

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE SAAD DAHLAB BLIDA 1



Faculté des Sciences

Département de Physique

Mémoire de fin d'études

en vue de l'obtention du diplôme de Master académique en Physique

Option : Physique des Rayonnements

Thème :

**Etude du pouvoir d'arrêt électronique pour
des ions lourds en utilisant le modèle de Bohr
réajusté.**

Préparé par : BENYOUCEF Aymen et DEHILI Eriane

Soutenu Publiquement le : 12 -10-2022 devant le jury composé de :

Mr.A.Mouzali	MCB	USDB.1	Président
Mr.A.Guesmia	MCA	USDB.1	Encadreur
Mr.M.Chekirine	MCB	USDB.1	Examineur
Mme.A.Cherfi	MCA	USDB.1	Examinatrice

Année universitaire 2021/2022

Remercîments

Nous remercions ALLAH tout puissant qui nous a donné la force et la volonté pour pouvoir finir nos années universitaires ainsi que ce mémoire.

Tout d'abord, ce travail ne saurait être aussi riche et n'aurait pas vu

le jour sans l'aide et l'encadrement de :Dr Abdalkader Guesmia,

Aussi nous tenons bien le remercier

Pour tous ses remarques et ses encouragements.

Nous tenons à exprimer toutes nos reconnaissances à Monsieur

Aziz Mouzali le président du jury

Nous adressons nos sincères remerciements à tous les professeurs

qui ont accepté l'invitation pour évaluer notre humble travail

bien entendu leurs préoccupations, Monsieur Mamoun Chekirine

et Madame Amel Cherfi

Merci encore une fois

Nous souhaitons remercier les enseignants du Laboratoire

Physique Théorique et Interactions Rayonnement Matière au

niveau de l'université Saad Dahleb.

Dédicace

A l'aide d'Allah, le tout puissant, nous avons pu Réaliser ce travail que je dédie :

En témoignage de ma reconnaissance

A mes très chers parents

A tous les membres de ma famille

À tous mes chers amis, collègues et enseignants.

A tous ceux qui aiment la physique

Aymen

Dédicace

A mes parents Mohamed et Aïcha.

Vous vous êtes dépensé pour moi sans compter. En reconnaissance de tous les sacrifices consentis par vous et pour me permettre d'atteindre cette étape de ma vie.

Mes adorable sœurs et frères :

*Kaouter; Ghoufrane; Fatihat- El khir; Meriem; Abed Ssamia et
Mohamed Abed basir.*

*Aux personnes les plus proches de mon cœur Amouna et Mima,
merci pour tout ce que vous avez fait pour moi.*

*Merci à mes amis pour tout le soutien qu'ils m'ont apporté
et cela depuis 8ans, nous avons grandi ensemble et je souhaite du
fond du cœur que nos chemins ne se séparent jamais même avec
les années qui passent.*

A Groupe Scout Mahali Cherifa

*A quelques personnes qui nous ont parfois fait vivre un
cauchemar, mais grâce à elles j'ai appris que la vie n'était pas
faite de fleurs et qu'il ne fallait jamais douter de mes
compétences et surtout, qu'après s'être agenouillé par terre on
peut se lever et bouger vers l'avant, la tête haute.*

*A mon binôme : Aymen qui m'a accompagné tout au long de
université.*

Eriane

ملخص

في الأونة الأخيرة، تم نشر نهج تحليلي عام لقدرة الإيقاف الإلكترونية للأيونات الثقيلة ذات الصلة بالطاقات غير النسبية في مجلة الفيزياء المرموقة " Physics Letters A 2020 " [Gue-2020]. هذا النهج المعروف باسم "نموذج بور المعدل" ، يعتمد على مزيج من نهجين عبر مفهوم احتمالي. في هذا النهج، يتم التعامل مع التصادمات البعيدة بواسطة نموذج فيرسوف ويتم معالجة التصادمات القريبة بواسطة نموذج بور. طبقنا هذا النموذج على أزواج الأهداف الأيونية التالية :



تمت مقارنة النتائج التي تم الحصول عليها مع نموذج باث ونموذج بور ونموذج فيرسوف والبيانات التجريبية الحالية [AIEA-2022] والقيم التي تم الحصول عليها بواسطة برنامج SRIM-2013. سمحت لنا هذه المقارنة برؤية أن النماذج النظرية لقوة الإيقاف الإلكترونية صالحة فقط لمجموعة من الطاقات (إما بسرعات منخفضة كما هو الحال في فيرسوف [Fir-1958]، أو بسرعات عالية كما هو الحال في بور و باث [Boh-1913, Bet-1930]). من ناحية أخرى، فإن نموذج بور المعدل يعيد إنتاج شكل قوة الإيقاف الإلكترونية بشكل جيد في المناطق الثلاث (السرعة العالية، السرعة المنخفضة والسرعة المتوسطة) ويعيد إنتاج البيانات التجريبية للمنطقتين العالية والمنخفضة.

في السرعات المتوسطة، وجدنا أن القيم المحسوبة بواسطة نموذج بور المعدل أعلى بكثير من البيانات التجريبية (16%-50%). يتم تفسير هذا الانحراف في المنطقة الوسطى من خلال حقيقة أن مصطلح التداخل السلبى قد تم إهماله.

أخيرًا، في ضوء الجوانب المقارنة التي تمت ملاحظتها، يمكن تحسين نهج بور المعدل بإضافة مصطلح التداخل السلبى الذي تم إهماله أو عن طريق تحسين الاحتمالات P_L و P_h أو عن طريق تعديل نموذج فيرسوف.

Résumé :

Récemment, une approche analytique générale du pouvoir d'arrêt électronique des ions lourds dans la matière pour des énergies non relativistes a été publiée dans le prestigieux journal de physique « Physics Letters A 2020 » [Gue-2020]. Cette approche qu'on appelle « modèle de Bohr réajusté » est fondée sur la combinaison de deux approches via un concept probabiliste. Dans cette approche les collisions lointaines sont traitées par le modèle de Firsov et les collisions proches sont traitées par le modèle de Bohr. Nous avons appliqué ce modèle aux couples ion-cible suivants :



Les résultats obtenus ont été comparés avec les modèles de Bethe, Bohr, Firsov, les données expérimentales existantes [AIEA-2022], et les valeurs obtenues par le code semi-empirique SRIM-2013. Cette comparaison nous a permis de voir que les modèles théoriques du pouvoir d'arrêt électronique sont valables uniquement sur une gamme d'énergies (soit à basses vitesses, tel est le cas de Firsov [Fir-1958], soit à hautes vitesses, tel est le cas de Bohr et de Bethe [Boh-1913, Bet-1930]). Par contre le modèle de Bohr réajusté reproduit bien la forme du pouvoir d'arrêt électronique dans les trois régions (haute vitesse, faible vitesse et vitesse intermédiaire) et reproduit pratiquement les données expérimentales des deux zones hautes et basses vitesses. Aux vitesses intermédiaires, nous avons constaté que les valeurs calculées par le modèle de Bohr réajusté sont nettement supérieures aux données expérimentales (16%-50%). Cette déviation dans la zone intermédiaire est interprétée par le fait que le terme négatif de recouvrement a été négligé.

Enfin, à la lumière des aspects comparatifs observés, l'approche de Bohr réajusté peut être améliorée en introduisant le terme de recouvrement ou en améliorant les probabilités P_H ou P_L ou en modifiant le modèle de Firsov.

Abstract:

Recently, a general analytical approach to the electronic stopping power of heavy ions in matter for non-relativistic energies has been published in the prestigious physics journal “Physics Letters A 2020” [Gue-2020]. This approach, known as the "re-adjusted Bohr model", is based on the combination of two approaches via a probabilistic concept. In this approach the distant collisions are treated by the Firsov model and the close collisions are treated by the Bohr model. We applied this model to the following ion-target pairs:

$^{16}\text{O} - ^{12}\text{C}$, $^{12}\text{C} - ^{12}\text{C}$, $^{35}\text{Cl} - ^{12}\text{C}$, $^{84}\text{Kr} - ^{20}\text{Ne}$, $^{84}\text{Kr} - ^{27}\text{Al}$, $^{84}\text{Kr} - ^{28}\text{Si}$ and $^{56}\text{Fe} - ^{28}\text{Si}$.

The results obtained were compared with the Bethe model, the Bohr model, the Firsov model, the existing experimental data [AIEA-2022], and the values obtained by the semi-empirical code SRIM-2013. This comparison has allowed us to see that the theoretical models of the electronic stopping power are valid only on a range of energies (either at low speeds as is the case of Firsov [Fir-1958], or at high speeds as is the case of Bohr and Bethe [Boh-1913, Bet-1930]). On the other hand, the re-adjusted Bohr model reproduces well the shape of the electronic stopping power in the three regions (high speed, low speed and intermediate speed) and practically reproduces the experimental data of the two high and low speed zones. At intermediate speeds, we found that the values calculated by the re-adjusted Bohr model are significantly higher than the experimental data (16%-50%). This deviation in the intermediate zone is interpreted by the fact that the negative overlap term has been neglected.

Finally, in the light of the comparative aspects observed, the adjusted Bohr approach can be improved by introducing the recovery term or by improving the probabilities P_H and P_L or by modifying the Firsov model.

Sommaire

Introduction générale	1
------------------------------------	----------

CHAPITRE I : Notions fondamentales sur l'interaction ion-matière

1. Phénomènes de ralentissement des particules chargées dans la matière.....	2
2. Paramètres physiques décrivant le ralentissement	3
3. Motivation de l'étude des paramètres de ralentissement des ions dans la matière	5
3.1. L'analyse atomique et nucléaire par faisceau d'ions.....	5
3.2. Radioprotection	6
3.3. Micro-électronique	6
3.4. Radiothérapie.....	7
3.a. Manque des données expérimentales du pouvoir d'arrêt	7
3. b. Dispersion des données expérimentales	8
3. c. Écart entre les théories existantes et les données expérimentales du pouvoir d'arrêt.....	8
4. Aperçu sur le développement du pouvoir d'arrêt	9
4.1. Zone de hautes vitesses : $(v \gg Z_1^{\frac{2}{3}} v_0)$	9
4.2. Zone intermédiaire $(v \approx Z_1^{\frac{2}{3}} v_0)$	10
4.3. Zone de basses vitesses $(v \ll Z_1^{\frac{2}{3}} v_0)$	10
4.4. Historique	11

CHAPITRE II : Théorie du pouvoir d'arrêt

1. Expression générale du pouvoir d'arrêt	12
2. Le modèle de Bohr	13
2.1 Introduction	13
2.2 Collisions proches	13
2.3 Collisions lointaines	16
2.4 Potentiel d'ionisation moyen	21
3. L'approche quantique de Bethe	21
4. Le modèle de Firsov	22

4.1 Image de Firsov de la perte d'énergie à basse énergie.....	22
4.2 Le modèle de Firsov	23
5- Le modèle de Bohr réajusté.....	25
6. Le logiciel de calcul numérique SRIM.....	28
6.1 Déroulement d'une simulation	28

CHAPITRE III : Résultats et discussions

1. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{16}O dans ^{12}C	31
2. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{12}C dans ^{12}C	33
3. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{35}Cl dans ^{12}C	33
4. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{84}Kr dans ^{20}Ne	35
5. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{84}Kr dans ^{28}Si	36
6. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{84}Kr dans ^{27}Al	37
7. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{56}Fe dans ^{28}Si	38
8. Calcul des déviations des modèles théoriques étudiées.....	39
8.1 Cas de l'ion ^{16}O dans la cible de ^{12}C	40
8.2 Cas de l'ion (^{12}C dans de ^{12}C , ^{35}Cl dans ^{12}C , ^{84}Kr dans ^{28}Si et ^{27}Al , ^{56}Fe dans ^{28}Si).....	41
Conclusion	45
Références	47

LISTE DES FIGURES

Fig.1 : Processus inélastiques pendant l'interaction projectile chargé – atome.....	2
Fig.2 : Schéma de l'effet Auger	3
Fig.3: Schéma reprenant le principe de ralentissement de la vitesse de l'ion énergétique E traversant l'épaisseur de Δx . ΔE est la perte d'énergie moyenne, σ_2 et σ_1 l'écart-type de la distribution du faisceau d'ions avant et après avoir traversé la cible respectivement.....	4
Fig.4 : Energie en fonction de la profondeur de pénétration de l'ion incident.....	5
Fig.5: Pouvoir d'arrêt électronique en fonction de l'énergie des ions ^{12}C dans Al_2O_3 , mesuré par un groupe de recherche de trois laboratoires différents	8
Fig.6 :le pouvoir d'arrêt électronique en fonction de l'énergie incidente du carbone dans l'or compare avec la théorie LSS ainsi que le code SRIM-2010.....	9
Fig.7 Variation du pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie du projectile	11
Fig.8 : Interaction élémentaire ion projectile-électron cible par la diffusion de Rutherford.....	14
Fig.9 : Interaction élémentaire ion projectile-électron orbital.....	16
Fig.10 : Géométrie de la perte d'énergie à basse énergie selon le modèle de Firsov....	22
Fig.11 : Schéma illustrant le plan de Firsov séparant les régions d'action des potentiels de l'ion et de l'atome dans le modèle de Firsov de perte d'énergie électronique.....	23
Fig.12: pouvoir d'arrêt de l'ion ^{16}O dans ^{12}C en fonction de la vitesse réduite v/v_0 ...	32
Fig.13: pouvoir d'arrêt de l'ion ^{12}C dans ^{12}C en fonction de la vitesse réduite v/v_0 ...	33
Fig.14: pouvoir d'arrêt de l'ion ^{35}Cl dans ^{12}C en fonction de la vitesse réduite v/v_0 ...	34
Fig.15: pouvoir d'arrêt de l'ion ^{84}Kr dans ^{20}Ne en fonction de la vitesse réduite v/v_0 ...	35
Fig.16: pouvoir d'arrêt de l'ion ^{84}Kr dans ^{28}Si en fonction de la vitesse réduite v/v_0 ...	37
Fig.17: pouvoir d'arrêt de l'ion ^{84}Kr dans ^{27}Al en fonction de la vitesse réduite v/v_0 ...	38
Fig.18 : pouvoir d'arrêt de l'ion ^{56}Fe dans ^{28}Si en fonction de la vitesse réduite v/v_0 ...	39

Liste des Tableaux :

Tableau.1 : Le nombre de fichiers de données disponibles en octobre 2014.....	7
Tableau.2 : les résultats de pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ^{16}O dans la cible de ^{12}C , aux énergies comprises entre (0.019-30 Mev/u)	41
Tableau.3 : les résultats de pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ^{12}C dans la cible de ^{12}C , aux énergies comprises entre (0.05-20 Mev/u).....	42
Tableau.4 : les résultats de pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ^{35}Cl dans la cible de ^{12}C , aux énergies comprises entre (0. 1-20 Mev/u)	42
Tableau.5 : les résultats de pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ^{84}kr dans la cible de ^{28}Si , aux énergies comprises entre (0.35-48 MeV/u).....	43
Tableau.6 : les résultats de pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ^{84}Kr dans la cible de ^{27}Al , aux énergies comprises entre (0.2- 35 Mev/u).....	43
Tableau.7 : les résultats de pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ^{56}Fe dans la cible de ^{28}Si , aux énergies comprises entre (0.19 - 45 MeV/u).....	44

Liste des abréviations :

RBS : Spectroscopie de rétrodiffusion Rutherford.

PIXE : Analyses par faisceaux d'ions et émission induite de rayon X.

ERDA : Analyse de détection de recul élastique.

C.M: Centre de Masse.

SRIM: Stopping and Range of Ions in Matter.

TRIM: Transport of Ions in Matter.

AIEA : Agence internationale de l'énergie atomique.

P_H : Probabilité pour que l'ion soit complètement épluché de ses électrons.

P_L : Probabilité pour que les électrons soient liés à l'ion projectile.

Introduction générale

Le pouvoir d'arrêt est une grandeur physique fondamentale qui caractérise le phénomène du ralentissement, il est défini comme étant la perte d'énergie par unité de parcours des particules chargées dans la matière. Cette perte d'énergie est essentiellement due aux chocs coulombiens avec les électrons du milieu ralentisseur.

Les mesures de la perte d'énergie des particules chargées sont très importantes dans de nombreux domaines scientifiques, notamment dans les expériences de physique nucléaire, en physique médicale (radiothérapie), l'analyse des dommages créés par les rayonnements (radiation damage), la radioprotection, l'analyse des matériaux avec des faisceaux d'ions, dans le processus d'implantation ionique. Elles sont aussi d'un grand intérêt d'un point de vue fondamental et fournissent d'importantes informations concernant les propriétés physiques des matériaux traversés.

Bien que l'étude théorique et expérimentale du pouvoir d'arrêt a débuté depuis le début du XXe siècle [Zie-2008, Zie-1977, Nor-1963], elle reste encore insuffisante, en particulier aux basses et intermédiaires énergies. De ce fait, une récente approche analytique du pouvoir d'arrêt et sans paramètre ajustable a été développée par A. Guesmia et Al [Gue-2020]. Cette approche (appelé modèle de Bohr réajusté) valable pour des énergies non relativiste combine le modèle de Bohr et le modèle de Firsov via un formalisme probabiliste.

Notre travail consiste à étudier le modèle de Bohr réajusté et l'appliquer aux différents couples ion-cible ($^{16}\text{O}-^{12}\text{C}$, $^{12}\text{C}-^{12}\text{C}$, $^{35}\text{Cl}-^{12}\text{C}$, $^{84}\text{Kr}-^{20}\text{Ne}$, $^{84}\text{Kr}-^{28}\text{Si}$, $^{84}\text{Kr}-^{27}\text{Al}$ et $^{56}\text{Fe} - ^{28}\text{Si}$) pour des énergies non relativistes. Nous allons aussi comparer les résultats obtenus avec les données expérimentales ainsi que quelques théories existantes (Bohr, Firsov, Bethe, Simulation SRIM).

Le manuscrit est composé de trois chapitres suivis de deux appendices contenant quelques précisions de calcul. Le présent chapitre est une introduction générale au domaine de l'interaction ion-matière. La description détaillée des modèles du pouvoir d'arrêt utilisés dans ce travail sont présentés dans le chapitre II, en particulier, le modèle de Bohr réajusté [Gue-2020]. Dans le chapitre III, nous présenterons les résultats obtenus par le modèle de Bohr réajusté et leurs comparaisons avec les données expérimentales [AIEA-2022] ainsi que le modèle de Bohr et de Bethe. Enfin, nous présenterons quelques conclusions et perspectives pour la suite de ce travail.

CHAPITRE I :

Notions fondamentales sur l'interaction ion-matière

CHAPITRE I

Notions fondamentales sur l'interaction ion-matière

1. Phénomènes de ralentissement des particules chargées dans la matière.

Lorsqu'une particule chargée énergétique avec une grande vitesse pénètre dans la matière, elle interagit avec les atomes du milieu ralentisseur. Suite à cette interaction, la particule chargée perd une partie ou la totalité de son énergie par plusieurs processus, tout dépend du type et de l'énergie de la particule incidente ainsi que les caractéristiques du milieu ralentisseur. Les processus de ralentissement des particules chargées dans la matière peuvent se résumer essentiellement en :

- a) Interaction avec les électrons qui se traduit par excitation ou ionisation de l'atome cible (voir Fig.1).

