

N° d'ordre : 3597

THÈSE

En vue de l'obtention du : **DOCTORAT**

Centre de Recherche : en Énergie

Structure de Recherche : Équipe d'Énergétique et Physique des Réacteurs Nucléaires,

Sécurité Nucléaire et Environnement (PRESN).

Discipline : Physique.

Spécialité : Physique Nucléaire.

Présentée et soutenue le 19/02/2022 par :

Jaouad El ASRI

UTILISATION DES METHODES NUMERIQUES POUR LE CALCUL DE LA PERTE D'ENERGIE ELECTRONIQUE ET NUCLEAIRE DES PARTICULES CHARGEES DANS LES MATERIAUX POLYMERES.

JURY

Hamid EZ-ZAHRAOUI	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V - Rabat	Président
Abdelkader BOULEZHAR	PES, Faculté des Sciences, Université Hassan II -Casablanca	Rapporteur/Examineur
Lahoucine BAHMAD	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V -Rabat	Rapporteur/Examineur
Abdelmajid SAIDI	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V -Rabat	Rapporteur/Examineur
Omar EL BOUNAGUI	PH, Faculté des Sciences, Université Mohammed V -Rabat	Examineur
Hassane ERRAMLI	PES, Faculté des Sciences, Université Cadi Ayyad -Marrakech	Co. Encadrant
Abdelouahed CHETAINE	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V -Rabat	Directeur de Thèse

Année Universitaire : 2021/2022

N° d'ordre : 3597

THÈSE

En vue de l'obtention du : **DOCTORAT**

Centre de Recherche : en Énergie
Structure de Recherche : Équipe d'Énergétique et Physique des Réacteurs Nucléaires,
Sécurité Nucléaire et Environnement (PRESN).
Discipline : Physique.
Spécialité : Physique Nucléaire.

Présentée et soutenue le 19/02/2022 par :

Jaouad El ASRI

**UTILISATION DES METHODES NUMERIQUES POUR LE CALCUL DE LA
PERTE D'ENERGIE ELECTRONIQUE ET NUCLEAIRE DES PARTICULES
CHARGEES DANS LES MATERIAUX POLYMERES.**

JURY

Hamid EZ-ZAHRAOUI	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V - Rabat	Président
Abdelkader BOULEZHAR	PES, Faculté des Sciences, Université Hassan II -Casablanca	Rapporteur/Examineur
Lahoucine BAHMAD	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V -Rabat	Rapporteur/Examineur
Abdelmajid SAIDI	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V -Rabat	Rapporteur/Examineur
Omar EL BOUNAGUI	PH, Faculté des Sciences, Université Mohammed V -Rabat	Examineur
Hassane ERRAMLI	PES, Faculté des Sciences, Université Cadi Ayyad -Marrakech	Co. Encadrant
Abdelouahed CHETAINE	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V -Rabat	Directeur de Thèse

Année Universitaire : 2021/2022

✉ Faculté des Sciences, avenue Ibn Battouta, BP. 1014 RP, Rabat -Maroc

☎ 00212(05) 37 77 18 76 📠 00212(05) 37 77 42 61; <http://www.fsr.um5.ac.ma>

Je dédie cette thèse :

A ma mère que je remercie infiniment pour son soutien, que Dieu s'accorde santé et une longue vie.

A mon épouse Laila

Pour sa patience et ses encouragements dans les périodes difficiles.

A mes frères et sœurs, mes garçons Mohamed, Jad Arrahmane et ma fille Malak.

A ma belle famille.

A mes collègues et professeurs du Laboratoire de Physique Nucléaire, de la faculté des Science UMR5- Rabat et de la faculté des Sciences FSS -Marrakech.

A tous mes amis.

Merci.

Remerciements

Ce travail de thèse s'est déroulé au sein de la Structure de Recherche de l'Équipe d'Énergétique et Physique des Réacteurs Nucléaires, Sécurité Nucléaire et Environnement, Centre de Recherche en Énergie de la Faculté des Sciences, Université Mohammed V de Rabat sous la direction de Professeur **Abdelouahed CHETAINE**.

Ce travail de recherche est le fruit d'une étroite collaboration entre la Structure de Recherche de l'Équipe d'Énergétique et Physique des Réacteurs Nucléaires, Sécurité Nucléaire et Environnement et l'équipe de physique et techniques nucléaires de la Faculté des Sciences Semalalia de l'Université Cadia Ayyad

D'abord et avant tout, j'aimerais exprimer mon appréciation et ma profonde gratitude à mon directeur de thèse Monsieur **Abdelouahed CHETAINE**, Professeur d'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat, pour m'avoir proposé ce sujet de thèse et pour avoir dirigé mes travaux scientifiques. Je le remercie très sincèrement pour la relecture minutieuse des différentes parties de cette thèse et pour les précieux conseils et encouragements qu'il n'a cessé de m'apporter.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à Monsieur **Hassane ERRAMLI**, Professeur d'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences Semlalia-Marrakech, mon Co-directeur de thèse. Je le remercie pour l'enthousiasme, la patience et la disponibilité qu'il a toujours témoignés à mon égard. Ses idées, ses suggestions et les discussions innombrables avec lui m'ont été d'un grand intérêt pour mener à bien ce travail. Qu'il sache que toute ma reconnaissance lui est acquise. J'apprécie ses compétences scientifiques et ses qualités humaines.

J'exprime toute ma reconnaissance à Monsieur **Hamid EZ-ZAHRAOUY**, Professeur d'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat, pour avoir accepté de présider le jury de cette thèse.

Je voudrais également adresser mes vifs remerciements à Monsieur **Abdelkader BOULEZHAR**, Professeur d'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences - Casablanca, d'avoir accepté de relire minutieusement cette thèse, d'en être rapporteur et d'en être examinateur.

Je tiens également à remercier Monsieur **Lahoucine BAHMAD**, Professeur d'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat, pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de rapporter et d'examiner cette thèse.

J'aimerais aussi remercier sincèrement Monsieur **Abdelmajid SAIDI**, Professeur d'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat, d'avoir accepté de relire consciencieusement cette thèse, d'en être rapporteur et de l'examiner.

Je tiens également à remercier Monsieur **Omar EL BOUNAGUI**, Professeur d'Habilité à la Faculté des Sciences-Rabat, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant le rôle d'examineur et d'être membre du jury de cette thèse.

Merci aussi à mes amis pour leurs soutiens et encouragements.

RESUME

Titre de la thèses : Utilisation des méthodes numériques pour le calcul de la perte d'énergie électronique et nucléaire des particules chargées dans les matériaux polymères.

Le but de cette thèse est d'apporter une contribution à la détermination de la perte d'énergie des particules chargées dans les matériaux à base des polymères. La première partie de l'ouvrage comporte un exposé détaillé des processus de la perte d'énergie des particules chargées lourds avec la matière. L'étude réalisée se base sur le développement d'un code de calcul basé sur la méthode de Monte Carlo qui permet de calculer la perte d'énergie électronique des particules chargées lourds dans les polymères, dans le domaine de LSS pour des énergies comprises entre 0,1 à 1 MeV/nucléon. Les résultats trouvés ont été comparés à ceux trouvés expérimentalement et à ceux trouvés par d'autres codes de calcul à savoir SRIM et MSTAR. Un autre programme de calcul, basé sur la méthode Monte Carlo, a été également développé pour la détermination de la perte d'énergie nucléaire des particules chargées dans les matériaux amorphes (SiO₂, LiF et Kapton). Nous avons obtenu des résultats encourageants qui concordent avec ceux obtenus par les codes SRIM, PSTAR et ASTAR, avec un écart est inférieure à 5%. Le programme développé présente l'avantage d'être rapide et appliquée à différents matériaux ralentisseur et pour différents particules chargées de différentes énergies.

Mots clés: Pouvoir d'arrêt; Simulation de Monte Carlo; Théorie LSS modifiée, Codes SRIM et MSTAR; Matériaux polymères.

ABSTRACT

Electronic and Nuclear Stopping Powers of Polymeric Materials for Heavy Ions: LSS Modified Theory and Monte Carlo Simulation.

The aim of this thesis is to make a contribution to the determination of the energy loss of charged particles in materials based on polymers. The first part of the thesis includes a detailed theory of the processes of energy loss of heavy charged particles in matter. The study carried out is based on the development of a computer code based on the Monte Carlo method which makes it possible to calculate the electronic energy loss of heavy charged particles in polymers, in the LSS domain for the energy range between 0.1 to 1 MeV/nucleon. The results found were compared with those found experimentally and with those found by other computer codes, namely SRIM and MSTAR. Another calculation program, based on the Monte Carlo method, has also been developed for the determination of the nuclear energy loss of charged particles in amorphous materials (SiO₂, LiF and Kapton). We obtained excellent results which a good agreement with those obtained by the SRIM, PSTAR and ASTAR codes, with a difference less than 5%. The program developed in this study has the advantage of being fast and can be applied to different materials and for all types of projectile particles of different energies.

Key words: Electronic and nuclear stopping power; LSS modified theory; Monte Carlo simulations; SRIM and MSTAR codes; Polymeric materials.



SOMMAIRE

Table des matières

Remerciements.....	i
RESUME	vi
ABSTRACT	vii
Liste des tableaux	xii
Liste des figures.....	xiii
Liste des Abréviations	xv
INTRODUCTION GENERALE.....	1

CHAPITRE I : LES PRINCIPAUX PROCESSUS D'INTERACTIONS DES PARTICULES CHARGÉES AVEC LA MATIERE.

Introduction :.....	5
I.1.Collisions électroniques :.....	7
I.1.1.principe :.....	7
I.1.2-ionisation.....	7
I.1.3- excitations.....	8
I.1.4-rayonnement de freinage :.....	9
I.2-Principe des collisions nucléaires :	11
I.2.1-Les sections efficaces différentielles.....	11
I.2.1.1.Définition.....	11
I.2.2.Conservation énergétique d'une collision élastique (nucléaire).	13
I.2.2.1.Principe la rétrodiffusion de rutherford (rbs)	16

I.2.2.2.Facteur cinématique	17
I.2.2.2.1.Définition.....	17
I.2.2.2.2.Les effets des paramètres sur le facteur cinématique	17
I.2.2.2.2.1.Effet de la masse	17
I.2.2.2.2.2.Effet de l'angle de diffusion	17
I.2.3.Détermination de l'énergie transmise à la cible	18
I.3.Le pouvoir d'arrêt :	18
I.3.1.Expression de la perte d'énergie linéiques	19
I.3.1.1. Perte d'énergie électronique dans le domaine de $V_1 > V_0 Z_1^{2/3}$	20
I.3.1.2.La perte d'énergie électronique et la section efficace électronique	23
I.3.1.2.1.La perte d'énergie électronique :	23
I.3.1.2.2.la perte d'énergie électronique domaine : $V_1 > V_0 Z_1^{2/3}$	23
I.3.1.2.3. Domaine de vitesses intermédiaires : $V_1 = V_0 Z_1^{2/3}$	26
I.3.1.2.4. Domaine de faible vitesse : $V_1 < V_0 Z_1^{2/3}$	26
I.3.1.2.4.1.Perte d'énergie électronique :	26
I.3.1.2.4.2.Perte d'énergie nucléaire :	26
I.3.1.2.5.Perte d'énergie globale :	31
I.4. Parcours de la particule dans la matière :	32
REFERENCES	35

**CHAPITRE II: DÉTERMINATION DU POUVOIR D'ARRÊT ÉLECTRONIQUE DES
MATÉRIAUX POLYMÈRES PAR UTILISATION DE LA MÉTHODE
DE MONTE CARLO**

Introduction :	39
II.1.Le pouvoir d'arrêt électronique d'un matériau aux faibles vitesses :	39
II.2. LA MÉTHODE DE SIMULATION :	42

II.3. Résultats et discussion :	45
II.4. Conclusion :	60
REFERENCE:	61

**CHAPITRE III : DÉTERMINATION DE LA PERTE D'ÉNERGIE NUCLÉAIRE DES IONS
LOURDS DANS LES CIBLES POLYATOMIQUES : UTILISATION DE
LA MÉTHODE DE SIMULATION DE MONTE CARLO.**

INTRODUCTION:	66
III.1. POUVOIR D'ARRÊT NUCLÉAIRE :	66
III.2. MÉTHODE DE CALCUL:	70
III.3. CHOIX DES MATÉRIAUX :	73
III.4. RÉSULTATS ET DISCUSSION:	76
III.5. CONCLUSION :	89
REFERENCES:	90

**CHAPITRE IV : CALCUL DE LA PERTE D'ÉNERGIE ÉLECTRONIQUE DES IONS
LOURDS DE FAIBLES DES ÉNERGIES**

Introduction:	94
IV.1. Méthode et calcul :	95
IV.2. Résultats et discussion :	99
IV.3. Conclusion :	111
REFERENCES:	112
CONCLUSION GENERALE	114
<u>ARTICLES</u>	117

Liste des tableaux

Tableau II .1 : Nombre atomique moyen la masse atomique moyenne ,.....	46
Tableau.II.2 : Pouvoir d'arrêt électronique de la cible polymère Mylar pour l'ion légère 11B	59
Tableau III.1 : Numéro atomique moyen et la masse atomique moyenne de dioxyde de silicium,	73
Tableau III 2 : Représente la comparaison des parcours et calculées pour Au et Bi dans SiO ₂	87
Tableau III.3 : Représente la comparaison des parcours et calculées pour Br et Hg dans SiO ₂	88
Tableau IV -1 : Nombre atomique moyen, la masse atomique moyenne et l'énergie d'excitationI	99

Liste des figures

Chapitre I :

Figure I.1:Représentation des caractéristiques de rayonnements et les différentes interactions	6
Figure I. 2:Phénomène d'ionisation	7
Figure I. 3:Phénomène d'excitation	8
Figure I. 4:Phénomène de freinage	9
Figure I. 5:Schéma de représentation des Trois types interactions «électron –matière».....	10
FigureI. 6:Evolution schématique d'un ion dans la matière solide. L'ion perd progressivement	12
FigureI. 7:Représentation d'une collision entre la particule projectile de masse M1 et P0 quantité	13
Figure I. 8:Schéma d'une collision élastique de Rétrodiffusion de Rutherford (RBS) ion incident	16
Figure I. 9:Interaction de particule incident de M1 et V1 avec l'atome de M2	22
Figure I. 10:Fonction de diffusion universelle (Thomas-Fermi) définie par Lindhard	30
Figure I. 11:Sections efficaces d'arrêt nucléaires et électroniques.	32
Figure I. 12:Schéma illustrant les différents parcours d'une particule dans un solide.	34

Chapitre II :

Figure.II 1:. Collision schématique dans des cibles amorphes.....	43
Figure.II 2:Pouvoir d'arrêt électronique en fonction de la vitesse réduite pour différents ions lourds	47
Figure.II 3: Pouvoir d'arrêt électronique de la cible polymère Formvar pour les ions lourds.....	53
Figure.II 4:Pouvoir d'arrêt électronique de la cible polymère Mylar (C10H8O4) pour les ions lourds:...	58

Chapitre III:

FigureIII 1:Rapport entre le pouvoir d'arrêt nucléaire et électronique.....	68
---	----

FigureIII 2:Représentation schématique de la collision entre la cible et un ion incident	69
Figure III-5(a): FigureIII 3:Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du SiO ₂ en fonction	77
FigureIII 5b:Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du LiF en fonction de l'énergie d'incident	77
FigureIII 5c:Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du kapton	78
FigureIII6a:Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du SiO ₂	78
FigureIII 6b:Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du LiF en fonction de l'énergie deHe.....	79
FigureIII 6c:Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du kapton en fonction de l'énergie 4He	79
Figure III-7(a): FigureIII 9:Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du SiO ₂ en.....	81
FigureIII -7b:Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire de la SiO ₂ en fonction ie d'incident 7N.....	81
Figure III-7(c) : FigureIII 11:: Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire du SiO ₂ de l'ion ²⁸ Ni	82
FigureIII .8a:Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire du LiF en fonction de l'ion ⁵ B.	82
FigureIII 8b:Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire du LiF en fonction de l'ion (¹⁴ N)N.....	83
FigureIII .8c:Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire du LiF en fonction de l'ion ⁵⁸ Ni.....	83
Figure III-9(a):. FigureIII 15:Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire de Kapton en fonction ⁵ B....	84
FigureIII 9b:Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du Kapton en fonction de l'ion(¹⁴ N)N.....	84
FigureIII 9c:Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire du Kapton en fonction de l'ion ²⁸ Ni	85

Chapitre IV :

FigureIV. 1: Collision schématique dans des cibles amorphes.....	97
Figure IV. 2:La perte d'énergie électronique en fonction de l'énergie des ions.....	100
FigureIV. 3:la perte d'énergie électronique dans la cible Kapton (C ₂₂ H ₁₀ O ₅ N ₂)	104
Figure IV. 4:La Perte d'énergie électronique dans LR-11 (C ₂₂ H ₁₀ O ₅ N ₂)	107
Figure IV. 5:Perte d'énergie électronique du ⁹ Be dans SiO ₂ en fonction de l'énergie incidente	110
Figure IV. 6:Perte d'énergie électronique de l'oxygène dans Al ₂ O ₃	110

Liste des Abréviations

LSS: Lindhard, Scharff et Schiott

SRIM: Stopping-Power and Range of ion Matter.

ASTAR: Stopping-Power and Range Tables for Helium.

ESTAR: Stopping-Power and Range Tables for Electron.

PSTAR: Stopping-Power and Range Tables for Proton.



INTRODUCTION GENERALE

Introduction Générale

Les méthodes de calcul, par simulation du mouvement des ions dans un milieu, ont été développées depuis les années soixante. L'idée fondamentale était de suivre la trajectoire de l'ion dans le milieu et de simuler les collisions avec les matériaux.

Les propriétés des matériaux semi-conducteur sont à la base de l'évolution de l'industrie micro-électronique c'est-à-dire la conception, la fabrication et l'utilisation des circuits intégrés.

Pour ce faire, les chercheurs se sont penchés sur des études expérimentales pour déterminer la perte d'énergie des ions à travers différents matériaux. Au fil des années, on a pu maîtriser le calcul de la perte d'énergie des ions à travers des matériaux amorphes. Dans le cadre de ce travail, on utilise un programme de calcul permettant de déterminer la perte d'énergie électronique et nucléaire de différents ions à travers différents matériaux.

L'utilisation d'ions lourds ou légers (dont l'énergie spécifique est de l'ordre de quelques MeV/nucléon) permet de produire de fortes densités d'excitations électroniques dans les matériaux. Cependant, les processus et la description des interactions inélastique ion-atome cible sont beaucoup plus complexe que ceux des interactions élastiques.

La perte d'énergie électronique des ions est calculée avec précision lorsque l'interaction peut être considérée comme une perturbation (faible transfert d'énergie, faible durée d'interaction ou charge peu élevée).

Certains auteurs ont effectués des études théoriques, d'autres se sont intéressés à la détermination expérimentales de $\left(\frac{dE}{dX}\right)$.

Ainsi, notre travail s'articulera autour des parties suivantes :

Dans le premier chapitre, nous rappelons les processus de l'interaction ion-matière. Les particules chargées perdent essentiellement leur énergie de manière inélastique via des excitations électroniques. Les chocs nucléaires, correspondant à des pertes d'énergie élastique, n'interviennent pas dans l'endommagement du matériau bombardé par des particules de grandes vitesses.

Dans le second chapitre, nous présentons une méthode numérique élaborée dans le cadre de ce travail afin de déterminer la perte d'énergie électronique des ions lourds dans les matériaux polymères.

Dans le troisième chapitre de ce mémoire, nous décrivons une méthode de calcul pour la

Introduction Générale

détermination de la perte d'énergie nucléaire des particules chargées de différentes énergies des matériaux cibles amorphes SiO_2 et LiF et Kapton. Le calcul a été effectué par le programme de calcul que nous avons développé dans le cadre de ce travail et basé sur la simulation de Monte Carlo.

Dans le quatrième chapitre de ce mémoire, nous décrivons, une méthode de calcul pour la détermination la perte d'énergie électronique dans les matériaux amorphes (nitrate de cellulose LR-115, feuille de polyimide de Kapton, SiO_2 et Al_2O_3), pour différentes particules projectiles, tels que ^9Be , ^{11}B , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O et ^{35}Cl , à faible vitesse en utilisant simulation de Monte Carlo et la théorie LSS modifiée. Ainsi, tous les résultats obtenus par la méthode de simulation de Monte Carlo et la théorie LSS modifiée sont comparées à ceux calculé, par les codes informatiques SRIM et MSTAR et les résultats obtenus expérimentalement.

CHAPITRE I

**LES PRINCIPAUX PROCESSUS D'INTERACTIONS
DES PARTICULES CHARGEES AVEC LA MATIERE**

Introduction :

Le passage des particules chargées dans la matière fait intervenir différents types d'interaction avec les atomes du milieu traversé. Les particules chargées ne disparaissent pas lors de leurs interactions avec la matière, mais perdent leurs énergies jusqu'à l'arrêt (si l'épaisseur du matériau cible est suffisante). Selon que la particule subit une collision élastique ou inélastique sur un électron ou un noyau, on peut imaginer quatre types principaux d'interaction :

Collisions inélastiques avec les électrons atomiques : C'est le mécanisme prépondérant qui conduit à l'ionisation ou l'excitation du milieu traversé. Elles sont prédominantes pour des ions ayant une énergie supérieure à quelques dizaines de keV par unité de masse atomique (uma).

Collisions élastiques avec les noyaux : La particule incidente est diffusée sans rayonner ni exciter les noyaux, mais en revanche, les noyaux subissent des déplacements. Ce processus est majoritaire pour des énergies de quelques keV/uma.

Collisions inélastiques avec un noyau : La particule est déviée par les forces coulombiennes et son ralentissement se manifeste par l'émission d'un rayonnement de freinage (Bremsstrahlung). Elle peut aussi céder de l'énergie au noyau et amener celui-ci dans un état excité. C'est l'excitation coulombienne du noyau.

Collisions élastiques avec les électrons : Ces interactions ne sont observées que pour des particules de très faible énergie (<100 eV).

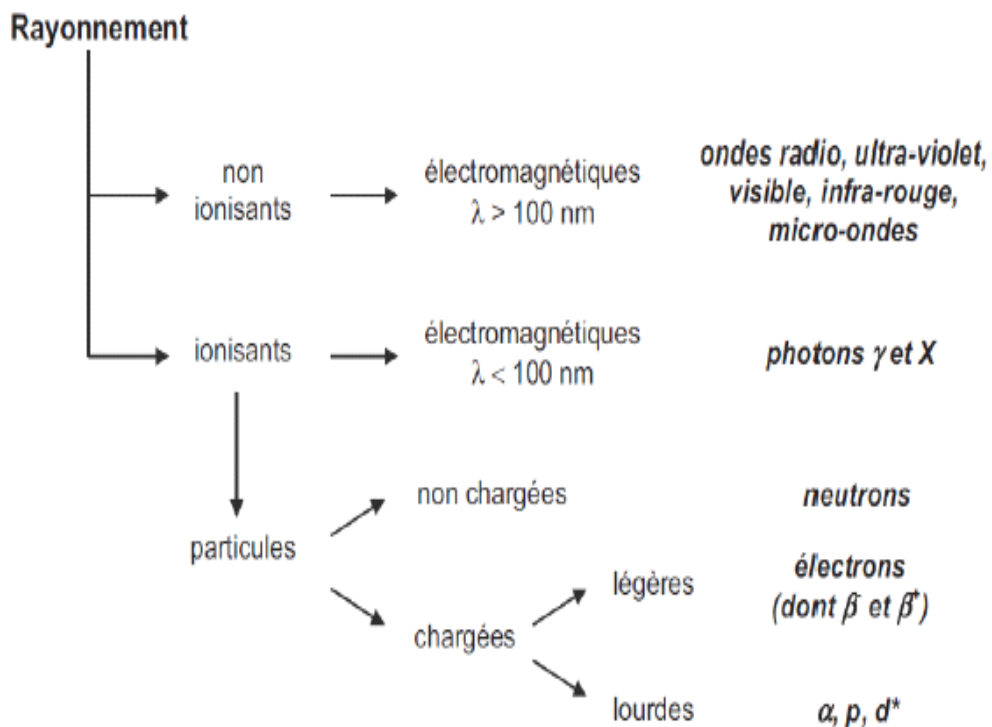
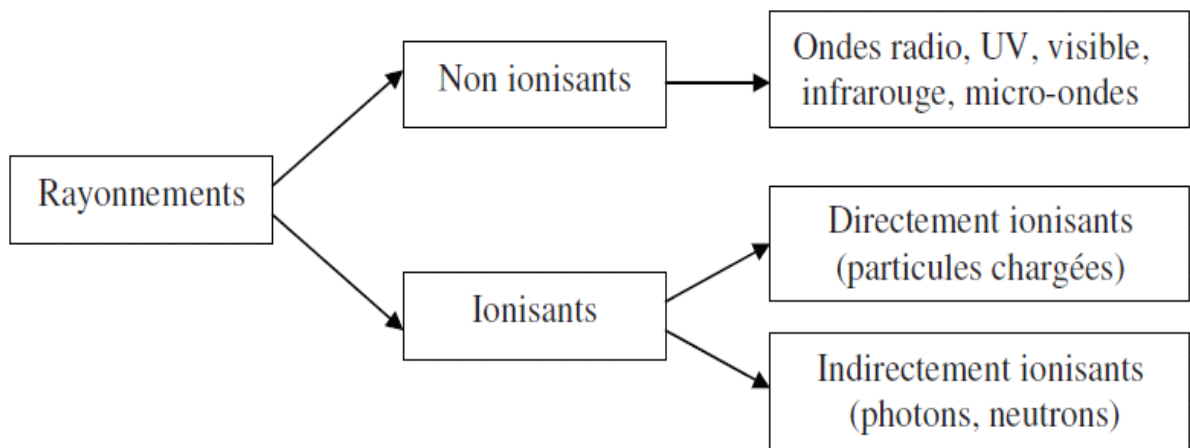


Figure I.1: Représentation des caractéristiques de rayonnements et les différentes interactions avec la matière [1]

I.1. Collisions électroniques :

I.1.1. Principe :

Dans le cas d'une collision électronique, la perte d'énergie se fait par interaction avec les électrons des atomes de la cible et provoque le ralentissement de l'ion. Au cours de ce type de choc, une partie de l'énergie est dissipée et il n'y a pas conservation de l'énergie cinétique totale du système : on parle alors de collision inélastique.

I.1.2. Ionisation

Lorsqu'un électron est éjecté du nuage électronique de l'atome suite à une interaction électronique, l'atome est ionisé. Il s'ensuit une désexcitation qui peut être plus ou moins rapide. Dans le cas où cette dernière est relativement lente ($\gg 10^{-13}$ s) par exemple dans les isolants où la mobilité électronique est faible, l'atome ionisé peut être éjecté hors de son site si le gain d'énergie dû à l'excitation de l'atome est suffisant [2].

Il y a ainsi création d'une paire de Frenkel suite à l'ionisation, on parle alors de radiolyse. Ce processus est actif dans les isolants car l'énergie moyenne des paires électrons-trous est bien souvent supérieure à l'énergie de liaison. Il en résulte la possibilité de créer des défauts électroniques stables.

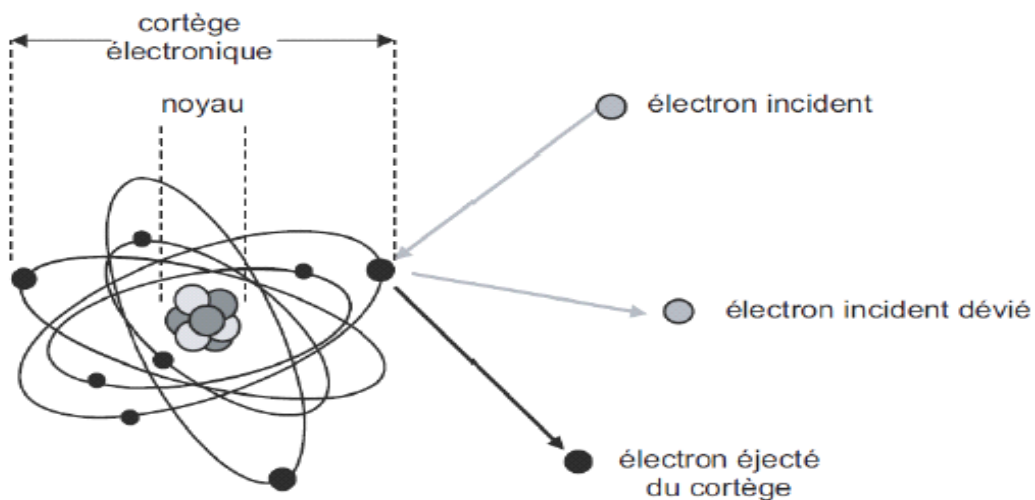


Figure I. 2:Phénomène d'ionisation

I.1.3- Excitations

Les désexcitations mettant en jeu des électrons Auger sont très fréquentes [3]. Dans les isolants, suite à une cascade Auger, l'apparition de trous dans la bande de valence peut entraîner localement l'apparition d'une charge positive dans les cristaux plus ou moins ioniques. Le mécanisme de «**Knotek-Feibelman**» [4] est un mécanisme Auger interatomique complexe. La désexcitation d'un atome X se fait par transition Auger interatomique avec des transferts d'électron de la bande de valence d'un atome Y vers l'atome X. si X est un cation et Y un anion (par exemple O^{2-}), il peut en résulter l'apparition d'un ion Y positif (par exemple O^+ , O^{2+}). De très fortes répulsions électrostatiques interviennent alors entre les cations présents dans le matériau et les ions Y+ anormalement chargés, éjectant ces derniers de leur site. L'explication du mécanisme de «**Knotek-Feibelman**» est basée sur des modèles développés par Flischer et al. [5]. La particule incidente laisse donc un grand nombre de paires de Frenkel derrière elle.

