



**HAL**  
open science

## Simulation énergétique des trajectoires d'électrons rapides à travers la matière

N. Randrianantoandro, Y. Labaye, A. Khater

► **To cite this version:**

N. Randrianantoandro, Y. Labaye, A. Khater. Simulation énergétique des trajectoires d'électrons rapides à travers la matière. *Journal de Physique III*, 1993, 3 (4), pp.849-858. 10.1051/jp3:1993168 . jpa-00248963

**HAL Id: jpa-00248963**

**<https://hal.science/jpa-00248963>**

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  
79.20K — 78.80

## Simulation énergétique des trajectoires d'électrons rapides à travers la matière

N. Randrianantoandro <sup>(1)</sup>, Y. Labaye <sup>(1)</sup> et A. Khater <sup>(1,2)</sup>

<sup>(1)</sup> Laboratoire Physique des Matériaux, URA 807 CNRS, Faculté des Sciences, Université du Maine, Avenue Olivier Messiaen, 72017 Le Mans, France

<sup>(2)</sup> Service de Physique des atomes et des surfaces, CEN Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

*(Reçu le 14 février 1992, révisé le 25 août 1992, accepté le 20 janvier 1993)*

**Résumé.** — Une nouvelle simulation de la fonction de transfert des électrons d'énergie initiale  $E_0$  ( $5 \text{ keV} \leq E_0 \leq 15 \text{ keV}$ ) basée sur une analyse énergétique de chaque étape de la diffusion est proposée pour le CEMS (Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy). Les résultats numériques obtenus, sont en bon accord avec les expériences obtenues en ICEMS (Integral Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy) et avec les résultats des simulations précédentes.

**Abstract.** — A novel simulation for the transfer function of high energy electrons with initial energy  $E_0$  ( $5 \text{ keV} \leq E_0 \leq 15 \text{ keV}$ ) based in an energy analysis of each stage of the diffusion, is presented for CEMS (Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy). The numerical results are in good agreement with ICEMS (Integral Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy) experimental data and with the results of previous simulations.

### 1. Introduction.

La spectrométrie Mössbauer en géométrie de réflexion appelée communément C.E.M.S. (Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy) est une technique utile pour l'analyse des surfaces [1, 2]. Cette technique est basée sur la détection des électrons, issus d'un processus de conversion interne  $\gamma$ -électron et porteurs de l'information Mössbauer. Ainsi, la connaissance de la fonction probabiliste de transfert d'un électron émis avec une énergie initiale  $E_0$ , à une profondeur  $x$  du solide, est nécessaire pour la déconvolution des spectres CEMS.

Il y a eu plusieurs traitements théoriques du transport de l'électron rapide à travers la matière. La forme analytique proposée par Bethe, Rose et Smith [3] et par Bothe [4], corrigée par Cosslett et Thomas [5], a été utilisée par divers auteurs [6-8] pour analyser les spectres CEMS. Ces fonctions de transfert ne permettent pas de rendre compte des résultats expérimentaux obtenus par CEMS [9, 10] car elles ont été conçues pour étudier le passage d'un faisceau d'électrons monocinétiques dans l'approximation d'un matériau de faible épaisseur ; elles ne tiennent pas compte du caractère aléatoire et pluridirectionnel de la diffusion. Par ailleurs, des algorithmes de simulation type Monte carlo des trajectoires électroniques ont été développés [11-13]. Liljequist [11] a proposé deux algorithmes pour la fonction de transfert.

Le premier, qu'il a appelé « *separated program* », traite séparément les processus de diffusion et les processus de perte d'énergie. Dans un premier temps, cet algorithme simule uniquement la trajectoire de l'électron. Les processus de diffusion qui permettent de calculer cette trajectoire sont décrits par la section efficace de diffusion élastique dans l'approximation de Born et par le facteur de ralentissement formulé par Bethe [14]. Comme on le montrera dans le paragraphe suivant, c'est un modèle de diffusion « *presque linéaire* » où le libre parcours varie linéairement avec la distance parcourue. Une fois l'électron sorti, l'algorithme simule la perte d'énergie sur une trajectoire en utilisant une fonction de distribution de perte d'énergie par collision  $F(W)$ , où  $W$  est l'énergie perdue par l'électron lors d'une collision inélastique.