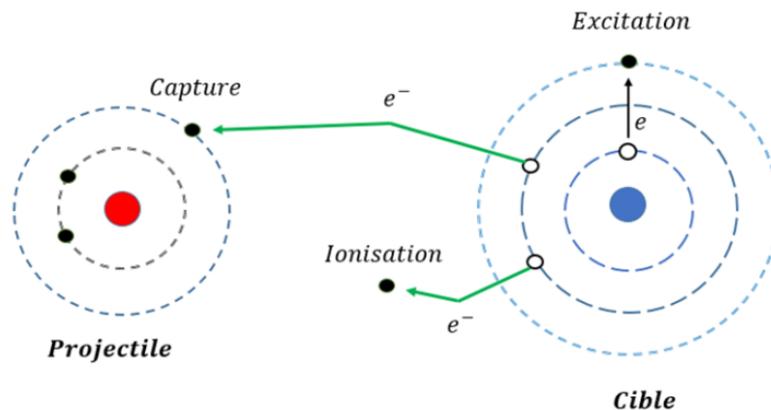


Fig.1 : Processus inélastiques pendant l'interaction projectile chargé – atome

- b) Echange de charge : Pour des vitesses de projectile de l'ordre de quelques v_0 (où v_0 =vitesse de Bohr), lors du passage d'une particule chargée dans la matière, les nuages électroniques s'interpénètrent et donnent lieu à des transferts des électrons d'un atome à l'autre. Ces échanges de charges s'accompagnent d'émission d'électrons (électron Auger) [Aug-1923] et de transfert d'énergie (voir Fig.2).

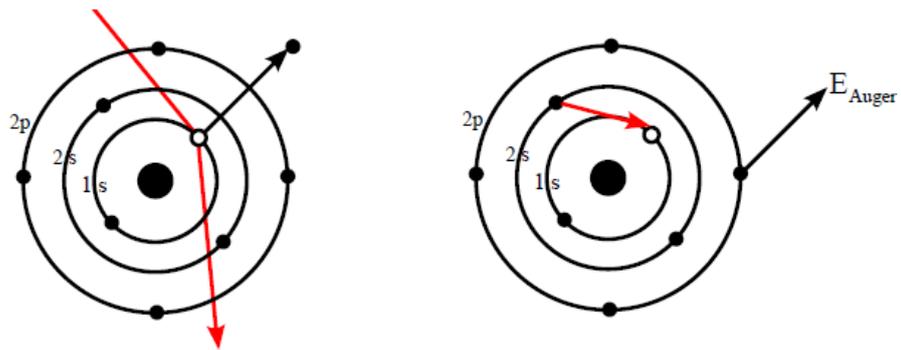


Fig.2 : Schéma de l'effet Auger [Aug]

- c) Lorsque la vitesse de l'ion incident est relativement grande permettant au paramètre d'impact d'être petit devant les dimensions atomiques, l'ion pénètre dans le nuage électronique et il peut y avoir interaction ion-électrons.
- d) Quand la vitesse de l'ion est faible, la distance minimum d'approche est comparable aux distances atomiques et l'interaction a lieu avec le noyau partiellement écranté par ses électrons. ce type d'interaction donne lieu à ce que l'on appelle communément pertes d'énergies nucléaires.
- e) A des grandes vitesses de la particule incidente il peut y avoir réaction Nucléaire : La particule atteint la matière nucléaire de la cible et peut alors éloigner ou bien produire une excitation du noyau cible. Du fait que les sections efficaces sont généralement très faibles dans le domaine d'énergie où nous travaillons, cette interaction sera négligée dans notre travail.
- f) Rayonnement de freinage : Ce processus n'intervient que pour les particules relativistes et sera donc ignoré dans notre étude.

2. Paramètres physiques décrivant le ralentissement

Quantitativement la compréhension du phénomène de ralentissement des ions lourds dans la matière est décrite par deux paramètres physiques. Le premier paramètre est la perte d'énergie moyenne par unité de longueur du milieu ralentisseur appelé alternativement, le pouvoir d'arrêt, stopping power, ou stopping force. Le second paramètre est la déviation standard de la distribution de la perte d'énergie appelé « Straggling in energy » ou simplement « energy Straggling ».

Quand la perte d'énergie relative est entre 10% et 40%, la distribution de la perte d'énergie ΔE est approximativement une Gaussienne avec la variance σ^2 [Smi-1997]. La définition des paramètres fondamentaux décrivant le ralentissement des ions dans la matière est représentée sur la Fig.3. Quand un faisceau d'ions d'énergie E et de variance σ_2^2 traverse une distance Δx dans la matière, il perd une fraction de son énergie, ΔE , accompagnée d'un étalement de l'énergie incident après la traversée de la longueur Δx . La définition explicite des deux paramètres est comme suit :

Le pouvoir d'arrêt est :

$$S = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta E}{\Delta x} = \frac{dE}{dx} \quad (I.1)$$

Énergie de Stragglng est [Sig-2006] :

$$\sigma = \sqrt{\sigma_1^2 - \sigma_2^2} \quad (I.2)$$

Où σ_1 , σ_2 sont respectivement la déviation standard du faisceau d'ions avant et après la traverse de la cible.

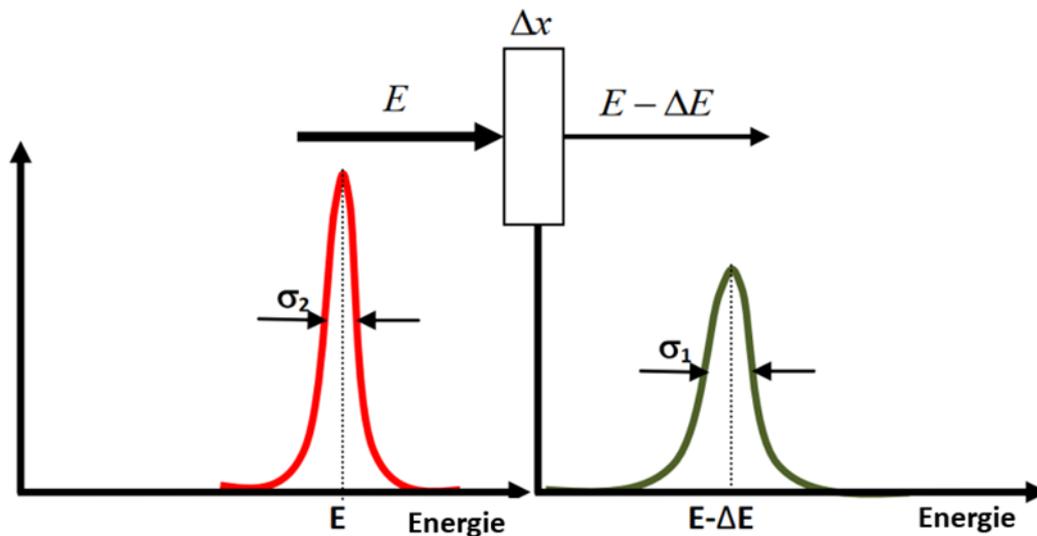


Fig.3 : Schéma reprenant le principe de ralentissement de la vitesse de l'ion énergétique E traversant l'épaisseur de Δx . ΔE est la perte d'énergie moyenne, σ_2 et σ_1 l'écart-type de la distribution du faisceau d'ions avant et après avoir traversé la cible respectivement [Gue-2016].

Remarque :

Le phénomène de fluctuation des parcours dues aux collisions électroniques des particules chargées traversant une épaisseur matérielle provoque une dispersion en énergie du faisceau, même si ce dernier est à l'origine monocinétique ($\sigma_1 > \sigma_2$).

Il est utile de noter, qu'à partir du pouvoir d'arrêt $\frac{dE}{dx}$, on peut en déduire l'énergie $E = E(E_0, x)$ de l'ion en fonction de la profondeur de pénétration x (voir Fig.4).

$$S(E) = \frac{dE}{dx} \Rightarrow dx = \frac{dE}{(E)} \Rightarrow \int_{x_0}^x dx = \int_{E_0}^E \frac{dE}{S(E)} \quad (I.3)$$

$E = E(E_0, x)$ est obtenue par intégration de l'équation précédente suivié par la résolution de l'équation de E en x .

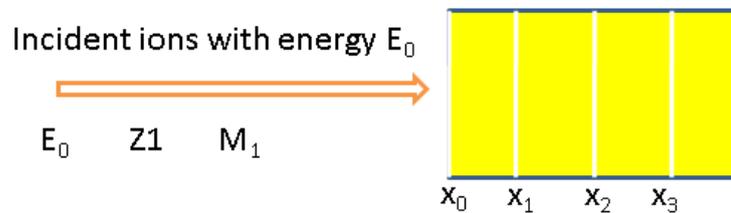


Fig.4 : Energie en fonction de la profondeur de pénétration de l'ion incident.

La profondeur maximale de pénétration R (appelé parcours) de l'ion dans la matière s'en déduit

$$R = \int_0^E \frac{1}{\frac{dE}{dx}} dE \quad (1.4)$$

3. Motivation de l'étude des paramètres de ralentissement des ions dans la matière

Avant d'introduire l'objet de notre travail, il est utile de répondre à la question suivante : pourquoi intéressons-nous à l'étude du pouvoir d'arrêt ?

Outre l'aspect fondamental de l'étude du ralentissement des ions dans la matière, la connaissance précise du pouvoir d'arrêt est nécessaire pour plusieurs applications des faisceaux d'ions tel que : L'analyse atomique et nucléaire par faisceau d'ions, la radioprotection, l'implantation ionique, la microélectronique, et la radiothérapie etc.

i) L'analyse atomique et nucléaire par faisceau d'ions : le pouvoir d'arrêt et la dispersion d'énergie sont des paramètres critiques et indispensables pour les

techniques d'analyse des couches minces par faisceau d'ions. En effet les données de ces paramètres sont utilisées dans pratiquement toutes les techniques d'analyse atomique et nucléaires par faisceau d'ions (RBS, PIXE, ERDA...). Ainsi, la validité des résultats d'une technique dépend de la précision des données du pouvoir d'arrêt et du Straggling. Pour comprendre l'influence du pouvoir d'arrêt sur une technique d'analyse atomique ou nucléaire nous citons à titre d'exemple la technique Rétrodiffusion spectrométrie (RBS). La technique RBS consiste à mesurer le nombre d'ions rétrodiffusés en fonction de leur énergie [Chu-1978]. La déduction du profil de concentration des éléments constituant la cible (l'échantillon) nécessite l'introduction des valeurs précises du pouvoir d'arrêt [Nou-2010, Chu-1978]. En effet, les particules incidentes perdent de l'énergie au fur et à mesure qu'elles pénètrent dans la matière. A une profondeur x et avant collision, l'énergie de l'ion incident peut être exprimée par la formule suivante [Nou-2010] :

$$E_x = E_o - \int_0^x \frac{dE}{dx} dx \quad (I.5)$$

où :

$\int_0^x \frac{dE}{dx} dx$: représente l'énergie perdue sur la distance (x), au cours du trajet aller.

E_0 : L'énergie initiale de la particule incidente.

ii) Radioprotection : Afin de se protéger contre les particules chargées des réacteurs et des accélérateurs nucléaires, nous avons besoin de construire des blindages autour de ces appareils. La conception et le choix de ces blindages sont basées sur la connaissance précise du pouvoir d'arrêt.

iii) Micro-électronique : Le développement exponentiel de l'industrie des composants microélectroniques a créé un besoin constant de nouveaux matériaux spécifiques. Pour obtenir les propriétés électroniques requises, certaines impuretés doivent être plantées dans certains matériaux à une profondeur appropriée. Les faisceaux d'ions actifs peuvent être utilisés comme outil pour ajouter ces impuretés. La détermination précise du pouvoir d'arrêt et du pouvoir de dispersion produit la puissance exacte nécessaire pour placer les impuretés spécifiques à la profondeur nécessaire [Gue- 2016]

iv) **Radiothérapie** : La radiothérapie est une technique de traitement du cancer utilisant les faisceaux d'ions pour détruire les cellules cancéreuses. La taille et la localisation de la cellule cancéreuse doivent être soigneusement explorées afin de déterminer le parcours du faisceau. Comme nous avons vu dans l'équation (I.4) le parcours est étroitement lié au pouvoir d'arrêt. Ainsi la connaissance précise du pouvoir d'arrêt et du Stragglng nous permettra la destruction des zones tumorales et la réduction des dommages potentiels. des tissus sains.

L'étude du ralentissement des ions dans la matière reste toujours d'actualité. En effet, la communauté scientifique dans le domaine interaction ion-matière ainsi que l'agence internationale de l'énergie atomique (AIEA) encouragent les scientifiques à produire théoriquement ou expérimentalement de nouvelles données précises de pouvoir d'arrêt [Mon-2017]. Ces encouragements sont incités par les faits suivants :

a) **Manque de données expérimentales du pouvoir d'arrêt** : Comme le montre le tableau partiel des données sur le pouvoir d'arrêt.

Z ₁ ions incident Z ₂ projectile	⁴ He	⁸ O	¹³ Al	²³ V	²⁸ Ni	⁴⁰ Zr	⁴⁵ Rh	⁵⁵ Cs
¹ H	0	2	0	0	0	0	0	0
⁶ C	5	21	9	1	4	1	1	1
¹⁸ Ar	1	4	1	0	1	0	0	0
¹³ Al	3	19	6	0	3	0	0	0
²⁶ Fe	1	0	1	0	0	0	0	0
³⁰ Zn	1	0	0	0	0	0	0	0
⁴⁰ Zr	0	0	0	0	0	0	0	0
⁴⁷ Ag	1	16	4	0	4	0	0	0
Air	1	2	1	0	0	0	0	0
Cell	0	0	0	0	0	0	0	0
PVC	1	0	0	0	0	0	0	0

Tableau.1 : Le nombre de fichiers de données disponibles en octobre 2014, [Pau2014].

b) Dispersion des données expérimentales : Pour les ions lourds, même si les données de pouvoir d'arrêt sont disponibles, un écart appréciable jusqu'à 15%, dans certains cas, en particulier aux énergies basses et intermédiaires a été observé [Nee-2009]. Pour exemple la Fig.5 montre le pouvoir d'arrêt du carbone dans l'oxyde d'aluminium mesuré par différents laboratoires marqués par les lettres C (Accelerator Laboratory, Helsinki, Finland), D (iThemba LABS, Afrique du Sud) et E (Université de Jyväskylä, Finlande), nous pouvons voir l'écart entre leurs mesures. Par exemple à une énergie de 0.25MeV/n on remarque un écart relatif d'environ 16% entre le laboratoire C et le laboratoire E [Gue-2016].

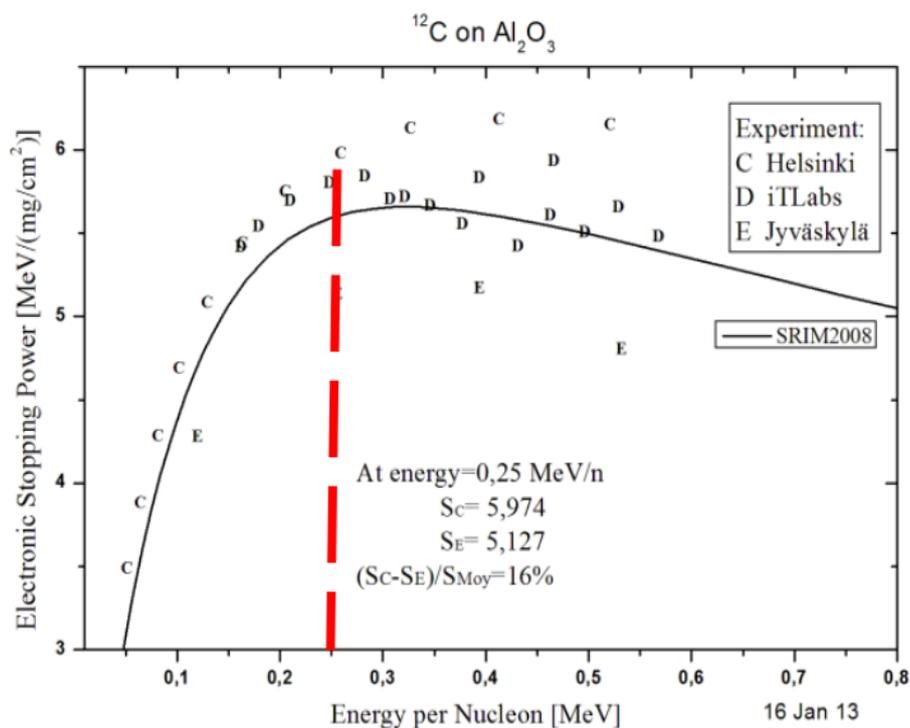


Fig.5 : Pouvoir d'arrêt électronique en fonction de l'énergie des ions ^{12}C dans Al_2O_3 , mesuré par un groupe de recherche de trois laboratoires différents. [Pau-2013].

c) Écart entre les théories existantes et les données expérimentales du pouvoir d'arrêt.

Malgré les efforts déployés depuis 1913 [Boh-2013] pour décrire théoriquement le pouvoir d'arrêt, un écart jusqu'à 30% a été constaté entre les valeurs expérimentales et les valeurs théoriques en particulier à basse énergie [Bur-1992]. Comme le montre la Fig. 6 représentant le pouvoir d'arrêt électronique en fonction de l'énergie incidente du carbone dans l'or comparé avec la théorie LSS.

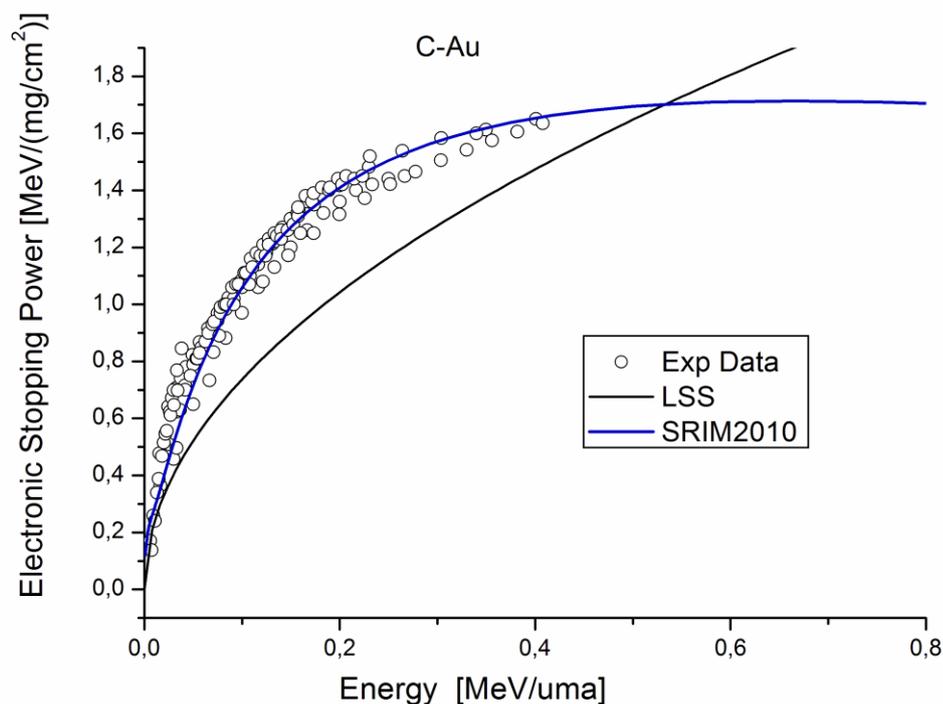


Fig.6 : Le pouvoir d'arrêt électronique en fonction de l'énergie incidente du carbone dans l'or comparé avec la théorie LSS ainsi que le code SRIM-2010 [Gue-2016].