L'interaction entre les ions incidents et le matériau cible entraîne le déplacement de beaucoup d'atomes et l'apparition d'un grand nombre de défauts de Frenkel. Il en résulte une augmentation de la diffusion même à basse température [6]. Lors de l'irradiation ionique dans les cristaux ioniques isolants, il peut y avoir apparition d'un champ électrique qui peut augmenter la diffusion de certains atomes [7].

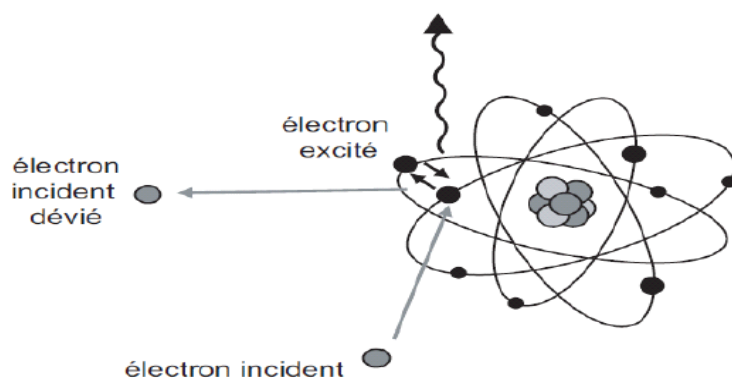


Figure I. 3:Phénomène d'excitation

I.1.4. Rayonnement de freinage :

Plus rarement, les électrons incidents peuvent interagir avec les noyaux des atomes de la substance traversée. Ils subissent l'influence du champ coulombien du noyau : ils sont alors déviés et cèdent une partie de leur énergie au noyau. Cela se manifeste par un ralentissement ou un freinage. L'énergie perdue est émise sous la forme de rayonnements X, dits de « freinage ou Bremsstrahlung ».

Ce phénomène n'est important que dans le cas d'électrons de forte énergie (supérieure à 1 MeV) traversant une matière constituée d'atomes lourds (numéro atomique Z élevé) [8].

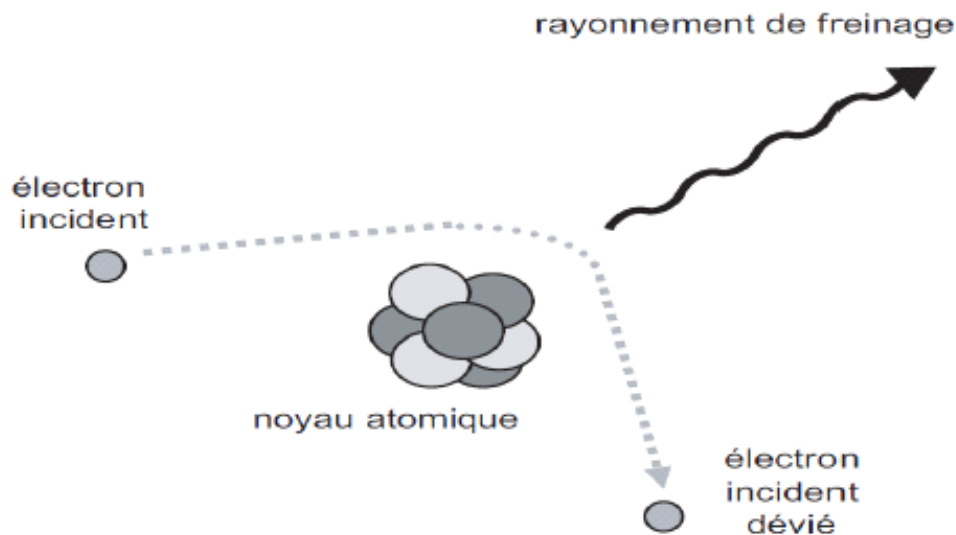


Figure I. 4 Phénomène de freinage

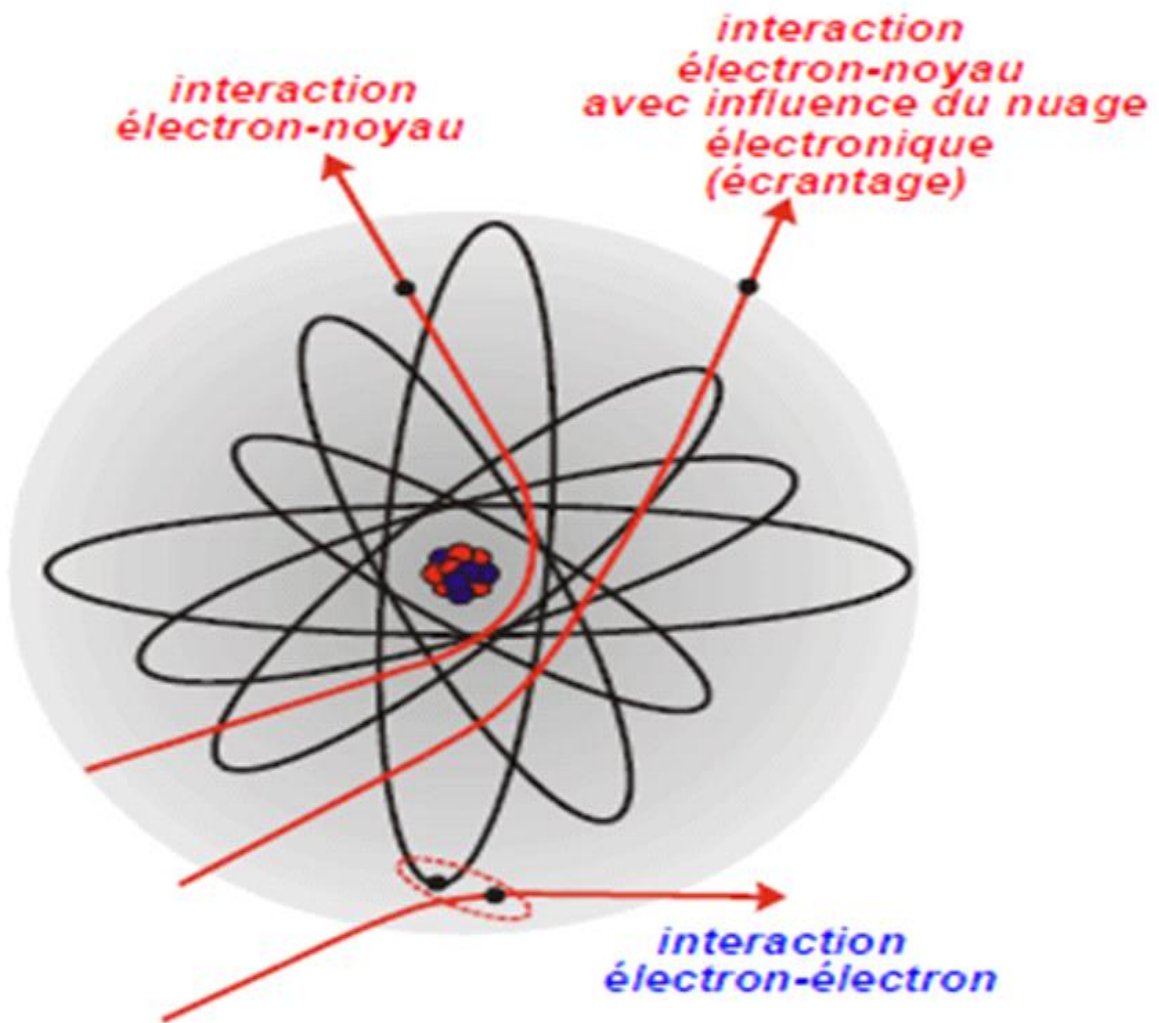


Figure I. 5: Schéma de représentation des Trois types interactions «électron –matière».

I.2- Principe des collisions nucléaires :

Une collision nucléaire entre une particule incidente et un atome peut se comparer à un choc entre deux boules de billard. Au cours de l'interaction, il y a conservation de l'énergie cinétique totale du système qui se traduit par un transfert d'énergie entre la particule incidente et la cible : on parle alors de collision élastique. Il en résulte un ralentissement et une déflexion angulaire de l'ion. La cinématique permet d'estimer l'énergie maximale transférée lors d'une collision. Celle-ci qui dépend des masses de la particule incidente (M_1), de la masse de l'atome cible (M_2) et de l'énergie de la particule incidente. L'expression de ce transfert énergétique est donnée par :

$$\Delta T_{max} = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2} E \quad (\text{I-1})$$

Avec

M_1 : la masse de l'ion incident.

M_2 : la masse de l'atome cible.

E : l'énergie de l'ion incident.

I.2.1-Les sections efficaces différentielles

I.2.1.1-Définition

La probabilité qu'une interaction se produise lors d'une collision entre un ion et un atome est mesurée par une section efficace (σ). Cette dernière dépend directement du potentiel d'interaction. Ce dernier décrit les interactions répulsives coulombiennes entre les noyaux, en considérant le cas d'un ion léger et avec de petits paramètres d'interaction. On se retrouve donc dans le cadre d'un potentiel purement coulombien. La section efficace différentielle, c'est à dire la probabilité d'observer une particule déviée sous un angle solide $d\Omega$ et dans un intervalle d'énergie donné est donnée par :

$$d\sigma_n = 2\pi \frac{Z_1 Z_2 e^4}{M_2 V^2} \frac{dT}{T^2} \quad \text{Pour } T < T_{max} \quad (\text{I-2})$$

Chapitre I : les principaux processus d'interaction des particules...

Avec :

T : l'énergie transmise lors de la collision.

T_{\max} : l'énergie maximale transférable lors d'une collision.

V_1 : la vitesse de l'ion incident.

Z_1 : le numéro atomique de la particule incidente.

Z_2 : le numéro atomique de l'atome cible.

M_2 : la masse de l'atome cible.

e = la charge élémentaire.

La détermination de la section efficace différentielle permet d'obtenir des informations sur le nombre d'atomes déplacés hors de leur position initiale (atomes de recul). Pour que ce déplacement soit effectif, donc qu'il n'y ait pas recombinaison, l'énergie transférée à l'atome doit être supérieure à une valeur minimale permettant de l'extraire de son site malgré son environnement. Cette valeur est appelée énergie de déplacement. Elle n'est bien connue que pour quelques matériaux modèles. Les atomes déplacés vont créer des défauts constitués de couples lacunes – interstitiels, c'est à dire des défauts de Frenkel. Si l'ion transfère une énergie suffisante aux atomes, ces derniers vont à leur tour interagir avec les atomes qui les entourent et créer ce que l'on appelle une cascade de déplacements (ou de collisions). Si cette cascade se produit près de la surface (figure I-6), un ou plusieurs atomes peuvent franchir la surface et passer dans le vide : il y a alors pulvérisation. Dans le cas d'une collision élastique, l'énergie cinétique et la quantité de mouvement totale se conservent.

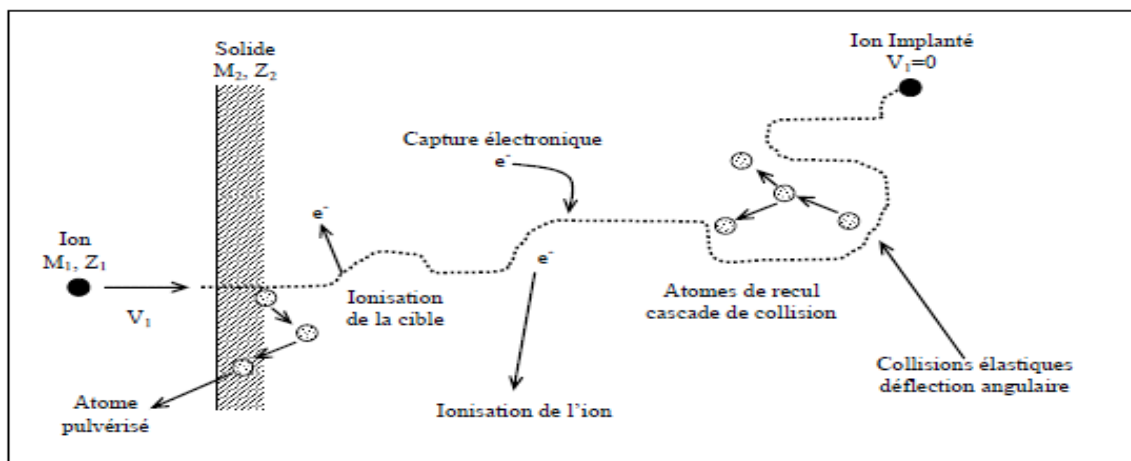


Figure I. 6: Evolution schématique d'un ion dans la matière solide. L'ion perd progressivement son énergie par une suite de collisions électroniques et nucléaires jusqu'à son implantation

I.2.2-Conservation énergétique d'une collision élastique (nucléaire).

Quand une particule projectile d'énergie E_0 et de masse M_1 entre en collision élastique avec un noyau chargé de masse M_2 au repos dans le système du laboratoire (cible) il y a transfert d'énergie vers la cible (figure I-7).

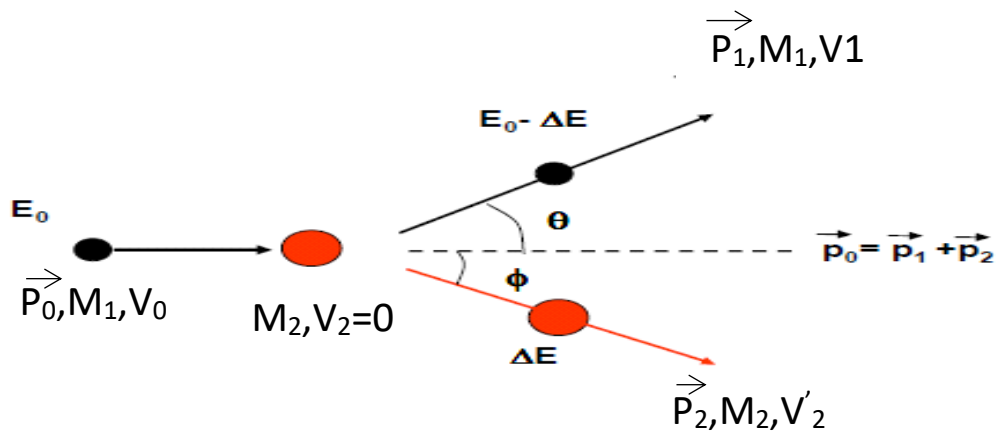
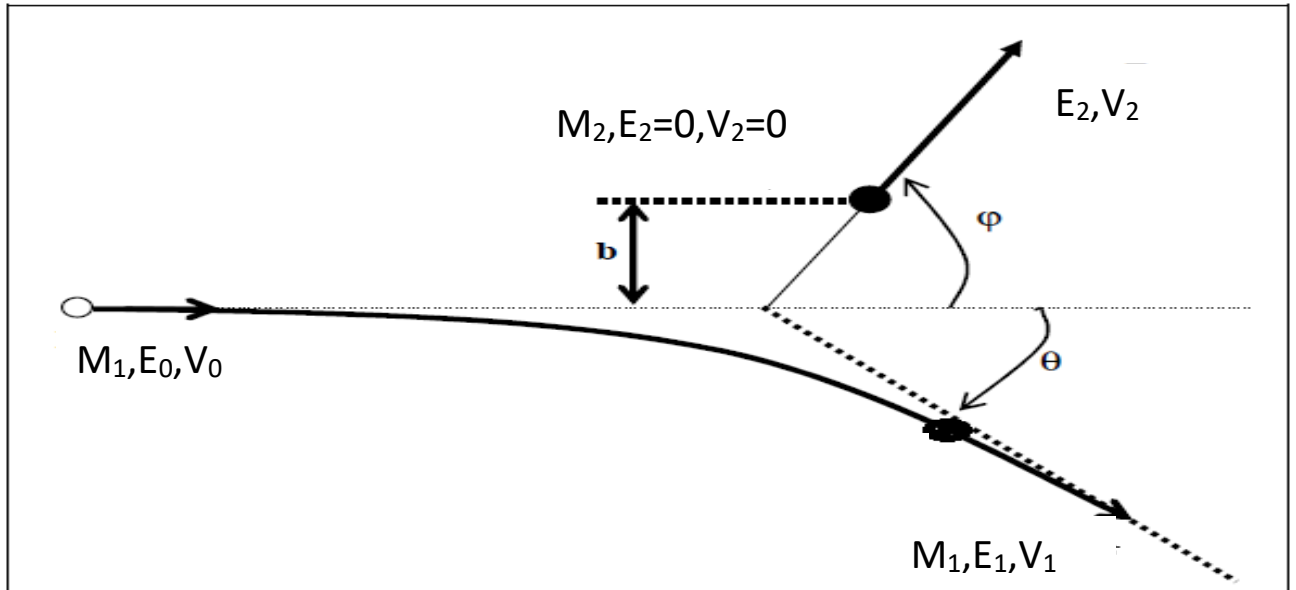


Figure I. 7 : Représentation d'une collision entre la particule projectile de masse M_1 et P_0 quantité de mouvement de vitesse V_0 vient heurter la cible de masse M_2 et P_1 quantité de mouvement au repos. θ et ϕ représentent respectivement

-Le principe de la conservation de la quantité de mouvement :

$$\sum_{i=1}^{N_{av}} M_i \vec{V}_i = \sum_{j=1}^{N_{ap}} M'_j \vec{V}'_j \quad (\text{I-3})$$

Si les particules après le choc sont identiques et leurs énergies internes conservées, le choc est élastique et l'énergie cinétique est conservée.

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} M_i V_i^2 = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} M_i V_i'^2 \quad (\text{I-4})$$

$$\frac{1}{2} M_1 V_1^2 + U_1 + \frac{1}{2} M_2 V_2^2 + U_2 = \sum_{j=1}^{N_{ap}} \left(\frac{1}{2} M'_j V_j'^2 + U'_j \right) \quad (\text{I-5})$$

En retranchant les deux expressions de la conservation de l'énergie et en tenant compte de la conservation de la masse, on obtient qui est l'expression de la conservation de la quantité de mouvement.

$$M_1 \vec{V}_1 + M_2 \vec{V}_2 = \sum_{j=1}^{N_{ap}} M'_j \vec{V}'_j \quad (\text{I-6})$$

La conservation de l'énergie cinétique (choc élastique) est obtenue s'il y a conservation de l'énergie interne.

$$U_1 + U_2 = \sum_{j=1}^{N_{ap}} U'_j \quad (\text{I-7})$$

$$\frac{1}{2} M_1 V_1^2 + \frac{1}{2} M_2 V_2^2 = \sum_{j=1}^{N_{ap}} \left(\frac{1}{2} M'_j V_j'^2 \right) \quad (\text{I-8})$$

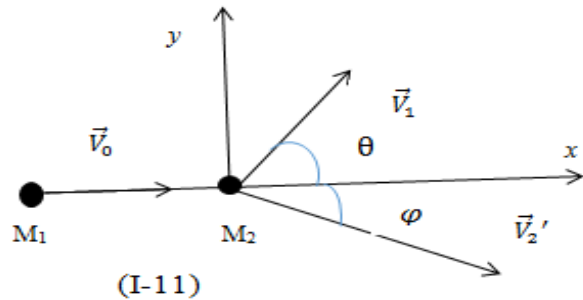
D'après la collision, les particules sont conservées dans leur structure interne et leurs vitesses sont respectivement V_1 et V_2'

$$\frac{1}{2} M_1 V_0^2 + \frac{1}{2} M_2 V_2^2 = \frac{1}{2} M_1 V_1^2 + \frac{1}{2} M_2 V_2'^2 \quad (\text{I-9})$$

La conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$M_1 \vec{V}_0 = M_1 \vec{V}_1 + M_2 \vec{V}_2' \quad (\text{I-10})$$

On projette cette relation vectorielle sur les axes x, y .



$$M_1 V_0 = M_1 V_1 \cos\theta + M_2 V_2' \cos\phi \quad (\text{I-11})$$

$$M_1 V_1 \sin\theta = M_2 V_2' \sin\phi \quad (\text{I-12})$$

Après la collision, les particules sont conservées dans leur structure interne, la collision est élastique et il y a conservation de l'énergie cinétique.

$$\frac{1}{2} M_1 V_0^2 = \frac{1}{2} M_1 V_1^2 + \frac{1}{2} M_2 V_2'^2 \quad (\text{I-13})$$

• Les équations (I-11) et (I-12) permettent d'écrire :

$$M_2^2 V_2'^2 = M_1^2 V_0^2 + M_1^2 V_1^2 - 2 M_1^2 V_0 V_1 \cos\theta \quad (\text{I-14})$$

• En remplaçant dans l'équation (I-13), on obtient :

$$\text{Soit } M_1 V_0^2 = M_1 V_1^2 + \frac{M_1^2}{M_2} V_0^2 + \frac{M_1^2}{M_2} V_1^2 - 2 \frac{M_1^2}{M_2} V_0 V_1 \cos\theta \quad (\text{I-15})$$

$$(1 + \lambda) V_1^2 - (2\lambda V_0 \cos\theta) V_1 + (\lambda - 1) V_0^2 = 0 \quad (\text{I-16})$$

On pose que : $\lambda = \frac{M_1}{M_2}$

La résolution de cette équation du second degré en V_1 on trouve s'expression suivante:

$$V_1 = V_0 \frac{\lambda \cos \theta}{\lambda + 1} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{\lambda^2 - 1}{\lambda^2 \cos^2 \theta}} \right) \quad (\text{I-17})$$

• Pour $M_1 < M_2$: c'est le signe positif qui convient. On doit prendre la solution positive, car les vitesses étant prises en valeurs absolues.

$$V_1 = V_0 \frac{\lambda \cos \theta}{\lambda + 1} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{\lambda^2 - 1}{\lambda^2 \cos^2 \theta}} \right) \quad (\text{I-18})$$

I.2.2.1-Principe la Rétrodiffusion de Rutherford (RBS)

Lorsqu'on envoie un faisceau de particules chargées avec une énergie de quelques MeV sur une cible, certaines particules projectiles s'approchent suffisamment des noyaux des atomes cibles pour subir une déflexion à grand angle. C'est la rétrodiffusion de Rutherford. Après le choc élastique, l'ion incident est rétrodiffusé avec un angle θ et une vitesse V_1 et l'atome cible est diffusé d'un angle φ avec une vitesse V_2 .

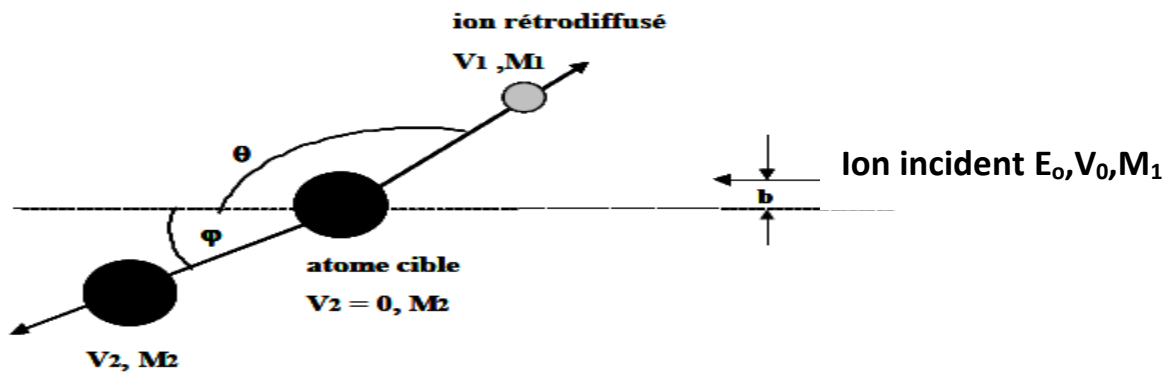


Figure I. 8: Schéma d'une collision élastique de Rétrodiffusion de Rutherford (RBS) ion incident de vitesse V_0 arrivant avec un paramètre d'impact b sur un atome de cible de M_2 au repos

I.2.2.2.Facteur cinématique

I.2.2.2.1.Définition

Le rapport des énergies du projectile après et avant la diffusion s'appelle facteur cinématique **K** (ou facteur de rétrodiffusion). On peut écrire aussi :

$$\frac{V_1}{V_0} = \frac{E_1}{E_0} = K = \frac{\lambda^2 \cos^2 \theta \left(1 + \sqrt{1 - \frac{\lambda^2 - 1}{\lambda^2 \cos^2 \theta}} \right)^2}{(\lambda + 1)^2} \quad (\text{I-19})$$

$$\text{D'où} \quad K = \frac{(\sqrt{1 - \lambda^2 \sin^2 \theta} + \lambda \cos \theta)^2}{(\lambda + 1)^2} \quad (\text{I-20})$$

On constate que K dépend de l'angle de diffusion θ et du rapport des masses des deux particules.

I.2.2.2.2-Les effets des paramètres sur le facteur cinématique

I.2.2.2.2.1-Effet de la masse

Pour un angle de diffusion fixe, nous avons les conditions suivant :

i) Quand M_2 est petit, K est proche de zéro donc les éléments légers absorbent une énergie importante de la particule projectile. Ceci permet de conclure que la méthode de rétrodiffusion de Rutherford convient mal aux éléments légers dans des cibles de masse élevée.

ii) Quand M_2 est grand, K est proche de 1, les éléments lourds absorbent peu d'énergie.

I.2.2.2.2.2-Effet de l'angle de diffusion

Pour $\Theta=180^\circ$: c'est-à-dire quand la particule projectile rebondit purement et simplement sur la cible,

K devient :

$$K = \left(\frac{1-\lambda}{1+\lambda} \right)^2 \quad (\text{I-21})$$

Pour $\Theta=90^\circ$ on a : $K = \left(\frac{1-\lambda}{1+\lambda}\right)$ on deduit que : $K^2_{90^\circ} = K_{180^\circ}$

Pour $\Theta=0^\circ$ on a : $K=1$ cela signifie que $V_0 = V_1$.

On ne remarque aucun intérêt physique, car les deux particules se frôlant (absence de collision).

I.2.3-Détermination de l'énergie transmise à la cible

D'après les équations (I-11) et (I-12) on obtient :

$$M_1 V_1 = (M_1 V_0 - M_2 V_2 \cos \Theta)^2 + (M_2 V_2 \sin \Theta)^2 \quad (\text{I-22})$$

En remplaçant la vitesse par son expression déduite l'équation (I-13) et on obtient :

$$V_2 = \frac{2M_1}{M_1+M_2} V_0 \cos \varphi \quad (\text{I-23})$$

On peut ainsi écrire l'expression de l'énergie transmise à la cible sous la forme :

$$T = E_2 = \frac{1}{2} M_2 V_2^2 \cos^2 \varphi$$

$$T = E_2 = \frac{4M_1 M_2}{(M_1+M_2)^2} E_0 \cos^2 \varphi \quad (\text{I-24})$$

*Ordre de grandeur de Θ et ϕ

Pour $\cos \phi = 1 \iff \sin \phi = 0$

Pour $\sin \Theta = 0$ est équivalent que $\Theta = 0$ ou $\Theta = \pi$

Donc l'expression de l'énergie maximale transmise T_{max} est donnée par:

$$T_{max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1+M_2)^2} E_0 \quad (\text{I-25})$$

I.3.Le pouvoir d'arrêt

Lors d'une interaction ion-matière, l'ion incident transmet son énergie à la cible tout au long de son passage dans le matériau. La quantité d'énergie perdue par l'ion lors de son ralentissement dans la

matière constitue alors un paramètre caractéristique concernant aussi bien les processus d'endommagement de la cible que l'émission de particules de cette dernière induite par irradiation. Ce paramètre est appelé pouvoir d'arrêt. Le pouvoir d'arrêt est caractéristique du milieu traversé et de la particule incidente (nature et énergie de l'ion projectile). Il s'exprime, en MeV. cm² /g quand on le divise par la densité du milieu :

$$-\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx} : \text{On peut l'exprimer en MeV. g}^{-1} \cdot \text{cm}^2 \quad (\text{I-26})$$

avec ρ : masse volumique

Selon le processus collisionnel considéré, interactions inélastiques ou élastiques, un pouvoir d'arrêt électronique et un pouvoir d'arrêt nucléaire sont définis. La perte d'énergie totale par unité de longueur dans la cible est obtenue en sommant les contributions nucléaire et électronique. [9].

