



**HAL**  
open science

## Traitement unifié de l'émission électronique secondaire du cuivre par une méthode de Monte Carlo

J.P. Ganachaud, M. Cailler

► **To cite this version:**

J.P. Ganachaud, M. Cailler. Traitement unifié de l'émission électronique secondaire du cuivre par une méthode de Monte Carlo. Journal de Physique, 1973, 34 (1), pp.91-98. 10.1051/jphys:0197300340109100 . jpa-00207361

**HAL Id: jpa-00207361**

**<https://hal.science/jpa-00207361>**

Submitted on 4 Feb 2008

**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.

Classification  
 Physics abstracts :  
 17.10 — 17.52

## TRAITEMENT UNIFIÉ DE L'ÉMISSION ÉLECTRONIQUE SECONDAIRE DU CUIVRE PAR UNE MÉTHODE DE MONTE CARLO

J. P. GANACHAUD et M. CAILLER

Laboratoire de Physique du Métal  
 Ecole Nationale Supérieure de Mécanique de Nantes

(Reçu le 6 juin 1972, révisé le 14 septembre 1972)

**Résumé.** — La présente théorie de l'émission électronique secondaire se veut un traitement unifié tant des processus de pénétration et de rétrodiffusion des électrons primaires que de création et de transport des électrons secondaires excités dans un métal. Elle utilise pour cela une méthode de Monte Carlo. Appliquée au cuivre et concernant les faibles énergies primaires, elle rend compte de façon satisfaisante de la distribution énergétique des électrons secondaires émis. La comparaison avec l'expérience est cependant quelque peu malaisée compte tenu des désaccords entre les mesures existantes. Les modèles angulaires retenus pour décrire les collisions élastiques et inélastiques et l'utilisation de données relatives aux pertes d'énergies caractéristiques permettent d'atteindre des valeurs très raisonnables des rendements secondaires. On étudie par ailleurs comment s'effectue la dissipation d'énergie à l'intérieur du métal en fonction de l'énergie du faisceau primaire.

**Abstract.** — The present theory of secondary electron emission intends to be a unified treatment both for penetration and back-scattering processes of primary electrons and for production and transport of secondary electrons excited inside a metal. It makes use of a Monte Carlo method. In the case of copper concerning low primary energies, it takes into account the energy distribution of emitted secondary electrons in a satisfactory way. Comparison with experiment is however somewhat difficult on account of disagreements with existing measurements. Selected angular models for a description of elastic and inelastic collisions and use of data related to characteristic energy losses allow us to obtain some very realistic values of secondary yields. We also study how the energy dissipation takes place inside the metal with respect to primary beam energy.

**1. Introduction.** — La théorie [1] que nous avons précédemment proposée pour l'émission électronique secondaire (EES) du cuivre conduit à un accord qualitatif encourageant avec l'expérience. Les courbes de distribution énergétique des électrons secondaires reflètent en effet les caractéristiques essentielles des mesures expérimentales actuellement à notre disposition.

La prise en compte incomplète de phénomènes physiques importants nous interdit toutefois une confrontation plus quantitative. Nous avons donc modifié notre précédent modèle afin d'obtenir des estimations du rendement d'émission secondaire total  $\sigma$ , d'émission secondaire vrai  $\delta$  et du coefficient de rétrodiffusion  $\eta$ .

Les théories actuelles, lorsqu'elles en tiennent compte, sous-estiment généralement ces observables. Cela provient en majeure partie d'un traitement incomplet de la pénétration et de la rétrodiffusion des électrons primaires (EP). A cet égard, notre première approche peut être soumise aux mêmes critiques. Nous en présentons ici une version améliorée.

Dans la théorie précédente les EP étaient supposés pénétrer sans déviation jusqu'à une profondeur  $R$

à laquelle ils avaient perdu presque toute leur énergie. Cette profondeur de pénétration suit une loi du type  $R = AE_p^n$  [2]. De plus, la fonction source utilisée  $S(E'; E_p)$  était paramétrée par l'énergie initiale  $E_p$  du faisceau primaire. La perte d'énergie du faisceau n'intervenait donc pas directement dans la fonction source.

L'hypothèse d'une pénétration rectiligne interdit en principe toute rétrodiffusion. Par contre l'isotropie de la source tend à rétablir une certaine vérité au niveau du processus de création dû à l'action conjuguée des primaires pénétrants et des rétrodiffusés.

Dans notre première analyse, nous avons noté l'importance du rapport  $R/\lambda$  de la profondeur de pénétration au libre parcours moyen (lpm) des électrons sur la forme de la distribution énergétique des ES. Ce rapport perd son arbitraire dans une théorie qui ne sépare plus la création du phénomène de transport. La profondeur de pénétration  $R$  est alors une conséquence de la théorie, intimement liée au choix de  $\lambda$ .

L'analyse détaillée de la rétrodiffusion nécessite une connaissance complète des dépendances angulo-énergétiques des sections efficaces tant élastiques

qu'inélastiques. En raison de l'insuffisance des données théoriques ou expérimentales dans le domaine des électrons lents, nous avons été conduits à proposer des modèles simples qui se présentent comme des corrections à un modèle purement inélastique et dont le calcul doit nous permettre de contrôler la vraisemblance.

Pour une telle étude, une simulation du type Monte Carlo présente un intérêt certain. En particulier, n'utilisant que des probabilités relatives, elle est dans le cas d'échantillons d'épaisseur infinie insensible à l'unité de longueur considérée et permet de s'affranchir en partie de certaines données numériques.