4. Aperçu sur le développement du pouvoir d'arrêt

L'étude théorique du pouvoir d'arrêt subdivise les domaines d'énergie en trois zones comme indiqué sur la Fig.7.

Zone de hautes vitesses : $\left(v \gg Z_1^{\frac{2}{3}} v_0 \right)$

Dans cette région de vitesse l'ion incident est entièrement épluché de ses électrons et le ralentissement est dû aux collisions électroniques. Dans ce domaine la théorie classique de Bohr [Boh-1913] et la théorie quantique de Bethe-Bloch [Bet-1930, Blo-1933] conduisent à une expression du pouvoir d'arrêt inversement proportionnelle au carré de la vitesse des ions incidents. Cette expression est relativement en bon accord avec les résultats expérimentaux. Il est à noter que ces théories nécessitent la connaissance d'une constante empirique en l'occurrence l'énergie moyenne d'excitation I .

Zone intermédiaire $\left(v \approx Z_1^{\frac{2}{3}} v_0 \right)$

Lorsque la vitesse des ions rapides diminue et devient comparable à la vitesse moyenne des électrons dans les atomes $v_0 Z_1^{\frac{2}{3}}$, plusieurs complications apparaissent :

- Certains électrons liés restent attachés aux ions, donc les ions ne sont pas complètement dépouillés de leurs électrons.
- Tous les électrons ne contribuent pas au ralentissement en particulier les électrons internes (projectile ou cible)

Cette région de vitesse est la plus difficile à décrire théoriquement, car toutes les différentes contributions de perte d'énergie sont présentes dans ce domaine de vitesse telles que : l'excitation et la désexcitation des ions incidents et des atomes cibles, échange de charge (ionisation des atomes cibles et capture d'électrons), Dans ce domaine de vitesses, il n'existe aucune formulation simple du pouvoir d'arrêt électronique. [Gue-2016].

Zone de basses vitesses $\left(v \ll Z_1^{\frac{2}{3}} v_0 \right)$

A faible vitesse, la majorité des électrons de la cible ont une vitesse orbitale plus grande que celle de l'ion incident. Au cours de la collision entre l'ion et un atome cible, les nuages électroniques des deux partenaires se recouvrent. Un réarrangement des niveaux électroniques aura lieu au cours de l'interaction. Alors, seuls les électrons faiblement liés de la cible contribuent à la perte d'énergie de l'ion.

Dans cette zone L'étude théorique du ralentissement à faible vitesse des ions lourds dans la matière a été fondamentalement étudiée par Firsov [Fir-1959] et Lindhard, Scharff et Schiøtt (LSS) [Lin-1963] en utilisant le modèle atomique statistique de Thomas-Fermi qui donne une dépendance linéaire en vitesse du pouvoir d'arrêt.

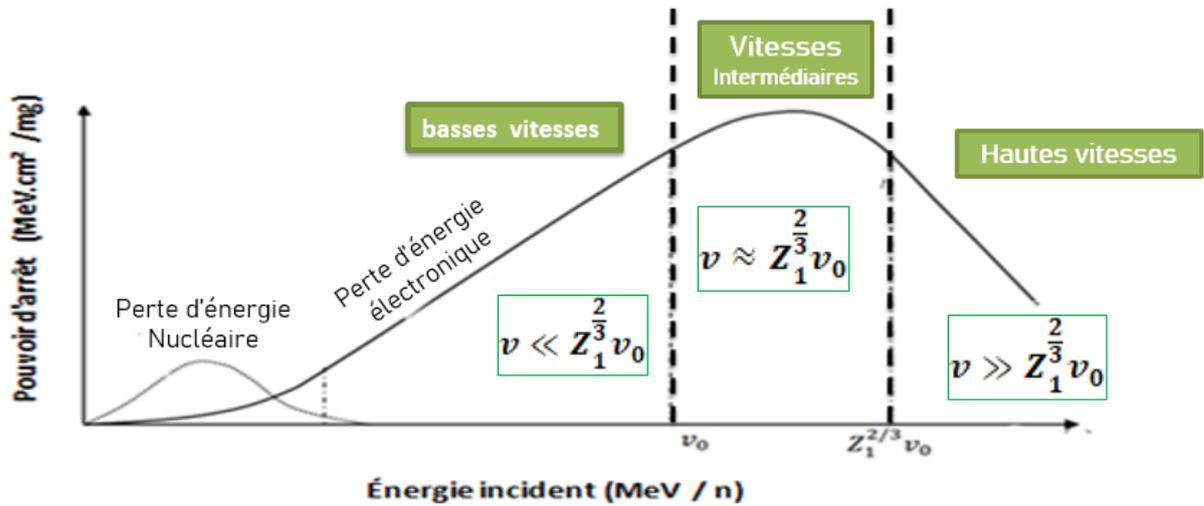


Fig.7 : Variation du pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie du projectile.

Historique

Le développement théorique du pouvoir d'arrêt des différentes zones citées

Ci-dessus se résume historiquement comme suit :

En 1913, juste après son travail sur la structure des atomes et des molécules, Bohr propose une description classique de la perte d'énergie des particules chargées dans la matière. Il suggère que la perte d'énergie de l'ion projectile résulte du transfert d'énergie de celui-ci aux électrons des atomes du milieu ralentisseur [Boh-1913].

En 1930 avec l'avènement de la mécanique quantique, Bethe propose un modèle quantique du pouvoir d'arrêt. Plus tard, Felix Bloch a étudié les approches classiques et mécanique quantique et a trouvé les conditions dans lesquelles ces théories pouvaient être utilisées. Bloch a apporté des corrections au modèle de Bethe et a obtenu la formule, qui est valable aussi bien pour le résultat de Bethe que pour celui de Bohr [Kor- 2006].

En 1958, Firsov a utilisé des techniques numériques pour dériver les potentiels interatomiques de deux atomes en collision traités par le modèle atomique de Thomas-Fermi, puis il a adapté ces potentiels en utilisant la longueur d'écran de Thomas-Fermi afin d'obtenir sa formule de pouvoir d'arrêt pour les faibles vitesses [Fir-1958].

Un autre modèle important pour les basses vitesses était la théorie de Lindhard, de Scharff et de Schiott (communément appelée théorie LSS) [Lin-1963]. La théorie LSS était l'apogée de la théorie de l'arrêt et de la distance basée sur les atomes statistiques [Zie-2008].

CHAPITRE II

Théorie du pouvoir d'arrêt

CHAPITRE II

Théorie du pouvoir d'arrêt

Dans ce chapitre nous présenterons le modèle de Bohr réajusté ainsi que les théories utilisées dans notre calcul en l'occurrence, la théorie de Bethe, la théorie de Bohr et de Firsov, ainsi que le code de simulations the Stopping and Range of Ions in Matter SRIM-2013.

1. Expression générale du pouvoir d'arrêt

On considère la collision d'un faisceau d'ions d'énergie E avec une cible mince d'épaisseur Δx composée de N atomes par unité de volume. L'atome cible de masse m_2 et de nombre atomique Z_2 est supposé au repos. Il a été démontré que la perte d'énergie $-\Delta E(T)$ du faisceau incident dans la cible d'épaisseur Δx pour une énergie de transfert particulier T_p (excitation, ionisation, simple diffusion avec un impact paramètre particulier...) est donnée [Sig-2006] par :

$$-\Delta E(T_p) = NT_p d\sigma(E, T_p) \Delta x \quad (\text{II.1})$$

Où $d\sigma(E, T_p)$ représente la section efficace différentielle de transfert d'une énergie particulière T_p pour une énergie incidente E .

Pour toutes les valeurs possibles de T_p , la perte d'énergie totale $-\Delta E$ dans la cible est donnée par l'intégration de l'équation (II.1) :

$$-\Delta E = \int_{T_p} NT_p d\sigma(E, T_p) \Delta x \quad (\text{II.2})$$

Ainsi, le pouvoir d'arrêt s'écrit :

$$S(E) = -\frac{1}{N \Delta x} \Delta E = \int_{T_p} T_p d\sigma(E, T_p) \quad (\text{II.3})$$

Le pouvoir d'arrêt est ainsi en fonction de la section efficace de transfert $d\sigma(E, T_p)$, il est alors nécessaire de connaître la nature exacte de l'interaction entre la particule incidente et l'atome cible afin de définir un potentiel d'interaction.

2. Le modèle de Bohr

2.1 Introduction

En 1913, Bohr suggère que la perte d'énergie d'une particule énergétique chargée traversant la matière est due à sa collision avec les électrons de l'atome cible. Le calcul de Bohr se base sur le concept du paramètre d'impact p . Dans un premier temps Bohr suppose que l'électron de l'atome cible est libre (non lié) [Boh-2013]. En utilisant l'interaction Coulombienne, Bohr arrive à écrire la perte d'énergie d'un ion par collision électronique sous forme d'une intégrale entre un minimum et un maximum du paramètre d'impact. Cette intégrale est infinie pour des valeurs de p tendant vers l'infini. Cette divergence conduit Bohr à imposer une limite supérieure au paramètre d'impact, au-dessus de laquelle, l'interaction devient adiabatique et ne produit aucun transfert d'énergie. Dans un second temps, Bohr essaye de justifier l'introduction du paramètre d'impact maximal en introduisant le fait que les électrons sont liés. Il propose que cette valeur maximal du paramètre d'impact p soit égale à la distance pour laquelle, le temps d'interaction $\tau \sim \frac{p}{v}$ (v étant la vitesse de l'ion incident) est de l'ordre du temps moyen de précession, ω^{-1} (ω étant la vitesse angulaire moyenne des électrons atomiques) des électrons autour de leurs noyaux. Le maximum du paramètre d'impact est donc de l'ordre de $p_{max} = \frac{v}{\omega}$; c'est le rayon adiabatique de Bohr au-delà duquel la perte d'énergie est nulle [Dam-2007]. Ainsi, Bohr suggère l'existence d'un paramètre d'impact intermédiaire p_0 et subdivise le calcul de la perte d'énergie de la particule chargée dans la matière par rapport au paramètres d'impact en deux types de collisions, les collisions proches ($p < p_0$) et les collisions lointaines ($p > p_0$) [Boh-2013].

2.2 Collisions proches

Pour ce type de collisions, Bohr suppose que les électrons de l'atome cible sont libres, autrement dit, il néglige la liaison entre l'électron et le noyau cible. Il traite alors, l'interaction élémentaire de l'ion incident avec l'électron cible par la diffusion de Rutherford [Nas-1996].

On considère la collision d'un ion de vitesse v (ou d'énergie E), de charge $Z_1 e$, et de masse m_1 se dirigeant sous un paramétré d'impact p vers un atome cible de masse m_2 au repos dans le système du laboratoire L ($v_2 = 0$) de charge $Z_2 e$ (voir Fig.8).

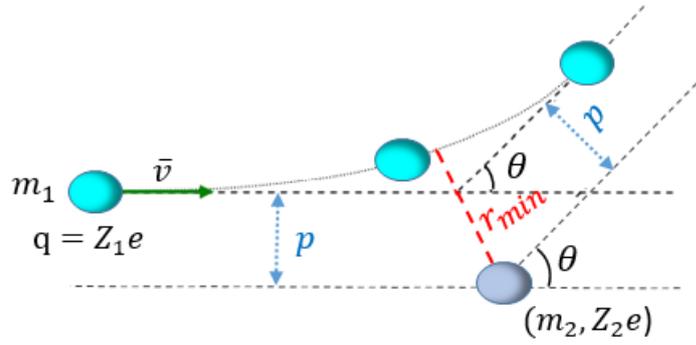


Fig.8 : Interaction élémentaire ion projectile-atome cible par la diffusion de Rutherford

L'étude de la dynamique binaire d'une collision de deux particules de masse m_1 et m_2 interagissant par un potentiel central $V(r)$ nous donne l'angle de diffusion θ sous sa forme intégrale [Nas-1996] :

$$\theta = \pi - 2 \int_{r_{min}}^{r_{\infty}} \frac{p}{r'^2} \frac{1}{\sqrt{\left[1 - \frac{V(r')}{E} - \frac{p^2}{r'^2}\right]}} dr' \quad (\text{II.4})$$

où r_{min} est la plus petite distance d'approche des deux particules déduite de l'équation :

$$1 - \frac{V(r_{min})}{E} - \frac{p^2}{r_{min}^2} = 0 \quad (\text{II.5})$$

Dans le cas de l'interaction coulombien de l'ion de charge Z_1e avec un électron, le potentiel d'interaction s'écrit :

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e(Z_1e)}{r} \quad (\text{II.6})$$

L'intégration de l'équation (II.4) pour le potentiel (II.6), donne [Nas-1996] :

$$\tan \frac{\theta}{2} = \frac{b}{2p} \quad (\text{II.7})$$

où b est la distance minimum d'approche donne par :

$$b = \frac{2Z_1e^2}{4\pi\epsilon_0\mu v^2} \text{ avec } \mu = \frac{m_1m_e}{(m_1+m_e)} \approx m_e \text{ la masse réduite du système ion-électron.}$$

Au cours du ralentissement de la particule chargée, à travers une cible d'épaisseur Δx plusieurs types de collisions peuvent avoir lieu induisant des pertes d'énergie comprises dans l'intervalle d'énergie dT ($T, T + dT$), où T est l'énergie cinétique transférée lors de l'interaction entre l'ion incident et un électron de l'atome cible.

A partir de la conservation de l'énergie totale et de la quantité de mouvement, on obtient dans le système du laboratoire (l'énergie cinétique transférée à la particule cible) :

$$T_{proche} = T_{max} \cos^2 \varphi \quad (\text{II.8})$$

où T_{max} est l'énergie maximale transférée lors d'un choc frontal ($p = 0, \theta = 180^\circ$) et $2\varphi = \pi - \theta$, φ est l'angle de recul dans le système du laboratoire.

En remplaçant l'angle φ par cette dernière relation, l'expression (II.8) devient :

$$T_{proche} = T_{max} \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (\text{II.8.a})$$

où :

$$T_{max} = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E, \quad \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) = \frac{1}{1 + \tan^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)}$$

Dans le cas d'une diffusion sur un électron cible ($m_2 = m_e$) $m_1 \gg m_e$, l'énergie maximale transférée de l'ion incident à l'électron de l'atome cible [She-2000] s'écrit :

$$T_{max} = \frac{e^4}{16\pi^2 \varepsilon_0^2} \frac{2Z_1^2}{m_e v^2 p^2} \quad (\text{II.9})$$

L'utilisation de la relation (II.7, II.9) nous permet d'écrire l'équation (II.8.a) comme suit :

$$T_{proche} = \frac{e^4}{16\pi^2 \varepsilon_0^2} \frac{2Z_1^2}{m_e v^2 p^2} \frac{1}{1 + \left(\frac{b}{2p} \right)^2} \quad (\text{II.10})$$

2.3 Collisions lointaines

Pour de grands paramètres d'impacts ($p > p_0$), les chocs sont pratiquement adiabatiques et ne conduisent qu'à de faibles transferts d'énergies. Les électrons cibles ne peuvent plus être considérés comme étant libres mais liés à leurs noyaux atomiques, Bohr introduit alors la structure atomique dans le pouvoir d'arrêt, en attribuant à ces électrons des fréquences orbitales classiques. Il considère que l'électron est lié au noyau par une force de rappel \vec{F}_{ext} de constante de raideur k . L'interaction élémentaire ion-électron peut être traitée comme une excitation électromagnétique de l'oscillateur harmonique par le champ électrique induit par le passage de l'ion projectile [Boh-1913].

La Fig.9, représente la trajectoire (suppose une ligne droite) AB de l'ion incident, où A est la position de l'ion incident à l'instant t . Le point C étant la position moyenne de l'électron et le point B est la projection orthogonale du point C sur la trajectoire AB de l'ion.

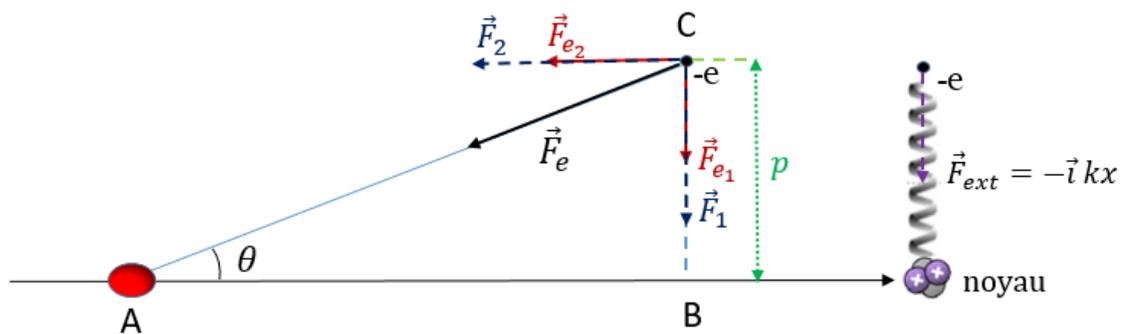


Fig.9 : Interaction élémentaire ion projectile-électron orbital

En choisissant l'origine du temps ($t = 0$), l'instant où l'électron se trouve à la position A, on peut écrire :

$$AB = v \cdot t \quad (II.11)$$

La force \vec{F} qui agit sur l'électron est la somme de la force électrique \vec{F}_e induite par l'ion incident et la force de rappel \vec{F}_{ext} :

$$\vec{F} = \vec{F}_e + \vec{F}_{ext} \quad (II.12)$$

Le module de la force électrique s'écrit $F_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e(Z_1e)}{AC^2}$ et l'expression de la force de rappel qui s'applique entre noyau et l'électron s'écrit sous la forme suivante (voir Fig.9) :

$$\vec{F}_{ext} = -\vec{i} kx \quad (\text{II.13})$$

où x est la mesure algébrique du déplacement de l'électron par rapport à sa position d'équilibre.