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{Total} = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_n \quad (\text{I-27})$$

$$S_{Tot} = S_e + S_n$$

Le pouvoir d'arrêt permet d'évaluer le parcours réel de l'ion projectile dans la matière. Au cours de l'interaction, la vitesse de l'ion incident diminue et l'ion se retrouve piégé dans la matière. La particule perd graduellement et continuellement son énergie cinétique selon un processus appelé : approximation du ralentissement continu (Continus Slowing Down Approximation). [10].

Le parcours R_{CSDA} d'une particule chargée d'énergie cinétique E_0 est lié à la perte d'énergie cinétique par la relation suivante :

$$R = \int_{E_0}^0 dx = \int_0^{E_0} \left(-\frac{dE}{dx}\right)^{-1} dE \quad (\text{I-28})$$

E_0 : l'énergie cinétique initiale de la particule projectile.

I.3.1. Expression de la perte d'énergie linéiques

L'expression analytique de la perte d'énergie tient compte du type d'interaction mise en jeu entre la particule incidente et l'atome cible. Il est presque toujours supposé que ces interactions se produisent par collisions binaires. Si on considère une particule incidente de charge Z_1 , d'énergie E_0 et de masse M_1 qui traverse une épaisseur dx composée de N centres diffuseurs, le nombre d'interactions qui se

produisent avec une énergie de transfert T est donnée par :

$$N.d\sigma (E_0, T) dx \quad (I-29)$$

$d\sigma$: représente la probabilité de transfert d'une énergie T par une particule d'énergie E_0 .

L'énergie est transférée au cours de chaque collision s'écrit en fonction du nombre d'interactions sous la forme:

$$- dE(T) = NT.d\sigma (E_0, T).dx \quad (I-30)$$

L'intégration de cette équation permet d'obtenir la perte d'énergie totale par unité de parcours, sur toutes les valeurs possibles de T comprises entre T_{\min} et T_{\max} :

$$\frac{\overline{\Delta E}}{\Delta x} = \left(- \frac{dE}{dx} \right) = N \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} T.d\sigma (E_0, T) \quad (I-31)$$

-Et l'énergie moyenne transférée \overline{T} en une interaction dans la cible :

$$\overline{T} = \frac{1}{\sigma_{\text{tot}}} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} T.d\sigma (E_0, T) \quad (I-32)$$

Avec :

$$N = N_A.\Delta x.\sigma_{\text{tot}}$$

N_A : Constante d'Avogadro

$$\Delta E_{\text{moy}} = N\overline{T}$$

N : nombre d'interaction induite par projectile sur Δx .

I.3.1.1. Perte d'énergie nucléaire dans le domaine de $V_1 > V_0 Z_1^{2/3}$ (Grande vitesse)

Les interactions entre l'ion incident et les atomes de la cible sont traitées comme des collisions élastiques entre deux particules, régis par les lois de la mécanique classique. Pour les transferts d'énergie conduisant à des déplacements d'atomes, l'interaction est purement coulombienne.

Soit une particule incidente de masse M_1 , de charge $(Z_1 e)$ et d'énergie cinétique E_0 se dirigeant avec

un paramètre d'impact b vers un atome cible au repos de masse M_2 , de charge (Z_2e) . La particule **1** subit une répulsion coulombienne qui la dévie d'un angle Θ .

D'après la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement, la relation qui lie le paramètre d'impact b à l'angle de diffusion θ c'est : **(Figure I-9)** :

$$b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_0} \cot\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{I-33})$$

$$\text{D'où : } d = 2b \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{I-34})$$

On note également d la distance minimale d'approche entre la particule et l'atome pour une collision frontale $b=0$ par s'expression : $d = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_0}$. (I-34)

L'énergie transmise au noyau du matériau cible est donnée par :

$$T = T_{max} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{I-35})$$

$$b = \frac{d}{2} \cot\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{I-36})$$

$$b^2 = \left(\frac{d}{2}\right)^2 \cot^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{d^2}{4} \left(\frac{T_{max}}{T} - 1\right) \quad (\text{I-37})$$

En injectant l'expression de T (I-35) dans l'équation (I-24) on obtient l'expression de l'énergie transmise au noyau cible en fonction de T_{max}

$$T = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \cos^2 \varphi = T_{max} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{I-38})$$

$$\text{Avec } \varphi = \frac{\pi - \theta}{2}$$

où T_{max} : est l'énergie maximale transférée lors d'un choc frontal ($b=0$, $\varphi = 180^\circ$) s'écrit :

$$T = T_{max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \quad (\text{I-39})$$

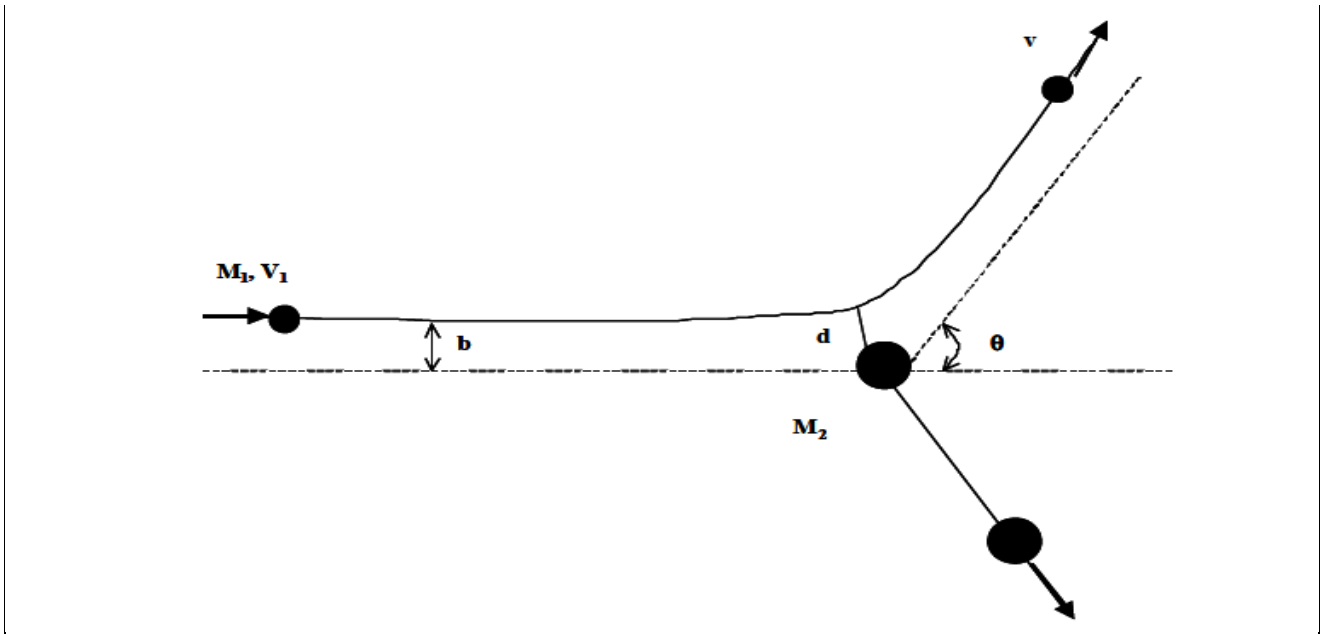


Figure I. 9: Interaction de particule incident de M1 et V1 avec l'atome de M2 en fonction du paramètre d'impact b et d.

$$T = \frac{T_{\max}}{1 + \left(\frac{2b}{d}\right)^2} \quad (\text{I-40})$$

La section efficace différentielle de diffusion s'écrit :

$$\sigma = \pi b^2 \quad \text{ou} \quad d\sigma = d(\pi b^2) = -\pi \frac{d^2}{4} \frac{T_{\max}}{T^2} dT \quad (\text{I-41})$$

b: est le paramètre d'impact

La perte d'énergie nucléaire s'obtient en intégrant l'équation (I-31) entre les valeurs minimale et maximale de l'énergie transférée, (L'intégration est faite jusqu' à T_{\min} et non pas 0 pour cause de la convergence).

La section efficace d'arrêt nucléaire exprimée en fonction des masses de la particule incidente et de l'atome cible ainsi que l'énergie incidente E_0 s'écrit sous la forme :

$$S_n = \int_0^\infty T(E_0, b, \varphi) \cdot d\sigma = \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} -\pi \frac{d^2}{4} \frac{T_{\max}}{T} dT = -\pi \frac{d^2}{4} T_{\max} \ln \left(\frac{T_{\max}}{T_{\min}} \right) \quad (\text{I-42})$$

$$D'o\grave{u} \quad S_n = -\pi \frac{Z_2^2 Z_1^2 e^4 M_1}{E_0 M_2} \ln \left(\frac{T_{max}}{T_{min}} \right) \quad (I-43)$$

On d\^eduit donc l'expression de la perte d'\^energie nucl\^eaire :

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right)_n = -N\pi \frac{Z_2^2 Z_1^2 e^4 M_1}{E_0 M_2} \ln \left(\frac{T_{max}}{T_{min}} \right) \quad (I-44)$$

N : la densit\^e atomique de la cible.

I.3.1. 2 .La perte d'\^energie \^electronique et la section efficace d'arr\^et \^electronique

I.3.1. 2.1 .La perte d'\^energie \^electronique :

La description des interactions in\^elastiques ion-atome cible est beaucoup plus complexe que celle des interactions \^elastiques. Le pouvoir d'arr\^et \^electronique des ions est calcul\^e avec pr\^ecision lorsque l'interaction peut \^etre consid\^eree comme une perturbation (faible transfert d'\^energie, faible dur\^ee d'interaction ou charge peu \^elev\^ee). Ceci est v\^erifi\^e pour les ions l\^egers tr\^es rapides. Aux vitesses interm\^ediaires, l'\^etat de charge de l'ion, d\^ependant du rapport des sections efficaces de capture et d'ionisation, doit \^etre pris en compte ainsi que l'\^energie maximale transmissible \^a l'\^electron. En dessous d'une certaine \^energie, l'ion n'est plus totalement \^epluch\^e et n'est plus capable d'exciter les \^electrons des couches profondes de la cible.

Le pouvoir d'arr\^et \^electronique diminue donc comme le carr\^e de la charge de l'ion et comme le nombre d'\^electrons actifs de la cible. Ainsi, l'expression du pouvoir d'arr\^et \^electronique est diff\^erente selon le domaine de vitesse consid\^er\^e. Deux mod\^eles tiennent compte des m\^ecanismes de perte d'\^energie, valables \^a grande et faible vitesse. La fronti\^ere entre ces deux r\^egimes est r\^egie par le rapport de la vitesse du projectile \^a la vitesse moyenne des \^electrons. Cette derni\^ere est donn\^ee d'apr\^es le mod\^ele de Thomas-Fermi, par la relation.

$$V_e = V_0 Z_1^{2/3} \quad (I-45)$$

V_0 : la vitesse orbitale de l'\^electron 1s de l'atome d'hydrog\^ene, c'est la vitesse de Bohr :

$$V_0 = \frac{e^2}{h} \cong 2,210^8 \text{ cm. s}^{-1} \quad (I-46)$$

I.3.1.2.2.La perte d'\^energie \^electronique domaine : $V_1 > V_0 Z_1^{2/3}$.

Dans le cas de collisions rapides, la vitesse de la particule incidente est sup\^erieure \^a la vitesse de ses

Chapitre I : les principaux processus d'interaction des particules...

électrons orbitaux. On peut considérer que l'interaction s'établit entre deux charges ponctuelles et utiliser un potentiel purement coulombien (Rutherford) avec les électrons de la cible.

Cette fois, l'interaction a lieu entre la particule incidente et les électrons de l'atome cible (ionisation et excitation). Les approximations précédentes restent valables dans ce cas, à savoir une collision inélastique entre les charges ponctuelles. L'équation (I-44) est modifiée, la masse M_2 est remplacée par celle de l'électron m_e ainsi que la charge qui devient e au lieu de Z_2e .

Le résultat est donné par la formule de Bethe:[11-12-13-14]

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi Z_2 Z_1^2 e^4}{v_1^2} \frac{N}{m_e} \ln\left(\frac{2m_e v_1^2}{I}\right) \quad (\text{I-47})$$

$N Z_2$: est la densité électronique de la cible,

m_e : la masse de l'électron

I : la valeur moyenne du potentiel tenant compte de l'ionisation et de l'excitation des atomes ralentisseurs. Il est donné par la formule semi empirique (en eV) [15-16].

$$I = 9,1 \times Z_2 \left(1 + 1,9 Z_2^{-2/3}\right) \quad \text{eV} \quad (\text{I-48})$$

Où
$$I = 10 \cdot Z_2 \quad \text{eV} \quad (\text{I-49})$$

Pour le rapport des masses entre un ion et un électron ($M_1/m_e \gg 1$). On obtient l'énergie maximale transférée aux électrons $T_{max} = 2m_e v_1^2$ qui peut être remplacé dans (l'éq-I-47). Pour avoir l'expression complète de la perte d'énergie électronique, il faut évaluer le transfert d'énergie minimale T_{min} . Celui-ci peut être considéré comme une énergie moyenne d'ionisation I qui tiendrait compte de la possibilité d'ioniser l'atome cible considéré.

Si le projectile est un ion lourd, la charge Z_1 varie le long de son parcours. En effet, lorsque celui-ci est ralenti lors de sa pénétration dans la matière, il tend à devenir neutre par capture électronique.

Dans l'équation (I-56) la charge est alors remplacée par la charge effective notée Z_{1eff} . Cette charge effective est estimée par la relation empirique de Barkas [17] par :

$$Z_{1eff} = (1 - \exp(-1,25x))Z_1 \quad (\text{I-50})$$

Où $x = 100\beta/Z_1^{2/3}$ et $\beta = \frac{v}{c}$

L'équation (I-47) montre que la perte d'énergie électronique varie en $\frac{\ln E_0}{E_0}$. Cette perte d'énergie est aussi proportionnelle au carré de la charge effective $(Z_{1eff})^2$ de l'ion projectile. Enfin, on peut remarquer que, du fait de la faible masse des électrons, les collisions avec les électrons devient faible le long de la trajectoire de l'ion incident et que les transferts d'énergie sont très petits devant l'énergie de la particule incidente.

L'évolution de la charge effective Z_{1eff} des ions lourds incidents est responsable du maximum de la courbe de perte d'énergie électronique en fonction de la vitesse de l'ion incident (pic de Bragg). Tant que la vitesse V_1 de l'ion incident est supérieure à celle V_e de ses électrons, la perte d'énergie varie en $(\ln E_0)/E_0$, alors qu'à des énergies plus faibles elle varie en $\ln E_0$.

Le rapport entre les pertes d'énergie nucléaire et électronique à grande vitesse s'exprime par :

$$\frac{\left(\frac{dE}{dx}\right)_n}{\left(\frac{dE}{dx}\right)_e} = \frac{Z_2 m e}{M_2} \approx \frac{1}{3600} \quad (\text{I-51})$$

Et par conséquent

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \gg \left(\frac{dE}{dx}\right)_n \quad (\text{I-52})$$

On constate que :

La perte d'énergie nucléaire est négligeable devant la perte d'énergie électronique aux grandes vitesses.

Dans ce domaine de grande vitesse, les collisions inélastiques sont majoritaires et la perte d'énergie totale est inversement proportionnelle à l'énergie de la particule incidente $\frac{\ln E_0}{E_0}$. Ce qui induit une diminution de la perte d'énergie électronique lorsque l'énergie de la particule augmente.

Si la formule du pouvoir d'arrêt électronique de Bethe est universellement utilisée, il ne faut pas oublier que son domaine d'application présente des limites. En effet, cette formule a été développée pour des projectiles de grande vitesse. Lorsque la vitesse de l'ion projectile, V_1 , diminue et devient du même ordre que la vitesse de ses propres électrons, l'ion projectile se trouve dans le domaine des vitesses intermédiaires.

I.3.1.2.3. Domaine de vitesses intermédiaires : $V_1 = V_0 Z_1^{2/3}$

Quand la vitesse du projectile diminue, le processus de capture entre en concurrence avec celui d'ionisation. Dans ce domaine, l'ion projectile n'est alors plus totalement épluché : il capture des électrons de la cible et son état de charge diminue. Sa charge électrique moyenne devient inférieure à $Z_1 e$, et le pouvoir d'arrêt électronique devient ainsi plus faible que ne le prévoit la formule de Bethe. Le domaine de validité de cette dernière peut alors être étendu en introduisant une charge effective ainsi, à la vitesse intermédiaire, du fait des effets antagonistes entre la vibration de la vitesse et de la charge effective, le dépôt d'énergie passe par un maximum, appelé pic de Bragg, et finit par décroître lorsque l'énergie des ions diminue.

I.3.1.2.4. Domaine de faible vitesse : $V_1 < V_0 Z_1^{2/3}$

I.3.1.2.4.1. Perte d'énergie électronique :

En tenant compte du potentiel écrané, Lindhard, Scharff et Schiott ont élaboré une théorie (dite théorie LSS) [18] qui permet de donner d'après l'équation (I-47) une expression analytique de la perte d'énergie électronique :

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = 8\pi e^2 Z_1^{1/6} a_0 \frac{Z_2 Z_1}{\left(z_1^{2/3} + z_2^{2/3}\right)} \frac{V_1}{V_0} \quad (\text{LSS}) \quad (\text{I-53})$$

Cette formule montre que la perte d'énergie varie comme la vitesse du projectile V_1 .

I.3.1.2.4.2. Perte d'énergie nucléaire :

A faible vitesse, la vitesse de l'ion est inférieure à celle de ses électrons. Dans ces conditions, la probabilité pour que l'ion se neutralise est importante et les collisions entre le projectile et les électrons périphériques sont quasi élastiques. Ceci a Lindhard conduit à l'utilisation d'un potentiel coulombien d'interaction de type Thomas-Fermi :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} f\left(\frac{r}{a}\right) \quad (\text{I-54})$$

Où $f\left(\frac{r}{a}\right)$ est la fonction de Thomas Fermi à un atome isolé.

Le rayon d'écrantage de Thomas-Fermi que l'on exprime sous la forme :

$$a_{TF} = 0,8853 \frac{a_0}{\left(z_1^{2/3} + z_2^{2/3}\right)^{1/2}} \quad (\text{I-55})$$

Avec $a_0 = 0,53 \text{ \AA}$ (Rayon de Bohr).

Lorsque la vitesse de l'ion diminue, la distance minimale d'approche du noyau cible augmente. Donc lorsque la vitesse de l'ion est de l'ordre de celle de ses électrons périphériques, cet ion a tendance à devenir neutre. Dans ces conditions, le potentiel décrivant l'interaction entre la particule projectile et l'atome cible peut être considéré comme un potentiel de Coulomb écranté de type Thomas-Fermi (Equation I-54), dont la fonction d'écrantage est égale à :

$$f\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{a}{2r} \quad (\text{I-56})$$

On obtient le potentiel d'interaction :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2 a}{2r^2} \quad (\text{I-57})$$

D'après l'équation (I-25), on a l'énergie maximale transférée est :

$$T_{\max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0$$

D'après l'équation (I-42) on a :

$$S_n = \int_0^\infty T \cdot d\sigma \cdot dx = \int_0^\infty T_{\max} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) 2\pi b db = \pi^2 \frac{d^2}{4} T_{\max} \quad (\text{I-58})$$

En exprimant T_{\max} et d la distance minimale d'approche le noyau en fonction des masses de la

particule incidente et l'atome cible.

Donc la section efficace et le pouvoir d'arrêt nucléaire sont donnée par :

$$S_n = \frac{\pi^2 Z_2 Z_1 e^2 a M_1}{M_1 + M_2} \quad (\text{I-59})$$

$$\left(\frac{-dE}{dx}\right)_n = N \pi^2 Z_2 Z_1 e^2 a \frac{M_1}{2(M_1 + M_2)} \quad (\text{I-60})$$

$N Z_2$: est la densité électronique de la cible,

On constate que :

L'expression de la perte d'énergie nucléaire ainsi obtenue ne dépend pas de l'énergie de la particule incidente ce qui ne correspond pas aux données expérimentales [20].

Lindhard et al [20-18] ont exprimé la perte d'énergie nucléaire en utilisant une énergie réduite (sans dimension) :

$$\varepsilon = \frac{4\pi a}{Z_2 Z_1 e^2} \frac{M_2}{(M_1 + M_2)} E = k_e E \quad (\text{I-61})$$

Avec
$$K_e = \frac{4\pi a}{Z_2 Z_1 e^2} \frac{M_2}{(M_1 + M_2)}$$

et une longueur réduite :
$$\rho = x N 4\pi a^2 \frac{M_2 M_1}{(M_1 + M_2)^2} = K_1 x \quad (\text{I-62})$$

Avec
$$K_1 = x N 4\pi a^2 \frac{M_2 M_1}{(M_1 + M_2)^2}$$

La perte d'énergie avec ces variables devient :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \frac{K_1}{K_e} \frac{d\varepsilon}{d\rho} \quad (\text{I-63})$$

Avec
$$\frac{K_1}{K_e} = N a Z_2 Z_1 e^2 \frac{M_1}{(M_1 + M_2)}$$

La section efficace d'arrêt :

$$S_n(\varepsilon) = \left(-\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = \frac{K_e}{k_1} \left(-\frac{dE}{dx}\right)_n = \frac{K_e}{k_1} N \int_0^\infty T(E, b, \varphi) \cdot 2\pi b db \quad (\text{I-64})$$

$\frac{d\varepsilon}{d\rho}$: dépend de la forme du potentiel $V(r)$ utilisé et donc de la forme de la fonction de Fermi.

Selon l'approximation de Kalbitzer et al. [21], cette perte d'énergie peut s'écrire :

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = \frac{1,7\varepsilon^{1/2}}{1+6,8\varepsilon+3,4\varepsilon^{3/2}} \log(\varepsilon + e) \quad (\text{I-65})$$

Cette relation reste la même quel que soit le couple projectile-atome cible. C'est une fonction universelle de la perte d'énergie nucléaire.

Par analogie, avec la collision élastique Lindhard et al. [22, 23,24] introduisent un transfert d'énergie réduite t , proportionnel au transfert d'énergie cinétique T :

$$t = \varepsilon^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2}\right) = \varepsilon^2 \frac{T}{T_{max}} \quad (\text{I-66})$$

$$\varepsilon = \frac{4\pi a}{Z_2 Z_1 e^2} \frac{M_2}{(M_1 + M_2)} E = K_e E$$

On remplace l'énergie réduite dans l'équation (I-66) on obtient :

$$\frac{t}{K_e^2} = \frac{T}{T_{max}} E^2 \quad (\text{I-67})$$

$$T = \frac{t}{k_e \varepsilon} \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (\text{I-77})$$

Le transfert d'énergie cinétique de la particule dépend l'énergie réduite et transfert d'énergie réduite.

Si $b=0$ alors $T=T_{max}$ et $\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = 1$ on déduit $t = \varepsilon^2$

si $b \rightarrow \infty$ alors $T=0$ et $\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = 0$ on déduit $t = 0$

Lindhard et al utilisent également une formule d'approximation pour la section efficace de diffusion qui est valide à 20 % [19, 15, 16] La présence du terme ε^2 dans l'expression (I-66) a permis de distinguer les situations de grandes vitesses ($\varepsilon > 1$) et des situations de faibles vitesses ($\varepsilon < 1$). On montre [18,20] que la section efficace de transfert d'énergie élastique peut s'écrire sous la forme :

$$d\sigma = \pi a^2 \frac{f(\sqrt{t})}{2t^{3/2}} dt = \pi a^2 \frac{f(\sqrt{t})}{t} d(\sqrt{t}) \quad (I-78)$$

Avec:
$$d(\sqrt{t}) = \frac{1}{2} t^{-1/2} dt$$

Donc :
$$f(\sqrt{t}) = \frac{2t^{3/2}}{\pi a^2} \frac{d\sigma}{dt} \quad (I-79)$$

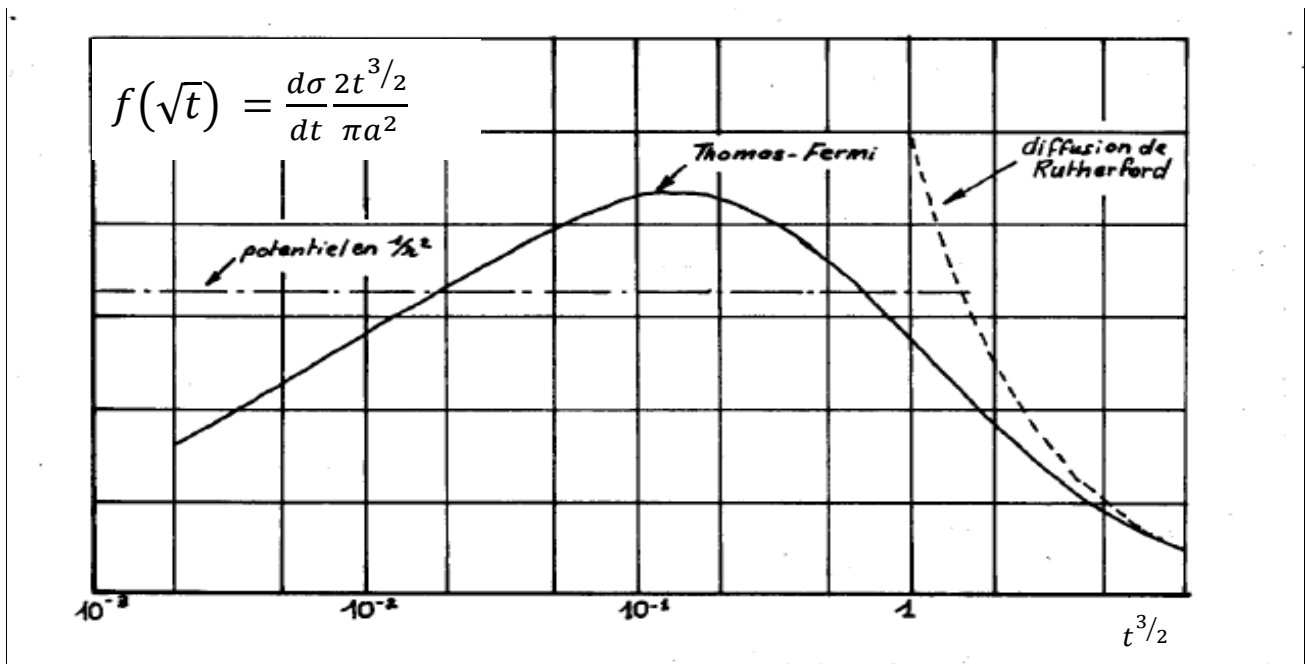


Figure I. 10: Fonction de diffusion universelle (Thomas-Fermi) définie par Lindhard

Où $f(t^{1/2})$ est une fonction universelle, cette dernière a été évaluée numériquement et tabulée par Lindhard, Nielsen et Scharff [20]. Dans la Figure I-10 on donne la variation de cette fonction comparée avec celle obtenue en utilisant un potentiel de Coulomb (diffusion Rutherford) et un

potentiel en $\frac{1}{r^2}$.

Aux grandes valeurs de $t^{3/2}$, est grand et/ou Θ est grand : dans ce cas, le rôle de l'écrantage est faible et on tend vers une situation dominée par la partie purement coulombienne du potentiel :

$$d\sigma \approx \pi a^2 \frac{dt}{4t^2} \iff f(\sqrt{t}) = \frac{1}{2t^{1/2}}$$

A plus faibles valeurs de $t^{3/2}$, le rôle de l'écrantage est fondamental. Pour $t^{3/2} \approx 0,1$, la fonction $f(t^{1/2})$ passe par un maximum.

I.3.1.2.5- Perte d'énergie globale :

En considérant les pertes d'énergie électronique et nucléaire indépendantes et additives, la perte d'énergie totale s'écrit sous forme:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right) = \left(\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE}{dx}\right)_n = NS_e + NS_n$$

N la densité atomique du matériau exprimée en cm^{-3} .

Ou en considérant les coordonnées réduites de Lindhard et al. [20]:

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right) = \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_e + \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n$$

Les différents mécanismes qui contribuent à la perte d'énergie totale sont représentés sur la Figure I.11.

