en effet que, dans une théorie "à un électron", l'énergie gagnée dans la réaction $Cu + Cu^+ \rightarrow Cu_2^+$ est β (β : intégrale de transfert) alors qu'elle vaut $2,4\beta$ dans la réaction $Cu + Cu_2^+ \rightarrow Cu_3^+$ (on a pris pour Cu_3^+ la moyenne entre les formes linéaire et équilatérale). Ceci nous conduit à prendre $\alpha = 2,4$.

Le calcul de la probabilité d'obtenir un M_3^+ par l'autre mode de formation (accrochage $M_2 \rightarrow M^+$) est du même type que celui exposé en /3/ pour les dimères. On a pris pour distribution angulaire et énergétique des M_2 le carré de la distribution des M (avec comme nombre total de M_2 : 10^{-1}). Le potentiel d'attraction $E_d^{(3)}(\rho)$ est aussi choisi du type $E_d^{(3)}(\rho) = \alpha' E_d^{(2)}(\rho)$ où α' est le rapport de l'énergie gagnée dans la réaction $Cu_2 + Cu^+ \rightarrow Cu_3^+$ à l'énergie gagnée dans la réaction $Cu + Cu^+ \rightarrow Cu_2^+$, soit $\alpha' = 1,4$. Comme les deux modes de formation d'un Cu_3^+ sont en général peu probables, on peut les supposer indépendants et ajouter les probabilités obtenues dans les deux calculs.

III - RESULTATS et DISCUSSION

Nous avons porté dans le tableau 1 les valeurs obtenues pour les probabilités de former un Cu_3^+ ou un Cu_2^+ , respectivement: $p^{(3)}$ et $p^{(2)}$. Nous avons placé dans une même colonne les probabilités correspondant à des particules qui ont approximativement la même énergie d'émission ϵ . Pour ceci nous supposons, comme dans l'hypothèse (1) développée plus haut, que les probabilités $p^{(3)}$ et $p^{(2)}$ calculées lorsque le centre de nucléation originel a l'énergie ϵ correspondent à des trimères d'énergies ϵ valant approximativement 3ϵ et 2ϵ .

ϵ (eV)	1	2	5	15	50
$p^{(2)}$	0,41	0,31	0,17	$0,12 \cdot 10^{-1}$	$0,30 \cdot 10^{-3}$
$p^{(3)}$	0,32	0,17	$0,58 \cdot 10^{-1}$	$0,32 \cdot 10^{-2}$	$0,16 \cdot 10^{-5}$

Tableau 1 - Probabilités de formation d'un dimère ou d'un trimère.

On peut ainsi estimer le rapport $r_{31}(\epsilon)$ des courants de trimères et d'ions simples pour différentes énergies d'émission ϵ . On aura :

$$r_{31}(\epsilon) = \frac{p^{(1)}(\epsilon)}{p^{(3)}(\epsilon)} \times \left[\frac{(E_b + \frac{\epsilon}{3})^2}{(E_b + \epsilon)^2} \right]$$

où le facteur entre crochet provient de la distribution énergétique des ions simples (voir /3/). En tenant compte de ce qu'une partie des ions simples disparaît par formation de dimères ou de trimères, on obtient : $p^{(1)}(1 \text{ eV}) \sim 0,36$ et $p^{(1)}(5 \text{ eV}) \sim 0,95$, ce qui conduit à $r_{31}(1 \text{ eV}) \sim 0,34$ et $r_{31}(5 \text{ eV}) \sim 2,54$. Ces résultats montrent qu'à basse énergie d'émission on peut s'attendre à un courant en Cu_3^+ plus important qu'en Cu^+ , mais que cet effet disparaît à plus haute énergie; cette tendance est observée expérimentalement /4/.

REFERENCES

- /1/ YU M.L., Phys. Rev., B24, (1981), 5625.
- /2/ JOYES P., J. Phys. Chem. Sol., 32, (1971), 1269.
- /3/ JOYES P., J. Phys., 44, (1983), 221.
- /4/ BLAISE G., Thèse d'Etat (1972) Orsay.