**2. Les grandes lignes de la méthode.** — 2.1 LIBRE PARCOURS MOYEN. — Dans la gamme d'énergie étudiée le lpm pour une collision inélastique électron-électron  $\lambda_{e-e}(E')$  est nettement inférieur aux autres lpm. Dans ces conditions, le lpm global  $\lambda(E')$  est très voisin de  $\lambda_{e-e}(E')$ . Ce n'est sans doute plus le cas dans le domaine des très faibles énergies où  $\lambda_{e-e}(E')$  a des valeurs (quelques dizaines d'Å) de l'ordre de grandeur des lpm élastiques. Il en est de même dans la région « hautes énergies » (quelques centaines d'eV). Nous approchons  $\lambda(E')$  par  $\lambda_{e-e}(E')$  estimé à partir de la fonction  $\text{Im}\left(-\frac{1}{\varepsilon(\omega)}\right)$  fournie par Beaglehole [3] pour le cuivre. Selon Pines [4] :

$$\frac{d^2(1/\lambda(E'))}{d\omega d\Omega} = C \cdot \frac{1}{\hbar^2 k^2} \text{Im}\left(-\frac{1}{\varepsilon(\omega)}\right)$$

où  $\omega$  représente le transfert d'énergie,  $k$  le transfert d'impulsion et  $\Omega$  la déviation angulaire correspondante. Par suite :

$$\frac{1}{\lambda(E')} = C \cdot \int d\Omega \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} d\omega' \frac{1}{\hbar^2 k^2} \text{Im}\left(-\frac{1}{\varepsilon(\omega')}\right)$$

$\text{Im}\left(-\frac{1}{\varepsilon(\omega)}\right) \simeq 0$  si  $\omega < \omega_{\min}$  avec  $\omega_{\min} \simeq 2$  eV pour le cuivre. De plus,  $\omega$  est nécessairement inférieur à

$$\omega_{\max} = E' - E_F$$

( $E_F$  : énergie de Fermi) si l'on veut tenir compte du principe de Pauli.

Principalement dans sa partie « faibles énergies », le lpm ainsi obtenu, représenté en figure 1, s'accorde quant à sa forme aux résultats expérimentaux de Kanter [5] et aux prévisions théoriques de Quinn [6]. Ce lpm a donc été retenu à titre d'essai puisque, comme nous l'avons fait remarquer, notre méthode de simulation est sensible à l'allure de  $\lambda(E')$  et non aux valeurs absolues. A cet égard, il sera intéressant de comparer nos conclusions aux mesures de pénétration des primaires et des transferts d'énergie présentées par Shul'man, Kanicheva et Barzdo [7] par exemple. Il ne semble pas d'autre part, selon quelques essais

que nous avons effectués, qu'un choix d'une fonction autre que celle de Beaglehole puisse changer l'allure de  $\lambda(E')$  de façon déterminante.

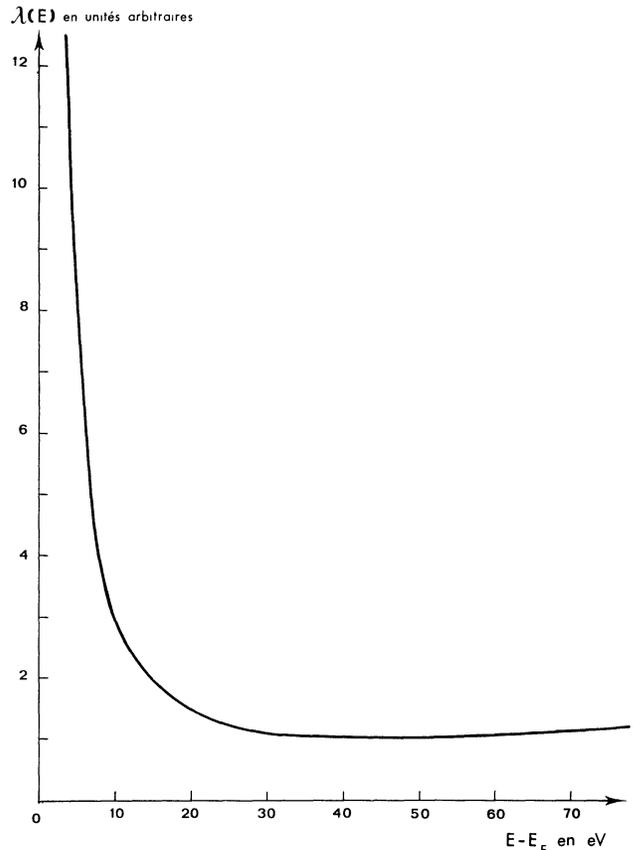


FIG. 1. — Libre parcours moyen obtenu par la théorie diélectrique en utilisant les valeurs expérimentales de Beaglehole. Les valeurs numériques indiquées pour  $\lambda$  correspondent à des distances en Å. La forme de cette courbe est cependant le seul aspect pris en compte dans une méthode de Monte Carlo pour laquelle l'unité de longueur est en fait arbitraire.

Enfin il est intéressant de remarquer que l'utilisation de fonctions expérimentales permet d'inclure partiellement dans la théorie les interactions de type collectif. L'introduction empirique de tels phénomènes reste compatible avec le reste de la théorie pour autant que nous admettions que les plasmons se désexcitent par un processus quasi local s'accompagnant en moyenne de la création d'un seul électron excité.

**2.2 EXCITATION DES ÉLECTRONS. PERTE D'ÉNERGIE ET DÉPENDANCE ANGULAIRE.** — Dans une collision de type inélastique, la probabilité pour qu'un électron d'énergie  $E'$  se retrouve après collision dans un état d'énergie comprise entre  $E$  et  $E + dE$  et ait une direction se situant dans l'angle solide  $\Omega, \Omega + d\Omega$  s'écrit :

$$P(E' ; E, \Omega) dE d\Omega ;$$

$\omega = E' - E$  est la perte d'énergie subie.