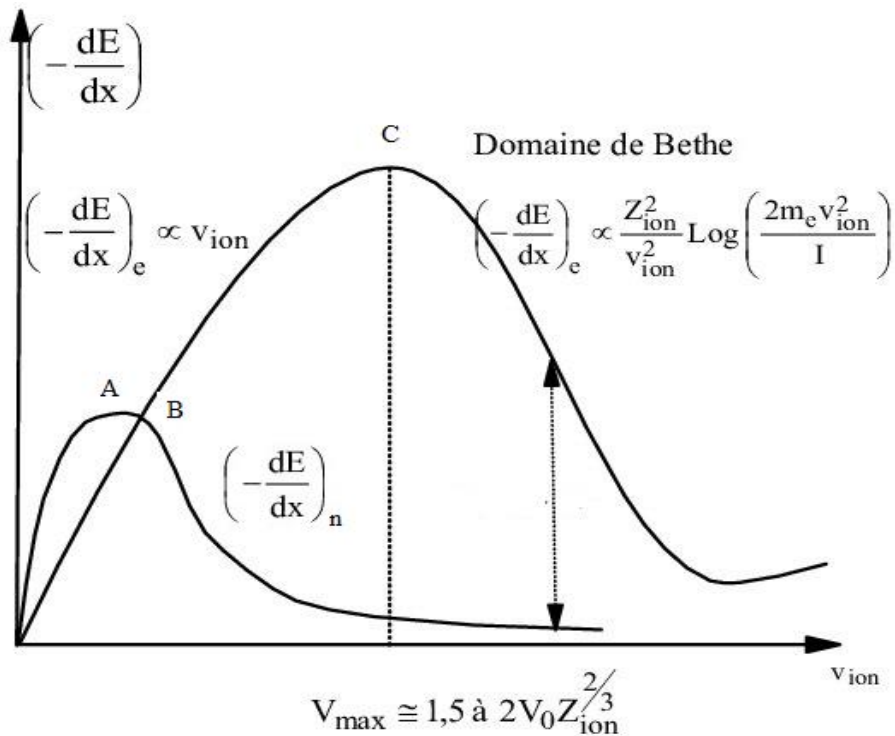


Figure I. 11: Sections efficaces d'arrêt nucléaires et électroniques [20].

Les points A, B, C correspondent respectivement au maximum du pouvoir d'arrêt nucléaire, à l'égalité entre les pouvoirs d'arrêt nucléaire et électronique, et au maximum du pouvoir d'arrêt électronique. Ces points délimitent approximativement les différents mécanismes d'arrêt.

On remarque d'après la Figure I-11, que dans le domaine des faibles vitesses, les collisions élastiques entre particule incidente et l'atome cible sont prédominantes. Le principal mode de ralentissement est la perte d'énergie nucléaire.

I.4. Parcours de la particule dans la matière :

Le parcours d'une particule est la distance totale de pénétration dans le matériau cible pour perdre totalement son énergie.

Pour des particules ayant une énergie supérieure à quelques dizaines de keV/uma, la perte d'énergie par ionisation ou excitation intervient essentiellement en début du parcours. Les collisions inélastiques à petit transfert sont majoritaires et les parcours de ces particules sont pratiquement rectilignes.

Pour des particules ayant une énergie inférieure à quelques dizaine de keV/uma, la perte d'énergie dans le milieu traversé provient majoritairement des collisions élastiques.

Le parcours de la particule projectile dans la matière se détermine à partir de la perte de l'énergie électronique et nucléaire, il s'exprime par:

$$R = \int_{E_0}^0 dx = \int_0^{E_0} \left(-\frac{dE}{dx}\right)^{-1} dE = \int_0^{E_0} \frac{dE}{\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_n} \quad (\text{I-80})$$

Les collisions atomiques étant aléatoires, il y a plusieurs changements de direction lors du parcours de la particule incidente. On définit le parcours projeté, R_p qui est la projection de R dans la direction de la particule incidente.

Les collisions vont induire autour du parcours projeté R_p une distribution statistique du parcours des ions thermalisés. En première approximation, on peut considérer que cette distribution est une Gaussienne, centrée autour de la valeur R_p avec un écart type ΔR_p correspondant à une largeur à mi-hauteur égale à $\Delta x = 2,35\Delta R_p$. La concentration d'ions implantés à une profondeur x est donnée par s'expression :

$$n(x) = N \exp - \left[\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2} \right] \quad (\text{I-81})$$

$$\text{Avec} \quad N = \frac{\phi}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\Delta R_p}$$

N : concentration en atomes au maximum de la distribution en atome par cm^3 .

ϕ : Nombre total d'atomes implantés (en atome par cm^2)

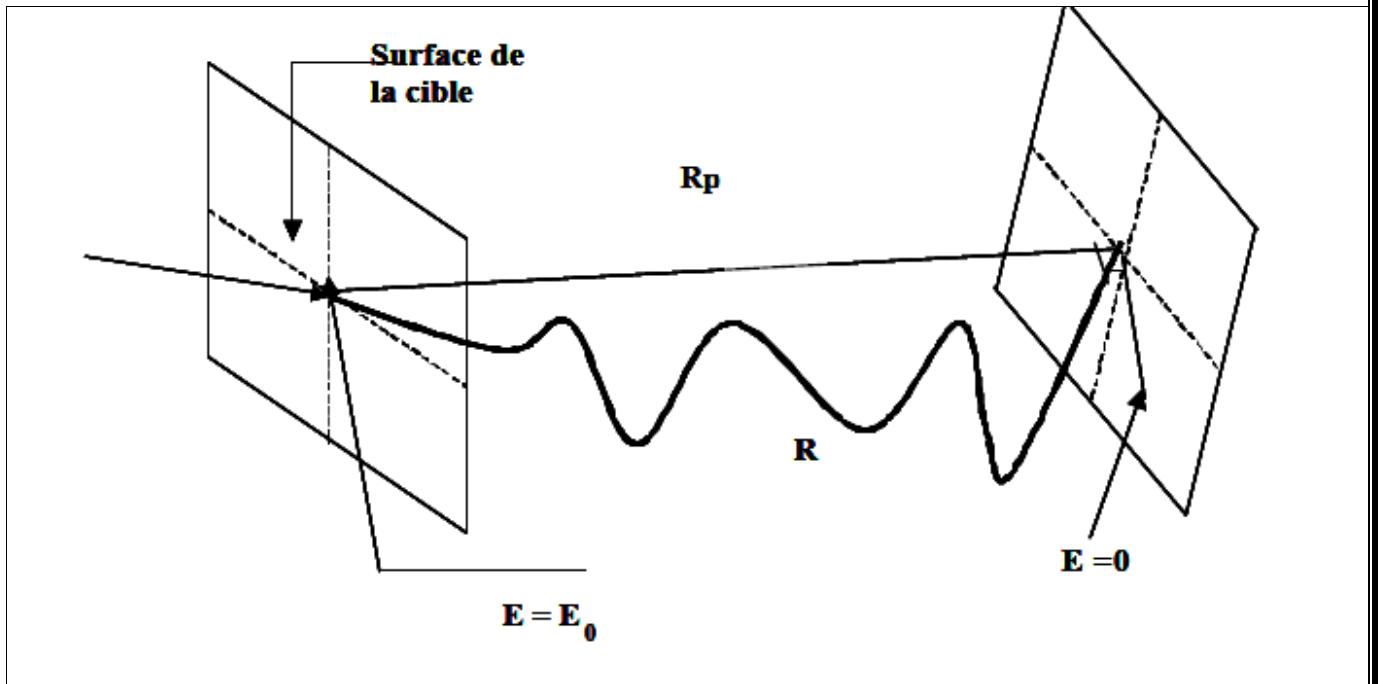


Figure I. 12: Schéma illustrant les différents parcours d'une particule dans un solide. [25]

REFERENCES

[1] : **C,Jimonet et H,Metivier2007**

Personne comptente en radioprotection .Principe de radioprotection – règlementation
EDP science ,209.

[2] : **Cazaux J. (1995a, (1995b).**

The role of the Auger mechanism in the radiation damage of insulators. *Microscopy
Microanalysis and Microstructures* 6, 345-362. Correlations between ionization
radiation damage and charging effects in transmission electron microscopy.
Ultramicroscopy 60, 411-425.

[3] :**Cazaux J. (1996 ,1999,1995a,1995b)**

Electron Probe Microanalysis of Insulating Materials Quantification Problems and
Some Possible Solutions. *X-ray Spectrometry* 25, 265-280 . Mechanisms of charging in
electron spectroscopy. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena.* 105,
155-185. The role of the Auger mechanism in the radiation damage of insulators.
Microscopy Microanalysis and Microstructures 6, 345-362 Correlations between
ionization radiation damage and charging effects in transmission electron microscopy.
Ultramicroscopy 60, 411-425.

[4] : **Feibelman P. J. et Knotek M. L. (1978)**

Reinterpretation of electron-stimulated desorption data from chemisorption systems.
Physical Review B 18, 6531-6539.

[5] : **Fleischer R. L., Price P. B. et Walker R. M. (1965) Fleischer R. L., Price P. B.,
Walker R. M. et Hubbard E. L. (1967)**

Tracks of Charged Particles in Solids. *Science* 149,383-393. Criterion for Registration in
Dielectric Track Detectors. *Physical Review* 156, 353-355.

[6] : **Zinckle S. J. (1997 ;1999)**

Irradiation spectrum and ionization-induced diffusion effects in ceramics.
Microstructure Evolution During Irradiation, Materials Research Society 439, 667-678.

Fundamental radiation effects parameters in metals and ceramics. Kiitani Symposium on Structural Defects in Advanced Materials 148, 447-477.

- [7] : **Cazaux J. (1995b)**
Correlations between ionization radiation damage and charging effects in transmission electron microscopy. *Ultramicroscopy* 60, 411-425.
- [8] : **CHRISTINE JIMONET ET HENRI METIVIER.**
"Personne compétente en radioprotection". Principes de radioprotection- réglementation EDP Sciences 2007. France.
- [9] : **Carpéna J., Boyer L. and Lacout J. L., French Patent, 98, (1998), 11334.**
- [10] : **E. Podgorasak .**
Radiation oncology physics, A handbook for teachers and students. Vienna : Technical Editor, IAEA. 2005.
- [11] : **H.A. Bethe, Ann. Phys. 5 (5) 325 (1930)**
- [12] : **H.A. Bethe, Z. Phys. 76, 293 (1932)**
- [13] : **H.A. Bethe, Phys. Rev. 89, 1256 (1953)**
- [14] : **H.A. Bethe, Handbuch der Physik 14, 491 (1933)**
- [15] : **F. Bloch, Ann. Physik 16. 287 (1933)**
- [16] : **F. Bloch, Z. f Physik 81. 363 (1933)**
- [17] : **Barkas H., Academic Press, New-York, chapter 9, 1 (1963), 371.**
- [18] : **Lindhard J., Scharff M. and Shiott H. E.,**
Mat. Phys. Medd., 33 (1963), 14, Range concepts and heavy ion ranges.
- [19] : **Methods of experimental physics Vol. 17 Atomic physics : accelerator (1980) Wei-Kan-Chu, Chapitre 2 : Energy loss of high velocity ions in matter Hans D. Betz, Chapitre 3 : Charge equilibration of high velocity ions in matter.**
- [20] : **J. Lindhard, V. Nielsen and M. Scharff,**
Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk, 36, No 10(1968).
- [21] : **Kalbitzer S., Oetzman H., Grahmann H., Feuerstein A.**
Z. Phys., A 278, (1976), 3, 223, A simple universal fit formula to experimental nuclear stopping power data.
- [22] : **P. Sigmund, Rev. Roum. Phys. 17, 823 (1972)**

[23] : **P. Sigmund, Rev. Roum. Phys. 17, 969 (1972)**

[24] : **P. Sigmund, Rev. Roum. Phys. 17, 1079 (1972)**

[25] : **LINDHARD J., SCHARFF M., SCHIOTT H. E.**

Range concepts and Heavy ion ranges Notes on atomic collisions II Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.D14(1963).

Chapitre II

**DETERMINATION DU POUVOIR D'ARRET
ELECTRONIQUE DES MATERIAUX POLYMERES PAR
UTILISATION DE LA METHODE DE MONTE CARLO.**

Introduction

La perte d'énergie électronique des ions, lors de leur passage dans la matière, a été d'un grand intérêt au cours des dernières décennies, à la fois d'un point de vue théorique qu'expérimental. Lindhard, Scharff et Schiott [1] (théorie LSS) ont utilisé le modèle statistique de Thomas-Fermi ont proposé une expression du pouvoir d'arrêt électronique proportionnel à la vitesse de la particule projectile [2-3].

Cette théorie permet aussi de décrire les phénomènes de la perte d'énergie et d'évaluer le pouvoir d'arrêt électronique pour des vitesses $V < V_0 Z_1^{2/3}$ [4-5-6]. De nombreux auteurs ont essayé de modifier le facteur de correction ξ_e impliqué dans la théorie, mais seulement pour un nombre très limité de combinaisons cibles ioniques [7-12]. De plus, le ralentissement des ions dans la matière, basée sur la théorie des transports, présente un intérêt considérable dans divers domaines de la physique des matériaux ; telles que la méthode de rétrodiffusion d'ions, détection de recul élastique, et émission de rayons X induite par les ions lourds ou réalisation de matériaux par implantation à haute énergie utilisant les ions lourds à haute énergie [13-16].

Un grand nombre d'études expérimentales et théoriques a été effectué sur le pouvoir d'arrêt électronique pour différents ions et matériaux cibles. Mais, nous avons constaté qu'il est impossible de mesurer expérimentalement le pouvoir d'arrêt électronique du grand nombre de combinaisons ion/cible [17-24].

Dans ce travail, les pouvoirs d'arrêt électroniques des matériaux Formvar ($C_5H_8O_2$) et Mylar ($C_{10}H_8O_4$) pour les ions ^{11}B , ^{19}F , ^{23}Na , ^{24}Mg , ^{27}Al , ^{28}Si , ^{31}P , ^{32}S , ^{35}Cl et ^{40}Ar dans la région énergétique comprise entre 0,1 et 1,0 MeV / nucléon ont été calculé par simulation de Monte Carlo, est ce, en utilisant la théorie LSS modifié.

Nous avons comparé les résultats obtenus par nos calculs à ceux obtenus expérimentalement et théoriquement en utilisant le code SRIM [25-26] et le code MSTAR [27-28]. Nous avons estimé que ces calculs supplémentaires conduiront bon développement pour l'évaluation du pouvoir d'arrêt électronique de différents matériaux et pour divers ions lourds.

II.1 .Le pouvoir d'arrêt électronique d'un matériau aux faibles vitesses :

Le modèle LSS affirme que la perte d'énergie (dE) liée à un parcours (dx) d'une particule projectile de charge (Z_1) dans un milieu cible de charge (Z_2) est proportionnelle à la vitesse de la particule projectile.

Le pouvoir d'arrêt électronique est donné par :

$$S_e = \left(-\frac{dE}{dx} \right)_{LSS} = \xi_e 8\pi e^2 N a_0 \left(\frac{Z_2 Z_1}{z} \right) \frac{V}{V_0} \quad (\text{II. 1})$$

et ce pour $V < V_0 Z_2^{2/3}$

Z_1, Z_2 : numéros atomiques de l'ion incident et de la cible atome respectivement

ξ_e : facteur de corrélation) est égal à $Z_1^{1/6}$ (qui varié autour de 2).

$a_0 = \frac{h}{m_e c^2}$: Rayon de Bohr.

$V_0 = \frac{c}{137}$: Vitesse de Bohr.

N : densité atomique.

V : vitesse de l'ion projectile.

$$Z = \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{3/2}$$

L'équation (II. 1) peut donc s'écrire sous forme :

$$S_e = \left(-\frac{dE}{dx} \right) = K(LSS) V \quad (\text{II. 2})$$

Avec $K(LSS)$ est une constante.

Afin de reproduire la forme linéaire des courbes de variations du pouvoir d'arrêt à faible vitesse, des ajustements des données expérimentales du pouvoir d'arrêt (disponibles dans la littérature) de différents matériaux cibles a été utilisé [29].

Dans le cadre de ce travail, nous avons évalué le coefficient de correction ξ_e pour différents matériaux polymères et pour différentes combinaisons ion-cibles, et ce, pour des particules projectiles de numéro de charge Z_1 comprise entre 5 et 18 et de différents énergies.

L'ajustement des valeurs obtenues pour ξ_e^* nous a permis de déduire une expression de la forme:

$$\xi_e^* = a(Z_1^b Z_2^c) \quad (\text{II. 3})$$

Où $a = 0,956$; $b = -0,573$ et $c = 0,237$.

Ensuite, nous avons injecté l'expression de ξ_e^* dans l'équation(II.1) et nous avons remplacé Z_1 par la charge effective $Z_{1\text{eff}}$ des particules projectiles lourdes de vitesse $V < V_0 Z_1^{2/3}$. [30-31].

L'expression de la charge effective est donnée par : [32].

$$Z_{1\text{eff}} = (1 - \exp(1,25x))Z_1 \quad (\text{II. 4})$$

Où $x = 100\beta/Z_1^{2/3}$ et $\beta = \frac{v}{c}$

Pour les calculs effectués dans le cadre de ce travail et afin de déterminer le pouvoir d'arrêt électronique (S_e) des cibles polymères pour des ions lourds, nous avons utilisé l'expression modifiée donnée par ci-dessous :

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{LSS-Modifié} = \xi_e^* 8\pi e^2 N a_0 \left(\frac{Z_2 Z_{1\text{eff}}}{Z}\right) \frac{V_1}{V_0} f(E) \quad (\text{II. 5})$$

Où Z_1 est remplacé par $Z_{1\text{eff}}$ donné dans l'équation (II. 4) et $f(E)$ est une fonction exponentielle exprimée par :

$$f(E) = a_1 e^{(-b_1 E)} \quad (\text{II. 6})$$

E : Energie des particules projectiles

Où a_1 et b_1 sont des paramètres réglables comprises entre :

Pour Formvar($C_5H_8O_2$) $0,508 < a_1 < 1,181$ et $1,623 < b_1 < 3,912$

Pour Mylar($C_{10}H_8O_4$) $0,531 < a_1 < 1,012$ et $1,899 < b_1 < 3,598$

Cependant, l'expression (II.5) devient:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{LSS-Modifié} = \xi_e^* 8\pi e^2 N a_0 \left(\frac{Z_2 Z_{1\text{eff}}}{Z}\right) \frac{V_1}{V_0} a_1 e^{(-b_1 E)} \quad (\text{II. 7})$$

L'expression (II.7) a été utilisée pour déterminer des valeurs empiriques de a_1 et b_1 qui conviendraient pour les calculs effectués pour les suites.

Dans un premier temps, nous avons calculé le pouvoir d'arrêt électronique; et nous avons ensuite étendu notre étude à différentes combinaisons ion-cibles polymères, et ce, pour une gamme d'ions lourds de charges Z_1 allant de 5 à 18.

La cible est considérée comme amorphe avec des atomes ayant des emplacements aléatoires et les propriétés directionnelles applicables pour les matériaux cristallins sont ignorés [24-33].

Le programme proposé, dans le cadre de ce travail, calcule les distributions tridimensionnelles finales des ions, le transfert d'énergie, la perte d'énergie et le pouvoir d'arrêt électronique. Le projectile est arrêté lorsque son énergie est inférieure à I (énergie moyenne d'excitation). Nous avons effectué une simulation conventionnelle avec un nombre élevé de trajectoires ioniques (10^6) pour pouvoir négliger que les fluctuations statistiques.

La section efficace différentielle correspondent aux collisions (avec un transfert d'énergie compris entre T et $T + dT$) entre une particule projectile d'énergie cinétique T , de charge Z_1 et de paramètre d'impact b et un électron du milieu ralentisseur est donnée par l'expression :

$$d\sigma(T) = 2\pi \frac{Z_1 e^4}{m_e v^2} \frac{dT}{T^2} \quad (\text{II.8})$$

L'expression de la perte d'énergie moyenne est calculée en intégrant entre b_{min} et b_{max} :

$$\langle T \rangle = \int_{b_{min}}^{b_{max}} T(b) d\sigma \quad (\text{II.9})$$

Où σ : est la section efficace de l'interaction

b : est le paramètre d'impact.

II.2. La méthode de simulation :

Chaque ion est caractérisé par les paramètres, qui l'identifie, à savoir le numéro atomique, la masse atomique, l'énergie, sa position dans l'espace caractérisée par les coordonnées X , Y et Z . Le suivi de l'évolution de ces paramètres a été effectué en utilisant la méthode de simulation Monte Carlo [23-24].

En effet, on suppose que la particule change de direction à la suite de chaque collision électronique binaire et qu'elle se déplace en ligne droite entre deux collisions successives. L'énergie de la particule est réduite en conséquence de collision électronique, et l'ion est arrêté dès que son énergie descend en dessous d'une valeur prédéfinie ou lorsque la position de la particule est en dehors de la cible.

En supposant que la cible à la forme d'un cylindre de rayon $r = b_{max}$, et de hauteur $h=L$ (Figure II.1).

Les dimensions de la cible sont de l'ordre de quelques micromètres. Le programme génère donc une distribution de la position des particules, caractérisé par les coordonnées (X , Y et Z), dans un cylindre de rayon $r = b_{max}$, et de hauteur $h=L$.

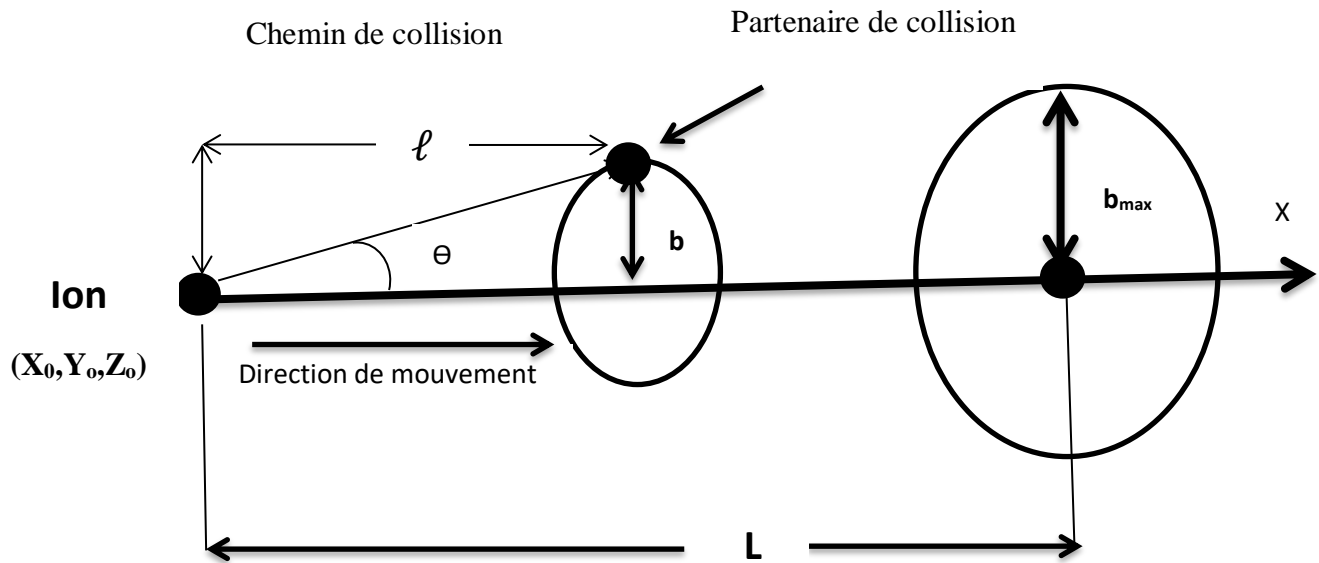


Figure. II 1: Collision schématique dans des cibles amorphes

La méthode de Monte Carlo consiste à générer trois nombres pseudo aléatoires ξ_1 , ξ_2 et ξ_3 en utilisant le programme subroutine aléatoires basé sur la méthode congruentielle. Avec $(0 \leq \xi_i < 1)$.

Nous générons un nombre homogène dans l'intervalle $[0, L]$ afin d'obtenir la position X et quelques positions d'espace $\{Y, Z\}$ de l'espace, et ce, dans un cercle de rayon b_{max} .

$$\begin{aligned} X &= \xi_1 L \\ Y &= -b_{max} + 2b_{max}\xi_2 \\ Z &= -b_{max} + 2b_{max}\xi_3 \end{aligned} \quad (II.11)$$

D'où : $Y \in [-b_{max}, b_{max}]$ et $Z \in [-b_{max}, b_{max}]$.

La génération isotrope du couple $\{Y, Z\}$ dans le cercle de rayon b_{max} est obtenu ; en respectant la condition :

$$Y^2 + Z^2 \leq b_{max}^2 \quad (II.12)$$

L'angle de diffusion θ est généré en fonction de la distribution angulaire sélectionnée à l'aide de la méthode mathématique du Von Neumann [35-36]. La direction initiale est repérée par l'angle θ et considérant la trajectoire du faisceau suivant l'axe OX

$$\theta = \arccos(1 - 2\xi_4) \quad (IV.13)$$

L'angle azimutal φ est échantillonné aléatoirement dans l'intervalle $[0, 2\pi]$, en utilisant la relation

$$\varphi = 2\pi\xi_5$$

A hautes énergies, en supposant que les électrons sont distribués d'une façon uniforme à l'intérieur de la cible. Toutes les particules incidentes subissent une interaction avec les électrons situés dans l'intervalle dont le paramètre d'impact est compris entre b et $b + db$. La densité de probabilité de collision (χ_1) est donnée par :

$$\chi_1(b)db = N L 2 \pi b db \quad (\text{II. 14})$$

Où N est la densité atomique de la cible.

La probabilité de ne trouver aucun électron dont le paramètre d'impact est inférieur à b , c'est-à-dire compris entre 0 et b , est :

$$\chi_2(b) = e^{-N.L.\pi.b^2} \quad (\text{II. 15})$$

Par conséquent, la densité de probabilité de trouver un électron de l'atome cible le plus proche et dont le paramètre d'impact est compris entre b et $b + db$, est donnée par le produit des deux probabilités χ_1 et χ_2 , d'où :

$$\chi(b)db = \chi_1(b) \cdot \chi_2(b) = e^{-N.L.\pi.b^2} N.L.2.\pi.b.db \quad (\text{II. 16})$$

Cette distribution de densité de probabilité permet la détermination du paramètre d'impact.

$$b = [-l n(\xi)/\pi NL]^{1/2} \quad (\text{II. 17})$$

Où ξ est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1.

A basses énergies la densité de probabilité de rencontrer un électron de la cible le plus proche entre b et $b + db$ est donnée par l'expression suivante :

$$\chi(b)db = \begin{cases} 2\pi N^{2/3} b db & \text{si } b < \pi^{-1/2}.N^{-1/3} \\ 0 & \text{si } b > \pi^{-1/2}.N^{-1/3} \end{cases} \quad (\text{II. 18})$$

Cette distribution de densité de probabilité permet la détermination du paramètre d'impact.

$$b = \left[\xi / \pi N^{2/3} \right]^{1/2} \quad (\text{II. 19})$$

En fait, les transferts d'énergie à un système quantique d'électrons liés ne peuvent être arbitrairement faibles. Même si on ne néglige pas le ralentissement par interaction avec les électrons dits libres du milieu, il faut néanmoins que la particule incidente cède une énergie suffisante pour faire passer l'électron d'une bande d'énergie à une autre ou au moins l'énergie d'une excitation élémentaire du milieu.

On considère que la cible d'atome a la forme d'un cylindre de rayon $r = b_{max}$ et de hauteur $h = L$, d'où :

$$b_{max}^2 \pi \cdot L = N^{-1} \quad (\text{II. 20})$$

En supposant une densité de probabilité uniforme des paramètres θ et b nous aurons :

$$\xi_1 = \frac{\int_0^b r dr}{\int_0^{b_{max}} r dr} \quad (\text{II. 21})$$

Par l'intégration de l'expression (II. 21) on trouve :

$$b = b_{max} \sqrt{\xi_1} \quad (\text{II.22})$$

Dans le cas isotrope, la densité de probabilité est donnée par la relation suivante :

$$P(\Omega) d\Omega = \frac{d\Omega}{4\pi} g(\theta) d\theta \cdot h(\varphi) d\varphi \quad (\text{II.23})$$

Avec :

$$g(\theta) d\theta = \frac{\sin\theta \cdot d\theta}{2}$$

$$h(\varphi) d\varphi = \frac{d\varphi}{2\pi}$$

II.3. Résultats et discussion

Le calcul a été effectué pour les matériaux polymères Formvar et Mylar qui sont caractérisés par les paramètres qui figure dans le tableau II.1. Nous avons pris les énergies d'excitation moyennes des constituants de ces matériaux égales à 19,2 eV pour l'hydrogène, à 81 eV pour le carbone et 106 eV pour l'oxygène [38].

Afin de tester la validité de la théorie LSS, nous avons représenté dans les figures 2a et 2b, le pouvoir d'arrêt électronique du matériau polymère Formvar en fonction de la vitesse réduite des ions pour divers ions lourds de charge Z_1 comprise entre 9 et 18, et ce, pour la théorie LSS et LSS théorie modifiée, respectivement.

Chapitre II : Détermination de la perte d'énergie électronique...

On constate donc que la théorie LSS prédit une tendance linéaire de la variation du pouvoir d'arrêt électronique en fonction de la vitesse des ions incidents (FigureII.2a).

D'autre part, en utilisant la théorie LSS modifiée, le comportement du pouvoir d'arrêt électronique du matériau cible Formvar atteint une valeur maximale pour vitesse réduite donnée de l'ion incident.