Le deuxième algorithme appelé « *mixed program* », traite les deux processus simultanément. Les paramètres de diffusion élastique dépendent de l'énergie et sont calculés selon la théorie BW1 (Bethe-Wentzel-1st Born approximation). La perte d'énergie subie, par l'électron, lors d'une collision est donnée par la fonction de distribution  $F(W)$  définie précédemment.

Dans leur article traitant le problème du transport des électrons de conversion, Liljequist, Ekdahl et Baverstam [12] (notation LEB dans ce qui suit) proposent que la fonction de transfert puisse être décrite sous une forme polynomiale. Sous cette forme ces auteurs montrent que les résultats de leur simulation, baptisée MCI (algorithme « *separated program* »), est en bon accord avec l'expérience.

Dans ce travail nous présentons deux algorithmes reposant sur le modèle *Continuous Slowing Down Approximation*, mais qui diffèrent selon la manière avec laquelle on décrit la trajectoire de l'électron à travers la matière : le premier est basé sur un critère géométrique, DCAC (Diffusion à Coefficient d'Atténuation Constant), similaire à celui de Liljequist [12, 13], le second énergétique DCADE (Diffusion à Coefficient d'Atténuation Dépendant de l'Energie), est une nouvelle manière de considérer la perte d'énergie dans l'approximation *continuous slowing down*. La simulation DCADE permettra de calculer directement la distribution en énergie des électrons émergeant à la surface.

## 2. Modèle de diffusion.

Lors de son passage à travers la matière, l'électron est dévié de sa trajectoire et perd de l'énergie. Cette modification de sa trajectoire peut être interprétée par la diffusion élastique et la perte d'énergie peut s'expliquer par la diffusion inélastique.

**2.1 DIFFUSION ÉLASTIQUE.** — La diffusion élastique est caractérisée par une section efficace de diffusion. Dans le cas d'un matériau métallique on peut calculer cette section efficace différentielle de diffusion élastique à partir du potentiel écranté de Coulomb. Dans l'approximation de Born du premier ordre cette section efficace s'écrit de la manière suivante :

$$\sigma^B(\theta, E) = \frac{1}{E^2} \frac{Z^2 e^4}{\left[4 \sin^2 \theta/2 + \frac{1}{(ka)^2}\right]^2} \quad (1)$$

où  $E$ ,  $\theta$ ,  $k$  et  $e$  sont respectivement l'énergie, l'angle de diffusion, le vecteur d'onde et la charge de l'électron.  $a$  est le paramètre d'écrantage défini par la relation  $a \approx a_H Z^{-1/3}$  ( $a_H = 0,529 \text{ \AA}$ , rayon de l'atome de Bohr).

**2.2 DIFFUSION INÉLASTIQUE.** — Pour rendre compte des phénomènes inélastiques nous avons choisi le modèle de Bethe [14]. Ce modèle décrit l'ensemble des processus inélastiques comme une perte d'énergie continue le long d'une trajectoire de longueur  $s$  (« *Continuous Slowing*

*Down Approximation* » ou CSDA). Dans cette approximation l'expression de la perte d'énergie est donnée par le facteur de ralentissement ou « *stopping power* » :

$$S = -\frac{dE}{dS} = 783 \frac{Z\rho}{AE} \ln(1,16 E/I) \quad (2)$$

où  $E$  (eV) est l'énergie de l'électron. Au départ, le paramètre  $I$  (eV) a été défini par Bethe comme le potentiel moyen d'ionisation des atomes diffuseurs [14, 15] pour décrire le « *stopping power* », ensuite il est devenu un paramètre d'ajustement pour différents auteurs [16]. Le facteur de ralentissement représente la perte d'énergie par unité de parcours.

Les processus inélastiques laissent la possibilité d'avoir des électrons absorbés par la matière. Par sa définition même, la relation (2) permet de calculer la distance maximale que peut parcourir un électron avant d'être absorbé. Cette distance est donnée par l'intégrale,

$$r_B = -\int_{E_0}^I \frac{dE}{S} \quad (3)$$

où  $E_0$  est l'énergie initiale de l'électron. Dans la littérature, on appelle communément cette distance le « *Bethe range* ».