L'allure des courbes expérimentales de pertes d'énergie caractéristiques (pec) apparaît, tout au moins dans

le cas des métaux nobles, comme assez peu modifiée lorsque varie l'énergie des EP. D'autre part, bien que résultant de sources d'énergies très différentes, les intensités des pertes d'énergie par excitation optique et électronique sont en accord quantitatif satisfaisant [8] pour les faibles transferts d'impulsion. Ces constatations, prévues par la théorie diélectrique, nous ont permis d'extrapoler les résultats issus des pec au domaine des faibles énergies excitatrices.

A titre de simplification, et en nous basant sur la relative insensibilité de la forme des courbes de pec aux conditions angulaires d'excitation (Thirlwell [9]), nous avons admis en première approche une forme séparable pour  $P(E' ; E, \underline{\Omega})$  soit en fait :

$$P(E' ; E, \underline{\Omega}) \simeq G(E', \omega) F(\underline{\Omega}).$$

Nous avons ainsi admis qu'un électron d'énergie  $E'$  pouvait, au cours d'une collision inélastique, perdre une énergie comprise entre  $\omega_{\min}$  et  $E' - E_F$  (principe de Pauli), suivant une loi de probabilité déduite des courbes de pec. Nous avons utilisé dans nos calculs les valeurs trouvées pour le cuivre par Powell [10] en utilisant une méthode en réflexion. Dans une étape plus avancée de telles mesures devraient être corrigées pour tenir compte des pertes multiples (Misell [11]).

L'énergie  $\omega$  perdue par un électron excitateur est transférée à un électron du métal d'énergie initiale  $E''$ . Pour un métal tel que le cuivre, ce sont très vraisemblablement les électrons  $d$  qui contribuent en majeure partie au processus de désexcitation. Les interprétations théoriques des expériences de photoémission reposent sur un modèle de transitions pour l'essentiel non directes (Berglund et Spicer [12] et autres). Des études plus récentes de Smith [13] ou de Nilsson, Norris et Wallden [14] vont dans le sens d'une interprétation en transitions directes des propriétés photoémisives des métaux nobles. En tout état de cause, il semble présentement difficile de trancher en faveur d'un mécanisme unique. Les calculs de Kane [16] tendent au contraire à prouver que, numériquement, des hypothèses aussi différentes que celles indiquées précédemment conduisent sur bien des points à des résultats voisins.

Sans entrer plus en détail dans ce débat, il semble possible d'affirmer qu'au cours des transitions, la conservation du vecteur  $\underline{k}$  n'est pas une règle de sélection prépondérante. Dans ces conditions, il est légitime de supposer que la probabilité conditionnelle  $p(E'', E'' + \omega) dE''$  pour que l'énergie  $\omega$  soit transférée à un électron de niveau initial situé entre  $E''$  et  $E'' + dE''$  est indépendante du transfert d'« impulsion » et sensiblement proportionnelle au produit des densités d'états initiaux et finals. Ainsi :

$$p(E'', E'' + \omega) dE'' \propto \rho(E'') \rho(E'' + \omega) dE''.$$

Nous avons utilisé les densités d'état « optiques » indiquées par Krolikowski et Spicer [16] pour le cuivre. Elles incluent aussi bien les électrons 3d que l'électron 4s. Après collision, pour un électron excitateur

d'énergie  $E'$  avant collision, se trouvent donc présents dans la cascade deux électrons d'énergies respectives

$$E = E' - \omega \quad \text{et} \quad E''' = E'' + \omega.$$

En ce qui concerne les dépendances angulaires, dans un système de coordonnées sphériques utilisant pour axe la direction de l'excitateur avant collision,

$$F(\underline{\Omega}) \equiv f(\cos \theta) h(\varphi).$$

En raison de l'isotropie du milieu retenue dans nos hypothèses, on admettra une symétrie de révolution autour de cet axe. Ainsi

$$\frac{dh(\varphi)}{d\varphi} = 0.$$

Les pec s'accompagnent en général de faibles déviations élémentaires, principalement aux hautes énergies où les règles de conservation de l'impulsion et de l'énergie conduiraient pour des particules libres à

$$\sin^2 \theta = \frac{\omega}{E'}.$$

Dans ce domaine, l'essentiel d'un changement de direction provient des collisions élastiques. Aux faibles énergies, ces deux actions se conjuguent.

Faute d'une connaissance plus décisive des phénomènes élémentaires, nous avons été conduits à supposer qu'à des énergies inférieures à une limite  $E_c$  arbitrairement choisie à 50 eV, l'électron excitateur suivait une loi de dispersion isotrope. L'électron excité dont l'énergie après collision la plus probable est inférieure à  $E_c$  est supposé éjecté suivant une loi de même type. Aux énergies supérieures, nous avons simulé pour l'excitateur une loi traduisant une évolution progressive vers une diffusion « en avant ».

A cet égard un modèle simple a été proposé, la diffusion s'effectuant dans un cône de demi-angle au sommet  $\theta_{\max}$  suivant une loi de distribution uniforme pour  $\cos \theta$ . Nous avons retenu empiriquement pour  $\theta_{\max}$  deux types de variations en fonction de l'énergie  $E'$  de l'électron excitateur :

$$\alpha) \cos \theta_{\max} = -1 + (E' - E_c)/A;$$

$$\beta) \cos \theta_{\max} = -1 + (E' - E_c)/B \text{ lorsque}$$

$$E' - E_c < B$$

et  $\cos \theta_{\max} = 0$  pour  $E' - E_c > B$ .

Les valeurs  $A = 800$  et  $B = 600$  eV conduisent pour les rendements à des résultats proches des valeurs expérimentales.

Il est vraisemblable qu'un modèle plus approprié utiliserait une progressivité plus réaliste de la loi de variation de  $\cos \theta_{\max}$ .

2.3 CONDITIONS AUX LIMITES, FRANCHISSEMENT DE LA SURFACE LIBRE. — Un électron ne peut franchir l'interface métal-vide que si son énergie est supérieure au travail de sortie  $\mathcal{W}$ . Alors il émerge si la condition

$\cos \theta > \sqrt{W/E}$  est satisfaite, sinon il subit une réflexion spéculaire.