Ce comportement est probablement dû à l'incorporation du facteur ξ_e et la fonction exponentielle $f(E)$ (FigureII.2b).

Les valeurs de pouvoir d'arrêt calculée et basées sur l'utilisation de l'expression (II.1) après incorporation du facteur ξ_e^* et la fonction exponentielle $f(E)$ seront comparées avec d'autres données théoriques et expérimentales.

Polymères	Eléments	Concentration(en%)	\bar{Z}	\bar{A}	\bar{I} (eV)
Fomvar(C ₅ H ₈ O ₂) $\rho = 1,23 \text{ g/cm}^3$	H	53,33	3,60	6,67	70,87
	C	33,33			
	O	13,33			
Mylar(C ₁₀ H ₈ O ₄) $\rho = 1,40 \text{ g/cm}^3$	H	36,36	4,55	8,73	78,70
	C	45,45			
	O	18,18			

Tableau II .1 : Nombre atomique moyen \bar{Z} , la masse atomique moyenne \bar{A} , Energie d'excitation moyenne(\bar{I}), concentrations du Mylar et de Fomvar [36].

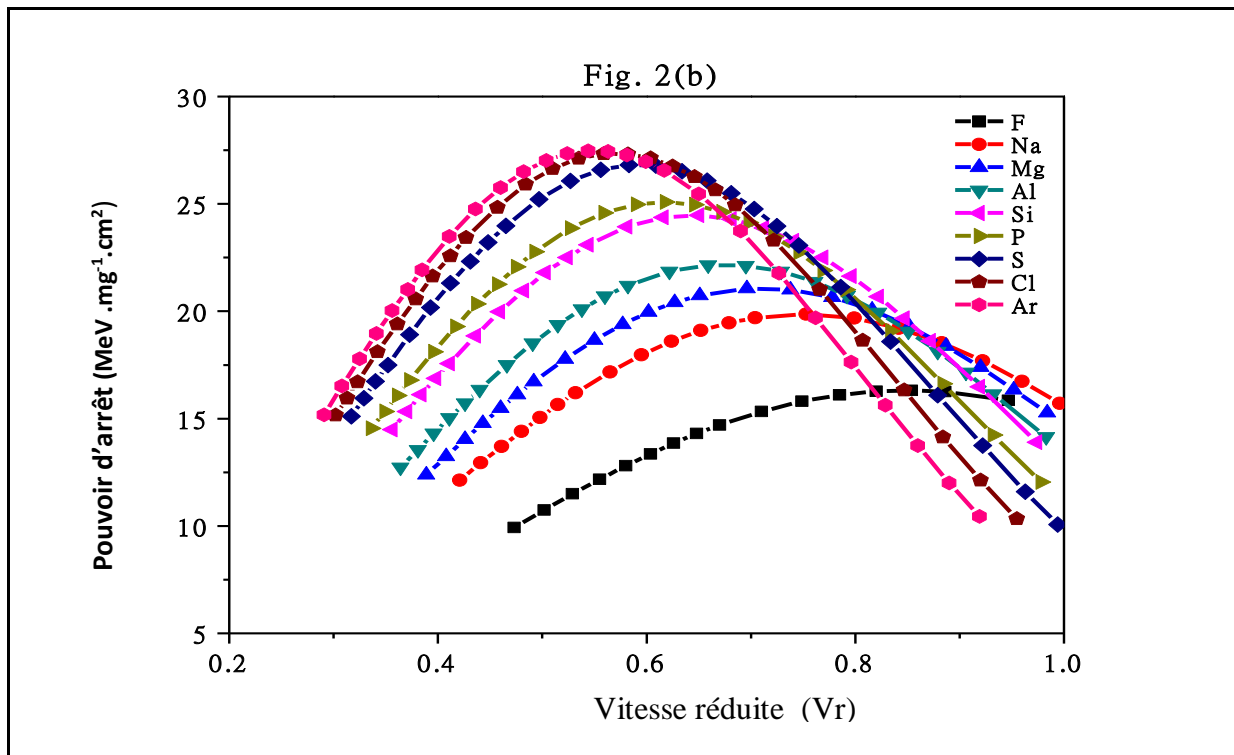
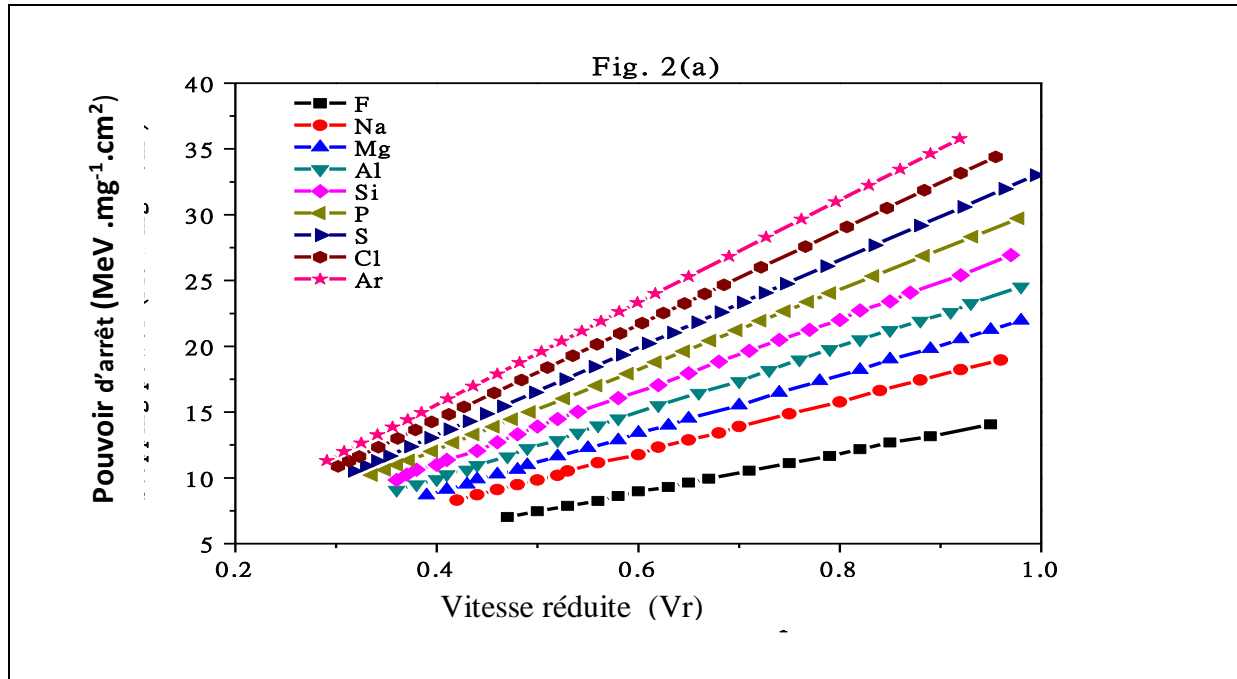


Figure. II 2: Pouvoir d'arrêt électronique en fonction de la vitesse réduite pour différents ions lourds incidents dans Formvar (C₅H₈O₂) : (a) Théorie LSS et (b) théorie LSS modifiée

Afin d'examiner la validité des paramètres de modification ξ_e et $f(E)$ dans la théorie LSS nous avons effectué une comparaison entre nos calculs et les résultats obtenus par la théorie LSS modifiée, la simulation de Monte Carlo, code SRIM, et quelques résultats expérimentaux déjà publiés.

Les figures II-3 et II-4 montrent le pouvoir d'arrêt électronique en fonction de l'énergie incidente dans les matériaux polymères Formvar et Mylar pour des ions numéro atomique $Z_1 = 9$ à 18. On note un bon accord entre les résultats trouvés par notre méthode de calcul (la théorie de LSS modifiés) et ceux obtenus par le code SRIM et la simulation Monte Carlo (voir les figures 3a à 3i et les figures 4a à 4i).

On outre, on constate que, l'allure du pouvoir d'arrêt électronique basé sur la théorie LSS modifiée et calculée pour des ions d'énergie dans la gamme 0,1 à 0,65 MeV / nucléon présente un parfait accord comparée à celles obtenues par d'autre donnée à savoir la méthode de Monte Carlo, Code SRIM et données expérimentales. [5-6-29].

Alors que cette concordance diminue rapidement au-delà d'une énergie $E=0,6$ MeV / nucléon.

Il est clair que pour les ions lourds ^{19}F , ^{27}Al , ^{28}Si , ^{35}Cl et ^{40}Ar dans Formvar (figure.II-3), les valeurs théoriques obtenues par la théorie LSS modifiée sont en accord étroit (environ 10%) avec les résultats obtenus par le code SRIM dans l'intervalle d'énergie ($0,1 \leq E \leq 0,63$ Mev/nucléon). De plus, dans la même gamme d'énergie, les ions lourds ^{23}Na , ^{24}Mg , ^{31}P et ^{32}S dans Formvar montrent un écart d'environ 12%. Pour la figure-II- 4, les ions lourds incidents comme ^{19}F , ^{35}Cl et ^{40}Ar dans le Mylar, les valeurs obtenues par la théorie LSS modifiée sont en accord étroit (environ 10%) avec les Code SRIM dans la région énergétique ($0,1 \leq E \leq 0,63$ Mev/nucléon). Cependant, les ions lourds ^{23}Na , ^{24}Mg , ^{27}Al , ^{28}Si , ^{31}P , et ^{32}S dans Mylar montrent une dispersion d'environ 13%.

Pour tous les projectiles ioniques de nombre de charge Z_1 compris entre 9 et 18, la présente formulation montre un bon accord (~ 8%) dans la gamme d'énergie [0,3 ; 0,6] MeV / nucléon. Mais au-dessus de 0,65 MeV/nucléon, la théorie LSS modifiée sous-estime fortement les valeurs du pouvoir d'arrêt électronique.

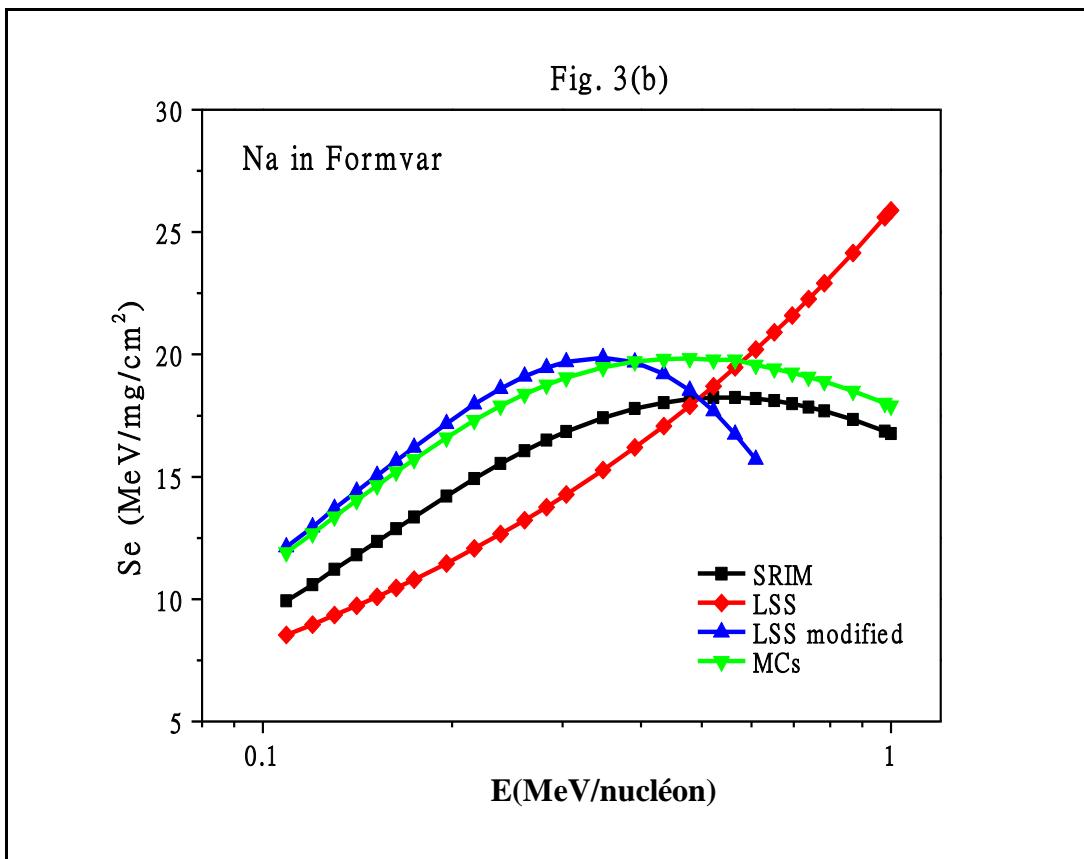
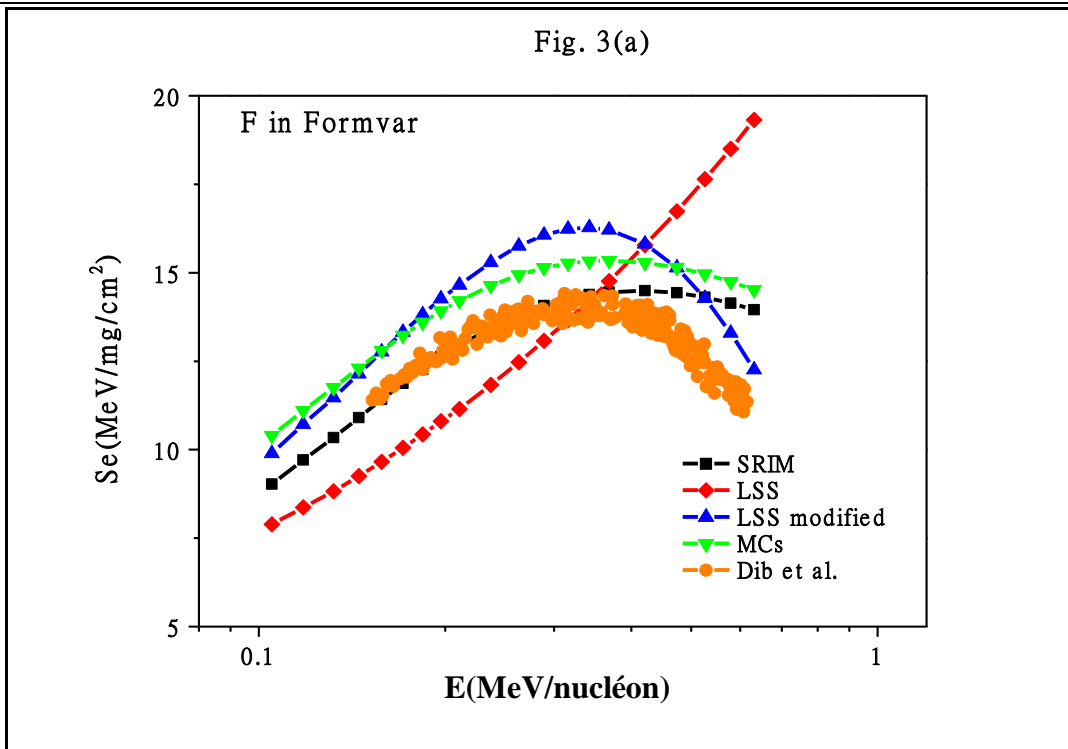


Fig. 3(c)

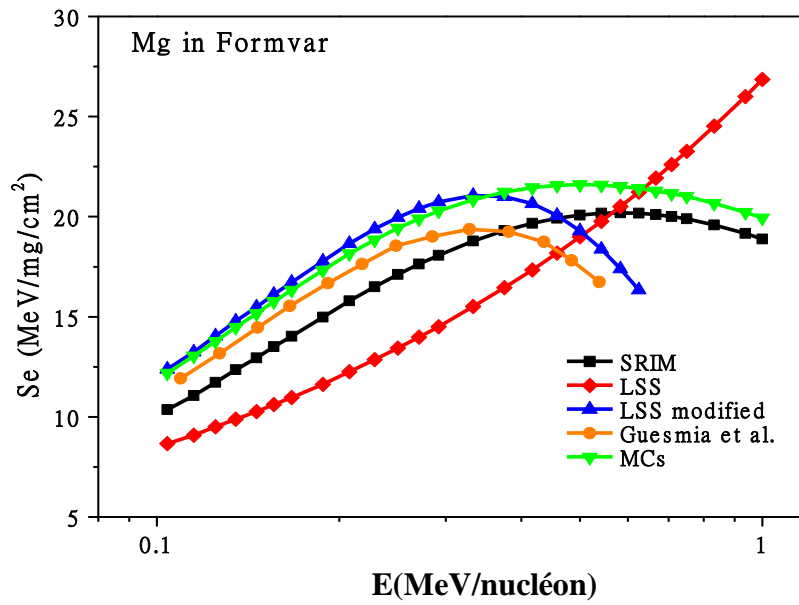
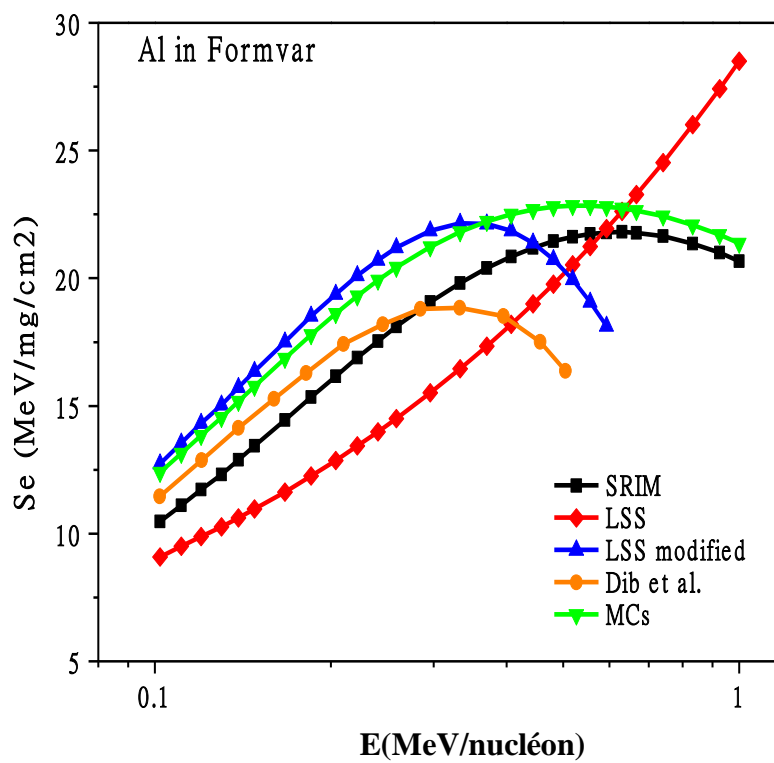
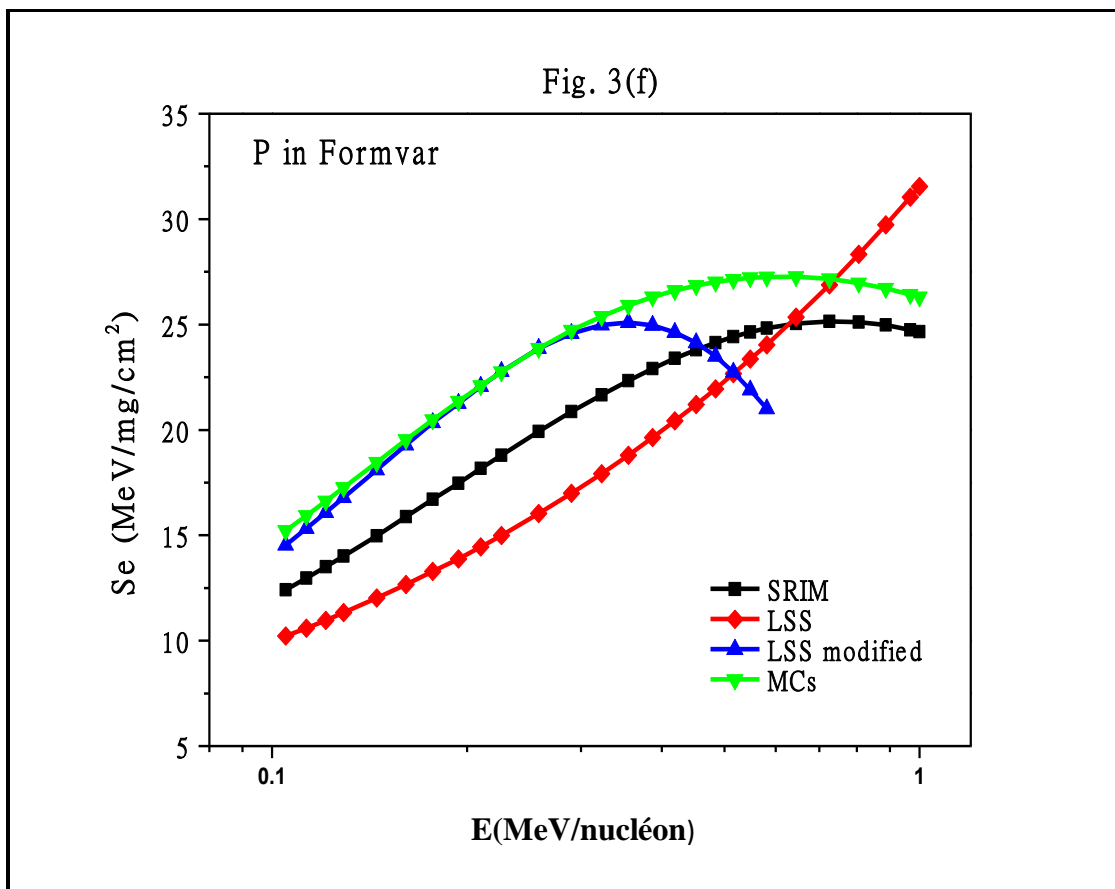
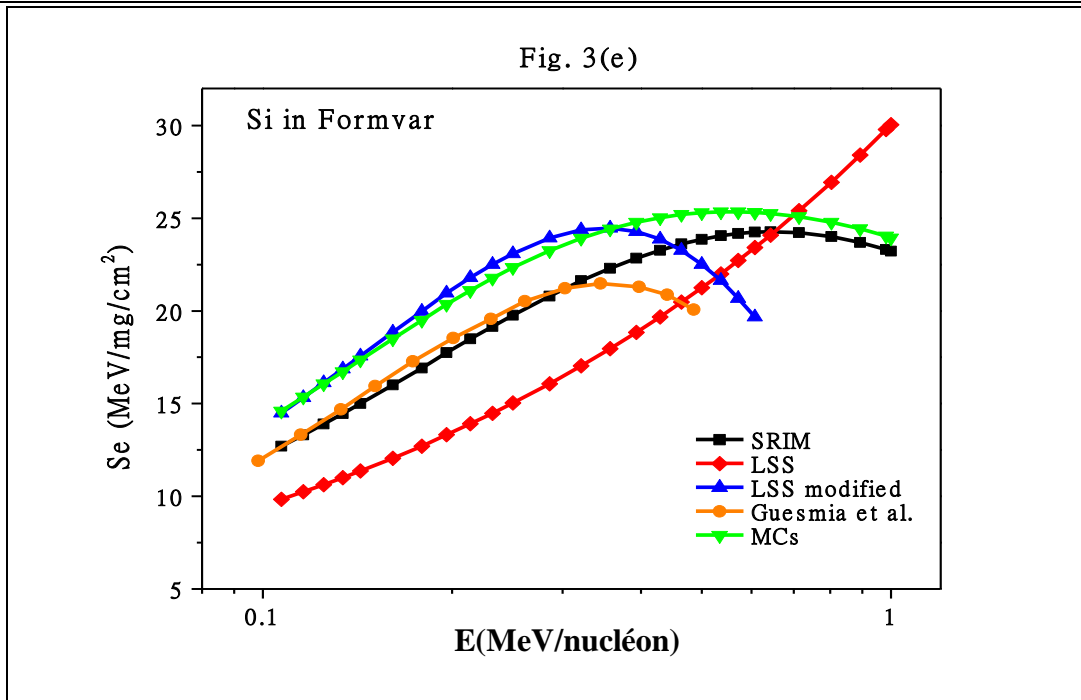
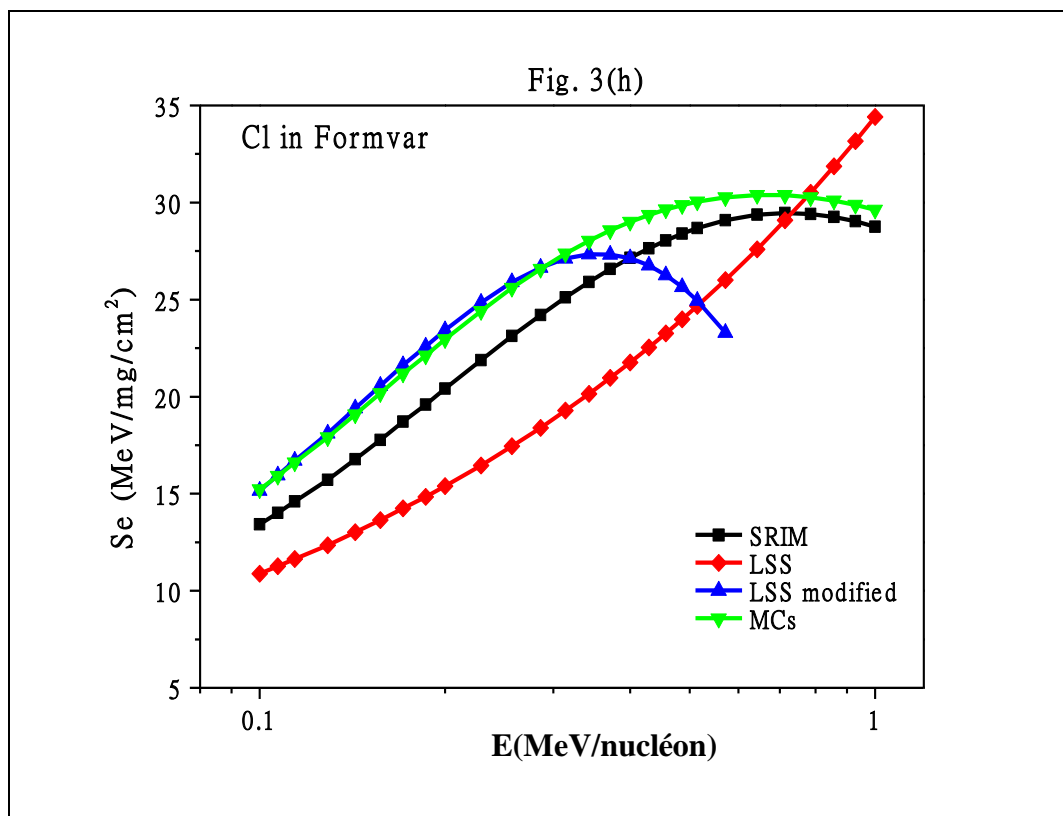
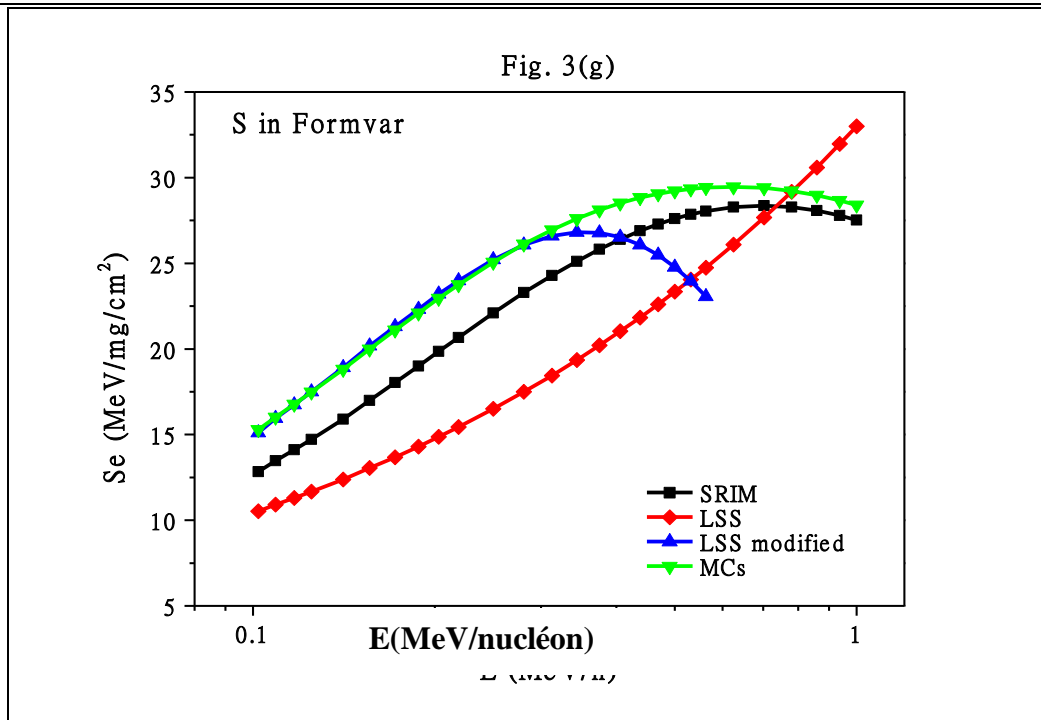


Fig. 3(d)







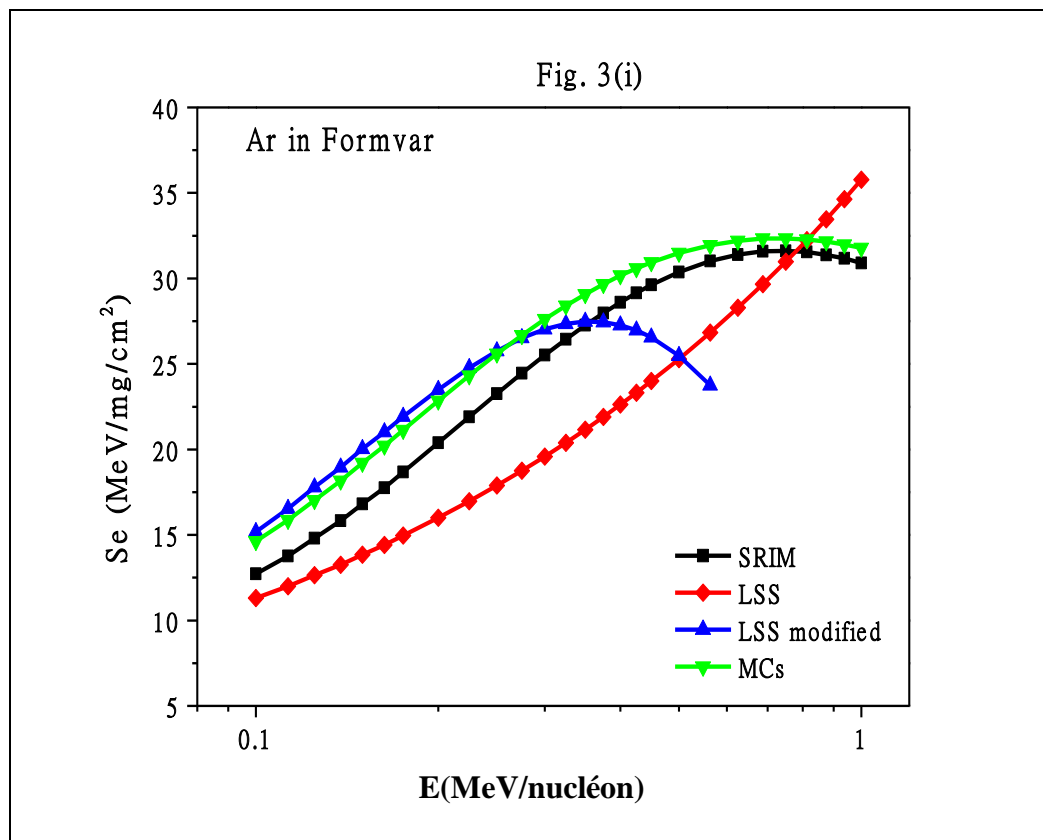


Figure.II.3: Pouvoir d'arrêt électronique de la cible polymère Formvar C₅H₈O₂ pour les ions lourds: (a) ¹⁹F, (b) ²³Na, (c) ²⁴Mg, (d) ²⁷Al, (e) ²⁸Si, (f) ³¹P, (g) ³²S, (h) ³⁵Cl et (i) ⁴⁰Ar.