### 3. Simulations.

La trajectoire d'un électron dans un milieu ralentisseur résulte d'une succession d'interactions. Entre deux interactions, l'électron effectue un parcours rectiligne, le libre parcours, constituant une étape de la trajectoire. La section efficace de diffusion élastique permet d'échantillonner les angles  $\theta_i$  de déviation après la  $i$ -ième collision élastique ou de calculer un angle moyen de diffusion que l'on gardera constant tout au long de la trajectoire. Simuler la trajectoire d'un électron revient donc à décrire une série d'étapes constituant une ligne brisée dont il faut déterminer la position spatiale de chaque nœud, auquel il faut associer une valeur de l'énergie de l'électron.

Pour nos deux algorithmes de simulation les éléments caractéristiques de la trajectoire d'un électron sont calculés à partir de la section efficace de diffusion (1).

- Le libre parcours élastique est donné par la relation :

$$\lambda_e(E) = 34,7 \frac{AE}{Z^{4/3} \rho} \quad (4)$$

où  $E$  est en keV et  $\lambda_e$  en Å.

- L'angle moyen de diffusion élastique est donné par son cosinus moyen :

$$\langle \cos \theta \rangle = 1 - 6,801 \times 10^{-3} \frac{Z^{2/3}}{E} \ln(108 EZ^{-2/3}) \quad (5)$$

où  $E$  est en keV.

- Le libre parcours de transport  $\lambda_{tr}$ .

$$\lambda_{tr} = \frac{\lambda_e}{1 - \langle \cos \theta \rangle} \quad (6)$$

en fonction de l'énergie,

$$\lambda_{tr}(E) = 51 \times 10^3 \frac{AE^2}{\rho Z^2 \ln(108 EZ^{-2/3})} \quad (7)$$

où  $E$  est en keV et  $\lambda_e$  en Å.

3.1 DIFFUSION À COEFFICIENT D'ATTÉNUATION CONSTANT (DCAC). — Les expressions (2) et (7) montrent que la distance parcourue et le libre parcours de transport varient de la même manière que l'énergie. En effet, la variation du libre parcours de transport en fonction de la distance parcourue peut s'écrire de la manière suivante :

$$\frac{d\lambda_{tr}}{ds} = \frac{d\lambda_{tr}}{dE} \cdot \frac{dE}{ds} \quad (8)$$

L'allure de cette dérivée montre que le libre parcours de transport varie linéairement avec la distance parcourue. On obtient alors une loi de type :

$$\lambda_{tr}(s) = \lambda_{tr}(0) \left( 1 - \frac{s}{r_B} \right) \quad (9)$$

où  $\lambda_{tr}(0)$  est le libre parcours de transport initiale.

De même, en utilisant la relation (4) et (9), le libre parcours élastique s'écrit :

$$\lambda_e(s) = \lambda_e(0) \left( 1 - \frac{s}{r_B} \right) \quad (10)$$

où  $\lambda_e(0)$  est le libre parcours élastique initiale.

On établit ainsi un *modèle presque linéaire* de diffusion qui permet de garder l'image simple de la diffusion élastique, tout en tenant compte des processus inélastiques. Ce modèle a déjà été utilisé par Liljequist *et al.* [11, 12].

D'après la description de la trajectoire (voir début du paragraphe 3), la distance parcourue par un électron après  $n$  collisions est donnée par la somme :

$$s(n) = \sum_{i=0}^{n-1} \lambda_e(i) . \quad (11)$$

La relation (10) s'écrit alors sous la forme :

$$\lambda_e(n) = \lambda_e(0) \left[ 1 - \frac{\sum_{i=0}^{n-1} \lambda_e(i)}{r_B} \right] . \quad (12)$$

Par récurrence, on obtient une expression plus simple :

$$\lambda_e(n) = \lambda_e(0) \left( 1 - \frac{\lambda_e(0)}{r_B} \right)^n = \lambda_e \alpha^n \quad (13)$$

Dans cet algorithme le libre parcours varie alors selon une suite géométrique de raison  $\alpha$ , tel que :

$$\alpha = 1 - \frac{\lambda_e(0)}{r_B} \quad (14)$$

Physiquement ce coefficient  $\alpha$  peut être interprété comme un coefficient d'atténuation. En effet, on peut calculer la perte d'énergie relative entre deux collisions élastiques par l'intermédiaire des relations (4) et (13) :

$$\frac{\Delta E}{E} = 1 - \alpha . \quad (15)$$

Cette perte relative d'énergie ne dépend alors que des caractéristiques  $(Z, A, \rho)$  du matériau absorbeur et de l'énergie initiale  $E_0$  de l'électron. Elle reste constante tout au long de la trajectoire, d'où l'appellation Diffusion à Coefficient d'Atténuation Constant (DCAC).