La projection \vec{F}_{e_1} de \vec{F}_e sur la direction CB, s'écrit :

$$F_{e_1} = F_e \sin\theta = \frac{e(Z_1 e) \overline{BC}}{4\pi\epsilon_0 AC^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e(Z_1 e)p}{(v^2 t^2 + p^2)^{3/2}} \quad (\text{II.14})$$

L'équation du mouvement de l'électron sur la direction CB s'écrit alors :

$$F_e \sin\theta - kx = m_e \frac{d^2x}{dt^2} \quad (\text{II.15})$$

L'équation (II.15) peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = \frac{F_e}{m_e} \sin\theta = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m_e} \frac{e(Z_1 e)p}{(v^2 t^2 + p^2)^{3/2}} = \phi(t) \quad (\text{II.16})$$

où $\omega^2 = \frac{k}{m_e}$ est la fréquence d'oscillation de l'électron. Cette équation est soumise aux conditions initiales suivantes :

$$x = 0 \text{ et } \frac{dx}{dt} = 0 \quad \text{pour } t = -\infty \quad (\text{II.17})$$

La solution de l'équation différentielle (Eq. II.16) s'écrit [Sig-2006] :

$$x(t) = \frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^t \sin \omega(t - t') \cdot \phi(t') dt' ; \quad \frac{dx}{dt} = \int_{-\infty}^t \cos \omega(t - t') \cdot \phi(t') dt' \quad (\text{II.18})$$

La somme de l'énergie cinétique de l'électron et de son énergie potentielle au temps t s'écrit :

$$\frac{m_e}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{m_e \omega^2}{2} x^2 = \frac{m_e}{2} \left(\int_{-\infty}^t \cos \omega t' \phi(t') dt' \right)^2 + \frac{m_e}{2} \left(\int_{-\infty}^t \sin \omega t' \cdot \phi(t') dt' \right)^2 \quad (\text{II.19})$$

L'énergie transférée à l'électron par la collision, dans la direction du mouvement perpendiculaire au trajet de la particule, est donnée par la variation de l'énergie cinétique dans cette direction :

$$T_{D_1} = \frac{1}{2} m_e \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = \frac{m_e}{2} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \cos \omega t' \cdot \phi(t') dt' \right)^2 \quad (\text{II.20})$$

En remplaçant $\phi(t')$ par son expression (Eq. II.16), on obtient :

$$T_{D_1} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{m_e} (Z_1 e)^2 p^2 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\cos \omega t'}{(v^2 t'^2 + p^2)^{\frac{3}{2}}} dt' \right)^2 \quad (\text{II.21})$$

$$T_{D_1} = \frac{1}{16\pi^2 \epsilon_0^2} \frac{2e^2 (Z_1 e)^2}{m_e v^2 p^2} \cdot f^2 \left(\frac{\omega p}{v} \right) \quad (\text{II.22})$$

avec :

$$f(x) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos xt'}{(t'^2 + 1)^{3/2}} dt' \quad (\text{II.23})$$

Cette fonction est représentée par la série convergente suivante [Boh-1913] :

$$f(x) = 1 - \frac{1}{1.1.2} \frac{3}{1.2} \left(\frac{x}{2}\right)^4 - \frac{1}{1.2.1.2.3} \left(\frac{3}{1.2} + \frac{5}{2.3}\right) \left(\frac{x}{2}\right)^6 \dots - \frac{1}{(n-1)! n!} \left(\frac{3}{1.2} + \frac{5}{2.3} + \dots + \frac{2n-1}{(n-1)n}\right) \left(\frac{x}{2}\right)^{2n} \dots +$$

$$(2\gamma + 2\log \frac{x}{2} - 1) \left(\left(\frac{x}{2}\right)^2 + \frac{1}{1.1.2} \left(\frac{x}{2}\right)^4 + \frac{1}{1.2.1.2.3} \left(\frac{x}{2}\right)^6 \dots + \frac{1}{(n-1)! n!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n} \dots \right) \quad (\text{II.24})$$

où γ est la constante d'Euler $\gamma = 0.5772$

Lorsque x est grand, $f(x)$ est représenté par la série asymptotique [Boh-1913] :

$$f(x) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-x} \sqrt{x} \left(1 + \frac{1.3}{8x} - \frac{1.3.4}{1.2} \left(\frac{1}{8x}\right)^2 + \frac{1.3.1.3.5}{1.2.3} \left(\frac{1}{8x}\right)^3 \dots - (-1)^{n+1} \frac{1.3.5 \dots (2n-3).1.3 \dots (2n-1)}{n! (8x)^n} \dots \right) \quad (\text{II.25})$$

De la même manière on obtient l'énergie transférée à l'électron dans la direction parallèle au trajet des particules incidentes [Boh-1913] :

$$T_{D_2} = \frac{m_e}{2} \left(\int_{-\infty}^t \sin \omega t' \cdot \psi(t') dt' \right)^2 \quad (\text{II.26})$$

Avec la fonction ψ donnée par :

$$\psi(t') = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m_e} \frac{e(Z_1 e) v t'}{(v^2 t'^2 + p^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{II.27})$$

$$T_{D_2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{m_e} (Z_1 e)^2 v^2 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{t' \sin \omega t'}{(v^2 t'^2 + p^2)^{\frac{3}{2}}} dt' \right)^2 \quad (\text{II.28})$$

$$T_{D_2} = \frac{1}{16\pi^2 \epsilon_0^2} \frac{2e^2 (Z_1 e)^2}{m_e v^2 p^2} \cdot g^2 \left(\frac{\omega p}{v} \right) \quad (\text{II.29})$$

où

$$g(x) = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{t' \sin xt'}{(t'^2+1)^{\frac{3}{2}}} dt' = \frac{x}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos xt'}{(t'^2+1)^{\frac{3}{2}}} dt' = f'(x) \quad (\text{II.30})$$

L'énergie totale transférée à l'électron, est alors égale à :

$$T_{Lointaine} = T_{D_1} + T_{D_2} = \frac{e^2}{16\pi^2 \varepsilon_0^2} \frac{2(Z_1 e)^2}{m_e v^2 p^2} L\left(\frac{\omega p}{v}\right) \quad (\text{II.31})$$

Où $L(x) = f^2(x) + g^2(x)$.

Notant [Boh-1913] que :

- $L(x)$ est égal à 1 pour $x = 0$ (II.32.a)

- $L(x)$ diminue très rapidement pour les valeurs croissantes de x (II.32.b)

- pour $x=0$, nous remarquons que $L'(x)=0$ (II.32c)

A partir de l'expression générale du pouvoir d'arrêt (Eq.II.3), on en déduit :

$$S(E) = -\frac{1}{N} \frac{\Delta E}{\Delta x} = Z_2 \left[\int_0^{p_0} T_{proche}(p) 2\pi p dp + \int_{p_0}^{+\infty} T_{Lointaine}(p) 2\pi p dp \right] \quad (\text{II.33})$$

En remplaçant T_{proche} et $T_{Lointaine}$ par leurs expressions, on obtient :

$$S(E) = -\frac{1}{N} \frac{\Delta E}{\Delta x} = \frac{e^2}{16\pi^2 \varepsilon_0^2} \frac{4\pi(Z_1 e)^2}{m_e v^2} Z_2 \left[\int_0^{p_0} \frac{p dp}{p^2 + (b/2)^2} + \int_{p_0}^{+\infty} \frac{1}{p} L\left(\frac{\omega p}{v}\right) dp \right] \quad (\text{II.34})$$

On pose $y = \frac{\omega p}{v}$ l'Eq. (II.34) s'écrit alors :

$$S(E) = -\frac{1}{N} \frac{\Delta E}{\Delta x} = \frac{e^2}{16\pi^2 \varepsilon_0^2} \frac{4\pi(Z_1 e)^2}{m_e v^2} Z_2 \left[\log\left(\frac{2p_0}{b}\right) + \int_{\frac{\omega p_0}{v}}^{+\infty} \frac{1}{y} L(y) dy \right] \quad (\text{II.35})$$

Une intégration par partie de (II.35) nous donne :

$$S(E) = -\frac{1}{N} \frac{\Delta E}{\Delta x} = \frac{e^2}{16\pi^2 \varepsilon_0^2} \frac{4\pi(Z_1 e)^2}{m_e v^2} Z_2 \left[\log\left(\frac{2p_0}{b}\right) + [\log(y) \cdot L(y)]_{\frac{\omega p_0}{v}}^{+\infty} - \int_{\frac{\omega p_0}{v}}^{+\infty} \log y L'(y) dy \right] \quad (\text{II.37.a})$$

$$S(E) = -\frac{1}{N} \frac{\Delta E}{\Delta x} = \frac{e^2}{16\pi^2 \varepsilon_0^2} \frac{4\pi(Z_1 e)^2}{m_e v^2} Z_2 \left[\log\left(\frac{2p_0}{b}\right) - \log\left(\frac{\omega p_0}{v}\right) \cdot L\left(\frac{\omega p_0}{v}\right) - \int_{\frac{\omega p_0}{v}}^{+\infty} \log y L'(y) dy \right] \quad (\text{II.37.b})$$

Bohr considère les approximations numériques suivantes :

- i. $\frac{\omega p_0}{v}$ est très petit, donc on peut mettre $L\left(\frac{\omega p_0}{v}\right) = 1$,
- ii. les bornes d'intégration entre 0 et ∞ ,
- iii. $L'(0) = 0$
- iv. l'utilisation de l'expression numérique de $f(x)$

Avec ces considérations Bohr obtient :

$$\int_0^{+\infty} \log y L'(y) dy = -\log C \quad (\text{II.36})$$

où

$$C \approx 1.229$$

Ainsi il obtient finalement le pouvoir d'arrêt électronique de Bohr :

$$\left(-\frac{1}{N} \frac{dE}{dx}\right)_{Bohr} = \frac{e^4}{16\pi^2 \varepsilon_0^2} \frac{4\pi Z_1^2}{m_e v^2} Z_2 \ln\left(\frac{cm_e v^3 (4\pi \varepsilon_0)}{e(Z_1 e)\omega}\right) \quad (\text{II.37})$$

où $\omega = (I/\hbar)$, I et \hbar représentent respectivement, le potentiel d'ionisation et d'excitation moyen de l'atome cible, et la constant de Planck ($\hbar \approx 1.054 * 10^{-34}$ j. s)

et $N = \rho \frac{N_{Av}}{A_2}$, avec N_{Av} nombre d'Avogadro ($N_{Av} \approx 6.022 * 10^{23}$ par mole),

ρ Masse volumique, et A_2 la masse atomique de l'atome cible.

Généralement le pouvoir d'arrêt électronique est tabulé en Mev. cm²/mg et le potentiel d'ionisation moyen est tabulé en ev, ainsi nous avons exprimé le pouvoir d'arrêt de Bohr en cette unité:

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx}\right)_{Bohr} = \frac{Z_1^2 Z_2}{A_2} \left(\frac{v_0}{v}\right)^2 (5.7636) \ln\left(\frac{(33.4428)}{z_1 I [\text{ev}]} \left(\frac{v}{v_0}\right)^3\right) \quad (\text{II.38})$$

où $v_0 \approx c/137.036$, avec c la vitesse de la lumière.

Remarque :

Le traitement classique de Bohr est valable à condition que le paramètre de Bohr soit supérieur à 1 [Sig-1997] :

$$2Z_1 \left(\frac{v_0}{v}\right) \gg 1 \quad (\text{II.39})$$

2.4 Potentiel d'ionisation moyen I

Il a été montré que le potentiel d'ionisation moyen I est proportionnel à Z_2 , son expression empirique est donnée par la relation suivante [Tur-1968] :

$$I \approx 11.2 + 11.7 * Z_2 \text{ ev} \Rightarrow 2 \leq Z_2 \leq 13 \quad (\text{II.40})$$

$$I \approx 52.8 + 8.71 * Z_2 \text{ ev} \Rightarrow Z_2 > 13 \quad (\text{II.41})$$

3. L'approche quantique de Bethe

Dans le cas où le paramètre de Bohr est petit (i.e. $v \gg 2Z_1v_0$) une description quantique de la perte d'énergie est plus appropriée. Cette théorie quantique du pouvoir d'arrêt qui est basée sur l'approximation de Born [Bor-1926], est élaborée par Bethe après une quinzaine d'années après Bohr. Sans entrer dans le détail des calculs, la formule quantique de Bethe du pouvoir d'arrêt s'écrit [Bet-1930] :

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{Bethe} = \frac{e^4}{16\pi^2\epsilon_0^2 m_e v^2} N Z_2 \ln\left(\frac{2mv^2}{I}\right) \quad (\text{II.42})$$

où I est le potentiel d'ionisation moyen de l'atome cible. Le terme $\ln\left(\frac{2mv^2}{I}\right)$ s'appelle le nombre d'arrêt de Bethe.

A travers la formulation du pouvoir d'arrêt électronique ainsi exprimé par Bethe on constate que le pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ne dépend pas de sa masse mais de sa vitesse. Diverses corrections relativistes [Fan-1947] ont été proposées afin d'étendre le domaine de validité de la formule de Bethe du pouvoir d'arrêt :

$$\left(-\frac{1}{N} \frac{dE}{dx}\right)_{Bethe} = \frac{e^4}{16\pi^2\epsilon_0^2 m_e v^2} Z_2 \left[\ln\frac{2m_e v^2}{I} - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 \right] \quad (\text{II.43})$$

où $\beta = v/c$, la vitesse relative de l'ion projectile (c est la vitesse de la lumière)

Le pouvoir d'arrêt de Bethe s'écrit en $\text{Mev. cm}^2/mg$ sous la forme suivante:

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx}\right)_{Bethe} = \frac{Z_1^2 Z_2}{A_2} \left(\frac{v_0}{v}\right)^2 (5.7636) \ln\left(\frac{(54.4228)}{I[\text{ev}]} \left(\frac{v}{v_0}\right)^2 - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2\right) \quad (\text{II.44})$$

4. Le modèle de Firsov

4.1 Image de Firsov de la perte d'énergie à basse énergie

Firsov considère la collision d'un atome (Z_1, m_1) incident de vitesse ($v < v_0$) avec un atome cible (Z_2, m_2) au repos sous un paramètre d'impact p . Selon l'image de Firsov [Fir-1959] le transfert d'énergie ΔE entre l'atome incident et l'atome cible se fait par l'échange d'électrons rapide de l'atome incident vers l'atome cible. Les électrons transférés de l'atome incident qui ont une vitesse v vers l'atome cible seront placés sur des niveaux d'énergie plus élevés. Une conséquence de cet échange est une excitation de l'atome cible en recevant des électrons rapides et en cédant des électrons lents à l'atome incident. Ce phénomène conduit à un changement de quantité de mouvement de l'atome incident après qu'elle s'éloigne de l'atome cible [Khe-2017].

Selon cette image, quand deux atomes entrent en collision il se forme une quasi-molécule formée par les deux atomes ; tel que les constituants de chaque atome occupent une zone de cette quasi-molécule. Ainsi, chaque atome appartient à une zone de l'espace de la quasi-molécule. Les deux zones sont séparées par une surface S appelée surface de Firsov. En général, la surface S est quelconque, tout dépend des nombres atomiques Z_1 et Z_2 . Pour des raisons de simplicité, Firsov suppose que cette surface est plane et perpendiculaire à la ligne reliant les deux noyaux et passant par son milieu. (Voir Fig.10).

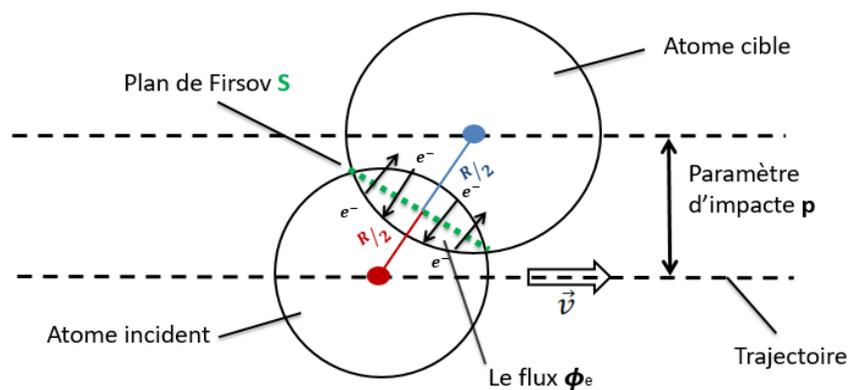


Fig.10 : Géométrie de la perte d'énergie à basse énergie selon le modèle de Firsov [Ogu-2007]

4.2 Le modèle de Firsov

Firsov dans son calcul de perte d'énergie considère que les atomes sont décrits par le modèle statistique de Thomas-Fermi. Dans le modèle de Thomas-Fermi, les grandeurs physiques ci-dessous (voir Fig.11) :

$n(r)$: La densité électronique moyenne à une distance r du noyau cible.

$u(r)$: La vitesse électronique moyenne à une distance r du noyau cible.

$\varphi(r)$: Le potentiel d'interaction entre les deux atomes.

Sont reliées avec les relations suivantes [Gal-1990] :

$$u(r) = \frac{3}{4m_e} (3\pi^2)^{1/3} \hbar n^{1/3}(r) \quad (\text{II.45.a})$$

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} (2e m_e \varphi)^{3/2} \quad (\text{II.45.b})$$

Le nombre moyen d'électrons par unité de temps traversant la surface de Firsov S dans une direction à la distance r du centre de l'atome est donné par [Smi-1997] :

$$\langle \Phi_e \rangle = \int_S n(r) \frac{u(r)}{4} ds \quad (\text{II.46})$$

Notant que $\frac{u(r)}{4}$ est la vitesse moyenne des électrons dirigés de l'atome vers l'ion.

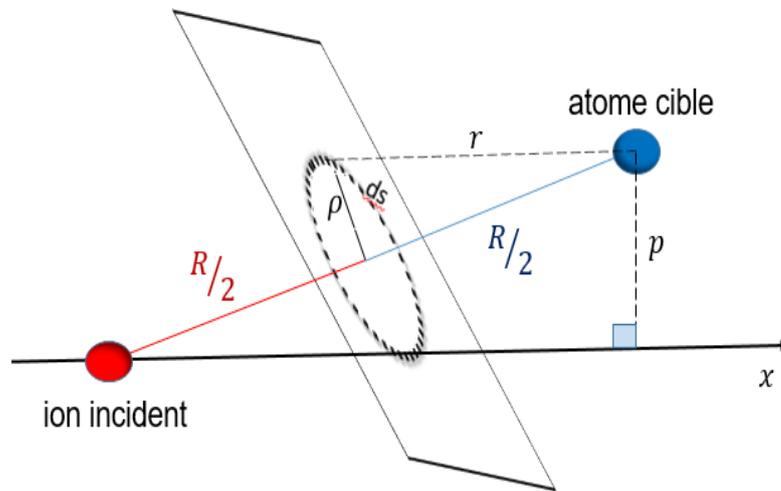


Fig.11 : Schéma illustrant le plan de Firsov séparant les régions d'action des potentiels de l'ion et de l'atome dans le modèle de Firsov de perte d'énergie électronique.

Soit F la force qui agit sur l'atome incident sous l'effet de l'atome cible. Cette force est égale à la variation de la quantité de mouvement de l'atome incident par unité de temps ($F=\Delta P/\Delta t$). Selon l'image de Firsov (échange d'électrons entre les deux atomes), cette force s'écrit :

$$F = m_e \dot{R} \langle \phi_e \rangle \quad (\text{II.47.a})$$

En utilisant l'Eq.(II.46) on obtient :

$$\vec{F} = m_e \frac{d\vec{R}}{dt} \int_s \frac{n(r)u(r)}{4} ds \quad (\text{II.47.b})$$

où $\frac{d\vec{R}}{dt}$ = la vitesse relative des deux atomes en interaction.