### 3. Simulation par une méthode de Monte Carlo. —

Nous indiquons dans ce paragraphe les aspects principaux du traitement numérique. Nous conviendrons de représenter par  $\gamma_i$  les différents nombres aléatoires créés selon une loi de probabilité uniforme entre 0 et 1. Les étapes essentielles sont dès lors les suivantes :

3.1 Un électron primaire incident, d'énergie  $E' = E_p$  frappe la surface de séparation. En notant  $z$  la profondeur on a alors  $z = z_0 = 0$ . Sa direction d'incidence fait un angle  $\theta'$  avec la normale à la surface tel que  $\cos \theta' = -1$  (incidence normale des électrons primaires).

3.2 Avant la première collision, l'électron parcourt en ligne droite une distance  $L = -\lambda(E') \text{Log} \gamma_L$ . Cette collision s'effectue ainsi à la profondeur

$$z = z_0 - L \cos \theta'$$

soit ici  $z = L$ .

3.3 Il perd une énergie  $\omega$ , en accord avec la loi de probabilité  $G(\omega)$  :

$$\frac{\int_{\omega_{\min}}^{\omega} G(\omega') d\omega'}{\int_{\omega_{\min}}^{E' - E_F} G(\omega') d\omega'} = \gamma_{\omega}.$$

La fonction  $\varphi(u) = \int_{\omega_{\min}}^u G(u') du'$  ayant été tabulée préalablement, la relation  $\varphi(\omega) = \gamma_{\omega} \varphi(E' - E_F)$  permet de déduire  $\omega$  en encadrant  $\varphi(\omega)$  entre deux valeurs  $\varphi(u)$  et  $\varphi(u + 0,5)$  de la tabulation.

3.4 Cet électron exciteur a donc après collision une énergie  $E = E' - \omega$ .

3.5 Dans cette collision, il subit une déviation repérée par rapport à sa direction initiale au travers des angles  $\alpha$  et  $\beta$  dont le sens est précisé par la figure 2.

En raison de l'isotropie supposée par le métal,  $\beta$  suit une loi de variation uniforme :

$$\beta = 2 \pi \gamma_{\beta}$$

$\cos \alpha = \cos \theta_{\max} + (1 - \cos \theta_{\max}) \gamma_{\alpha}$  d'où une répartition uniforme de  $\cos \alpha$  entre  $\cos \alpha_{\max}$  et 1, le cas d'une diffusion isotrope correspondant à

$$\cos \theta_{\max} = -1.$$

La nouvelle direction de propagation fait avec l'axe des  $z$  un angle  $\theta$  donné par :

$$\cos \theta = \cos \theta' \cdot \cos \alpha + \sin \theta' \sin \alpha \cos \beta.$$

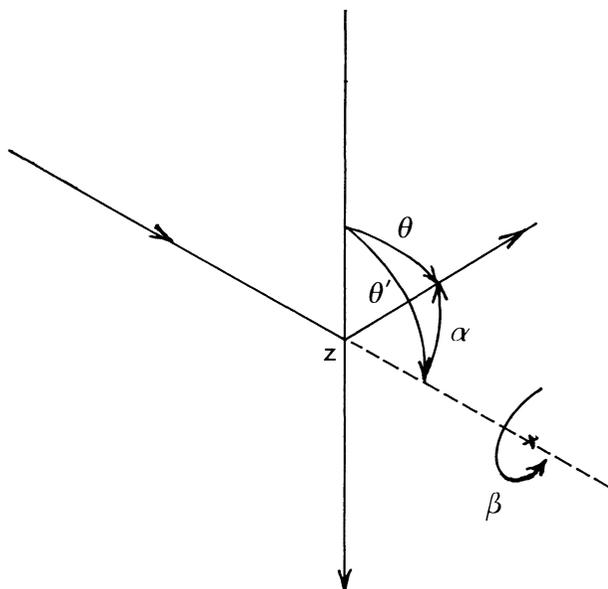


FIG. 2. — Paramètres angulaires liés à une collision subie par un électron au cours de son transport vers la surface libre du métal.

3.6 Un électron du métal a été excité à partir d'un niveau  $E''$  de la bande de conduction selon la loi de probabilité :

$$\frac{\int_{E_0}^{E''} \rho(u) \rho(u + \omega) du}{\int_{E_0}^{E_F} \rho(u) \rho(u + \omega) du} = \gamma_{E''}$$

( $\rho(u)$  représente une densité d'état).

Si  $\omega$  est inférieur à  $E_F$ , l'excitation n'intéresse que le domaine énergétique compris entre  $E_F$  et  $E_0 = E_F - \omega$ .

Par contre, si  $\omega$  est supérieur à  $E_F$ , la borne inférieure devient  $E_B$ , énergie du bas de la bande de conduction (choisie comme zéro de référence puisqu'on néglige l'excitation des couches plus profondes).

$$D(v) = \int_{E_0}^v \rho(v') \rho(v' + \omega) dv'$$

ayant été calculé, il convient de situer  $D(E'') = \gamma_{E''} D(E_F)$  entre deux valeurs  $D(v)$  et  $D(v + 0,5)$  encadrantes.

3.7 L'électron excité, d'énergie  $E''' = E'' + \omega > E_F$ , suit une loi de distribution angulaire isotrope et fait un angle  $\theta'''$  avec l'axe des  $z$  tel que :

$$\cos \theta''' = 2 \gamma_{\theta'''} - 1.$$

Ainsi deux électrons d'énergies  $E$  et  $E'''$  participent dès lors à la cascade. Leur histoire sera suivie en reprenant le schéma que nous venons de développer. Il en sera de même de tous les électrons participant au transport.