Nous avons pris comme angle de déviation après chaque collision élastique, l'angle moyen de diffusion exprimé par la relation (5). Il restera constant en valeur absolue mais changera de signe aléatoirement.

**3.2 DIFFUSION À COEFFICIENT D'ATTÉNUATION DÉPENDANT DE L'ÉNERGIE (DCADE).** — Dans ce modèle nous proposons de suivre l'énergie de l'électron collision par collision. Le « *stopping power* » ou relation de Bethe (relation (2)) donne la perte d'énergie par unité de parcours. Si on considère que le libre parcours est la distance parcourue entre deux collisions, alors l'énergie perdue entre deux collisions est donnée par l'équation :

$$E(i+1) - E(i) = -\lambda_e(E(i)) \frac{dE}{ds}(E(i)). \quad (16)$$

En utilisant la relation (4) donnant l'expression du libre parcours en fonction de l'énergie, on obtient la perte d'énergie relative entre deux collisions :

$$\frac{\Delta E}{E} = 27 \frac{Z^{-1/3}}{E} \ln \left[ \frac{1,16 E}{I} \right] \quad (17)$$

où  $E$  est un keV.

Dans ce modèle, la perte d'énergie relative dépend alors de l'énergie de l'électron, d'où l'appellation Diffusion à Coefficient d'Atténuation Dépendant de l'Énergie (DCADE).

Pour éviter un nombre infini de collision, l'électron sera considéré comme absorbé par la matière si son énergie devient plus petite que l'énergie moyenne d'ionisation  $I$ . Cette condition est analogue à celle qu'utilise la notion de « *Bethe range* » dans la description géométrique (DCAC).

Dans cet algorithme DCADE, la valeur absolue de l'angle de déviation après chaque collision élastique varie en fonction de l'énergie, selon la relation (5) et changera de signe aléatoirement.

#### 4. Résultats.

Dans le tableau I, nous avons reporté les principaux types d'électrons réémis après la transition 14,4 keV du  $^{57}\text{Fe}$  et leurs paramètres de diffusion dans le fer [16].

Les valeurs de  $\lambda_e(E_0)$  et  $\langle \theta \rangle$  qui est l'angle moyen de diffusion, sont calculées à partir de la théorie BW1.

**4.1 FONCTION DE TRANSFERT.** — L'analyse des électrons rétrodiffusés passe par la connaissance de la probabilité pour qu'un électron émis à la profondeur  $x$  émerge à la surface, avec une énergie de sortie comprise entre  $E$  et  $E + dE$  et sous un angle compris entre  $\theta$  et  $\theta + d\theta$ . Cette probabilité d'émergence sera notée :

$$T(x, E, G) dE dG \quad (18)$$

avec

$$G = \cos \theta.$$

Pour une direction de sortie  $\theta$ , telle que  $G \in [G_1, G_2]$ , et une énergie de sortie  $E \in [E_1, E_2]$ , la probabilité d'émergence est donnée par l'intégrale :

$$T_{G, E}(x) = \int_{G_1}^{G_2} \int_{E_1}^{E_2} T(x, E, G) dE dG. \quad (19)$$

Dans la littérature, cette probabilité d'émergence est appelée *fonction de transfert* des électrons rétrodiffusés.

Tableau I. — Avec K = *Electron de conversion K* ; A = *Electron Auger (KLL)* ; L, M = *Electron de conversion L, M* ; XPE = *Photoélectron dû aux Rayons X* ; GPE = *Photoélectron dû aux Rayons gamma*.

[K = K-conversion electrons ; A = Auger electrons (KLL) ; L, M = L, M-conversion electrons ; XPE = electrons generated by X-ray photons in photoelectric effect ; GPE = electrons generated by  $\gamma$ -ray photons in photoelectric effect.]

Type	K	A	L, M	XPE	GPE
Energie initiale (keV)	7,3	5,4	13,6	$\leq 6,3$	$\leq 14,4$
Probabilité d'émission $C_i$	0,8	0,63	0,09	0,28	0,1
$r_B$ (Å)	3 331	2 058	9 363	—	—
$\lambda_e(E_0)$ (Å)	23,4	17,3	43,6	—	—
$\langle \theta \rangle$ (°)	15,6	17,5	12,2	—	—

Sur la figure 1 sont représentées les fonctions de transfert relatives aux électrons de type K, voir tableau I, obtenues par les algorithmes de simulation DCAC, DCADE, et par comparaison par LEB [12]. On constate que qualitativement les trois courbes donnent des résultats similaires.