Fig. 4(a)

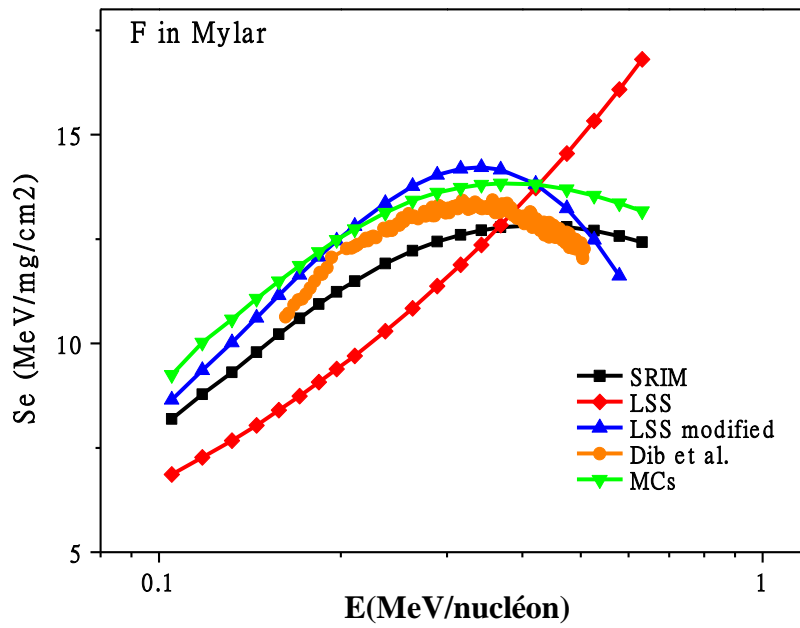


Fig. 4(b)

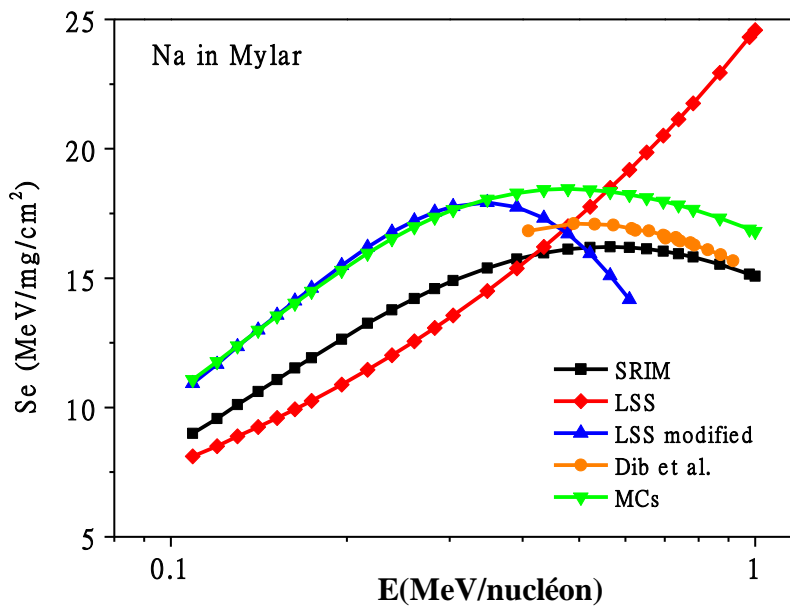


Fig. 4(c)

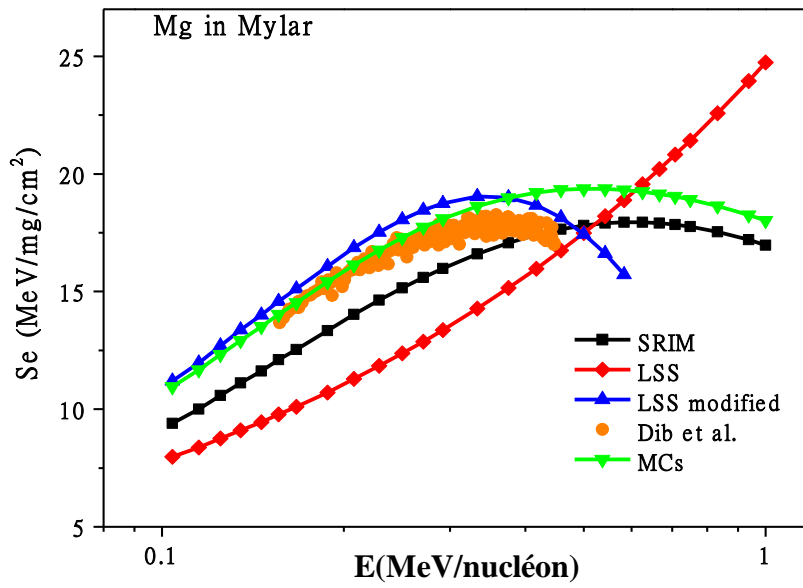
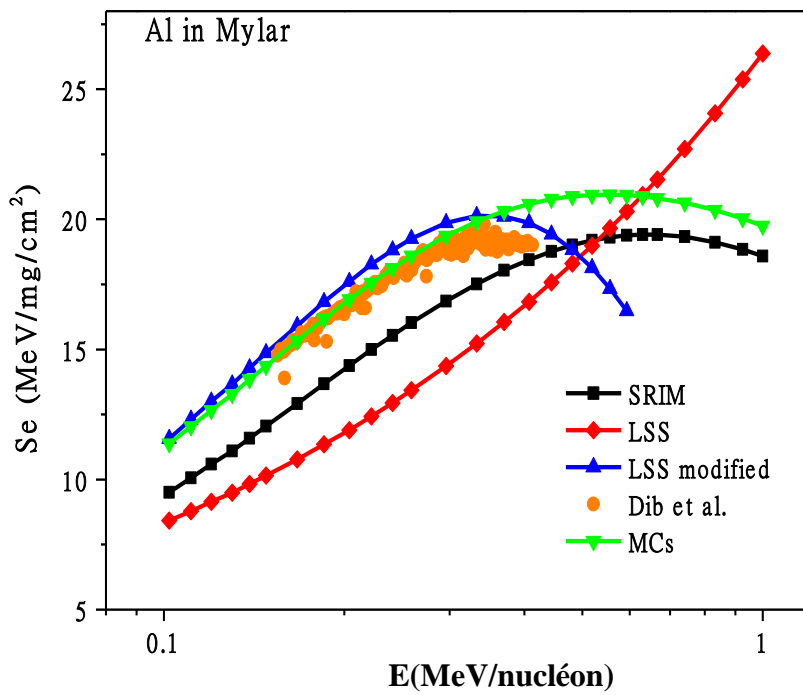


Fig. 4(d)



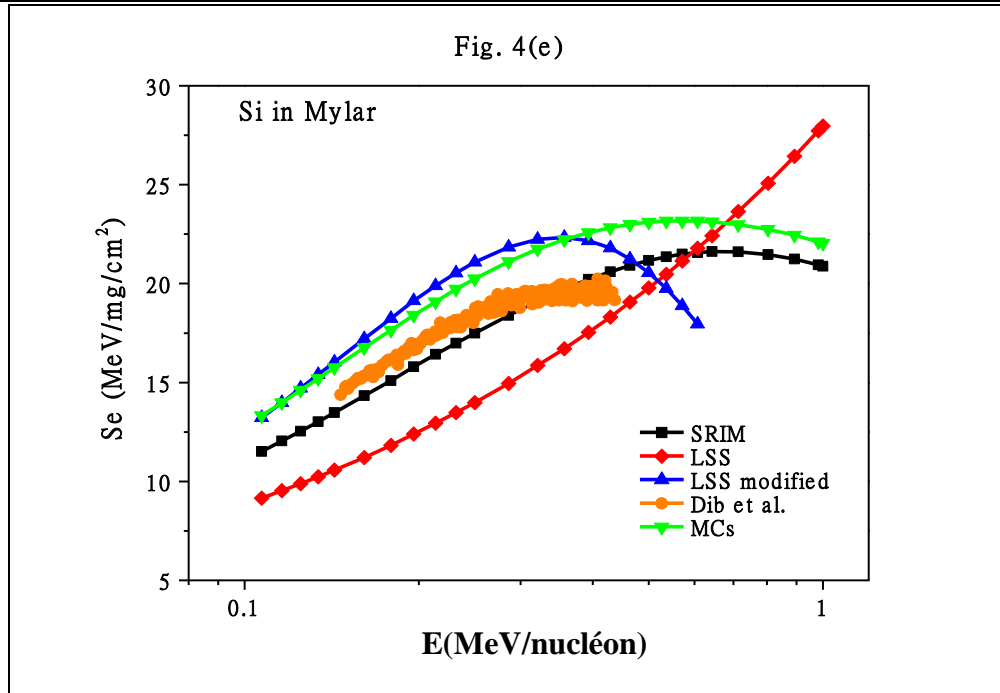


Fig. 4(f)

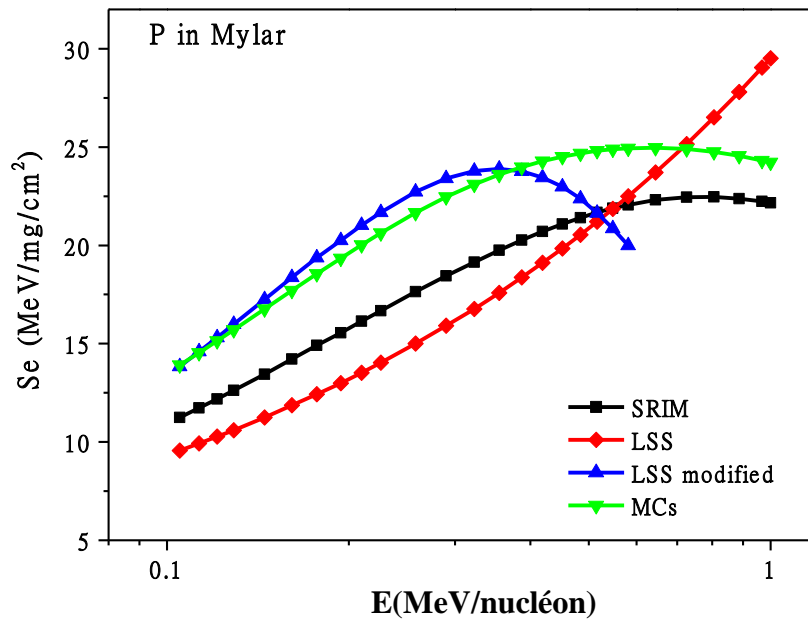
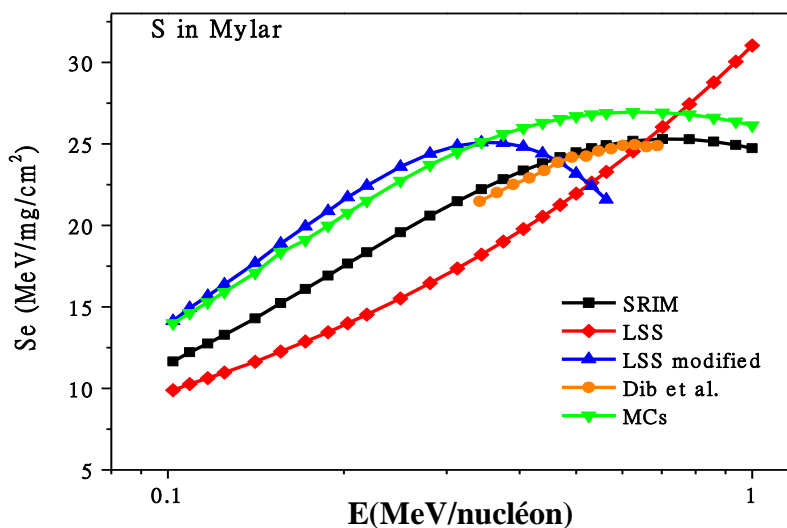


Fig. 4(g)



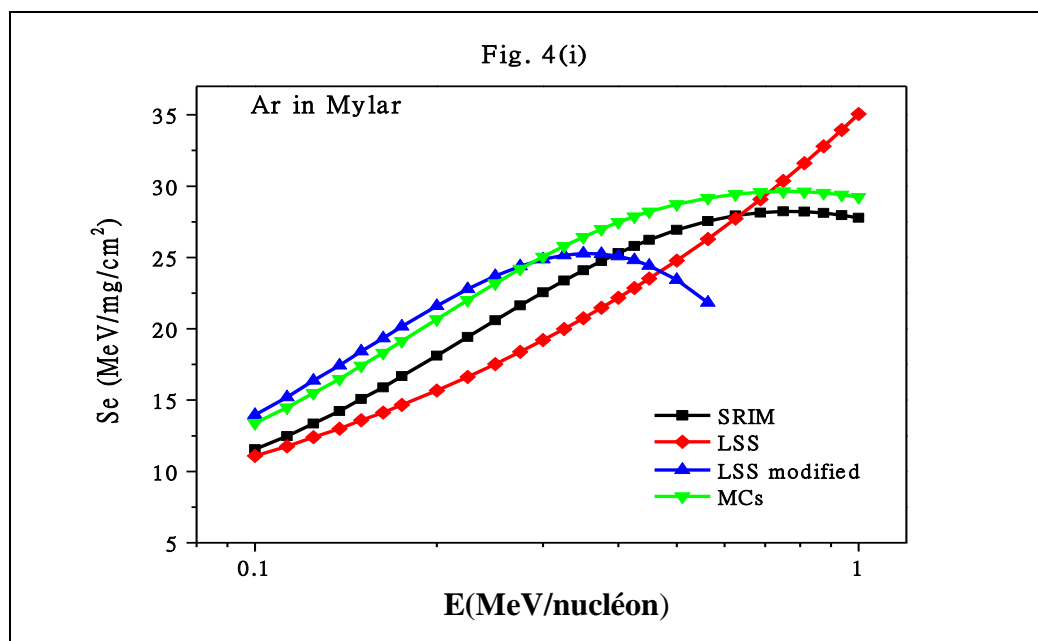
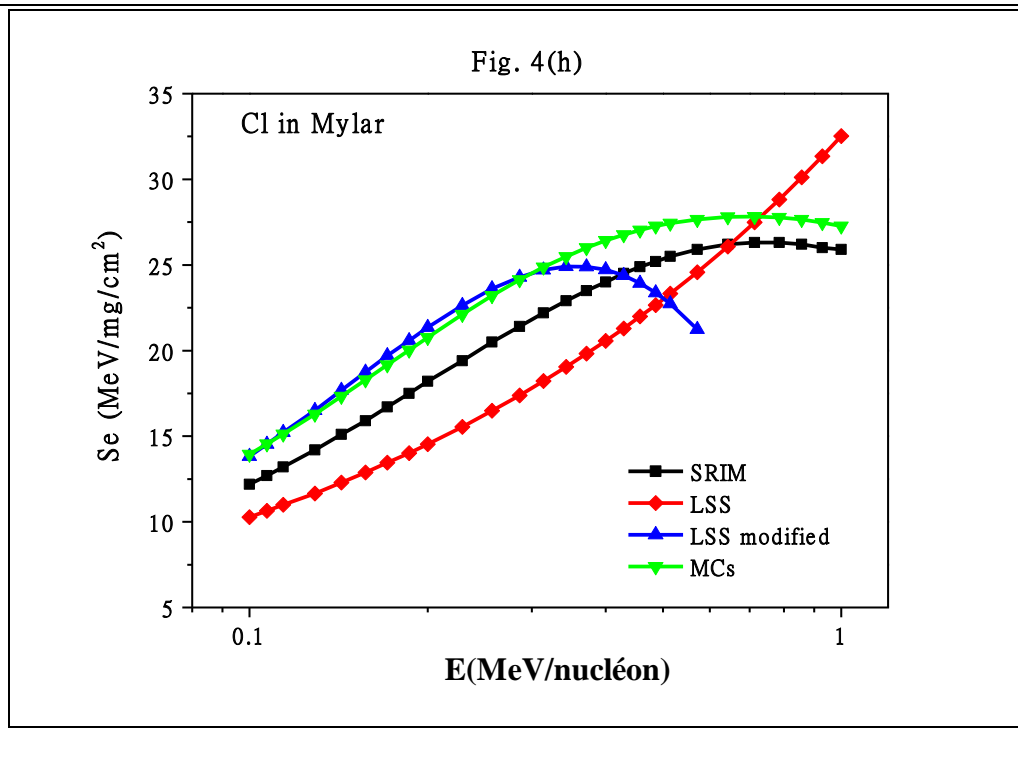


Figure. II 4 : Pouvoir d'arrêt électronique de la cible polymère Mylar (C₁₀H₈O₄) pour les ions lourds: . (a)¹⁹F,(b)²³Na,(c)²⁴Mg,(d)²⁷Al,(e)²⁸Si,(f)³¹P,(g)³²S,(h)³⁵Cl et (i)⁴⁰Ar

Energie (MeV/nucléon)	Pouvoir d'arrêt (MeV/mg/cm ²)				
	Monte Carlo	LSS Modifiée	Code SRIM	Code MSTAR	Raisanen and Rauhala
0,31	6,43	6,23	6,13	6,30	6,18
0,35	6,38	6,21	6,15	6,22	6,20
0,38	6,35	6,19	6,14	6,14	6,16
0,42	6,28	6,11	6,11	6,04	6,09
0,46	6,21	6,03	6,08	5,91	6,05
0,50	6,12	5,96	6,03	5,79	5,96
0,54	6,02	5,89	5,96	5,66	5,83
0,58	5,93	5,78	5,90	5,54	5,78
0,62	5,84	5,53	5,83	5,44	5,67
0,66	5,75	5,34	5,75	5,34	5,56
0,70	5,65	5,16	5,66	5,23	5,45
0,78	5,50	4,66	5,50	5,06	5,25
0,85	5,31	4,26	5,34	4,90	5,10

Tableau.II.2 : Pouvoir d'arrêt électronique de la cible polymère Mylar (C₁₀H₈O₄) pour l'ion légère ¹¹B

Le tableau.II.2 présente rassemble les valeurs du pouvoir d'arrêt électronique calculé par utilisation du code SRIM, Code MSTAR, la théorie LSS modifiée et la simulation de Monte Carlo à basses énergies.

Par comparaison avec les données expérimentales (colonne 6 du tableau II-2), on confirme la bonne concordance entre les résultats obtenus par l'utilisation des deux méthodes. Nous remarquons aussi, que les résultats obtenus, pour des ions ¹¹B dans le Mylar, par utilisation de la théorie LSS modifiée sont en bon accord (dispersion 5%) avec ceux obtenus expérimentalement et ceux obtenus par calcul avec les autres méthode de calculs, et ce, dans la gamme d'énergie [0,31 ; 0,85] MeV / nucléon.

II.4. Conclusion :

Dans la présente étude exposé dans ce chapitre, nous avons pu calculer la perte d'énergie des ions lourds ^{19}F , ^{23}Na , ^{24}Mg , ^{27}Al , ^{28}Si , ^{31}P , ^{32}S , ^{35}Cl et ^{40}Ar dans les polymères Formvar et Mylar ,et ce, en utilisant plusieurs méthodes: SRIM, théorie LSS modifiée et simulation de Monte Carlo. Nous avons calculé le pouvoir d'arrêt des matériaux polymères pour les ions lourds dont le nombre de charge varie entre 9 et 18 dans l'intervalle d'énergie [0,1 ; 1,0] MeV / nucléon. En plus, nous avons calculé la perte d'énergie électronique des ions ^{11}B dans le Mylar pour des d'énergies variant de 0,31 à 0,85 MeV / nucléon.

La comparaison de nos résultats avec les données expérimentales et celles obtenus par d'autre méthodes de calculs montre un accord satisfaisant pour tous les ions projectiles dans les polymères Formvar et Mylar.

REFERENCE:

- [1] : **J. LINDHARD, M. SCHARFF, and H. E. SCHIOTT,**
“Range Concepts and Heavy Ion Ranges,” *Mat. Fys. Medd. Dans. Viden. Selskab.*, 33, 1 (1963).
- [2] : **E. B. BAKER,**
“The Application of the Fermi-Thomas Statistical Model to the Calculation of Potential Distribution in Positive Ions,” *Phys. Rev.*, 36, 630 (1930).
- [3] : **L. H. THOMAS,**
“The Calculation of Atomic Fields,” *Proc Cambridge Philos. Soc.*, 26, 542 (1927).
- [4] : **P. NEETU et al.**
“Electronic Stopping Power of Polymers for Heavy Ions in the Ion Energy Domain of LSSTheory,” *Radia. Meas.*, 44, 363 (2009).
- [5] : **A. DIB et al.**
“Electronic Stopping Power Data of Heavy Ions in Polymeric Foils in the Ion Energy Domain of LSS Theory,” *Nucl. Instr. Meth. Res. B*, 362, 171 (2015).
- [6] : **J. RAISANEN and E. RAUHALA,**
“Stopping Powers and Energy Loss of Mylar, Kapton, Havar, and Ni for $Z = 3-17$ Ions in the Energy Range 0.2–2.1 MeV/amu,” *Phys. Rev* 41, 3951 (1990);
- [7] : **P. BANERJEE, B. SETHI, and J. M. CHATTERJEE,**
“A Semi empirical Method Based on the LSS Formalism for Estimating Electronic Energy Loss,” *Nucl. Instr. Meth.*, B14, 527 (1986).
- [8] : **N. K. ARAS, M. P. MENON, and G. E. GORDON,**
“Ranges of Fragments from Fission of U235 with Thermal Neutrons and the Kinetic Energy Deficit,” *Nucl. Phys.*, 69, 337 (1965);
- [9] : **S. HONTZEAS and H. BLOK,**
“Ranges in Tungsten of ^{99}Mo and ^{132}Te Fragments from the Thermal Neutron Fission of ^{235}U ,” *Phys. Scr.*, 4, 229 (1971);
- [10] : **Y. LAICHTER and N. H. SHAFRIR,**
“Range Determination of Individual ^{252}Cf Fission Fragments in Solids and Gases,” *Nucl. Phys. A*, 371, 45 (1981).
- [11] : **A. IZMEN, O. BIRGUL, and N. K. ARAS,**

Chapitre II: Détermination de la perte d'énergie électronique...

- “Ranges of ^{99}Mo and ^{140}Ba in Several Stopping Media from the Spontaneous Fission of ^{252}Cf ,” *J. Inorg. Nucl. Chem.*, 36, 25 (1974).
- [12] : **N. BOHR**,
“The Penetration of Atomic Particles Through Matter,” *Pk. Danske. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, 18, 1,(1948).
- [13] : **U.FANO**,
“Penetration of Protons, Alpha Particles, and Mesons,” *Ann. Rev. Nucl. Sci.*,13,1 (1963).
- [14] : **A. MANGIAROTTI et al.**
“A Survey of Energy Loss Calculations for Heavy Ions Between 1 and 100 keV,” *Nucl. Instr. Meth. A*, 580, 114 (2007).
- [15] : **L.C.NORTHCLIFFE and R. F. SCHILLING**,
“Range and Stopping-Power Tables for Heavy Ions,” *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, 13, 67 (1963).
- [16] : **P. SIGMUND**,
“Energy Loss of Charged Particle in Solids,” *Appl. Sci.*, 8, 1 (1975).
- [17] : **J. CHANG et al.**,
“A Simple Method to Calculate the Displacement Damage Cross Section of Silicon Carbide,” *Nucl. Eng. Technol.*, 46, 475 (2014).
- [18] : **J. F. ZIEGLER**,
“Stopping of Energetic Light Ions in Elemental Matter,” *J. Appl. Phys.*, 85, 1249 (1999);
- [19] : **H. ERRAMLI and O. EL BOUNAGUI**,
“Charged Particle Activation Analysis: Applications, *Encyclopedia of Analytical Chemistry*,” *Encyclopedia of Analytical Chemistry: Applications, Theory and Instrumentation*, pp. 1–24, Wiley Online Library, United Kingdom (2017).
- [20] : **P. SIGMUND and A. SCHINNER**,
“Progress in Understanding Heavy-Ion Stopping,” *Nucl. Instr. Meth. Res. B*, 382, 15 (2016).
- [21] : **C. C. MONTANARI and P. DIMITRIOU**,
“The IAEA Stopping Power Database, Following the Trends in Stopping Power of Ions in Matter,” *Nucl. Instr. Meth. Res. B*, 408, 50, (2017).
- [22] : **H. GEISSEL et al.**
“Experimental Studies of Heavy-Ion Slowing Down in Matter,” *Nucl. Instr. Meth. Res.*, B195, 3,(2002).
- [23] : **H. ERRAMLI et al.**

Chapitre II: Détermination de la perte d'énergie électronique...

“A Monte Carlo Computer Code for Evaluating Energy Loss of 10 keV to 10 MeV Ions in Amorphous Silicon Materials,” Nucl. Instr. Meth. Res. B, 263, 127 (2007).

[24] : **O. EL BOUNAGUI and H. ERRAMLI,**

“Monte Carlo Calculation of Energy Loss of Hydrogen and Helium Ions Transmitted Under Channelling Conditions in Silicon Single Crystal,” Nucl. Instr. Meth. Res. B, 268, 1361.(2010).

[25] : **J. F. ZIEGLER, J. P. BIRSACK, and U. LITTMARK,**

The Stopping and Ranges of Ions in Solids, Vol. 1, p. 321, Pergamon, New York (1985).

[26] : **J. F. ZIEGLER, “SRIM-2013,**

<http://www.srim.org> (current as of Oct. 24, 2018).