A chaque étape, il convient de tester :

a) Si les électrons ont une énergie insuffisante pour participer au processus d'émission ( $E < W$ ), auquel

cas, ils sont considérés comme absorbés et ne sont plus pris en compte par la suite.

b) S'ils ont atteint la surface libre (donc si  $z - L \cos \theta < 0$ ).

$\alpha$ ) Si oui, on teste si leur énergie  $E > W$  permet la traversée de l'interface, c'est-à-dire si  $E \cos^2 \theta > W$ . Dans le cas d'un test favorable, ils sont comptés au nombre des électrons secondaires émis et leur énergie  $E - W$  après franchissement est repérée. Lorsque le test a été négatif, on suppose l'électron réfléchi spéculairement sans perte d'énergie, ce qui correspond aux nouveaux paramètres :

$$\cos \theta \rightarrow -\cos \theta \quad \text{et} \quad z \rightarrow L \cos \theta - z.$$

$\beta$ ) Sinon, où s'ils ont été réfléchis, on doit alors simuler une nouvelle itération.

On suit de cette façon les cascades provenant d'un échantillon d'EP dont la taille a varié selon nos essais entre 500 et 10 000. Rapportés à un électron primaire, les nombres d'électrons sortant avec une énergie comprise entre 0 et  $E_p$  d'une part, 0 et 50 eV d'autre part (50 eV est la limite arbitraire généralement admise pour distinguer les secondaires vrais) permettent de définir respectivement un rendement secondaire total et un rendement secondaire vrai. Le repérage des quantités d'énergie dissipées dans des tranches d'épaisseur  $\Delta z$  à diverses profondeurs  $z$  du matériau donne l'allure des courbes de transfert d'énergie en fonction de la profondeur.

**4. Résultats obtenus.** — Nous présentons à partir de calculs effectués par la méthode de simulation les résultats obtenus pour diverses énergies primaires.

Comme dans [1] nous avons retenu les valeurs  $W = 13,18$  eV et  $E_F = 8,68$  eV.

**4.1 COURBES DE DISTRIBUTION ÉNERGÉTIQUE DES ÉLECTRONS SECONDAIRES.** — La figure 3 représente la distribution énergétique des ES pour une énergie primaire de 200 eV. Obtenue par simulation des trajectoires de 10 000 EP, elle est suffisamment lisse pour mettre en évidence ses caractéristiques essentielles si l'on considère des classes d'amplitude 2 eV.

Par rapport à nos résultats antérieurs, le maximum de cette courbe est décalé vers les faibles énergies (3 eV au lieu de 5). Les valeurs expérimentales proposées sont de 3,1 eV pour Bronshtejn et Shchuchinskij [17], de 4,5 eV pour Scheibner et Tharp [18] (pour  $E_p = 190$  eV). Amelio [19] cite d'autre part une valeur de 2,8 eV pour une énergie primaire de 300 eV. Reste à savoir si les écarts constatés résultent des différences entre les énergies primaires ou de l'utilisation d'échantillons différents. Par ailleurs, le repérage par classes d'amplitude assez larges ne permet pas de donner une valeur définitive à notre résultat théorique.

Si l'on amène en correspondance les maxima des courbes théorique et expérimentale [18], on peut constater un accord satisfaisant pour les énergies

au-delà du maximum. Nous notons en particulier la présence d'un renflement vers 12 eV s'accordant bien tant en abscisse qu'en ordonnée avec les caractéristiques expérimentales. Nous retrouvons donc certaines de nos conclusions antérieures malgré l'utilisation de fonctions de perte d'énergie différentes. La décroissance de la courbe théorique est par ailleurs nettement améliorée par rapport à nos précédents résultats. Ce point est manifestement dû à une prise en compte de la rétrodiffusion.

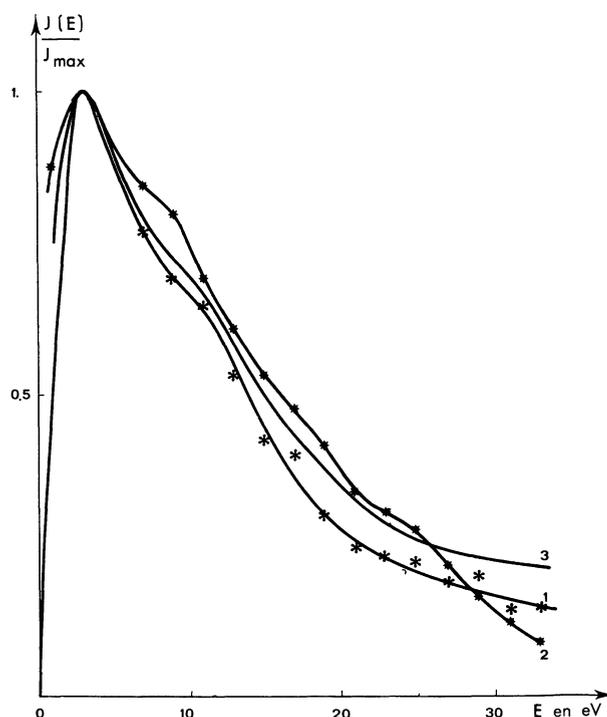


FIG. 3. — Courbes réduites de distribution énergétique des électrons secondaires. La courbe 1 est relative aux résultats de la présente étude. Elle est comparée avec les valeurs correspondant à la courbe 2, provenant de notre précédente théorie. Si l'on compare ces valeurs aux données expérimentales représentées par la courbe 3 qui traduit les mesures de Scheibner et Tharp on constate une amélioration de l'accord global due à la prise en compte de la rétrodiffusion. Les maxima de ces 3 courbes ont été amenés à coïncidence.

La largeur de la courbe réduite à mi-hauteur est voisine de 13,5 eV, à rapprocher de la valeur expérimentale de 15 eV et des 16,5 eV de notre première méthode. Le choix d'un libre parcours moyen influe très certainement sur cet observable, comme nous l'avons déjà indiqué. A cet égard, le lpm actuel aurait donné dans la première théorie des largeurs de courbes beaucoup plus faibles.