Comme l'ont montré LEB, un ajustement par un polynôme d'ordre 2 reproduit assez bien les fonctions de transfert résultant de ces différentes simulations. En adoptant les notations utilisées par LEB, pour les électrons K, la fonction de transfert s'écrit :

$$T_{t,t}^K(x) = a \left( \frac{x}{r_B} \right)^2 + b \left( \frac{x}{r_B} \right) + c$$

pour  $0 \leq x \leq r_{\text{eff}}$  (20)

$$T_{t,t}^K(x) = 0$$

pour  $x \geq r_{\text{eff}}$

où  $x$  et  $r_{\text{eff}}$  sont respectivement la profondeur d'émission et la profondeur effective pour laquelle  $T_{t,t}^K(x) = 0$ . On utilise les indices  $(t, t)$  pour désigner une fonction de transfert relative aux électrons émergeant à la surface avec une énergie de sortie  $E \in [0, E_0]$  et un angle de sortie  $\theta \in [0, \pi]$ .

Le tableau II regroupe les coefficients  $a$ ,  $b$  et  $c$  obtenus par les différentes simulations, pour une énergie initiale  $E_0 = 7,3$  keV.

La fonction de transfert totale des électrons issus d'un processus de conversion interne, émis à une profondeur  $x$ , est la somme des probabilités d'émergence de chaque type d'électrons (voir Tab. I) :

$$T_{t,t}^{\text{tot}}(x) = T_{t,t}^c(x) + \hat{T}_{t,t}(x) \quad (21)$$

où  $T_{t,t}^c(x)$  et  $\hat{T}_{t,t}(x)$  sont respectivement les contributions des électrons de conversion et de photoélectrons XPE et GPE.