[27] : **H. PAUL and A. SCHINNER,**

“An Empirical Approach to the Stopping Power of Solids and Gases for Ions from 3Li to 18Ar,” Nucl. Instr. And Meth. B, 179, 299 (2001).

[28] : **H. PAUL and A. SCHINNER,**

“An Empirical Approach to the Stopping Power of Solids and Gases for Ions from 3Li to 18Ar Part II,” Nucl. Instr. And Meth. B, 195, 166 (2002).

[29] : **M.Abdesselem,J.P.Stoquert;M.Hage-Ali,J.J.Gorb and P.Siffert.**

NIMB B73(1993)115-112

[30] : **A. GUESMIA et al.**

“Semi Empirical Formula for Electronic Stopping Power Determination of ^{24}Mg , ^{27}Al and ^{28}Si Ions Crossing Formvar Foil in the Ion Energy Domain of LSS Theory,” Rad. Phys. Chem., 96, 205 (2014).

[31] : **C. NORTHCLIFFE and R. F. SCHILLING,**

“Range and Stopping-Power Tables for Heavy Ions,” Nucl. Data Tables A, 7, 233 (1970);

[32] : **W. H. BARKAS,**

Nuclear Research Emulsions, Vol. 1, p. 518, Academic Press, New York and London (1963).

[33] : **O. EL BOUNAGUI and H. ERRAMLI,**

“Channeling Energy Loss in Silicon by Using Numerical and Experimental Methods,” Mod. Phys. Lett. B, 25, 2171 (2011).

[34] : **D. E. KNUTH,**

The Art of Computer Programming. Vol. 1, Fundamental Algorithms, p. 634, Addison-Wesley (1969).

- [35] : **J. von NEUMANN**,
“Various Techniques Used in Connection with Random Digits,” J. Res. Nat. Bur. Stand. Appl. Math. Series, 12, 36 (1951).
- [36] :**J. P. NOUGIER**,
Méthode de calculs numérique, p. 325, 3rd ed., Elsevier Masson, Paris (1991). 36. **W. H. BRAGG** and **R. KLEEMAN**, “On the α Particles of Radium, and Their Loss of Range in Passing Through Various Atoms and Molecules,” Philos. Mag., 10, 318(1905);
- [37] : **W. H. BRAGG** and **R. KLEEMAN**,
“On the α Particles of Radium, and Their Loss of Range in Passing Through Various Atoms and Molecules,” Philos. Mag., 10, 318 (1905);
- [38] : “**Stopping Power and Ranges for Protons and Alpha Particles**,”
INIS Vol. 26, Report ICRU-49, International Commission on Radiation Units and Measurements (1993).

CHAPITRE III

**DETERMINATION DE LA PERTE D'ENERGIE
NUCLEAIRE DES IONS LOURDS DANS LES CIBLES
POLYATOMIQUES : UTILISATION DE LA
METHODE DE SIMULATION DE MONTE CARLO.**

INTRODUCTION:

La perte d'énergie des ions dans les cibles amorphes a été étudiée pour différentes gammes d'énergie ioniques [1-5]. L'approximation binaire des collisions a longtemps été utilisée pour simuler le ralentissement suite aux interactions des projectiles avec les matériaux cibles, et constituer ainsi la base d'une grande théorie analytique dans ce domaine [6-8]. Il existe un intérêt de longue date pour les pouvoirs d'arrêt des particules chargées lourdes dans la matière, car de telles informations sont nécessaires dans de nombreux domaines de la physique fondamentale et appliquée à savoir, la physique radiologique et la dosimétrie biomédicale [9]. Aujourd'hui, l'interaction des particules chargées avec le milieu ralentisseur est bien connue expérimentalement et théoriquement [10,11].

La simulation de Monte Carlo présente de nombreux avantages par rapport à la formulation analytique actuelle basée sur la théorie des transports. Il permet un traitement plus rigoureux de la diffusion élastique, une prise en compte explicite de l'énergie des surfaces et des interfaces. En utilisant cette méthode, il est facile de déterminer l'énergie et les distributions angulaires [12].

La simulation de Monte Carlo prend ainsi en compte un large éventail de possibilités et nous aide à réduire l'incertitude. Cette méthode de calcul est très flexible; cela nous permet de faire varier les hypothèses de risque en fonction de tous les paramètres et de modéliser ainsi une gamme de résultats possibles.

III. 1. Pouvoir d'arrêt nucléaire :

Les interactions d'un ion avec la matière rassemblent l'ensemble du processus suivant lequel une particule projectile cède son énergie à la cible. L'énergie cinétique communiquée à ces matériaux produit des modifications de la cible. C'est donc l'énergie transférée qui est responsable des défauts créés. Les transferts d'énergie sont divisés en deux parties:

(i)- les collisions inélastiques constituent le principal mode de perte d'énergie; il s'agit là d'un échange de charges entre les particules et la cible, d'une ionisation des atomes cibles ou d'une excitation des électrons [13-16].

(ii)-les collisions élastiques résultent principalement de déplacements des atomes cibles et donc de défauts cristallins dans la structure [7].

Chapitre III: Détermination de la perte d'énergie nucléaire...

Les pertes d'énergie nucléaire peuvent être associées à une déviation angulaire importante dépendant de l'ion et de la masse de la cible tandis que les processus électroniques exercent une influence plutôt mineure sur l'angle de diffusion. Ce mode de perte d'énergie se produit principalement à basse énergie (figure-III-1).

Il existe très peu de résultats expérimentaux quantifiant ces pertes d'énergie. La perte d'énergie nucléaire est donc souvent évaluée théoriquement. La section efficace de diffusion coulombienne des particules chargées par les noyaux du milieu est calculée, ainsi que le transfert d'énergie au cours de ce processus.

À des énergies très élevées (supérieures à plusieurs centaines de MeV), le ralentissement de toutes les particules chargées est contribué au rayonnement de freinage (Bremsstrahlung), à l'effet Tcherenkov (rayonnement bleue) et aux réactions nucléaires.

Aux petites énergies, le ralentissement des ions est traditionnellement séparé en deux processus distincts: la perte d'énergie électronique et la perte d'énergie nucléaire. La somme de ces deux processus est appelée le pouvoir d'arrêt totale qui s'exprime par :

$$S_{\text{Total}}(E) = S_e(E) + S_n(E) \quad (\text{III .1})$$

Par le pouvoir d'arrêt nucléaire, on entend des collisions élastiques entre l'ion incident et les atomes de l'échantillon. Si l'on connaît la forme du potentiel répulsif $V(r)$ entre deux noyaux, il est possible de calculer le pouvoir d'arrêt nucléaire $S_n(E)$. Le potentiel répulsif entre deux noyaux peut être obtenu avec une grande précision à partir de calculs de la mécanique quantique.

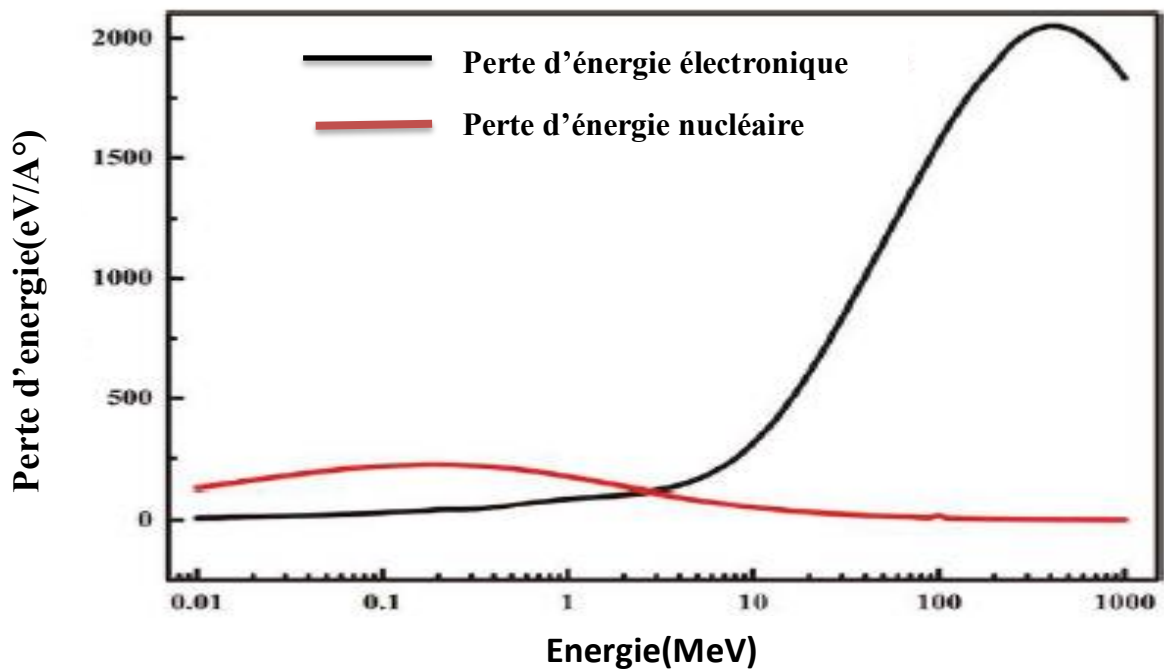


Figure III 1: Rapport entre le pouvoir d'arrêt nucléaire et électronique [18].

Plusieurs formulations du potentiel ont été proposées pour décrire l'interaction ion-atome. La plupart d'entre elles reposent sur des descriptions statistiques du cortège électronique pour lesquelles l'expression du potentiel d'interaction comporte un terme coulombien ($1/r$) multiplié par une fonction d'écrantage $\Phi(r/a)$. Le potentiel est décrit sous la forme suivante :

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(r/a) \quad (\text{III-2})$$

Z_1 et Z_2 : nombres atomiques respectifs de la particule projectile et de l'atome cible.

r : distance de séparation nucléaire (entre noyau projectile et noyau cible).

$\Phi(r/a)$: fonction d'écran de Thomas-Fermi.

Le rayon d'écran de Thomas-Fermi « a » est donné par les équations proposées par Lindhard et Firsov respectivement.

$$a = \frac{0,88853a_0}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{1/2}} \quad \text{en } \text{\AA}$$

Chapitre III: Détermination de la perte d'énergie nucléaire...

$$\text{Où } a = \frac{0,88853a_0}{\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{3/2}}$$

Où a_0 est le rayon de Bohr = 0,529 Å.

Ces formules prennent en compte les nuages électroniques d'interpénétration de la particule incidente et du noyau de la cible.

A haute énergie, le calcul de la perte d'énergie nucléaire néglige l'effet d'écran dû aux électrons [12, 19].

L'énergie transféré à la cible, après une première collision est donné par :

$$\Delta T = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2} E \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \gamma E \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{III.3})$$

Avec

$$\gamma = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}$$

Où M_1 et M_2 sont les masses atomiques de la particule incidente et de la cible respectivement et E est l'énergie de la particule projectile.

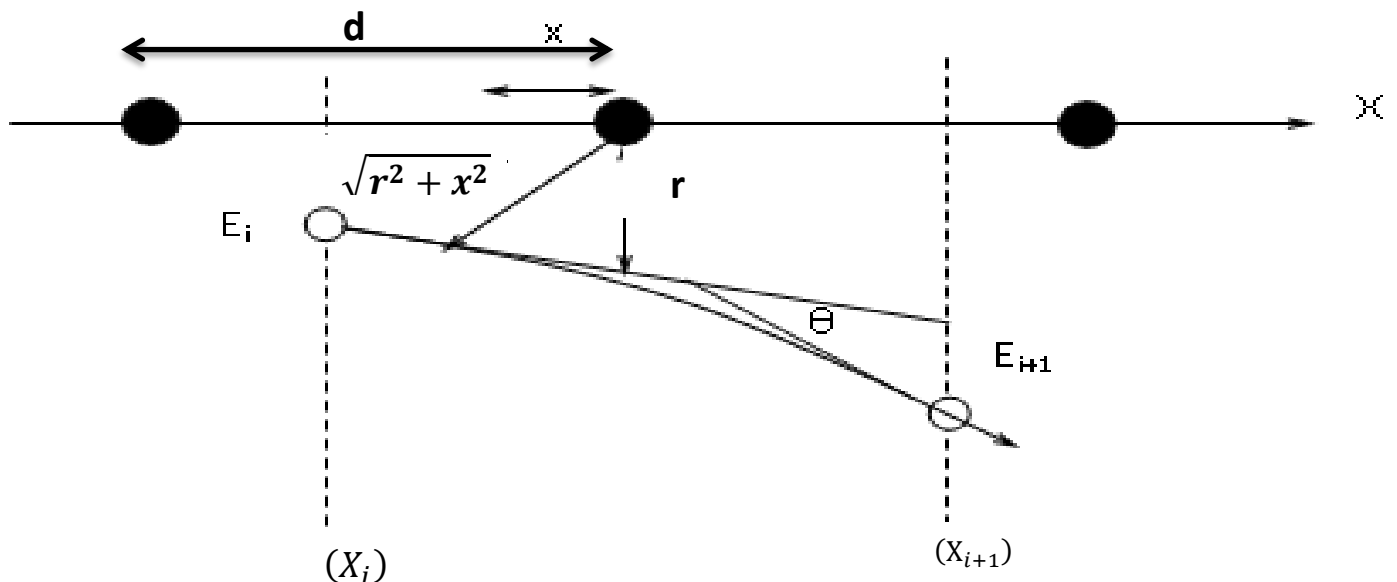


Figure III.2: Représentation schématique de la collision entre la cible et un ion incident

Chapitre III: Détermination de la perte d'énergie nucléaire...

Le pouvoir d'arrêt nucléaire est donc lié à l'énergie transférée par l'ion incident par suite de collisions élastiques avec les atomes cibles [20].

Ainsi la perte d'énergie moyenne par unité de longueur s'exprime par:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_n = N \int_0^\infty T(\mathbf{b}) \cdot d\sigma = NS_n(E) \quad (\text{III.4})$$

Avec :

N : la densité atomique de la cible.

S_n : la section efficace d'arrêt nucléaire.

b : le paramètre d'impact.

σ : La section efficace de diffusion.

Le parcours moyen R de la particule chargée incidente dans le milieu ralentisseur est donné par l'expression :

$$R = \int_E^0 dx = \int_0^E \left(-\frac{dE}{dx}\right)_n^{-1} dE = \int_0^E \frac{dE'}{NS_n(E')} \quad (\text{III.5})$$

III.2. Méthode de calcul:

Chaque ion incident est caractérisé par son numéro atomique, sa masse atomique, son énergie, sa direction et sa position spatiale. L'utilisation de la méthode de simulation de Monte-Carlo, permet de suivre l'évolution de ces paramètres. La particule est supposée changée de direction à la suite de collisions binaires et se déplace en ligne droite entre deux collisions successives. L'énergie de la particule incidente est réduite à la suite d'une collision élastique. La cible est considérée comme amorphe avec des atomes occupants des emplacements aléatoires. Les propriétés directionnelles applicables pour les matériaux cristallins sont ignorées dans le cadre de ce travail [7].

Chapitre III: Détermination de la perte d'énergie nucléaire...

Le calcul de la perte d'énergie nucléaire a été effectué en ne tenant compte que des collisions élastiques :

$$\langle T \rangle = \int_{b_{min}}^{b_{max}} T(b) d\sigma \quad (\text{III.6})$$

Le paramètre d'impact de collision b est déterminé par tirage des nombres aléatoires uniformément distribué entre 0 et 1, et l'angle de diffusion θ dans le système du centre de masse est calculé à partir du formalisme de diffusion nucléaire basé sur le potentiel de Molière [21].

Pour déterminer la distance dl entre deux collisions successives, nous avons utilisé l'équation suivante:

$$dl = \frac{-1}{N\sigma} \ln(\xi) \quad (\text{III.7})$$

ξ est un nombre aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1.

Le parcours moyen est obtenu par l'expression :

$$R = \int \langle \cos\theta \rangle dl \quad (\text{III.8})$$

Chaque élément de longueur dl de la trajectoire de l'ion incident est projeté sur la direction d'incidence des x en multipliant par le cosinus directeur (coordonnée polaire).

L'angle de diffusion θ est généré selon une distribution angulaire en utilisation la méthode mathématique de Von .Neumann [22-23].

Ainsi :

$$\theta = \cos^{-1}(1 - 2\xi') \quad (\text{III.9})$$

Où ξ' est un nombre aléatoire.

L'angle de diffusion azimut ϕ est tiré aléatoire et d'une façon équiprobable dans l'intervalle angulaire

$[0, 2\pi]$. Il s'exprime:

$$\phi = 2\pi\xi'' \quad (\text{III. 10})$$

ξ'' est un nombre aléatoire : $0 \leq \xi'' < 1$

Le transfert d'énergie maximum T_{max} est donné par:

$$T_{max} = \gamma E \quad (\text{III. 11})$$

Le transfert d'énergie minimum T_{min} s'écrit :

$$T_{min} = \gamma E \sin^2 \left(\frac{\theta_{min}}{2} \right) \quad (\text{III. 12})$$

Où θ_{min} est l'angle de diffusion minimum dans le cadre de ce travail, θ_{min} est près, généralement, égal à 1° dans le système de laboratoire,

Les méthodes de calcul, pour la simulation du mouvement des ions dans un milieu, ont été développées depuis les années soixante. L'idée fondamentale était de suivre la trajectoire de l'ion dans le milieu et de simuler les collisions avec les noyaux.

Nous avons développé dans le cadre de ce travail, un programme, de simulation, basé sur la méthode de Monte Carlo afin de déterminer la perte d'énergie nucléaire.

Ce programme de simulation a été conçu dans le langage FORTRAN 99 sous Windows. Le programme simule les trajectoires de la particule incidente dans la matière, à l'aide de la procédure random. Il nous permet d'attribuer à tout ion et dans tout milieu une énergie, une direction et de suivre l'évolution de ces paramètres lorsque l'ion traverse la matière.

On note que, la génération de la direction de la particule projectile est effectuée d'une manière équiprobable par tirage aléatoire sur l'intervalle angulaire $[0, \pi]$.

***Remarque :**

Les nombres pseudo aléatoires ξ sont générés à l'aide d'un programme de tirage aléatoire basé sur la méthode congruentielle (Figure III.3).

L'organigramme du programme de calcul est illustré dans la (figure III.4).

III-3 . Choix des matériaux :

Nous avons utilisé différents matériaux cibles amorphes à savoir le : SiO₂, LiF et Kapton .

Le tableau III-1 ci-dessous rassemble les numéros atomiques moyens \bar{Z} et les masses moyennes atomiques \bar{A} de ces matériaux cibles.

cibles	\bar{Z}	\bar{A}
dioxyde Silicon (SiO ₂) $\rho = 2,210 \text{ g/cm}^3$	9,99	19,99
Lithium fluoride (LiF) $\rho = 2.64\text{g/cm}^3$	4,55	8,73
Kapton polyimide (C ₂₂ H ₁₀ O ₅ N ₂) $\rho = 1,420 \text{ g/cm}^3$	5,03	9,80

Tableau III.1 : Numéro atomique moyen \bar{Z} et la masse atomique moyenne \bar{A} de dioxyde de silicium, de fluorure de lithium du Kapton polyimide

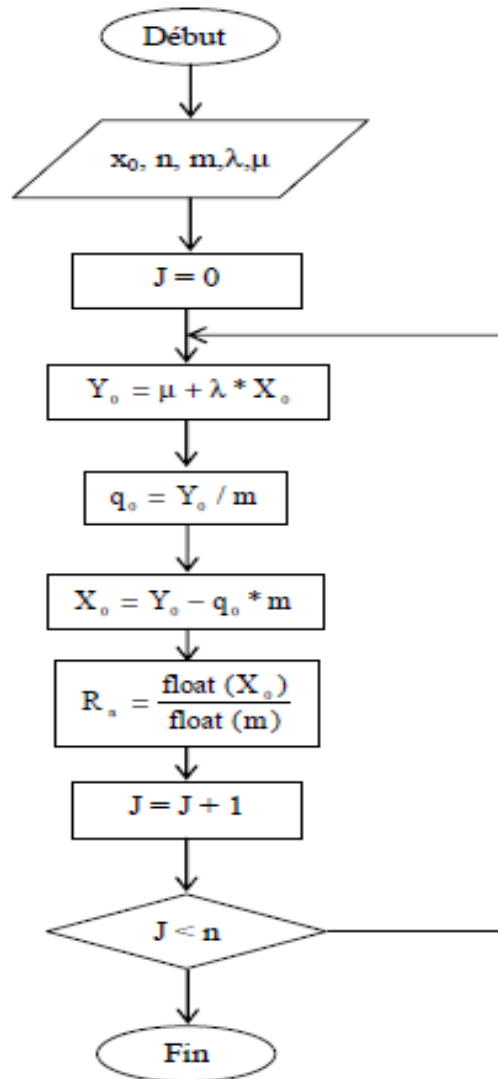


Figure III.3 : Organigramme du programme pour le tirage aléatoire des nombres pseudo aléatoires.

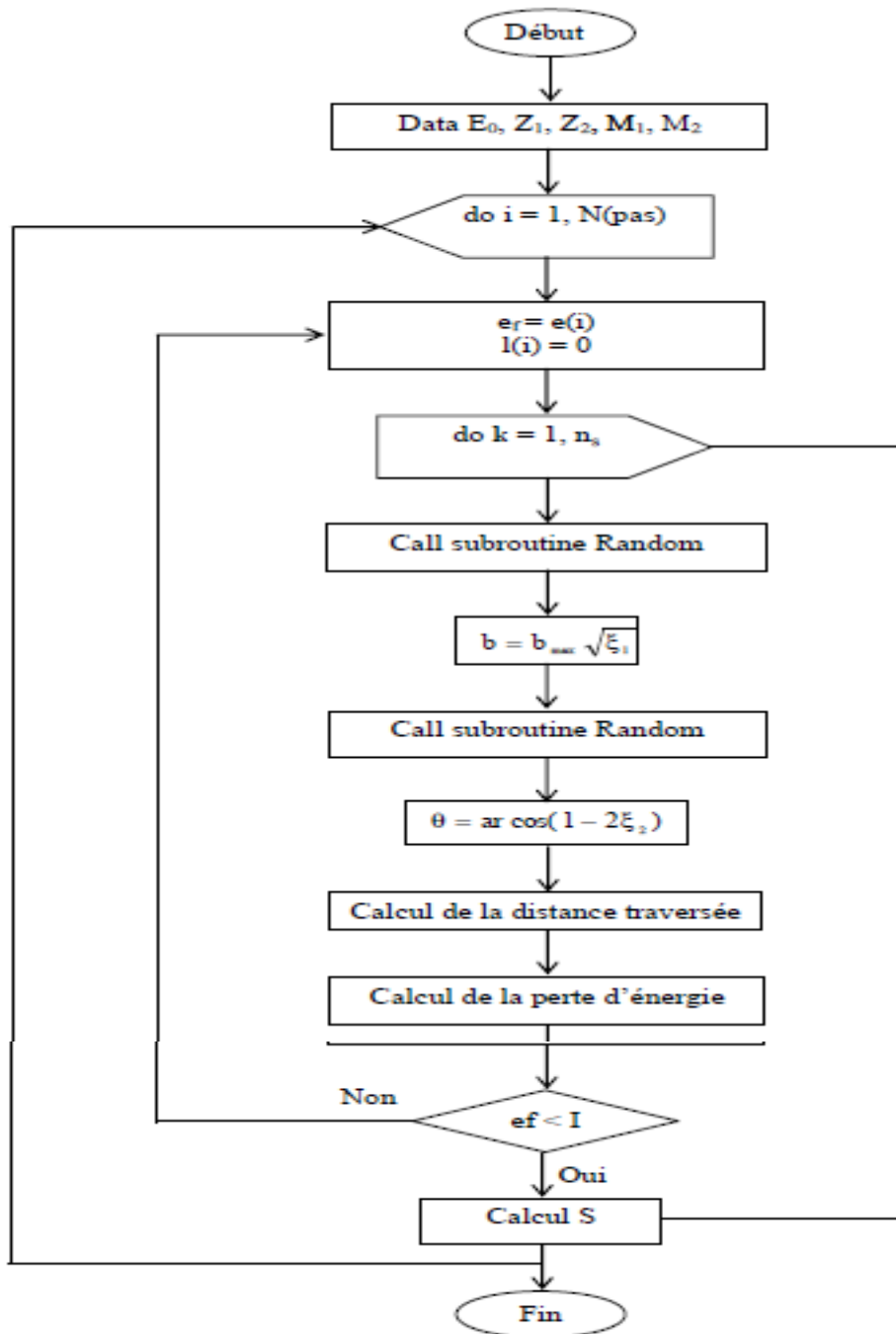


Figure III.4 : Organigramme du programme du calcul

III.4. Résultats et discussion:

Les résultats obtenus sont illustrés dans les figures III- (5 et 6). Ces figures montrent les variations de la perte d'énergie nucléaire en fonction l'énergie de la particule incidente. Cette étude a été réalisée pour le proton et l'hélium dans les matériaux SiO₂, LiF et Kapton et pour des énergies comprises entre 0,01 keV à 10 MeV.

Nos résultats sont en excellent accord avec ceux obtenus par les codes SRIM [24] et PSTAR / ASTAR [25, 26]. D'autre part, la perte d'énergie nucléaire du proton incident est faible, ceci est dû au fait que la particule incidente est légère, et le paramètre d'impact est très important par rapport à l'ion hélium dans des cibles amorphes SiO₂, LiF et Kapton.

Une caractéristique commune à tous les ions est que le pouvoir d'arrêt nucléaire en fonction de l'énergie ionique passe par un maximum aux des énergies relativement faibles. Ensuite, il diminue lorsque l'énergie de l'ion incident augmente. Cela signifie que le pouvoir d'arrêt nucléaire n'est important que pour les faibles vitesses ioniques.

Chapitre III: Détermination de la perte d'énergie nucléaire...

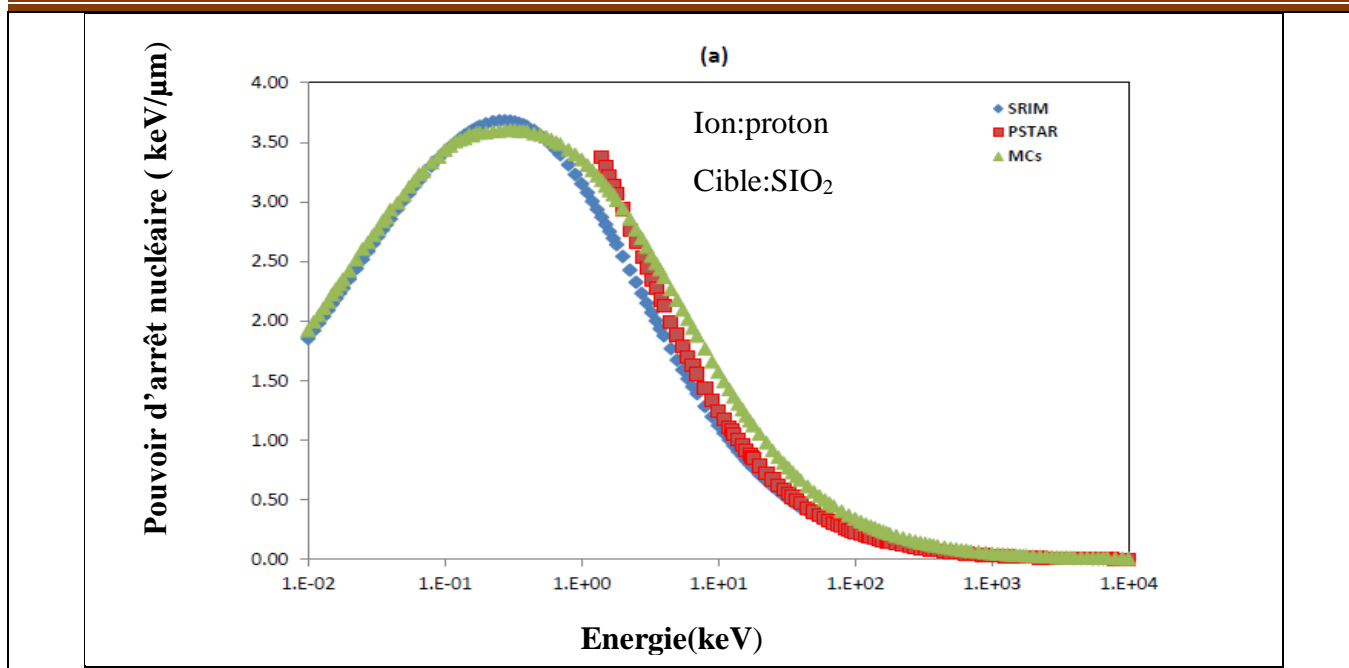


Figure III-5(a): Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du SiO₂ en fonction de l'énergie de l'ion incident de proton

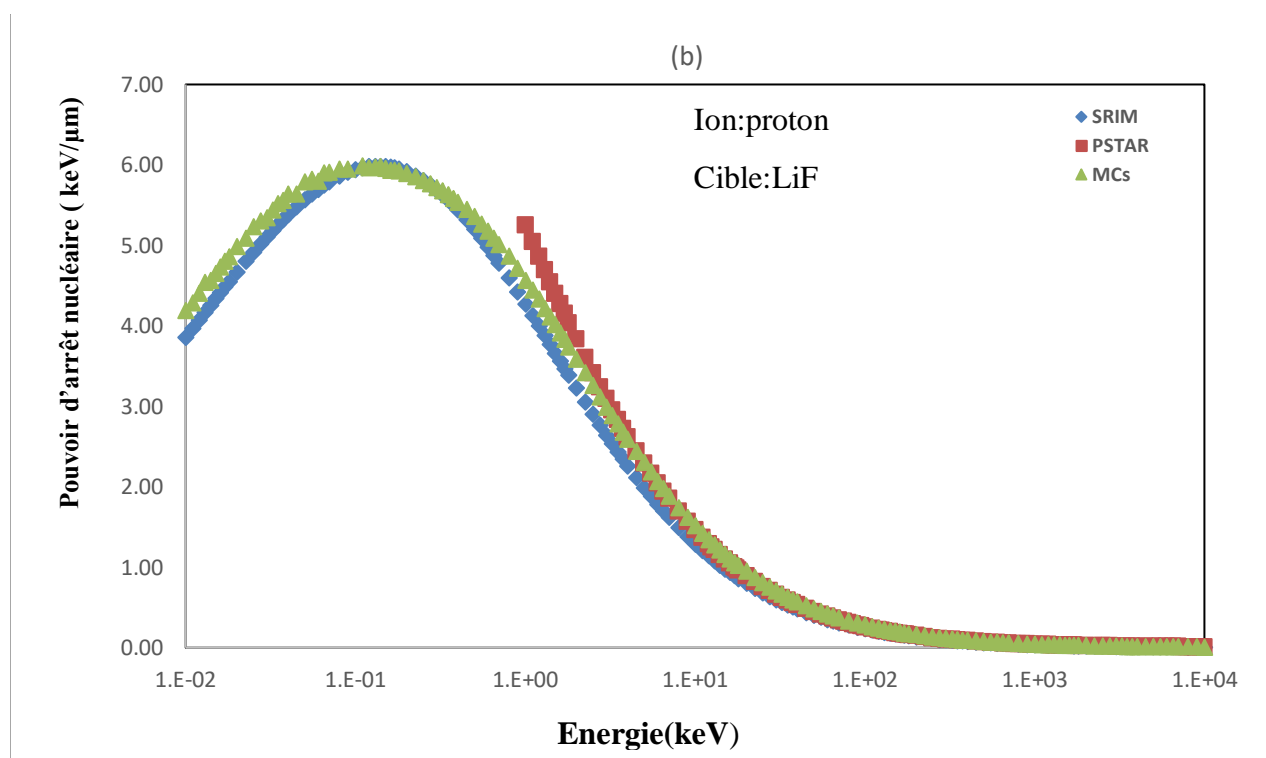


Figure III-5(b): Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du LiF en fonction de l'énergie de l'ion incident de proton.