Le travail total de ralentissement de l'ion (c'est-à-dire l'énergie d'excitation électronique de l'atome) est :

$$T_F = -\Delta E = \int F dR = m_e \int \langle \phi_e \rangle \dot{R} dR \quad (\text{II.48.a})$$

$$T_F = -\Delta E = m_e \int \left[\int_s \frac{n(r)u(r)}{4} ds \right] \frac{d\vec{R}}{dt} d\vec{R} \quad (\text{II.48.b})$$

où $d\vec{R}$ est le vecteur parallèle à la vitesse. En introduisant l'Eq. (II.45.a) dans (II.48.b), on obtient:

$$-\Delta E = \frac{3}{16} (3\pi^2)^{1/3} \hbar v \int_{-\infty}^{+\infty} (n(r)^{4/3} ds) dx \quad (\text{II.49})$$

en remplaçant (II.45.b) dans (II.49), on obtient:

$$-\Delta E = \frac{m^2 e^2}{4\pi^2 \hbar^3} \int (\int_s \varphi^2 ds) \dot{R} dR \quad (\text{II.50})$$

Firsov suppose que la perte d'énergie cinétique est petite et considère que

$$\|\dot{R}\| = v \quad (\text{II.51.a})$$

Avec ces considérations, nous avons (voir Fig.11) :

$$\dot{R} dR = v dx \quad dx = \frac{\dot{R}}{|R|} d\vec{R} \quad (\text{II.51.b})$$

$$R^2 = p^2 + x^2 \quad (\text{II.51.c})$$

$$r^2 = \frac{R^2}{4} + \rho^2 \quad (\text{II.51.d})$$

$$r = \frac{p^2 + x^2}{4} + \rho^2 \quad (\text{II.51.e})$$

Firsov a pris le potentiel φ sous la forme [Fir-1958] :

$$\varphi(r) = \frac{(Z_1+Z_2)}{r} \chi\left(1,13 (Z_1 + Z_2)^{\frac{1}{3}} \frac{r}{a_0}\right) \quad (\text{II.52})$$

où χ est fonction d'écran de Thomas-Fermi , $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ le rayon de Bohr et r est la distance entre l'atome et la surface S .

On remplace (II.51.e) dans (II.49) on obtient:

$$T_F = -\Delta E = \frac{3}{16} (3\pi^2)^{1/3} \hbar v \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_S \left[n \left(\frac{p^2+r^2}{4} + \rho^2 \right)^{1/2} \right]^{4/3} \right) ds dx \quad (\text{II.53})$$

où : $ds = 2\pi\rho dp$

L'évaluation numérique de l'Eq. (II-53) T_F donne l'énergie d'excitation électronique de l'atome [Fir-1958]:

$$T_F = \frac{0.35(Z_1+Z_2)^{5/3}}{\left(1+0.16(Z_1+Z_2)^{1/3} \frac{p}{a_0}\right)^5} \frac{\hbar v}{a_0} \quad (\text{II.54})$$

Le calcul du pouvoir d'arrêt électronique pour un milieu amorphe donne [Tep-1962]

$$Se = 2\pi \int_0^{+\infty} T_F(p) p dp = 5,15 * 10^{-15} (Z_1 + Z_2) \frac{v}{v_0} \quad (ev.cm^2/atome) \quad (\text{II.55})$$

L'expression s'écrit en Mev. cm^2/mg :

$$s_e = 3.1014 \frac{(Z_1+Z_2)}{A_2} \left(\frac{v}{v_0}\right) \quad (MeV.cm^2/mg) \quad (\text{II.56})$$

5. Le modèle de Bohr réajusté

Le modèle de Bohr réajusté [Gue-2020] combine deux approches du pouvoir d'arrêt électronique via un concept probabiliste. Dans cette approche les collisions lointaines sont décrites par le modèle de Firsov et les collisions proches sont décrites par le modèle de Bohr. Le paramètre d'impact limite p_0 qui sépare les collisions proches et distantes est choisi de telle manière que la perte d'énergie moyenne pour une collision soit égale au potentielle d'ionisation moyen I . Le choix de p_0 est justifié par le raisonnement semi-classique suivant, de sorte que pour une vitesse de projectile v , une excitation de l'atome cible sera possible si le paramètre d'impact est inférieur à une certaine valeur p_0 telle que la perte d'énergie soit égale à la plus faible énergie d'excitation électronique.

Partant des faits suivants :

i. En générale l'interaction entre l'ion incident et l'électron est soit coulombien ou coulombien écrantée.

ii. Lorsqu'un ion est très rapide $\gg v_0$, il sera complètement épluché de ces électrons et sa charge est égale à la charge nucléaire et évidemment son interaction avec un électron est purement coulombienne (tel le cas de Bohr).

iii. Par ailleurs si l'ion incident est lent ($v < v_0$), l'ion n'est plus complètement épluché de ces électrons et certain électrons restent attachés à l'ion et évidemment son interaction avec un électron est décrite par un potentiel coulombien écranté (tel le cas de Firsov).

iv. Lorsqu'un ion pénètre dans la matière, son interaction avec les électrons dépend de sa vitesse et par conséquent comme mentionné en ii. et iii. de la charge de l'ion ; donc le type d'interaction (coulombien ou coulombien écranté) choisi pour une zone de vitesse n'est que probabiliste qui est étroitement liée à la charge d'équilibre de l'ion dans la matière.

v. Sur la base d'une grande quantité de données expérimentales a atteint la conclusion que l'ion incident est complètement épluché de ses électrons avec une probabilité dépendante de la vitesse, qui a été donnée par l'expression empirique[Bet-1972]

$$p_H = 1 - \exp\left(\frac{-v}{Z_1^a v_0}\right) \quad (\text{II.57})$$

où $a \approx 2/3$ pour les gaz et plus petit, pour les cibles solides il varie de 0,51 à 0,6. Dans le présent travail, il a été décidé d'utiliser $a = 2/3$. Par conséquent, la fraction de charge moyenne que les électrons encore liés à l'ion projectile à la vitesse v est donnée par la expression

$$p_L = 1 - p_H = \exp\left(\frac{-v}{Z_1^a v_0}\right) \quad (\text{II.58})$$

vi. La section efficace d'arrêt électronique est une section efficace (i.e. une probabilité).

vii. Le théorème d'addition [Dec-2003] de la théorie des probabilités,

La section efficace d'arrêt électronique totale peut être écrite comme [Gue-2020]:

$$S_{tot} = S_{proche} + S_{Lointaine}$$

$$S_{tot} = p_H \int_0^{p_0} 2\pi p T_{proche}(p) dp + p_L \int_{p_0}^{\infty} 2\pi p T_{Lointaine}(p) dp \quad (II.59)$$

Il est à noter que dans l'Eq. (II.59), il a été supposé que l'espace des événements est constitué des collisions lointaines et des collisions distantes. Pour des raisons de simplicité, il a été supposé aussi que le terme négatif décrivant la probabilité que des collisions proches et lointaines se produisent simultanément est négligeable (i.e. les collisions proches et lointaines sont des événements mutuellement exclusifs).
Intégration des termes de l'équation. (II-59)

$$S_{proche} = p_H \frac{e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2} \frac{4\pi Z_1^2 Z_2}{2m_e v^2} \ln \left[1 + \left(\frac{1}{Z_1} \frac{p_0}{a_0} \left(\frac{v}{v_0} \right)^2 \right)^2 \right] \quad (II.60)$$

$$S_{Lointaine} = p_L 2\pi 0.35(Z_1 + Z_2) \frac{\hbar v a_0}{12 \times [0.16]^2} * \frac{\left(1 + 4 * 0.16 (Z_1 + Z_2)^{\frac{1}{3}} \frac{p_0}{a_0} \right)}{\left(1 + 0.16 (Z_1 + Z_2)^{\frac{1}{3}} \frac{p_0}{a_0} \right)^4} \quad (II.61)$$

Le pouvoir d'arrêt total de Bohr réajustée s'écrit en Mev. cm²/mg sous la forme suivant :

$$S_{Tot} = \frac{Z_1^2 Z_2}{A_2} \left(\frac{v_0}{v} \right)^2 (2.8818) \left(1 - e^{\left(\frac{-v}{v_0 Z_1^{2/3}} \right)} \right) \ln \left\{ 1 + \left(\frac{1}{Z_1} \frac{p_0}{a_0} \left(\frac{v}{v_0} \right)^2 \right)^2 \right\} \\ + \frac{(Z_1 + Z_2)}{A_2} \left(\frac{v}{v_0} \right) (3.2833) e^{\left(\frac{-v}{v_0 Z_1^{2/3}} \right)} \frac{\left(1 + 4 * 0.16 (Z_1 + Z_2)^{1/3} \frac{p_0}{a_0} \right)}{\left(1 + 0.16 (Z_1 + Z_2)^{1/3} \frac{p_0}{a_0} \right)^4} \quad (II.62)$$

où A_2 est la masse atomique de la cible.

Comme mentionné plus haut le paramètre d'impact limite est déduit de l'équation suivante :

$$T_{Fir} = I \quad (II.63.a)$$

On trouve :

$$\frac{p_0}{a_0} = \frac{1.5695 * \left(\frac{v (z_1+z_2)^{\frac{5}{3}}}{v_0 I[\text{ev}]} \right)^{\frac{1}{5}} - 1}{0.16(z_1+z_2)^{\frac{1}{3}}} \quad (\text{II.63.b})$$

6. Code SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) de simulations du pouvoir d'arrêt

Dans ce paragraphe, nous présentons le code de simulation utilisé dans cette étude. Stopping and Range of Ions in Matter (SRIM) est une suite de logiciel permettant de calculer l'interaction des ions avec la matière. Le programme principal de SRIM est Transport of ions in matter (TRIM).

Le logiciel a été développé par James F. Ziegler et Jochen P. Biersack en 1980[Zie-1985]. Il a connu plusieurs mises à jour depuis sa publication. Actuellement, le logiciel est disponible dans sa version 2013 [SRIM-2013]. Leur son fonctionnement basé sur une méthode de Monte-Carlo et plus précisément sur la méthode « Binary collision approximation »[Mar-1974] avec une sélection aléatoire du paramètre d'impact pour chaque ion.

6.1 Déroulement d'une simulation

Pour les paramètres d'entrée, il est nécessaire de spécifier le type d'ions que l'on souhaite implanter, l'énergie d'implantation (de l'ordre de 10 eV à 10 GeV) et le type de matériau dans lequel on souhaite implanter les ions. En sortie, le programme répertorie la distribution tridimensionnelle des ions dans le solide et les paramètres, tels que la profondeur de pénétration, sa propagation le long du faisceau d'ions et perpendiculairement à celui-ci. La simulation conserve aussi toutes les cascades d'atomes dans la cible. La concentration de lacunes, la vitesse de pulvérisation, l'ionisation et production de phonons dans le matériau cible, la répartition énergétique entre les pertes nucléaires et électroniques et le taux de déposition d'énergie sont d'autres paramètres conservés tout au long de la simulation.

Les programmes sont conçus pour pouvoir être interrompus à tout moment, puis repris plus tard. Ils ont une interface utilisateur facile à utiliser et des paramètres par défaut

intégrés pour tous les ions et matériaux. Une autre partie du logiciel permet de calculer le pouvoir d'arrêt électronique de n'importe quel ion de n'importe quel matériau (y compris les cibles gazeuses). Basé sur des critères pour déterminer la moyenne d'un ensemble de données expérimentales [Zie-2010], ces fonctionnalités ont rendu SRIM très répandu en milieu scientifique. Cependant, il ne tient pas compte de la structure cristalline ni des changements dynamiques dans la composition du matériau, ce qui limite son utilité dans certains cas.

CHAPITRE III

Résultats et discussions

CHAPITRE III

Résultats et discussions

Dans ce chapitre, nous présenterons les résultats de calcul du pouvoir d'arrêt obtenu par les approches théoriques développées dans le chapitre précédent tel que : le modèle de Bethe, le modèle de Bohr, l'approche de Firsov ainsi que le modèle de Bohr réajusté. Le calcul et la représentation graphique du pouvoir d'arrêt avec les modèles cités ci-dessus a été aménagé sous forme d'un programme utilisant l'outil de calcul OriginPro 2021 où il suffit d'introduire uniquement les données atomiques de l'ion incident et l'atome cible ($A_1.A_2$ et $Z_1.Z_2$). Dans le but d'analyser la fiabilité des modèles théoriques du pouvoir d'arrêt, nous avons comparé les résultats obtenus avec les données expérimentales existantes [AIEA-2022] ainsi qu'avec la simulation de code semi-empirique SRIM-2013.

Nous avons choisi l'unité $\text{Mev.cm}^2/\text{mg}$ communément utilisée pour le pouvoir d'arrêt électronique, nous avons calculé le pouvoir d'arrêt électronique en fonction de la vitesse réduite v/v_0 au lieu de l'énergie E de l'ion incident. La relation entre l'énergie E et la vitesse réduite est donnée par :

$$\frac{v}{v_0} = 6,35 \sqrt{\frac{E [\text{MeV}]}{A_1 [\text{u.m.a}]}} \quad (\text{III.1})$$

Où E/A_1 l'énergie de l'ion incident.

Principalement le choix des couples ions-cibles est basé sur la disponibilité des données expérimentales. Pour cette étude nous avons choisi les couples suivants :



Pour toutes les figures représentant le pouvoir d'arrêt électronique en fonction de la vitesse réduite, nous avons adopté les couleurs suivantes pour chaque modèle :

- La couleur bleue représente le modèle de Bethe décrit par l'Eq. (II.44).
- La couleur mauve représente le modèle de Bohr décrit par l'Eq. (II.38).
- La ligne discontinue représente le modèle de Firsov décrit par l'Eq. (II.56).
- La couleur noir représente le modèle de Bohr réajusté décrit par l'Eq. (II.62).
- La couleur verte représente la simulation du code semi-empirique SRIM-2013.
- Les points en forme de boule représentent les données expérimentales [AIEA-2022].

1. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{16}O dans ^{12}C

Les résultats de calcul ainsi que les données expérimentales du pouvoir d'arrêt électronique de ^{16}O dans ^{12}C sont résumés sur la Fig.12.

La Fig.12 représente le pouvoir d'arrêt électronique expérimental de l'ion ^{16}O dans la cible de ^{12}C en fonction de la vitesse réduite v/v_0 (de 0 à 34, correspondant à la gamme d'énergies 0.019-30 MeV/u) incluant les valeurs calculées par les modèles présentés dans le chapitre 2 (Bethe, Bohr, Firsov, Bohr réajusté) ainsi que le pouvoir d'arrêt déduit du code SRIM-2013. La comparaison entre les différents modèles du pouvoir d'arrêt avec les données expérimentales nous permet de faire le constat et l'interprétation suivante :

- Le modèle de Bohr réajusté a bien la forme du pouvoir d'arrêt électronique décrite dans la littérature (les trois zones d'énergies : haute, basse et intermédiaire).
- Naturellement un accord entre la simulation SRIM et les données expérimentales (AIEA) du pouvoir d'arrêt puisque SRIM est un code semi-empirique utilisant les données expérimentales.
- A grand vitesse ($v/v_0 > 12.5$), le pouvoir d'arrêt de Bethe, Bohr, et Bohr réajusté coïncident remarquablement avec les données expérimentales ainsi qu'avec la simulation SRIM.
- La valeur maximale expérimentale du pouvoir d'arrêt électronique de ^{16}O dans ^{12}C se trouve entre $(3.7 < \frac{v}{v_0} < 3.9 \approx v_0(z_1)^{2/3})$ qui est pratiquement identique à celle donnée par le modèle de Bohr réajusté ($\frac{v}{v_0} = 4$). Par contre le modèle de Bohr atteint le maximale à $\frac{v}{v_0} \approx 4,5$ qui est supérieure à la valeur expérimentale, en revanche le modèle de Bethe atteint le maximum à $\frac{v}{v_0} \approx 2$ qui est très inférieure à la valeur expérimentale.
- Dans la zone intermédiaire, les valeurs du pouvoir d'arrêt électronique calculés par le modèle de Bohr réajusté sont relativement supérieures aux valeurs expérimentales jusqu'à 35%. Cette déviation (acceptable dans la zone intermédiaire) peut être interprétée partiellement par le fait que le modèle de Bohr réajusté ne tient pas compte du terme négatif de recouvrement entre les collisions

lointaines et proches. On s'attend que l'introduction du terme de recouvrement dans le modèle de Bohr réajusté améliore nettement les résultats obtenus. Par ailleurs les valeurs calculées par le modèle quantique de Bethe sont nettement supérieures aux données expérimentales (>100%) ainsi que les valeurs calculées par le modèle de Bohr qui décroissent rapidement dans la zone intermédiaire.

- Pour des vitesses réduites inférieures à 3.7 ($\frac{v}{v_0} < 3.7$), le pouvoir d'arrêt expérimentale commence à diminuer comme c'est le cas du modèle de Bohr réajusté. On constate qu'à basses énergies, ($0 < \frac{v}{v_0} < 3,7$) le pouvoir d'arrêt de Bohr réajusté, Firsov, simulation SRIM sont compatibles avec les données expérimentales. Par contre le modèle de Bohr et Bethe divergent énormément des données expérimentales.

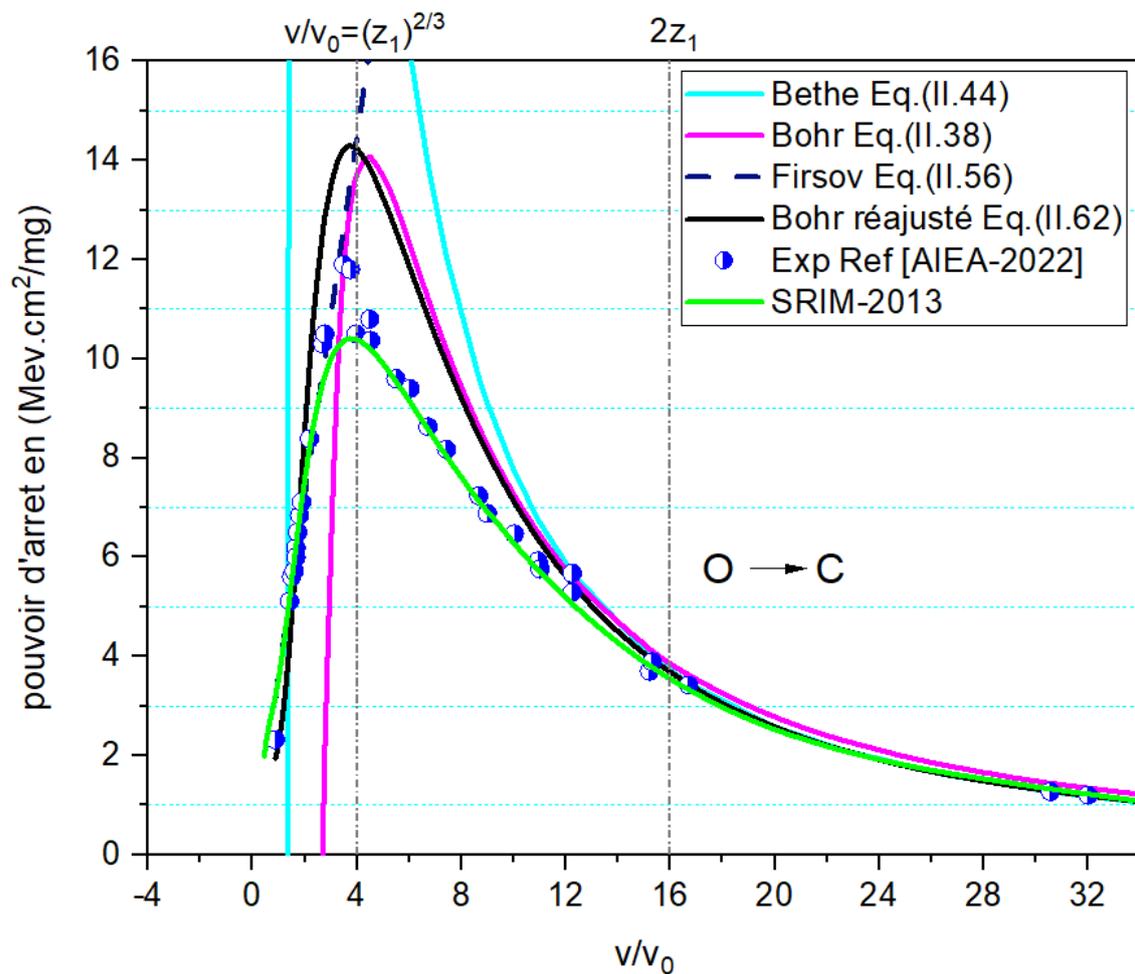


Fig.12 : pouvoir d'arrêt de l'ion ^{16}O dans la cible de ^{12}C en fonction de la vitesse réduite v/v_0 .