La figure 4 montre que, selon notre modèle, la courbe de distribution énergétique se resserre quand l'énergie primaire croît et tend à devenir stationnaire vers 1 keV. Cela va dans le sens de nos premières conclusions. La position du pic secondaire reste sensiblement constante, proche de 3 eV avec toutefois un très léger déplacement vers les faibles énergies lorsque  $E_p$  croît. Les mesures de Palmberg [20] concer-

nant le germanium indiquent une telle tendance. Par contre, les observations de Seah [21], réalisées il est vrai dans des conditions assez différentes semblent caractérisées par une grande insensibilité, dans un large domaine, des courbes d'EES à la valeur de l'énergie primaire, ce qui s'accorderait d'ailleurs avec le point de vue de Bronshtejn et Shchuchinskij. De telles conclusions s'écartent considérablement de ce que l'on peut déduire de la comparaison des valeurs de 4,5 et 15 eV pour  $E_p = 190$  eV de Scheibner et Tharp et de 2,8 et 10 eV pour  $E_p = 300$  eV d'Amelio pour la position du pic secondaire et la largeur de la courbe réduite à mi-hauteur respectivement. En définitive, il est bien évident qu'un ensemble plus vaste de résultats expérimentaux faciliterait une conclusion.

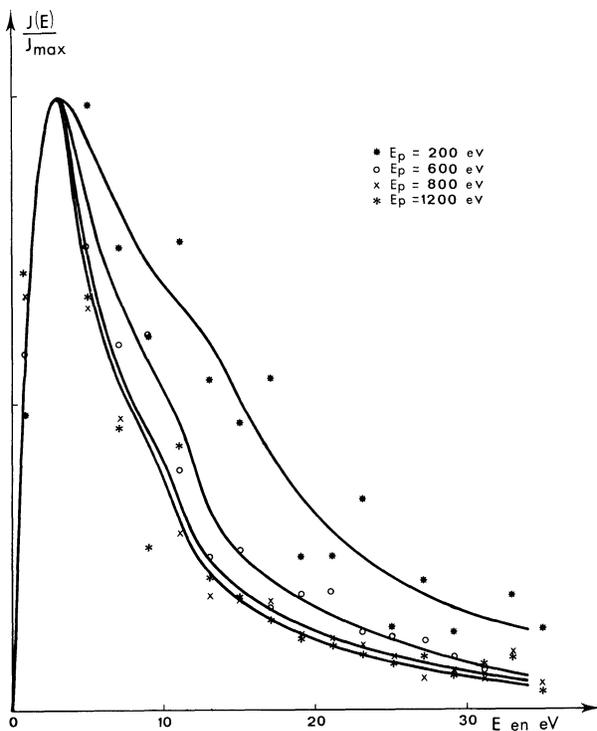


FIG. 4. — Evolution de la courbe réduite de distribution énergétique avec l'énergie primaire. La position du maximum reste sensiblement constante. La largeur à mi-hauteur diminue lorsque croît l'énergie primaire, tendant à devenir stationnaire pour  $E_p = 1$  keV. Les courbes tracées s'ajustent au mieux aux valeurs obtenues dont la dispersion est liée à la petitesse de l'échantillon statistique considéré (1 000 trajectoires simulées).

4.2 COURBES DE RENDEMENT. — Les figures 5a et 5b représentent les variations de  $\sigma$ ,  $\delta$  et de  $\eta = \sigma - \delta$  en fonction de l'énergie primaire, selon nos deux modèles de diffusion. Proches aux faibles énergies, elles s'écartent l'une de l'autre au-delà de leur maximum. Elles présentent chacune un tel maximum  $\sigma_M$  de  $\sigma$  légèrement supérieur à 1,3 pour  $E_{pM}$  entre 0,5 et 0,6 keV. D'autre part, les valeurs de  $E_p$  pour lesquelles  $\sigma = 1$  sont approximativement

$$E_{p1} = 150 \text{ et } E_{p2} = 1150 \text{ eV}$$

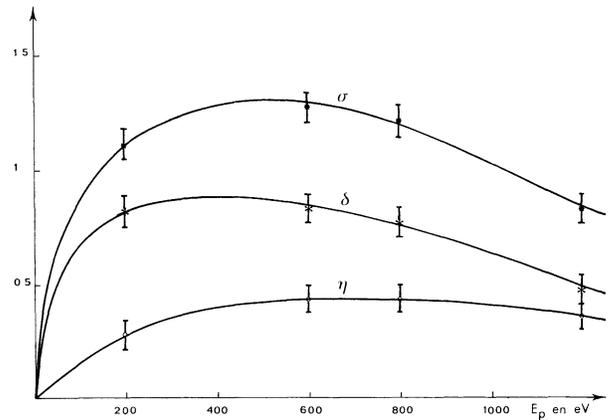


FIG. 5a. — Courbes de rendements secondaires obtenues en utilisant le premier modèle angulaire. Les résultats obtenus sont de l'ordre de grandeur des valeurs expérimentales mais la décroissance de  $\sigma$  et  $\delta$  aux hautes énergies est trop rapide. On a estimé une marge d'erreur plausible.