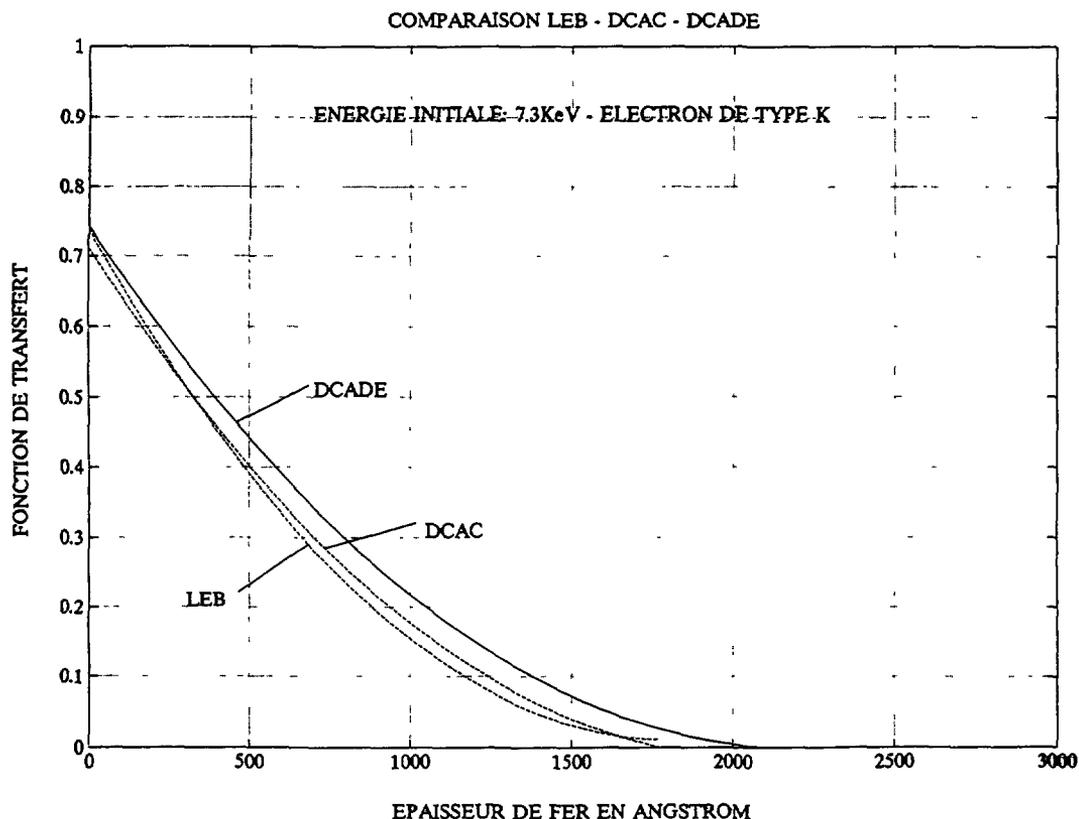


Fig. 1. — Fonctions de transfert relatives aux électrons de type K, obtenues par les différents algorithmes de simulation DCADE, DCAC, et pour comparaison LEB [12].

[Transfer function for K-type electrons, calculated by the algorithms DCADE, DCAC and compared to the LEB algorithm [12].]

Tableau II. — Coefficients du polynôme générateur obtenus par les différentes simulations.

[Coefficients of the generating polynomials for different simulation models.]

	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
DCAC	1,9	- 2,3	0,71
DCADE	1,3	- 2,0	0,74
LEB [12]	2,5	- 2,7	0,74

L'émission d'un électron primaire de conversion est accompagnée de l'émission d'un électron Auger ou de rayon X. Ainsi, il existe des paires d'électrons (électron de conversion K et électron Auger (KLL)) qui, arrivant à la surface du matériau, ne peuvent être distingués d'un

électron ayant pour énergie la somme des énergies  $E_K + E_A$  [17]. En tenant compte de cet effet de paire, la fonction  $T^e(x)$  peut s'écrire comme :

$$T^e(x) = c_K T_{t,t}^K(x) + c_A T_{t,t}^A(x) - c_A T_{t,t}^A(x) T_{t,t}^K(x) + c_L T_{t,t}^L(x) \quad (22)$$

où les coefficients  $c_i$  sont les probabilités d'émission de chaque type d'électrons (Tab. I). Le terme croisé,  $T_{t,t}^A(x) T_{t,t}^K(x)$ , représente l'effet de paire.

Une analyse de la fonction de transfert  $\hat{T}_{t,t}(x)$  des électrons secondaires (les photoélectrons XPE et GPE) a été proposée par LEB [12] et corrigée par Deeney et McCarthy [17]. L'analyse corrigée prévoit que dans un échantillon semi-infini et homogène de fer, les contributions de ces photoélectrons soient de l'ordre de 5 % du signal total (voir Tab. III).

Tableau III. — Contributions des différents types d'électrons.

[Contributions of different electrons types.]

Type	$N_{t,t}^i(\infty)/N_{t,t}^{\text{tot}}(\infty)$		
	DCAC %	DCADE %	LEB %
Electrons K + Electrons A (KLL)	59,31	58,84	58,28
Electrons LM	19,44	19,70	19,38
XPE	2,90	2,56	3,10
GPE	2,80	2,40	2,80
Electrons paires	15,55	16,50	16,44

4.2 COMPARAISON AVEC L'EXPÉRIENCE. — Nous avons comparé nos résultats avec les expériences de Tricker *et al.* [9] et de Swanson et Spijkerman [10]. Ces expériences consistent à déposer des couches minces ( $d \leq 3\,000 \text{ \AA}$ ) de fer pur sur un substrat d'acier inoxydable. Les signatures des deux couches étant différentes, on distingue aisément les signatures hyperfines des deux contributions : un singulet pour l'inox et un sextuplet Zeeman pour le fer. On peut donc, en fonction de l'épaisseur  $d$  de la couche de fer, tracer la contribution du signal provenant de l'inox, rapporté au signal total :

$$J(d) = \frac{I_{\text{inox}}}{I_{\text{Fe}} + I_{\text{inox}}} = \frac{I_{\text{inox}}}{I_{\text{total}}} \quad (23)$$

où  $I_{\text{inox}}$  et  $I_{\text{Fe}}$  sont respectivement les intensités des signaux issus de l'inox et du fer.