2. Pouvoir d'arrêt électronique du ^{12}C dans ^{12}C

Les résultats de calcul ainsi que les données expérimentales du pouvoir d'arrêt électronique de ^{12}C dans ^{12}C en fonction de la vitesse réduite v/v_0 (de 0 à 28 correspondant à la gamme d'énergies 0.001-20 Mev/u) sont résumés la Fig.13. A partir de la Fig.13, on constate les mêmes observations et interprétations que pour le cas ^{16}O dans ^{12}C .

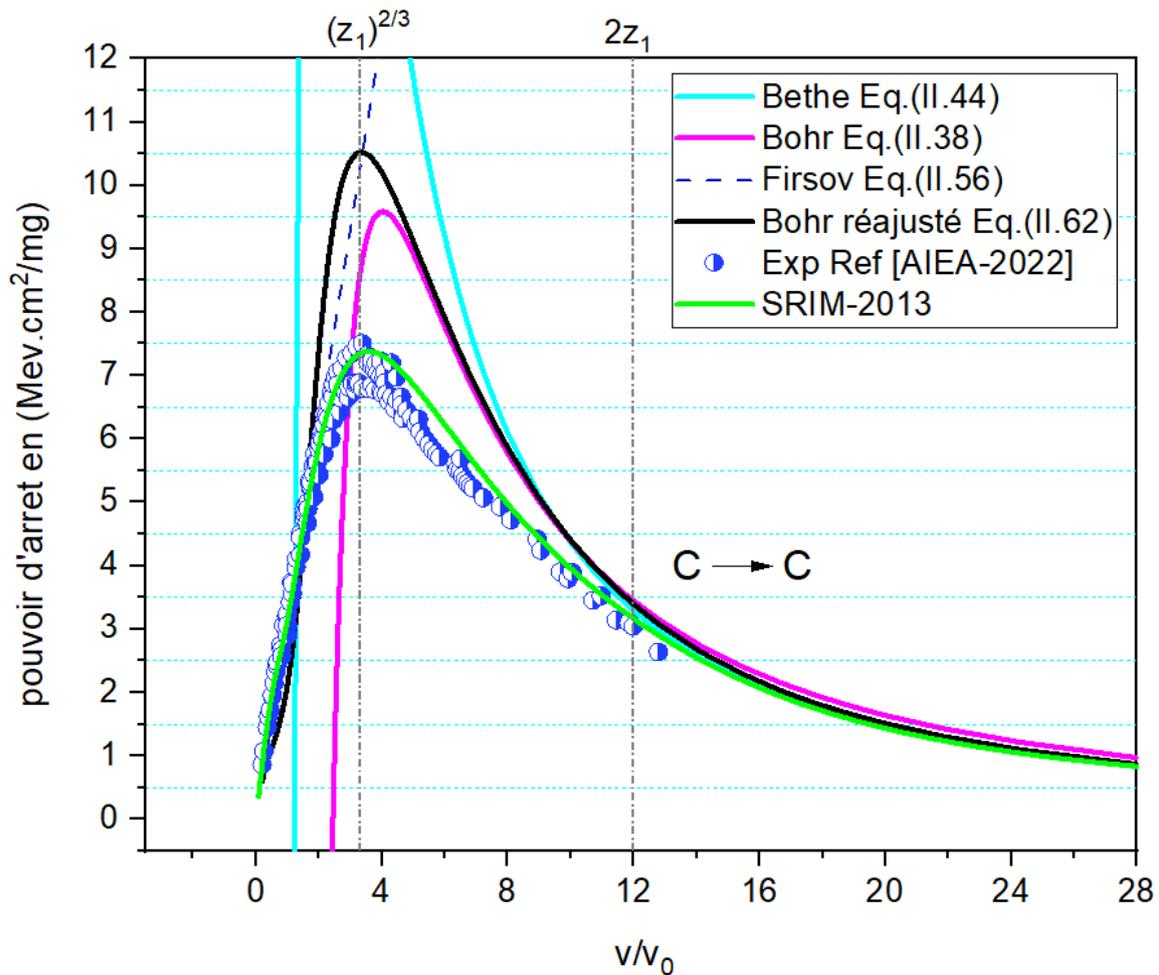


Fig.13 : pouvoir d'arrêt de l'ion ^{12}C dans la cible de ^{12}C en fonction de la vitesse réduite v/v_0 .

3. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{35}Cl dans ^{12}C

Les résultats de calcul ainsi que les données expérimentales du pouvoir d'arrêt électronique de ^{35}Cl dans ^{12}C en fonction de la vitesse réduite v/v_0 (de 0 à 45 correspondants à la gamme d'énergies 0.001-54.7Mev/u) sont résumés sur la Fig.14. En général, nous avons les mêmes observations et interprétations que pour le cas ^{16}O dans ^{12}C . De plus on constate dans ce cas (^{35}Cl - ^{12}C) que le maximum du pouvoir d'arrêt expérimental est atteint approximativement au voisinage de la vitesse réduite

$v/v_0 \sim 5,2$ qui est différent de la valeur $v_0(z_1)^{2/3} = 6.6$. A notre avis cela est dû au fait que la position de la valeur maximale du pouvoir d'arrêt dépend des nombres atomiques de l'ion incident et de l'atome cible comme le montre les données expérimentales de plusieurs couples (ion-cibles). Ce fait a été vérifié pour le cas de l'ion d'oxygène sur différents atomes cibles ainsi que de l'ion de chlore sur différentes cibles. Par ailleurs, le maximum du pouvoir d'arrêt donné par le modèle de Bohr réajusté se trouve approximativement ($v/v_0 = 5,1$) au même ordre de grandeur de la valeur expérimentale ($v/v_0 \sim 5,2$). Il est à noter que dans ce cas, les données expérimentales sont relativement faibles, ce qui induit une incertitude sur la position du maximum du pouvoir d'arrêt.

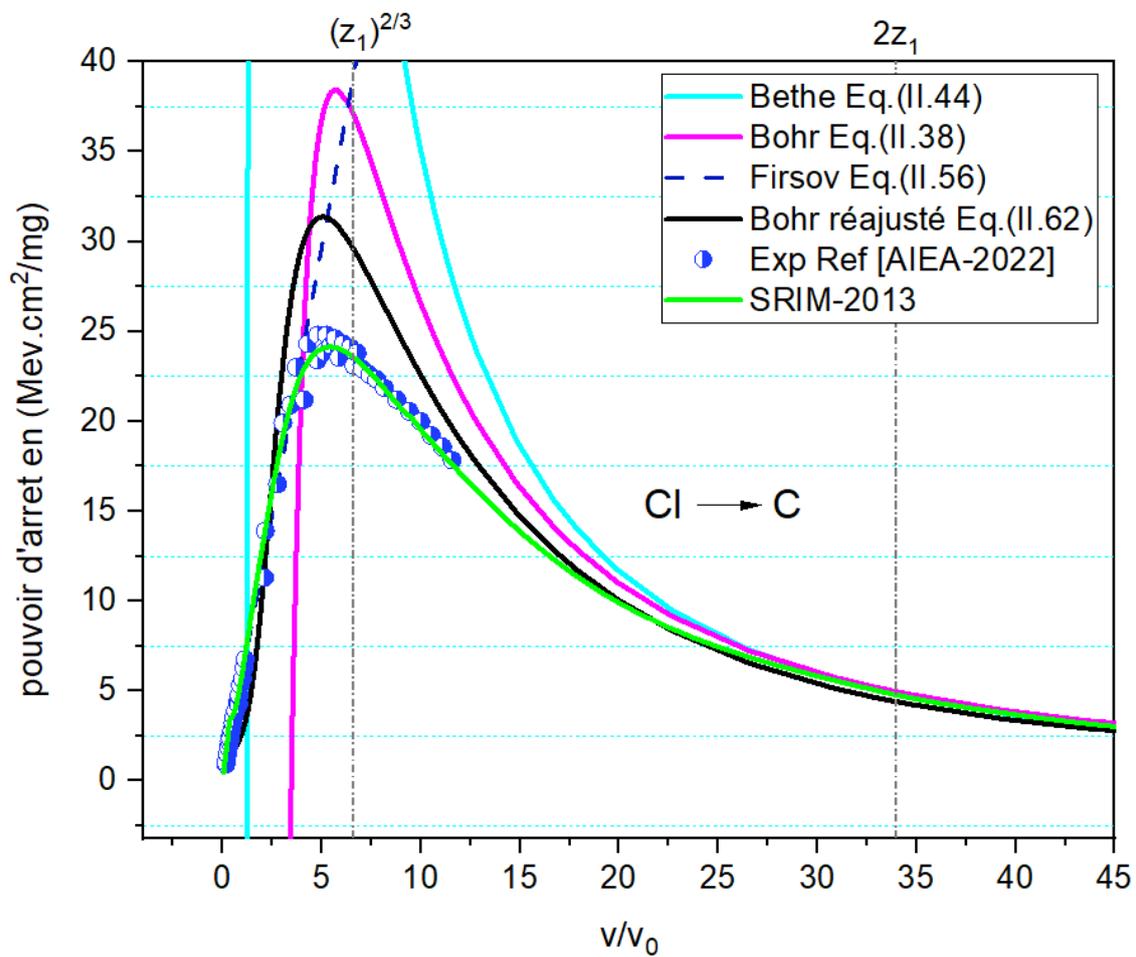


Fig.14 : pouvoir d'arrêt de l'ion ^{35}Cl dans la cible de ^{12}C en fonction de la vitesse réduite v/v_0 .

4. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{84}Kr dans ^{20}Ne

Les résultats de calcul ainsi que les données expérimentales du pouvoir d'arrêt électronique de ^{84}Kr dans ^{20}Ne en fonction de la vitesse réduite v/v_0 (de 0 à 45 correspondant à la gamme d'énergies 0.001-54.7 MeV/u) sont résumés sur la Fig.15. On constate en particulier ce qui suit :

- Pratiquement les mêmes résultats et les mêmes explications que dans le cas de ^{16}O dans ^{12}C . Cependant, comme il a été noté dans le cas de ^{35}Cl - ^{12}C , nous remarquons aussi que dans la zone intermédiaire, la position du pouvoir d'arrêt maximale que ce soit expérimental ou déduit du code SRIM est différente de la valeur de $(z_1)^{2/3}$. A partir de la Fig.15, il est clair que les données expérimentales du pouvoir d'arrêt (Kr-Ne) sont rares et dispersées ce qui influe sur la fiabilité du code SRIM pour ce couple dans la région $\frac{v}{v_0} \approx 20$ jusqu'à $\frac{v}{v_0} \approx 10$.
- Selon les données expérimentales disponibles pour ^{84}Kr - ^{20}Ne , il est difficile de localiser la position du pouvoir maximale, il nous paraît que la position du pouvoir maximale se trouve probablement entre $\frac{v}{v_0} = 7$ et $\frac{v}{v_0} \approx 10,9$. La position du pouvoir d'arrêt donnée par le modèle de Bohr réajusté ($\frac{v}{v_0} \approx 7,1$) se trouve dans cette zone, afin de confirmer cette conclusion des nouvelles données expérimentales sont nécessaires.
- Pour des vitesses faibles tel que $\frac{v}{v_0} < 7$, les valeurs calculées par le modèle de Bohr réajusté s'écartent légèrement des données expérimentales, cela est probablement due au fait que le modèle de Firsov ne décrit pas bien les valeurs du pouvoir d'arrêt à basse énergie, quand le nombre atomique (z) de projectile est très différent de la cible [Sug-1981]. Dans cette zone $\frac{v}{v_0} < 7$, nous avons une difficulté d'interprétation du fait que données sur les pouvoir d'arrêt sont déficients.

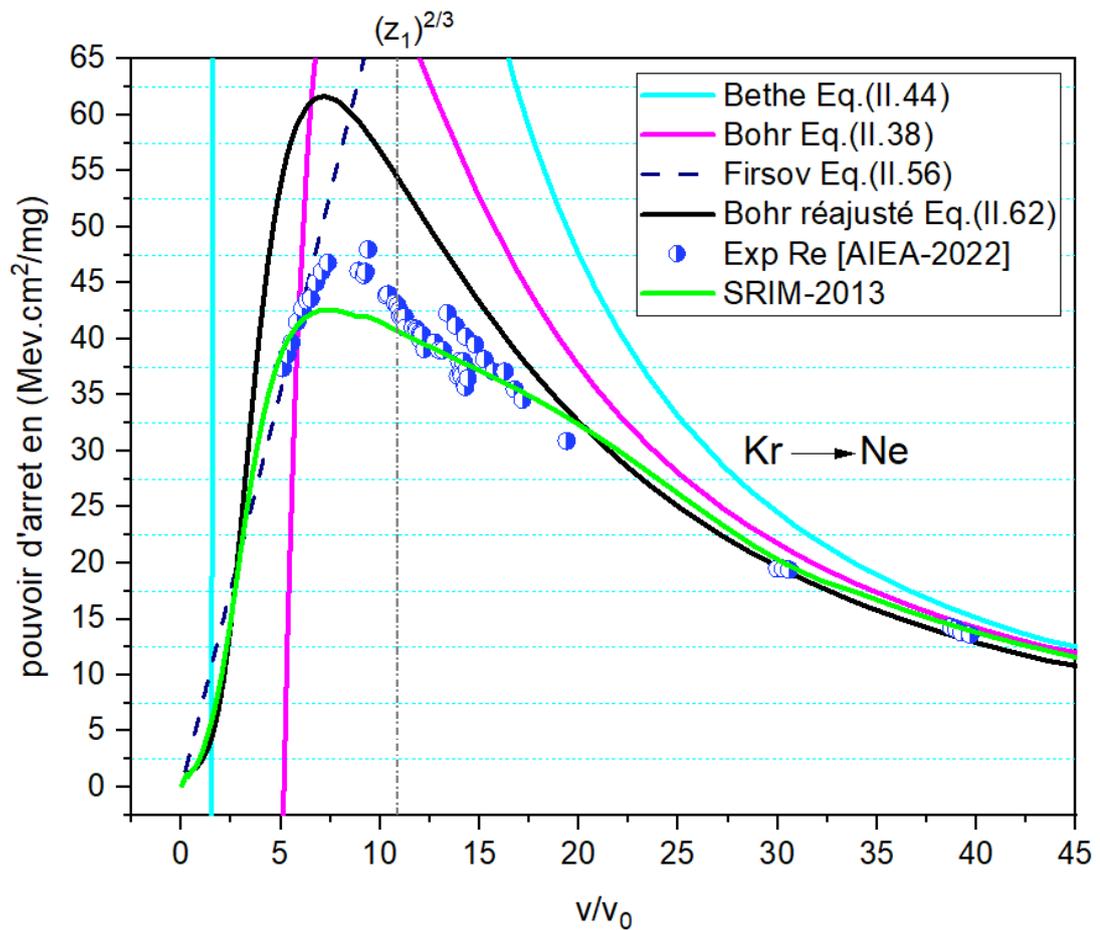


Fig.15 : Pouvoir d'arrêt de l'ion ^{84}Kr dans la cible de ^{20}Ne en fonction de la vitesse réduite v/v_0 .

5. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{84}kr dans ^{28}Si

Les résultats de calcul ainsi que les données expérimentales du pouvoir d'arrêt électronique de ^{84}kr dans ^{28}Si en fonction de la vitesse v/v_0 (de 0 à 52, correspondant à la gamme d'énergies 0.001-75 MeV/u) sont résumés sur la Fig.16. A partir de la Fig.16 on peut en déduire les même conclusions et interprétations que pour le cas Kr-Ne.

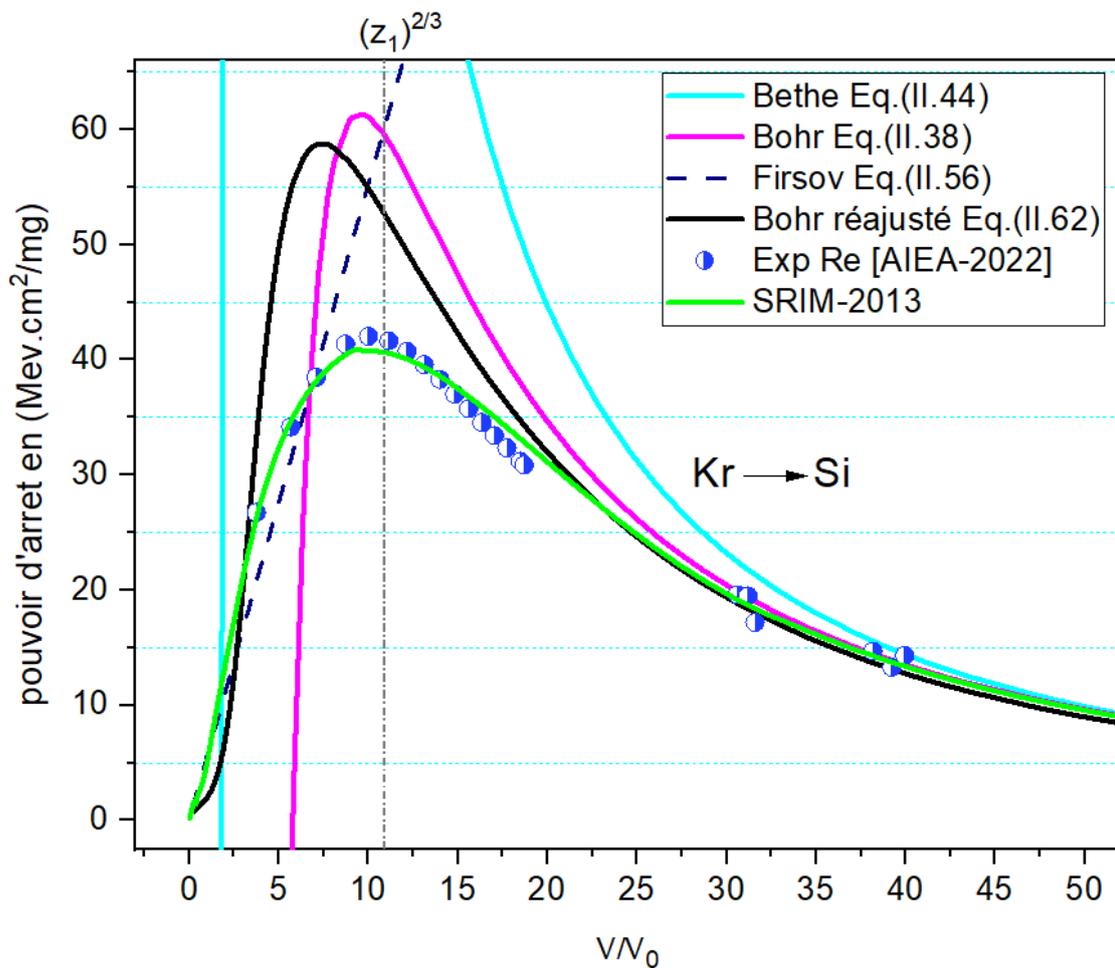


Fig.16 : pouvoir d'arrêt de l'ion ^{84}Kr dans la cible de ^{28}Si en fonction de la vitesse réduite v/v_0 .

6. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{84}kr dans ^{27}Al

Les résultats de calcul ainsi que les données expérimentales du pouvoir d'arrêt électronique de ^{84}kr dans ^{27}Al en fonction de la vitesse réduite v/v_0 (de 0 à 50 correspondants à la gamme d'énergies 0.20-68.97Mev/u) sont résumés sur la Fig. 17. A partir de la Fig.17, on peut en déduire les mêmes conclusions et interprétations que pour le cas ^{84}Kr - ^{20}Ne .

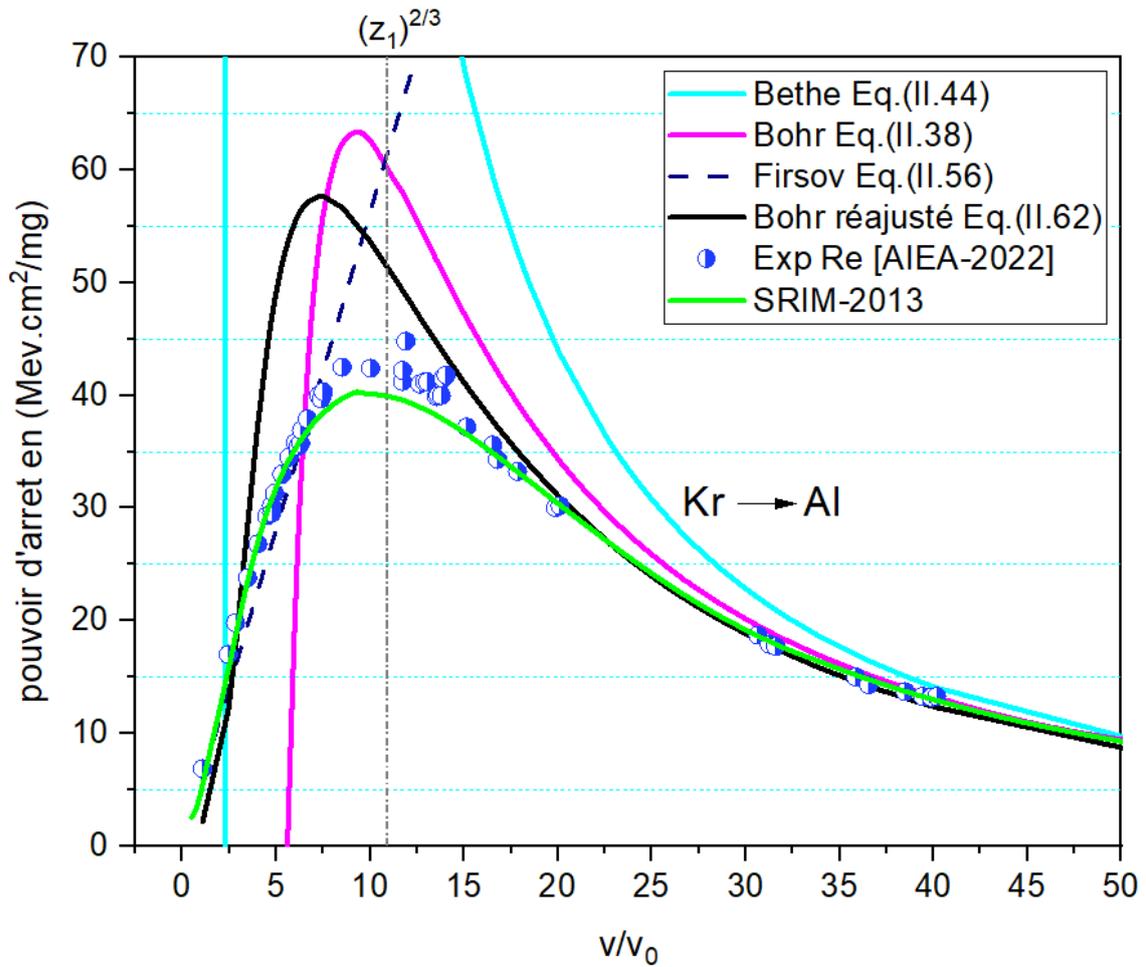


Fig.17 : Pouvoir d'arrêt de l'ion ^{84}Kr dans la cible de ^{27}Al en fonction de la vitesse réduite v/v_0 .

7. Pouvoir d'arrêt électronique de ^{56}Fe dans ^{28}Si

Les résultats de calcul ainsi que les données expérimentales du pouvoir d'arrêt électronique de ^{56}Fe dans ^{28}Si en fonction de la vitesse réduite v/v_0 (de 0 à 50, correspondant à la gamme d'énergies 0.001-68.97MeV/u) sont résumées sur la Fig.18. A partir de la lecture de la Fig.18, on constate que :

- Pratiquement les mêmes résultats et les mêmes explications que dans le cas de ^{16}O dans ^{12}C . Cependant, comme il a été noté dans le cas de ^{84}Kr - ^{20}Ne , nous remarquons que dans la zone intermédiaire la valeur maximale de Bohr réajusté ($\frac{v}{v_0} \approx 6.3$) ne correspond pas entièrement à la valeur de $(z_1)^{2/3} \approx 8.8$, cela est probablement dû au fait que les résultats du modèle de Firsov ne sont pas compatibles avec les données expérimentales et simulation SRIM, surtout aux régions entre $\frac{v}{v_0} \approx 1.5$ et $\frac{v}{v_0} \approx 5$

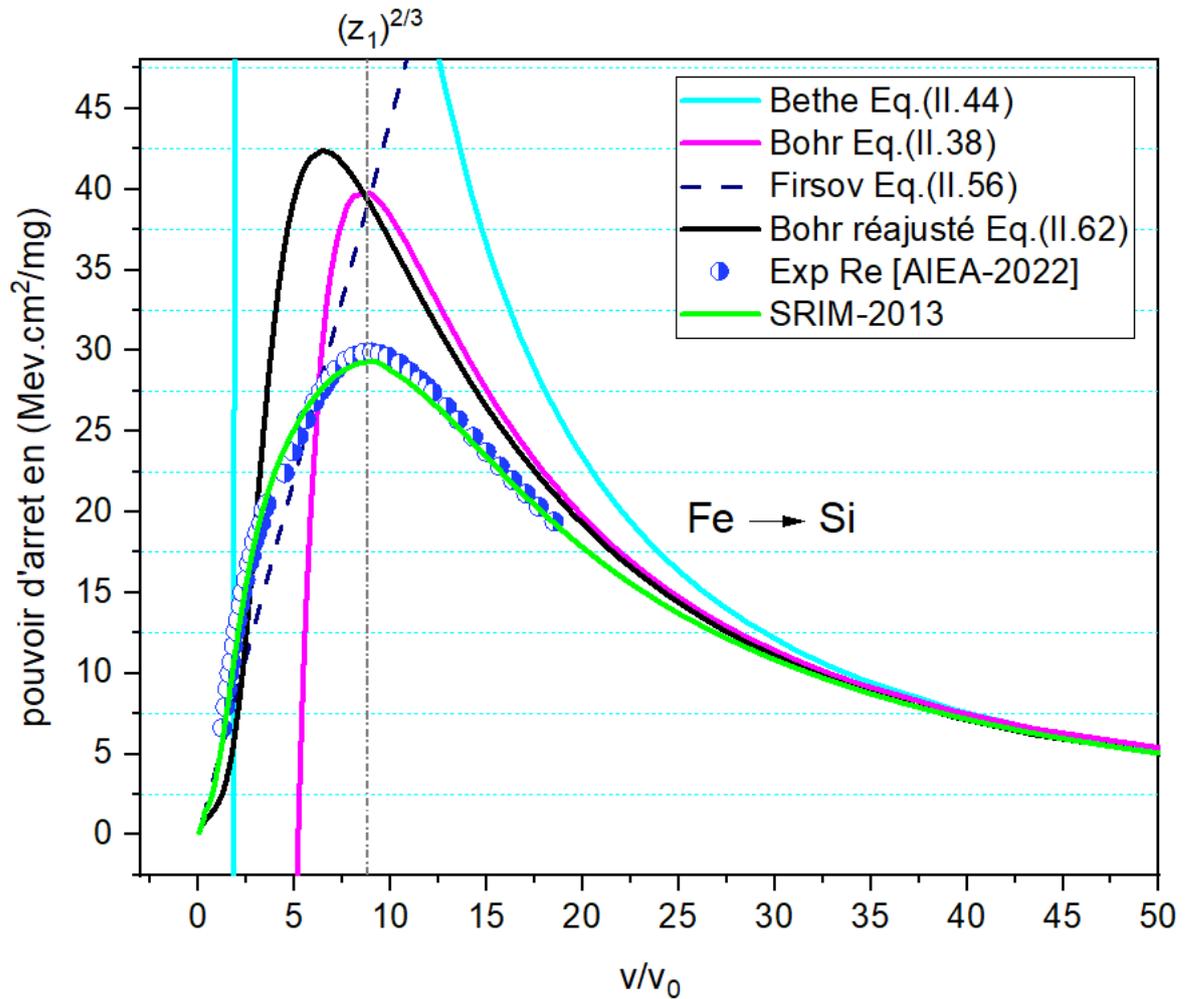


Fig.18 : pouvoir d'arrêt de l'ion ^{56}Fe dans la cible de ^{28}Si en fonction de la vitesse réduite v/v_0 .

8. Calcul des déviations des modèles théoriques étudiées

Dans le but d'étudier la déviation des valeurs calculées par les modèles théoriques avec les données expérimentales des pouvoirs d'arrêt, nous définissons l'écart relatif $\delta(\%)$ entre le pouvoir d'arrêt électronique expérimental et théorique comme suit [AIEA-2022] :

$$\delta(\%) = \frac{S_{exp} - S_{The}}{S_{exp}} * 100$$

où S_{exp} et S_{The} sont respectivement le pouvoir d'arrêt électronique expérimentale et théorique.

Les tableaux 2, 3, 4, 5, 6 et 7 résument les valeurs numériques du pouvoir d'arrêt calculées par les modèles étudiés ainsi que leurs déviations par rapport aux données expérimentales pour les couples $^{16}\text{O}-^{12}\text{C}$, $^{12}\text{C}-^{12}\text{C}$, $^{35}\text{Cl}-^{12}\text{C}$, $^{84}\text{Kr}-^{28}\text{Si}$, $^{84}\text{Kr}-^{27}\text{Al}$ et $^{56}\text{Fe}-^{28}\text{Si}$ respectivement.

8.1 Cas de l'ion ^{16}O dans la cible de ^{12}C

Zone de haute vitesse $\frac{v}{v_0} \gg Z_1^{\frac{2}{3}}$

Les valeurs du pouvoir d'arrêt électronique calculées par le modèle de Bohr, Bethe et Bohr réajusté sont pratiquement en accord avec les données expérimentales ainsi qu'avec la simulation SRIM-2013. A hautes vitesses, le pourcentage d'écart (δ) entre le calcul théorique et les données expérimentales disponibles fluctue pour chaque modèle comme suit :

- Le modèle de Bethe $0.2 < \delta < 7 \%$
- Le modèle de Bohr $2 < \delta < 10 \%$
- Le modèle de Bohr réajusté $0.4 < \delta < 2.7 \%$
- Pour le modèle de Firsov qui n'est pas applicable à haute vitesse son écart est supérieur à 100 %.

Zone de vitesse intermédiaire $\frac{v}{v_0} \approx Z_1^{\frac{2}{3}}$

Dans cette zone une déviation remarquable jusqu'à $> 100 \%$ entre les valeurs du pouvoir d'arrêts électroniques calculés par le modèle de Bohr ou Bethe ou Firsov par contre la déviation est modérée pour le cas du modèle de Bohr réajusté et elle fluctue entre 21% et 31%. On s'attend que cette déviation diminue en introduisant le terme de recouvrement dans le calcul de Bohr réajusté.

Zone de basse vitesse $\frac{v}{v_0} \ll Z_1^{\frac{2}{3}}$

Les valeurs du pouvoir d'arrêts électroniques calculées par le modèle de Bohr réajusté ou Firsov sont pratiquement en accord avec les données expérimentales ainsi qu'avec la simulation SRIM-2013. A basses vitesses, comme prévu le modèle de Bohr ou Bethe ne sont pas en accord avec les données expérimentales où l'écart atteint $> 100 \%$.

On remarque qu'à très faibles vitesses $0 < \frac{v}{v_0} < 1$, les écarts de Firsov et Bohr réajusté par rapport aux données expérimentales sont beaucoup plus élevés, ce qui est probablement dû au fait que dans les modèles de Firsov, le pouvoir d'arrêt nucléaire n'est pas pris en considération.

Energie (E/A_1) O----C	v/v_0	Bethe	Bohr	Firsov	Bohr réajusté	Exp (AIEA)	Bethe $\delta(\%)$	Bohr $\delta(\%)$	Firsov $\delta(\%)$	Bohr réajuste $\delta(\%)$	
Mev/u	-	<i>Mev.cm²/mg</i>					%				
0.019	0.88	-161.13	-811.36	3.17	1.94	2.32	> 100%	> 100%	-36.5	16.3	
0.069	1.67	41.16	-95.11	6.04	5.97	6.00			-0.6	0.5	
0.075	1.74	42.96	-79.87	6.29	6.51	6.50			3.2	-0.1	
0.081	1.81	44.13	-67.43	6.54	7.03	6.84			4.4	-2.8	
0.500	4.49	23.81	14.06	16.25	13.86	10.80		-30.2	-50.4	-28.3	
0.750	5.50	18.35	13.09	19.90	12.58	9.60	-91.1	-36.3	> 100%	-31.1	
0.906	6.04	16.14	12.27	21.87	11.81	9.40	-71.7	-30.5		-25.6	
1.375	7.45	12.02	10.16	26.94	9.89	8.17	-47.2	-24.4		-21.0	
1.868	8.68	9.60	8.61	31.40	8.43	7.24	-32.6	-18.9		-16.4	
2.012	9.01	9.08	8.25	32.59	8.08	6.88	-32.0	-19.8		-17.5	
2.508	10.06	7.69	7.22	36.39	7.08	6.47	-18.8	-11.6		-9.5	
2.980	10.96	6.74	6.47	39.66	6.34	5.92	-13.8	-9.3		-7.1	
3.024	11.04	6.66	6.41	39.95	6.28	5.76	-15.6	-11.3		-9.0	
3.740	12.28	5.65	5.57	44.43	5.43	5.29	-6.7	-5.4		-2.7	
4.614	13.64	4.78	4.83	49.36	4.67	4.71	-1.6	-2.5		0.8	
5.020	14.23	4.47	4.55	51.48	4.39	4.46	-0.3	-2.1		1.5	
5.865	15.38	3.95	4.08	55.64	3.90	3.89	-1.6	-4.9		-0.4	
7.000	16.80	3.43	3.59	60.79	3.40	3.42	-0.2	-5.0		0.5	
24.05	31.14	1.23	1.40	112.68	1.24	1.27	3.0	-10.1		2.3	
30.00	34.78	1.02	1.17	125.85	1.03	-	--	--	-	--	

Tableau.2 : les résultats du pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ^{16}O dans la cible de ^{12}C , aux énergies comprises entre (0.019-30 MeV/u).

8.2 Cas l'ion (^{12}C dans ^{12}C , ^{35}Cl dans ^{12}C , ^{84}Kr dans ^{28}Si et ^{27}Al , ^{56}Fe dans ^{28}Si)

De la même manière, les tableaux suivants représentent les valeurs de pouvoir d'arrêt électronique des ions ^{12}C dans ^{12}C , ^{35}Cl dans ^{12}C , ^{84}Kr dans ^{28}Si et ^{27}Al , ^{56}Fe dans ^{28}Si en fonction de la vitesse réduite v/v_0 , mesurées et calculées par les modèles suivants : Bethe, Bohr, Firsov et Bohr réajusté, ainsi que le pourcentage d'écart (δ) entre le calcul théorique et les données expérimentales avec chaque modèle comme suit :

Energie (E/A_1) C---C	v/v_0	Bethe	Bohr	Firsov	Bohr réajusté	Exp (AIEA)	Bethe δ (%)	Bohr δ (%)	Firsov δ (%)	Bohr réajuste δ (%)	
Mev/u	-	Mev.cm ² /mg					%				
0.050	1.42	15.37	-83.89	4.40	3.95	4.17	> 100%	> 100%	-5.6	5.3	
0.060	1.56	20.63	-58.18	4.82	4.74	4.89			1.3	3.0	
0.063	1.59	21.64	-52.42	4.94	4.98	4.96			0.3	-0.3	
0.067	1.64	22.72	-45.74	5.10	5.29	4.99			-2.2	-5.9	
0.071	1.69	23.54	-40.01	5.25	5.59	5.32			1.4	-5.0	
0.076	1.75	24.30	-33.92	5.43	5.95	5.31			-2.2	-12.0	
0.100	2.01	25.53	-15.18	6.23	7.46	5.83			-6.8	-27.9	
0.142	2.39	24.33	-1.16	7.42	9.16	6.72			-10.4	-36.3	
0.310	3.54	17.63	9.19	10.97	10.49	7.32			-25.6	-49.8	-43.3
0.677	5.22	11.04	8.67	16.20	8.84	6.12			-80.4	-41.6	-44.5
1.000	6.35	8.48	7.37	19.69	7.51	5.61	-51.2	-31.4	-33.8		
1.988	8.95	5.16	5.04	27.77	5.10	4.42	-16.6	-14.1	-15.4		
2.511	10.06	4.32	4.35	31.21	4.37	3.89	-11.1	-11.9	-12.2		
3.000	11.00	3.77	3.87	34.11	3.85	3.52	-7.1	-10.0	-9.4		
3.500	11.88	3.34	3.49	36.84	3.44	3.10	-7.9	-12.5	-11.0		
3.587	12.03	3.28	3.43	37.30	3.38	3.04	-7.9	-12.8	-11.2		
20.080	28.45	0.81	0.94	88.25	0.84	-	--	--	--	--	

Tableau.3 : les résultats du pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ¹²C dans la cible de ¹²C, aux énergies comprises entre (0.05-20 MeV/u).