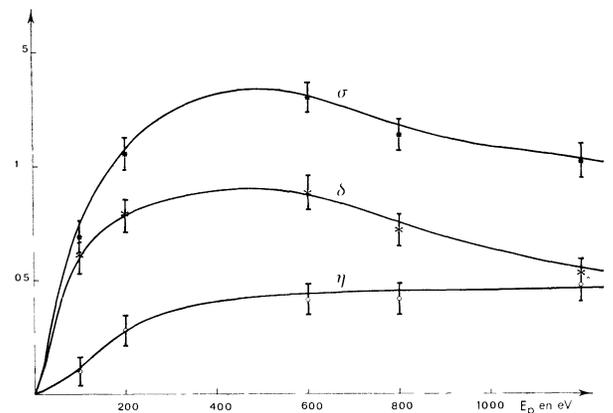


FIG. 5b. — Résultats comparables à ceux de 5a mais utilisant le second modèle angulaire proposé. On constate un meilleur comportement de  $\sigma$  et  $\delta$  dans la gamme des énergies élevées.  $\eta$  présente cependant une légère croissance avec  $E_p$ .

dans le premier modèle et  $E_{p1} = 180$  et  $E_{p2} = 1600$  eV dans le second.

Ces résultats sont à comparer avec ceux de Bruining et De Boer [22] et de Kollath [23] pour lesquels  $\sigma_M = 1,3$ ,  $E_{pM} = 600$  eV,

$$E_{p1} = 200 \text{ eV et } E_{p2} = 1500 \text{ eV.}$$

Il convient de rester prudent car ces mesures furent réalisées à une époque où la technique du vide n'était que mal maîtrisée. Les mesures plus récentes de Bronshtejn et Frajman [24] indiquent que ces valeurs de  $\sigma$  sont trop faibles : ce rendement aurait un maximum voisin de 1,45 pour 700 eV et prendrait la valeur 1 pour  $E_{p2} = 2800$  eV.

La courbe théorique de  $\delta$  présente une allure très similaire, passant par un maximum voisin de 0,9 pour  $E_p \sim 500$  eV. Tout comme pour  $\sigma$ , cette valeur est sans doute un peu faible.

Le coefficient de rétrodiffusion  $\eta$  présente une constance approchée entre 400 et 1200 eV, en accord au moins qualitatif avec l'expérience. La légère décroissance avec l'énergie primaire observée pour 5a

irait dans le sens des résultats de Bronshtejn et Frajman qui donnent  $\eta = 0,38$  pour 1,2 keV et 0,34 pour 4 keV. Les ordres de grandeur pour  $\eta$  sont cependant retrouvés :  $\eta \approx 0,45$ .

Nous avons indiqué sur les graphiques les marges d'erreur que nous jugions possibles. A titre d'exemple,  $\sigma$  peut varier de 1,1 à 1,05 pour 200 eV si l'on passe de 1 000 à 10 000 électrons simulés.

4.3 DISSIPATION D'ÉNERGIE DANS LE MÉTAL. — La figure 6 indique comment se répartit la dissipation d'énergie en fonction de la profondeur pour diverses énergies primaires. En l'absence de valeurs définitives

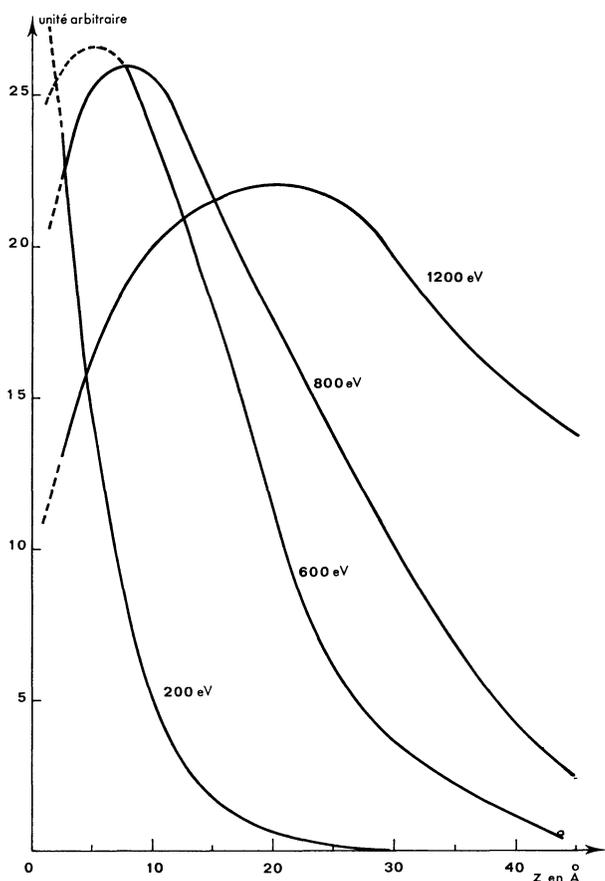


FIG. 6. — Pour diverses énergies  $E_p$ , on représente comment se répartit la dissipation d'énergie au sein du métal en fonction de la profondeur. Compte tenu de l'arbitraire dans les valeurs du lpm, il convient de retenir essentiellement l'allure des courbes. Aux faibles énergies, la dissipation intéresse des épaisseurs faibles. Ce comportement évolue lorsque croît  $E_p$  vers une plus grande uniformité de la dissipation d'énergie par rapport à la profondeur.

pour le lpm, nous devons surtout retenir l'allure de telles courbes. Le maximum se déplace vers les plus grandes profondeurs lorsque croît l'énergie du faisceau incident, ce qui est physiquement raisonnable. Aux énergies primaires faibles, l'allure aiguë de la courbe traduit une pénétration réduite. Cette forme évolue progressivement vers une plus grande constance de la

perte d'énergie en fonction de la profondeur s'accompagnant d'une diminution de son intensité. Cela va dans le sens des observations de Young [25] selon lesquelles, pour une énergie primaire de quelques keV, les pertes d'énergies dans une couche d'épaisseur donnée ne dépendent pratiquement pas de la profondeur.

Nos courbes présentent par ailleurs des allures très comparables à celles obtenues expérimentalement par Shul'man, Kanicheva et Barzdo à des énergies il est vrai supérieures. Ces valeurs expérimentales sont indiquées en figure 7.