Dans l'hypothèse de l'absorbeur homogène où la désexcitation du  $^{57}\text{Fe}$  est indépendante de la profondeur, ce rapport est donné par celui des intégrales [16].

$$J(d) = \frac{\int_d^\infty T_{t,t}^{\text{tot}}(x) dx}{1,5 \int_0^d T_{t,t}^{\text{tot}}(x) dx + \int_d^\infty T_{t,t}^{\text{tot}}(x) dx} \quad (24)$$

où le coefficient 1,5 devant la contribution du fer est dû à la différence de densité d'atomes résonnants dans chaque matériau [9].

La figure 2 représente la comparaison des calculs par simulations du rapport  $J(d)$  avec les points expérimentaux. Ces courbes sont calculées avec les coefficients du polynôme générateur des fonctions de transfert relatif à chaque modèle de simulation. On retrouve l'accord qualitatif entre les trois simulations DCAC, DCADE et celle de LEB. On constate un accord satisfaisant entre les trois résultats des simulations et les points expérimentaux.

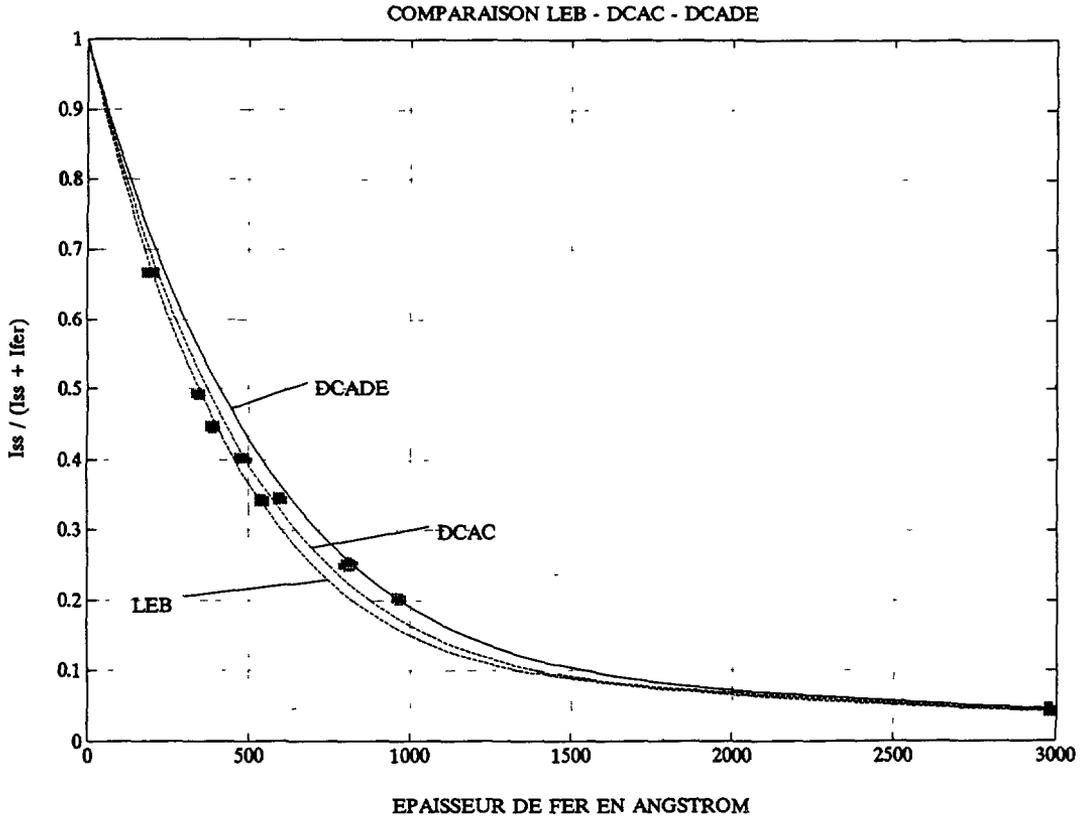


Fig. 2. — Contribution du signal provenant de l'inox par rapport au signal total (voir relation (23)).  $I_{\text{inox}}$  et  $I_{\text{Fe}}$  sont respectivement les intensités des signaux issus de l'inox et du fer. Les courbes en continu sont calculées avec les coefficients du polynôme générateur des fonctions de transfert relatives à chaque modèle de simulation (voir Tab. II). Les points expérimentaux ont été obtenus par Tricker *et al.* [9] et par Swanson et Spijkerman [10].