Energie (E/A_1) Cl---C	v/v_0	Bethe	Bohr	Firsov	Bohr réajusté	Exp (AIEA)	Bethe δ (%)	Bohr δ (%)	Firsov δ (%)	Bohr réajuste δ (%)	
Mev/u	-	Mev.cm ² /mg					%				
0.110	2.11	204.22	-279.60	12.52	11.76	11.30	> 100%	> 100%	-10.8	-4.1	
0.686	5.26	87.88	37.87	31.26	31.33	24.80			-52.7	-26.1	-26.3
0.800	5.68	79.33	38.43	33.76	31.00	24.60			-56.2	-37.2	-26.0
0.852	5.86	76.02	38.38	34.84	30.78	23.55			-63.0	-47.9	-30.7
0.914	6.07	72.45	38.16	36.09	30.49	24.30			-57.0	-48.5	-25.5
1.029	6.44	66.73	37.46	38.29	29.88	24.10			-55.5	-58.9	-24.0
1.143	6.79	61.98	36.58	40.36	29.23	23.80			-53.7	-69.6	-22.8
1.366	7.42	54.55	34.65	44.12	27.94	22.58			-53.5	-95.4	-23.8
1.498	7.77	51.02	33.51	46.20	27.20	22.32			-50.1	> 100%	-21.9
1.653	8.16	47.47	32.21	48.53	26.36	21.85			-47.4		-20.6
2.209	9.44	38.23	28.17	56.10	23.67	20.55	-86.0	-37.1	-15.2		
2.491	10.02	34.90	26.48	59.58	22.50	19.98	-74.7	-32.5	-12.6		
2.766	10.56	32.21	25.02	62.78	21.46	19.21	-67.7	-30.2	-11.7		
3.059	11.11	29.81	23.64	66.02	20.47	18.57	-60.5	-27.3	-10.2		
3.339	11.60	27.85	22.47	68.97	19.60	17.83	-56.2	-26.0	-9.9		
20.00	28.40	6.50	6.53	168.81	5.88	-	--	--	--	--	

Tableau.4 : les résultats du pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ³⁵Cl dans la cible de ¹²C, aux énergies comprises entre (0.1-20 MeV/u).

Energie (E/A_1) Kr--Si	v/v_0	Bethe	Bohr	Firsov	Bohr réajusté	Exp (AIEA)	Bethe $\delta(\%)$	Bohr $\delta(\%)$	Firsov $\delta(\%)$	Bohr réajuste $\delta(\%)$	
Mev/u	-	Mev.cm ² /mg					%				
0.350	0.350	3.76	390.81	-334.27	20.74	26.74	> 100%	> 100%	22.4	-25.4	
2.500	10.04	127.37	62.19	55.43	54.98	42.04		-47.9	-31.9	-30.8	
3.100	11.18	109.13	59.77	61.73	52.10	41.66		-43.5	-48.2	-25.1	
3.700	12.21	95.85	56.70	67.44	49.37	40.75		-39.1	-65.5	-21.2	
4.300	13.17	85.71	53.63	72.70	46.88	39.58		-35.5	-83.7	-18.4	
4.900	14.06	77.67	50.76	77.61	44.62	38.31		-32.5	> 100%	-16.5	
5.500	14.89	71.14	48.13	82.22	42.57	37.02	-92.2	-30.0		-15.0	
6.100	15.68	65.71	45.75	86.59	40.71	35.76	-83.8	-27.9		-13.8	
6.700	16.44	61.12	43.59	90.75	39.01	34.56	-76.9	-26.1		-12.9	
7.900	17.85	53.76	39.86	98.54	36.04	32.35	-66.2	-23.2		-11.4	
8.800	18.84	49.40	37.48	104.00	34.12	30.87	-60.0	-21.4		-10.5	
24.15	31.21	21.87	19.45	172.29	18.36	19.60	-11.6	0.8		6.3	
25.12	31.83	21.17	18.92	175.72	17.86	19.50	-8.6	3.0		8.4	
25.80	32.25	20.71	18.56	178.08	17.53	17.20	-20.4	-7.9		-1.9	
48.00	43.99	12.33	11.77	242.90	11.01	48.000	-	-		-	-

Tableau.5 : les résultats du pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ⁸⁴Kr dans la cible de ²⁸Si, aux énergies comprises entre (0.35-48 MeV/u).

Energie (E/A_1) Kr--Al	v/v_0	Bethe	Bohr	Firsov	Bohr réajusté	Exp (AIEA)	Bethe $\delta(\%)$	Bohr $\delta(\%)$	Firsov $\delta(\%)$	Bohr réajuste $\delta(\%)$	
Mev/u	-	Mev.cm ² /mg					%				
0.200	2.84	441.43	-909.85	16.00	17.70	19.80	> 100%	> 100%	19.2	10.6	
0.300	3.48	414.97	-425.55	19.59	28.54	23.80		-46.8	-12.9	-33.3	
1.800	8.52	158.04	62.40	47.99	56.66	42.50		-47.5	-33.4	-26.3	
2.500	10.04	125.52	62.53	56.55	53.57	42.40		-28.1	-50.0	-8.9	
3.530	11.93	97.63	57.37	67.20	48.79	44.80		-86.1	-22.0	-89.1	-5.2
4.820	13.94	77.27	50.67	78.52	43.68	41.52		-81.7	-20.0	-90.0	-3.6
4.930	14.10	75.95	50.16	79.41	43.29	41.80	-65.6	-19.5	> 100%	-5.4	
6.850	16.62	58.95	42.53	93.61	37.53	35.60	-57.1	-17.4		-4.7	
8.003	17.96	52.19	39.00	101.18	34.80	33.23	-46.4	-14.3		-3.4	
9.949	20.03	43.94	34.31	112.81	31.05	30.02	-42.6	-11.9		-1.4	
10.20	20.28	43.08	33.79	114.23	30.63	30.20	-14.2	-1.7		4.8	
24.20	31.24	21.35	19.02	175.95	17.80	18.70	-15.3	-3.2		3.4	
25.21	31.88	20.64	18.48	179.58	17.29	17.90	-14.4	-2.7		3.9	
25.79	32.25	20.25	18.18	181.63	17.01	17.70	-9.8	-1.8		4.8	
35.01	37.57	15.70	14.56	211.62	13.61	14.30	-	-		-	-

Tableau.6 : les résultats du pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ⁸⁴Kr dans la cible de ²⁷Al, aux énergies comprises entre (0.2-35 MeV/u).

Energie (E/A_1) Fe-Si	v/v_0	Bethe	Bohr	Firsov	Bohr réajusté	Exp (AIEA)	Bethe δ (%)	Bohr δ (%)	Firsov δ (%)	Bohr réajuste δ (%)	
Mev/u	-	<i>Mev.cm²/mg</i>					%				
0.190	2.77	221.25	-472.51	12.26	16.47	17.30	> 100%	> 100%	29.1	4.8	
0.208	2.90	223.14	-400.07	12.83	18.30	18.10			29.1	-1.1	
0.233	3.07	222.74	-321.82	13.58	20.74	18.70			27.4	-10.9	
1.830	8.59	82.80	40.68	38.06	39.89	29.87			-36.2	-27.4	-33.6
2.420	9.88	68.20	39.14	43.77	37.13	29.62			-32.1	-47.8	-25.4
2.740	10.51	62.42	37.85	46.57	35.72	29.19			-29.7	-59.5	-22.4
3.530	11.93	51.92	34.59	52.86	32.58	27.77			-87.0	-24.5	-90.3
3.710	12.23	50.05	33.88	54.19	31.94	27.42	-82.5	-23.6	-97.6	-16.5	
4.170	12.97	45.88	32.17	57.45	30.41	26.51	-73.1	-21.4	> 100%	-14.7	
4.570	13.57	42.84	30.81	60.14	29.20	25.71	-66.6	-19.8		-13.6	
5.120	14.37	39.31	29.11	63.66	27.69	24.65	-59.5	-18.1		-12.3	
5.620	15.05	36.61	27.72	66.70	26.45	23.72	-54.4	-16.9		-11.5	
6.160	15.76	34.12	26.37	69.83	25.25	22.83	-49.5	-15.5		-10.6	
6.710	16.45	31.94	25.14	72.88	24.13	21.97	-45.4	-14.4		-9.8	
7.880	17.83	28.19	22.88	78.98	22.08	20.32	-38.7	-12.6		-8.7	
8.620	18.64	26.27	21.67	82.60	20.96	19.41	-35.3	-11.7	-8.0		
45.00	42.60	6.81	6.81	188.73	6.43	-	--	--	--	--	

Tableau.7 : les résultats du pouvoir d'arrêt électronique de l'ion ^{56}Fe dans la cible de ^{28}Si , aux énergies comprises entre (0.19-45 MeV/u).

Conclusion

Nous avons étudié le modèle analytique général de Bohr réajusté décrivant le pouvoir d'arrêt électronique des ions lourds dans la matière pour un système ion-cible et pour des énergies non relativistes [Gue-2020]. Ce modèle est basé sur la combinaison de deux approches via un concept probabiliste. Dans ce modèle les collisions lointaines sont décrites par le modèle de Firsov [Fir-1958] et les collisions proches sont décrites par le modèle de Bohr [Boh-2013].

Les résultats obtenus ont été comparés avec le modèle de Bethe, Bohr, Firsov, les données expérimentales existantes [AIEA-2022], et les valeurs obtenues par le code semi-empirique SRIM-2013. Cette comparaison nous a permis de voir que les modèles théoriques du pouvoir d'arrêt électronique sont valables uniquement sur une gamme d'énergies (soit à basse vitesses [Fir-1958], soit à haute vitesses [Boh-1913, Bet-1930]). Par contre le modèle de Bohr réajusté reproduit bien la forme du pouvoir d'arrêt électronique dans les trois régions (haute vitesse, faible vitesse, vitesse intermédiaire) et reproduit pratiquement les données expérimentales des deux zones hautes et basses vitesses. Aux vitesses intermédiaires, nous avons constaté que les valeurs calculées par le modèle de Bohr réajusté sont nettement supérieures aux données expérimentales (16%-50%). Cette déviation dans la zone intermédiaire est interprétée par le fait que le terme négatif de recouvrement a été négligé.

Malgré les progrès des travaux expérimentaux et théoriques sur la détermination de pouvoir d'arrêt électronique des ions lourds sur une large gamme d'énergies, nous sommes encore loin de comprendre les mécanismes exacts des processus physiques participant aux ralentissements des ions lourds dans la matière. Ceci est particulièrement vrai pour les faibles vitesses et les vitesses intermédiaires, comme c'est le cas de l'ion ^{84}Kr dans la cible de ^{84}Ne .

Nous nous attendons à ce que l'écart observé entre nos calculs et les données expérimentales aux énergies intermédiaires puisse être réduit en incluant dans nos calculs le terme de recouvrement négatif qui tient compte de la probabilité d'occurrence simultanée des collisions proches et distantes. De plus, un choix raffiné des probabilités P_H et P_L et de la borne supérieure p_0 peuvent encore réduire l'écart observé aux énergies intermédiaires. La formule analytique proposée devrait être valide pour d'autres systèmes projectile-cible, mais davantage de données expérimentales sont nécessaires pour vérifier cette affirmation. Nous pouvons donc conclure que le pouvoir

d'arrêt électronique donné par l'Eq (II.62) devrait être utile pour prédire le pouvoir d'arrêt électronique lorsque peu ou pas de données expérimentales sont disponibles. À la lumière des tendances observées, l'approche proposée pour évaluer le pouvoir d'arrêt électronique peut être améliorés en poursuivant l'un des axes de recherche suivantes :

- (i) La modélisation et l'inclusion dans l'Eq. (II.59) du terme de recouvrement
- (ii) En utilisant des formes alternatives pour les probabilités P_H ou P_L ,
- (iii) En remplaçant le modèle de Firsov par n'importe quel modèle de Firsov modifié (en ajustant deux paramètres liés à la charge de l'ion et au degré d'ionisation des électrons atomiques dans l'atome cible) [Sug-1977, Kom-1973].

Référence :

[AIEA-2022] <https://www-nds.iaea.org/stopping/>.

[Aug] <http://www.slideshare.net/suhahudhud/auger-effect-puplic>.

[Aug-1923] P. Auger, Comptes Rendus Acad. Sci. Paris, 177 (1923) 169 et 180 (1925) 65.

[Bet-1930] H. A. Bethe, Ann. Physik. 397, 3, (1930) 325-400.

[Bet-1972] H.D. Betz, Rév. Mod. Phys. 44 (1972) 465.

[Blo-1933] F. Bloch, Ann. Physik, 408, 3, (1933)285-320.

[Boh-1913] N. Bohr Dr. phil. (1913): II. On the theory of the decrease of velocity of moving electrified particles on passing through matter , Philosophical Magazine Series 6, 25:145, 10-31

[Boh-1954] N.Bohr and J. Lindhard, Dan.Mat. Fys.MEDD.28, No.7 (1954)

[Bor-1926] M. Born, Z. Phys., 38 (1926) 803.

[Bur-1992] Burenkov, A. F., Komarov, F. F. and Fedotov, S. A. (1992b). "The ion charge statefluctuation effect during high energy ion implantation: Monte-Carlo simulation,"Nucl. Instrum. Methods B 67, 35.

[Cel-2013] C.E.Celedon, E.D.Cantero, G.H. Lantschner, N.R. Arista, ,Nucl. Instr. Meth. B 315 (2013) 21-25.

[Chu-1978] W. K. Chu, J. W. Mayer and M. A. Nicolet, Backscattering spectroscopy, AcademicPress, New york, (1978).

[Dam-2007] S. DAMACHE, Etude du ralentissement des protons et des particules alpha d'énergies $\sim(0.2 -3.4)$ MeV/u dans le nickel, le polypropylène, le mylar et le fluorure de lithium. Aspects expérimental et théorique, Thèse de doctorat. Université des sciences et de la technologie "HOUARI BOUMEDIENE " , (2007).

[Dec-2003] W. J. Decoursey, Statistiques et probabilités pour les applications d'ingénierie, Newnes, (2003).

[Fan-1947] U. Fano. Phys. Rev. 72, 26 (1947).

[Fir-1958] O. B. Firsov, J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.) **34**, 447 (1958), Soviet Phys. JETP **7**, 308 (1958).

[Fir-1959] O. B. Firsov, Sov. Phys. JETP, 36(9), N°5, (1959)1076-1080.

[Gal-1990] A. Galindo, P. Pascual, Quantum mechanics II, Springer-Verlag New York Berlin Heidelberg, (1990).

[Gue-2016] A.Guesmia, Contribution to the study of the fundamental physical parameters (stopping power, ionization potential and energy straggling) describing the slowing down of heavy ions in solid material, Thèse de doctorat. Université M'hemed Bougara de Boumerdés .

[Gue-2020] A. Guesmia et al. /physicLetter A 384 (2020).

[Khe-2017] K. Mahdi, comparaison between Firsov and Lindhard-Scharff-Schiott (LSS)), Mémoire de Master académique . Université Saad Dahleb Blida1, 2017.

[Kom-1973] F.F. Komarov, M.A. Kumakhov, Phys. Status Solidi (b) 58 (1973) 389–400.

[Kor-2006] S.Korostiy, Spectroscopic Investigation of the charge Dynamics of Heavy Ions Penetrating Solid and Gaseous Trgets, Thesis (2006).

[Lin-1963] J. Lindhard, M. Scharff, Mat. Fys.Medd. Dan. Vid. Selsk. 33 (14),(1963) 1-42.

[Mar-1974] T. Robinson et Ian M. Torrens, « *Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation* », Physical Review B, vol. 9, n° 12, 15 juin 1974, p. 5008–5024 ([DOI 10.1103/PhysRevB.9.5008](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.9.5008), consulté le 22 novembre 2019)

[Mon-2017] C.C. Montanari, P. Dimitriou, Nucl. Instrum. Methods B 408 (2017) 50–55.

[Nas-1996] M. Nastasi, J. Mayer and J. K. Hirvonen. Ion-solid interactions. Fundamentals and applications (CUP, 1996).

[Nee-2009] Neetu, Pratibha, V . Sharma, P.K. Diwanad Shyam kumar. Radiat, Meas. 44 (2009) 363-368.

[Nor-1963] L.C.Northcliffe, Ann. Rev. Nucl. Sci. 13 (1963)67.

[Nou-2010] R.Nouri , Etude par spectroscopie de rétrodiffusion Rutherford de l'implantation ionique de Sb⁺ dans Si. Effet de l'orientation du détecteur sur les spectres obtenus, Thèse de magister en physique .Université de constantine 2010.

[Ogu-2007] Y. Oguri, T. Niinou, S. Nishinomiya, K. Katagiri, J. Kaneko, J. Hasegawa, M. Ogawa, Nucl. Instrum. Methods A 577 (2007) 381–385.

[Paul-2013] H. Paul, Stopping power for heavy, <http://www.exphs.un-linz.ac.at/stopping/>.

[Paul-2014] H. Paul, private communication (2014).

[Sig-1997] P. Sigmund, "Charge - dependent electronic stopping of swift nonrelativistic heavy ions", Phys. Rev. A, Vol. 56, No. 5, p.p. (3781- 3792), (1997).

- [**Sig-2006**] P. Sigmund, Particle Penetration and Radiation Effects, Vol. 1, General Aspects and Stopping of Swift Point Charges, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2006.
- [**Smi-1997**] R. Smith et al, Atomic and Ion Collisions in Solids and Surfaces, R.Smith (Ed), 1997.
- [**SRIM-2013**] <http://www.srim.org> (consulté le 22 novembre 2019).
- [**Sug-1977**] H. Sugiyama, J. Phys. Soc. Jpn. 43 (5) (1977) 1702–1707.
- [**Sug-1981**] H.Sugiyama, Radiat. Eff. 56 (1981) 205-212.
- [**She-2000**] Dr. Mohamed Shehadeh Al-Daghma et Prof. Dr. Ali Mohamed Juma. Physique nucléaire, Partie 2 p. 139 (2000).
- [**Tep-1962**] Ya.A. Teplova, V.S. Nikolaev, I.S. Dmitriev, L.N. Fateeva, Sov. Phys. JETP 15 (1) (1962) 31-41.
- [**Tur-1968**] Dalton, P.,and J.E., Turner 1968,Health Phys.15,257.
- [**Zie-1977**] J.F. Ziegler, Hydrogen stopping powers and Ranges in all Elements, vol.3,Pergamon,New York, 1977.
- [**Zie-1985**] F. Ziegler et Jochen P. Biersack, « *The Stopping and Range of Ions in Matter* », dans *Treatise on Heavy-Ion Science: Volume 6: Astrophysics, Chemistry, and Condensed Matter*, Springer US, 1985), p. 93–129.
- [**Zie-2008**] J.F. Ziegler, J.P.Biersack,M.D. Ziegler;SRIM The Stopping and Range of Ions in Matter (2008).
- [**Zie-2010**] F. Ziegler, M. D. Ziegler et J. P. Biersack, , Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 19th International Conference on Ion Beam Analysis, vol. 268, n° 11, 1^{er} juin 2010, p. 1818–1823.