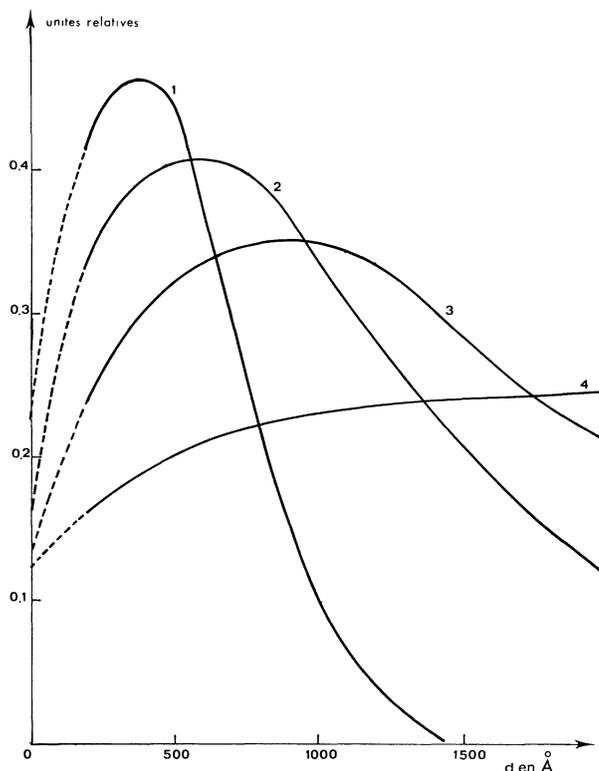


FIG. 7. — Courbes expérimentales obtenues par Shul'man Kanicheva et Barzdo pour des énergies de plusieurs keV. Elles représentent en fait le coefficient d'EES en fonction de l'épaisseur de l'échantillon de cuivre. Cet observable est selon ces auteurs proportionnel à la quantité représentée en figure 6. Les indices 1, 2, 3, 4 se rapportent à des énergies primaires de 5, 7, 9, 15 keV respectivement.

En conclusion, notre prise en compte de la rétrodiffusion des électrons primaires nous a permis une confrontation quantitative avec un ensemble de données expérimentales. La distribution énergétique des électrons secondaires présente ainsi une allure beaucoup plus satisfaisante qu'auparavant. Principalement, sa décroissance est beaucoup plus conforme à l'expérience aux énergies secondaires supérieures à 20 eV où la rétrodiffusion intervient de façon appréciable. Les valeurs des rendements obtenus, sans être en accord complet avec ce que l'on sait des mesures les plus récentes, sont voisines de la réalité. De plus, cet accord se manifeste autant pour  $\sigma$  que pour  $\delta$ .

**Remerciements.** — Nous tenons à remercier M<sup>lle</sup> Offret, Directeur du Laboratoire de Physique du Métal de l'École Nationale Supérieure de Mécanique de Nantes qui a permis et encouragé cette étude. Nous sommes également reconnaissants aux membres

du Laboratoire de Physique des Solides de la Faculté des Sciences d'Orsay et tout particulièrement aux Drs G. Toulouse et C. Colliex des utiles discussions que nous avons eues en commun.

#### Bibliographie

- [1] CAILLER M. et GANACHAUD J. P., *J. Physique* **33** (1972) 903.
- [2] KANTER H., *Phys. Rev.* **121** (1961) 461.
- [3] BEAGLEHOLE D., *Proc. Phys. Soc. (London)* **B 68** (1955) 657.
- [4] PINES D., dans *Elementary excitations in Solids*. W. A. Benjamin Inc. New York (1964).
- [5] KANTER H., *Phys. Rev. B* **1** (1970) 522.
- [6] QUINN J. J., *Phys. Rev.* **126** (1962) 1453 ; *J. Appl. Phys.* **2** (1963) 167.
- [7] SHUL'MAN A. R., KANICHEVA I. R., et BARZDO B. F., *Sov. Phys. Solid State* **5** (1964) 2452.
- [8] RAETHER H., dans *Springer Tracts in modern Physics* Springer Verlag Berlin 1965, Vol. 38.
- [9] THIRLWELL J., *Proc. Phys. Soc.* **91** (1967) 552.
- [10] POWELL C. J., *Proc. Phys. Soc. (London)* **76** (1960) 593.
- [11] MISELL D. L., *Z. Phys.* **235** (1970) 353.
- [12] BERGLUND C. N. et SPICER W. E., *Phys. Rev.* **136A** (1964), 1030 1044.
- [13] SMITH N. V., *Phys. Rev. B* **3** (6) (1971) 1862.
- [14] NILSSON P. O., NORRIS C. et WALLDEN L., *Phys. Kond. Mater.* **11** (1970) 220.
- [15] KANE E. O., *Phys. Rev.*, **159** (1967), 624.
- [16] KROLIKOWSKI W. F. et SPICER W. E., *Phys. Rev.* **185** (1969) 882.
- [17] BRONSHTEJN I. M. et SHCHUCHINSKIY Ya. M., *Radio-tekhnika i elektronika* **6** (1961) 670 ; **9** (1964) 738.
- [18] SCHEIBNER E. J. et THARP L. N., *Surface Science* **8** (1967) 247.
- [19] AMELIO G. J., *Journal of Vacuum Sci. Technol.* **7** (1970) 593.
- [20] PALMBERG P. W., *J. Appl. Phys.* **38** (1967) 2137.
- [21] SEAH M. P., *Surface Science* **17** (1969) 132-161-181.
- [22] BRUINING H. et DE BOER J. H., *Physica* **5** (1938) 17.
- [23] KOLLATH R., *Handb. Phys.* **21** (1956) 232.
- [24] BRONSHTEJN I. M. et FRAJMAN B. S., *Radiotekhnika i elektronika* **7** (1962) 1643 ; **7** (1962) 1530.
- [25] YOUNG J. R., *J. Appl. Phys.* **28** (1957) 524.