[The isolated contribution of the stainless steel thin film normalized with respect to the total signal (see Eq. (23)).  $I_{\text{inox}}$  and  $I_{\text{Fe}}$  are signals from stainless and iron respectively. The theoretical curves are calculated using the coefficients of the generating polynomials which correspond to the different simulation models (see Tab. II); the experimental points are from reference [9, 10].]

D'un point de vue quantitatif, les contributions de chaque type d'électrons au signal total peuvent être évaluées par le rapport  $N_{t,t}^i(\infty)/N_{t,t}^{\text{tot}}(\infty)$ , où  $N_{t,t}^i(\infty)$  représente la probabilité totale pour qu'un électron de type  $i$  émerge à la surface de l'échantillon. Le tableau III regroupe ces contributions (en pourcentages) obtenues par les différentes simulations.

On retrouve dans les résultats de DCAC et DCADE la contribution de l'ordre de 5 % de XPE et GPE prévue par l'analyse de Deeney et McCarthy [17].

### 5. Conclusions.

Nous avons effectué deux simulations des trajectoires électroniques dont les résultats sont en bon accord avec les expériences par ICEMS. La première simulation DCAC, basée sur un critère géométrique, est analogue à celle effectuée par LEB [11, 12]. La deuxième simulation (DCADE), tient compte de la variation d'énergie le long de la trajectoire. La loi de Bethe que nous avons utilisée intègre les processus inélastiques, résonnants où non. Cette méthode permet de suivre à chaque étape la position et l'énergie de l'électron pour, le cas échéant, être appliquée à l'étude des matériaux en couches. Toutefois l'utilisation de ce modèle ne permet que la description des effets moyens du transport des électrons rapides à travers la matière.

### Remerciements.

Nous remercions Mrs K. Maschke de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne et J. P. Eymery de l'Université de Poitiers pour leurs conseils.

### Bibliographie

- [1] TRICKER M. J., THOMAS J. M. et WINTERBOTTOM P., *Surf. Sci.* **45** (1974) 601.
- [2] FRIEDT J. M., Techniques de l'ingénieur, Spectrométrie des vibrations et des particules, « Applications récentes de la Spectrométrie Mössbauer. Cas de la géométrie de diffusion », pp. 2608-1-2608-11.
- [3] BETHE H. A., ROSE M. E. et SMITH L. P., *Am. Philos. Soc.* **78** (1938) 573.
- [4] BOTHE W., *Z. Phys.* **5** (1921) 63 ; *Z. Phys.* **54** (1929) 161 ; *Handbook of Phys., Lpz* **2212** (1933) 1 (Berlin Springer) ; *Ann. Phys., Lpz* **6** (1949) 44.
- [5] COSSLETT V. E. et THOMAS R. N., *Brit. J. Appl. Phys.* **15** (1964) 883.
- [6] KRAKOWSKI R. A. et MILLER R. N., *Nucl. Instrum. Methods* **100** (1972) 93.
- [7] BAINBRIDGE J., *Nucl. Instrum. Methods* **128** (1975) 531.
- [8] HUFFMAN G. P., *Nucl. Instrum. Methods* **137** (1976) 267.
- [9] TRICKER M. J., THOMAS J. M. et WINTERBOTTOM P., *J. Chem. Soc. Faraday II* **71** (1975) 1708.
- [10] SWANSON K. R. et SPIUKERMAN J. J., *J. Appl. Phys.* **41** (1970) 3155.
- [11] LILJEQUIST D., *J. Phys. D : Appl. Phys.* **11** (1978) 839.
- [12] LILJEQUIST D., EKDHAL T. et BÄVERSTAM V., *Nucl. Instrum. Methods* **155** (1978) 529.
- [13] LILJEQUIST D., SALVAT F., MAYOL R. et MARTINEZ J. D., *J. Appl. Phys.* **65** (1989) 2431.
- [14] BETHE H. A., *Handbook of Physics* **24** (1933) 273 (Berlin Springer).
- [15] BIRKOFF R. D., *Handbook of Phys.*, « The passage of fast electron through matter » (1957) 53 (Berlin Springer).
- [16] RANDRIANANTOANDRO N., Thèse de Docteur de l'Université du Maine (Le Mans 1991).
- [17] DEENEY F. A. et MCCARTHY J. P., *Nucl. Instrum. Methods* **155** (1978) 529.
- [18] LILJEQUIST D., SALVAT F., MAYOL R. et MARTINEZ J. D., *Nucl. Instrum. Methods* **179** (1981) 617.