Chapitre III: Détermination de la perte d'énergie nucléaire...

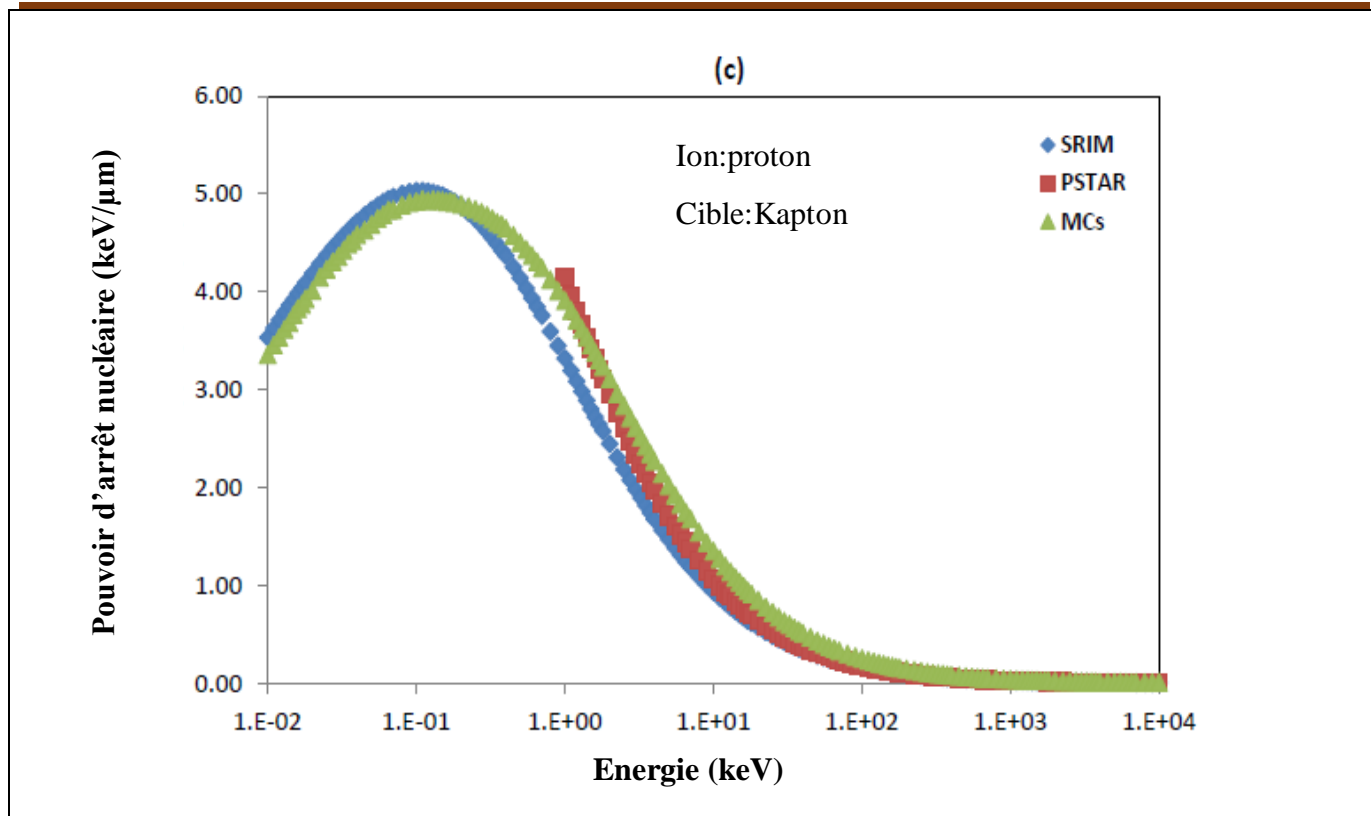


Figure. III 5(c): Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du kapton en fonction de l'énergie de l'ion incident de proton.

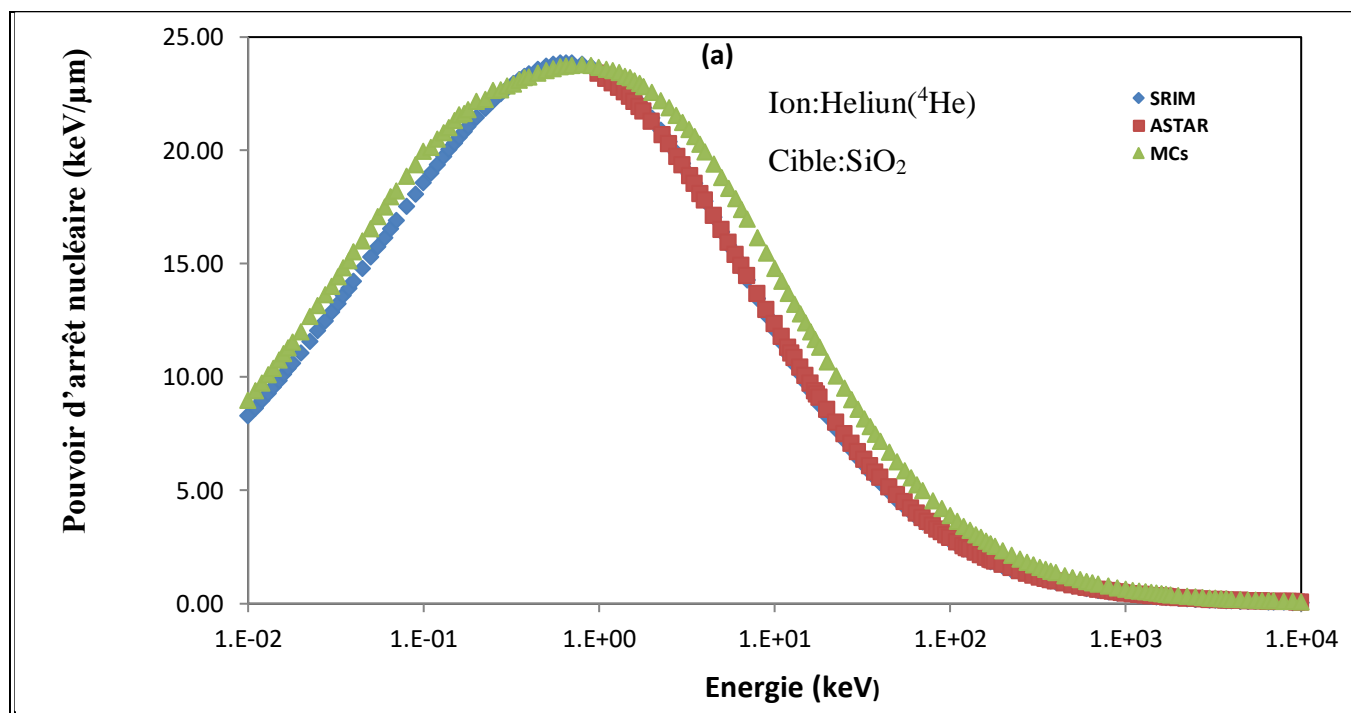


Figure. III. 6(a): Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du SiO₂ en fonction de l'énergie de l'ion incident ⁴He.

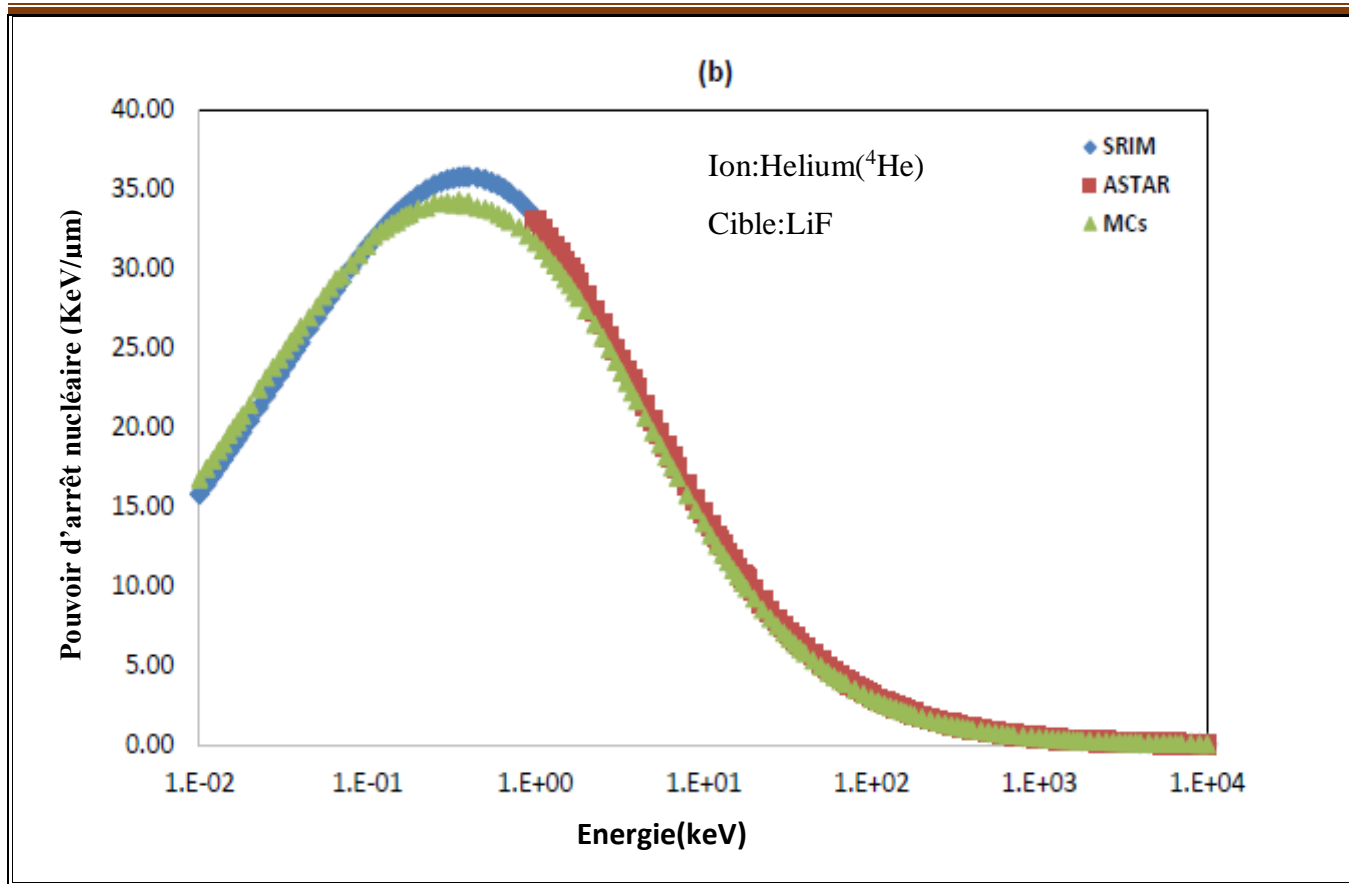


Figure III-6(b): Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du LiF en fonction de l'énergie de l'ion incident ^4He .

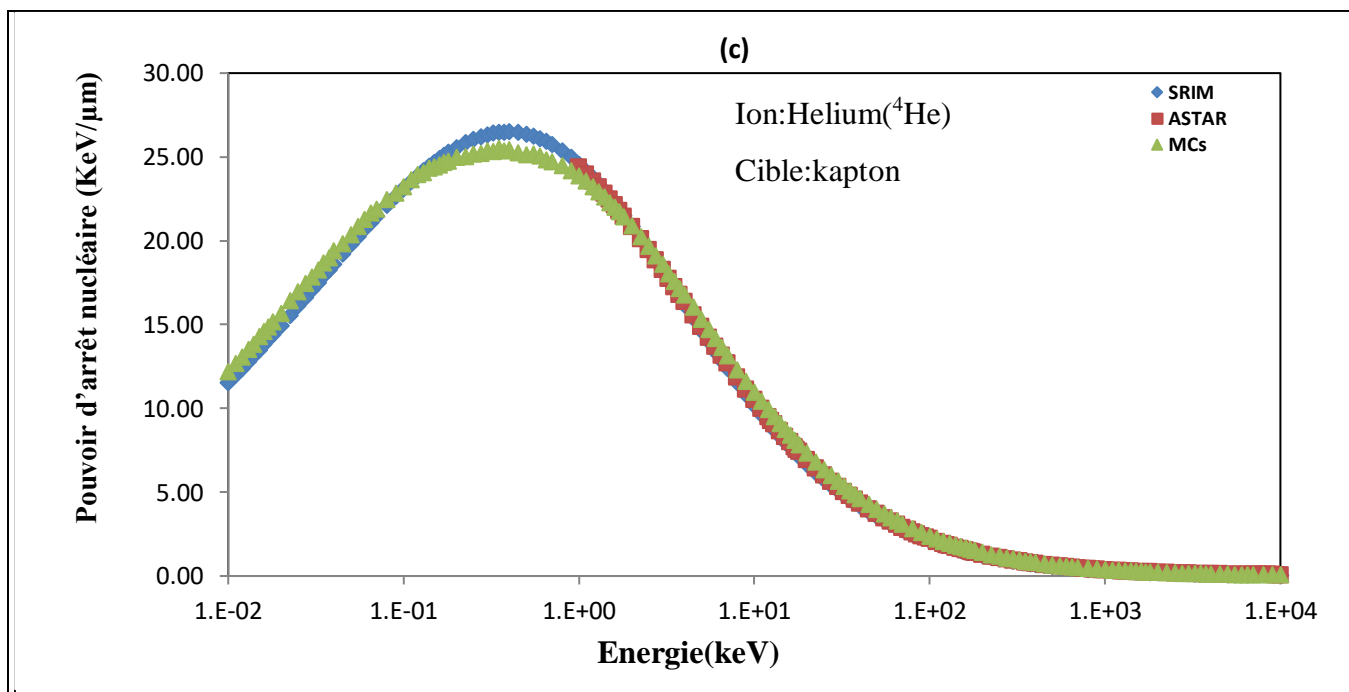


Figure III-6(c): Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du kapton en fonction de l'énergie de l'ion incident ^4He .

Chapitre III: Détermination de la perte d'énergie nucléaire...

Cette étude a été étendue à d'autres ions tels que le ^5B , ^7N et ^{28}Ni .

Les figures III-(7, 8 et 9) montrent les variations du pouvoir d'arrêt en fonction de l'énergie cinétique pour les ions ^5B , ^7N et ^{28}Ni dans les matériaux SiO_2 , LiF et Kapton . On remarque que toutes ces courbes augmentent lors de l'augmentation de l'énergie incidente jusqu'à un maximum, puis diminuent au fur et à mesure que l'énergie de l'ion augmente.

On constate la perte d'énergie nucléaire maximale est de :

- 113,36 keV / μm pour ^5B .
- 177,1 keV / μm pour ^7N .
- 1087,7 keV / μm pour ^{28}Ni , et ce, dans la cible SiO_2 .

Le maximum pour les ions perte d'énergie nucléaire dans la cible LiF est de :

- 150,5 keV / μm , pour ^5B
- 236,2 keV / μm pour ^7N
- 1303,2 keV / μm pour ^{28}Ni .

Pour la cible du kapton, la courbe de la perte d'énergie nucléaire a un maximum de l'ordre de : 105,8 keV / μm pour ^5B , 158,1 keV / μm pour ^7N et 828,2 keV / μm pour ^{28}Ni (figures III-7 (a), (b) et (c)), respectivement.

Cependant, on remarque aussi qu'en augmentant le numéro atomique de la particule incidente, la perte d'énergie nucléaire augmente. Ces résultats montrent que la contribution du numéro atomique des ions lourds incidents est importante sur la perte d'énergie nucléaire. Ceci est probablement dû au fait que lorsque le numéro atomique des particules projectiles augmente, le nombre d'interactions augmente, ce qui conduit à une augmentation de l'énergie perdue.

En effet, la majorité des particules incidentes de faible énergie déposent leur énergie à courte distance à l'intérieur des matériaux cibles. En revanche, les résultats obtenus par notre méthode de calcul sont en bon accord, comparés à ceux obtenus théoriquement par utilisation du code SRIM [24].

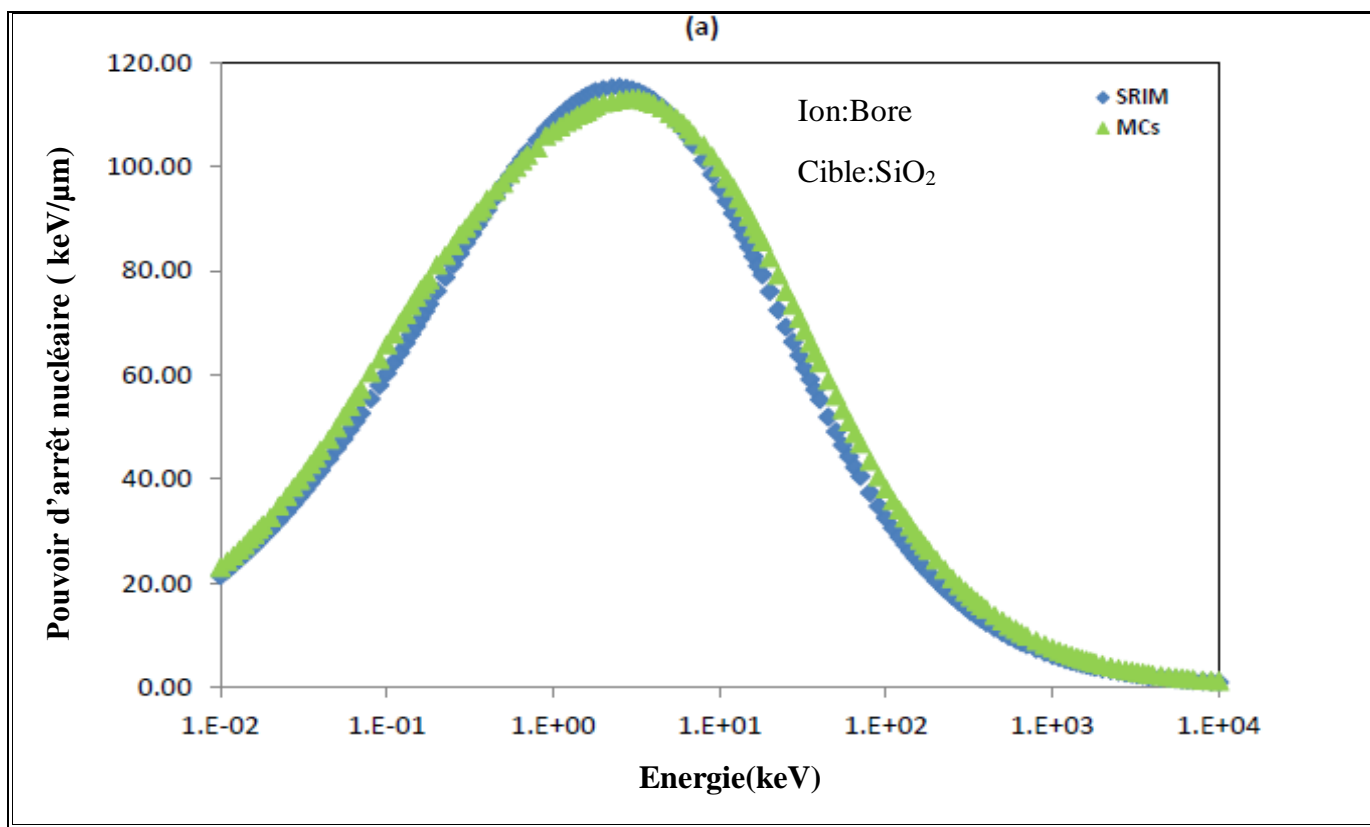


Figure III-7(a): Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du SiO₂ en fonction de l'énergie d'incident de l'ion ⁵B.

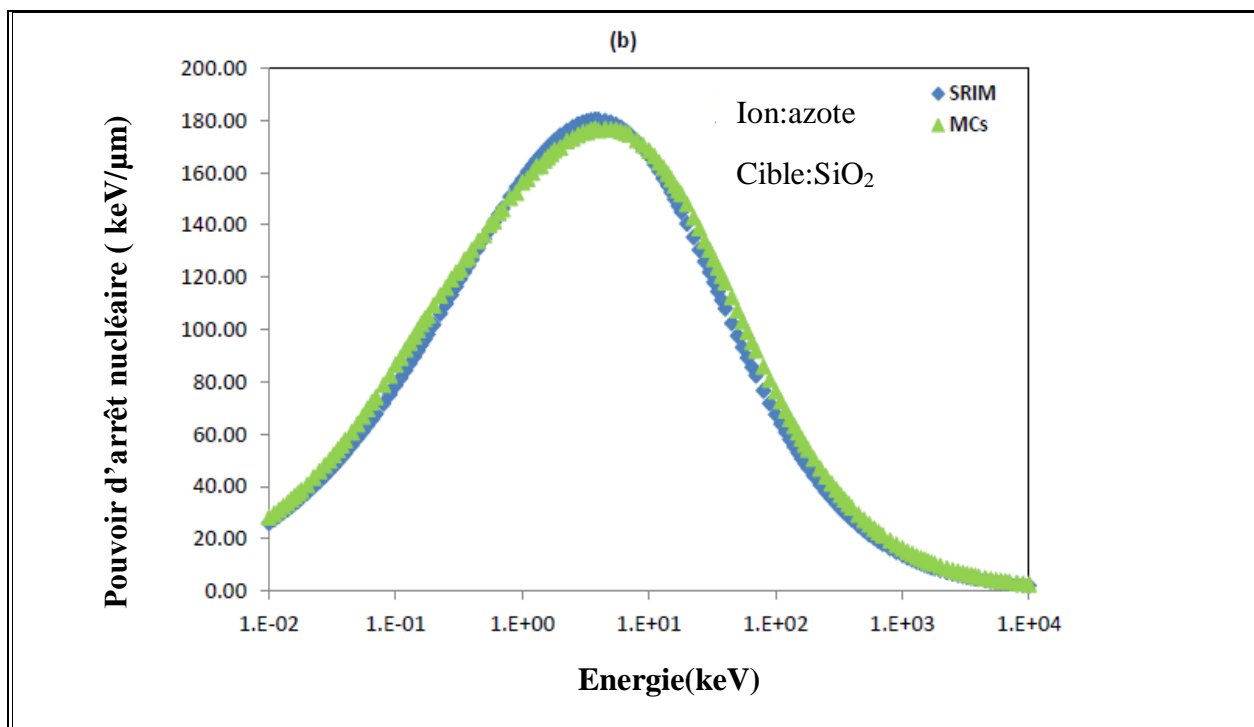


Figure III-7(b): Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire de la SiO₂ en fonction de l'énergie de l'ion incident ⁷N.

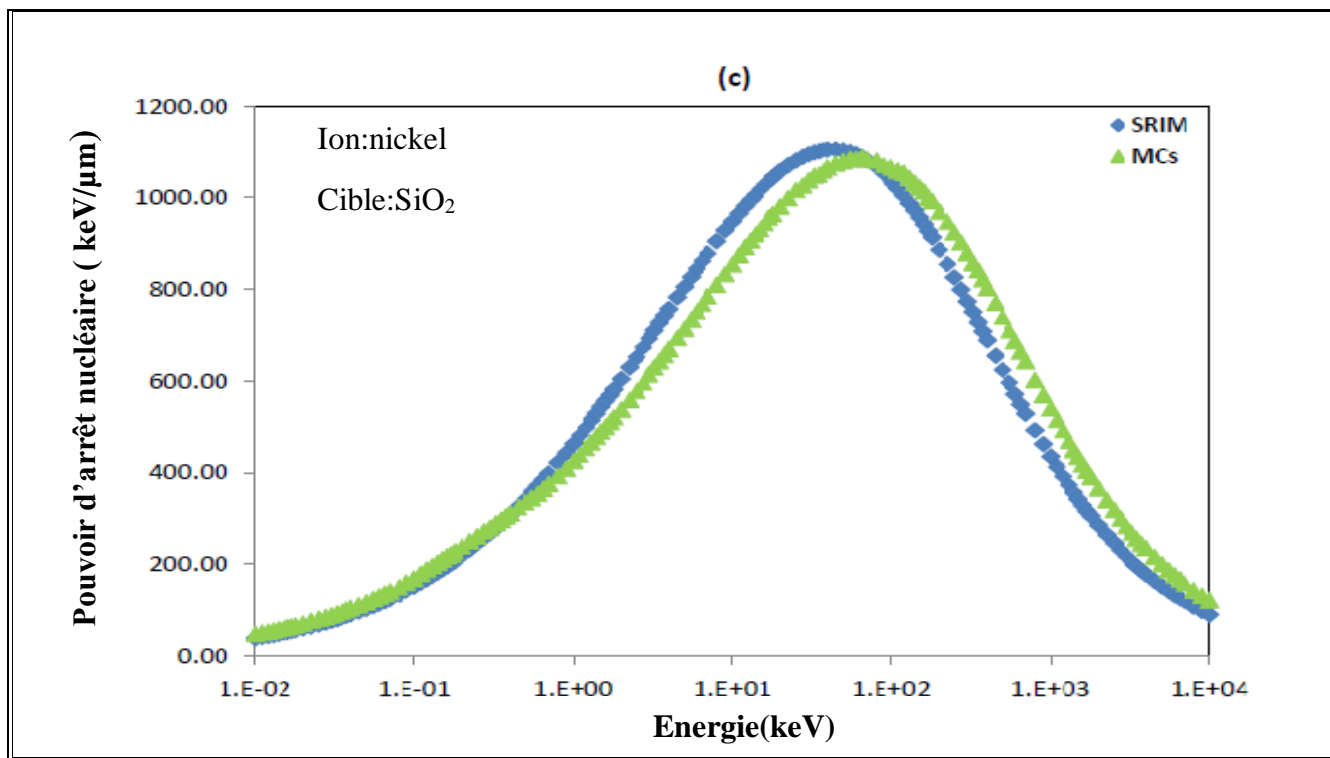


Figure III-7(c) : Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire du SiO₂ en fonction de l'énergie de l'ion incident ²⁸Ni

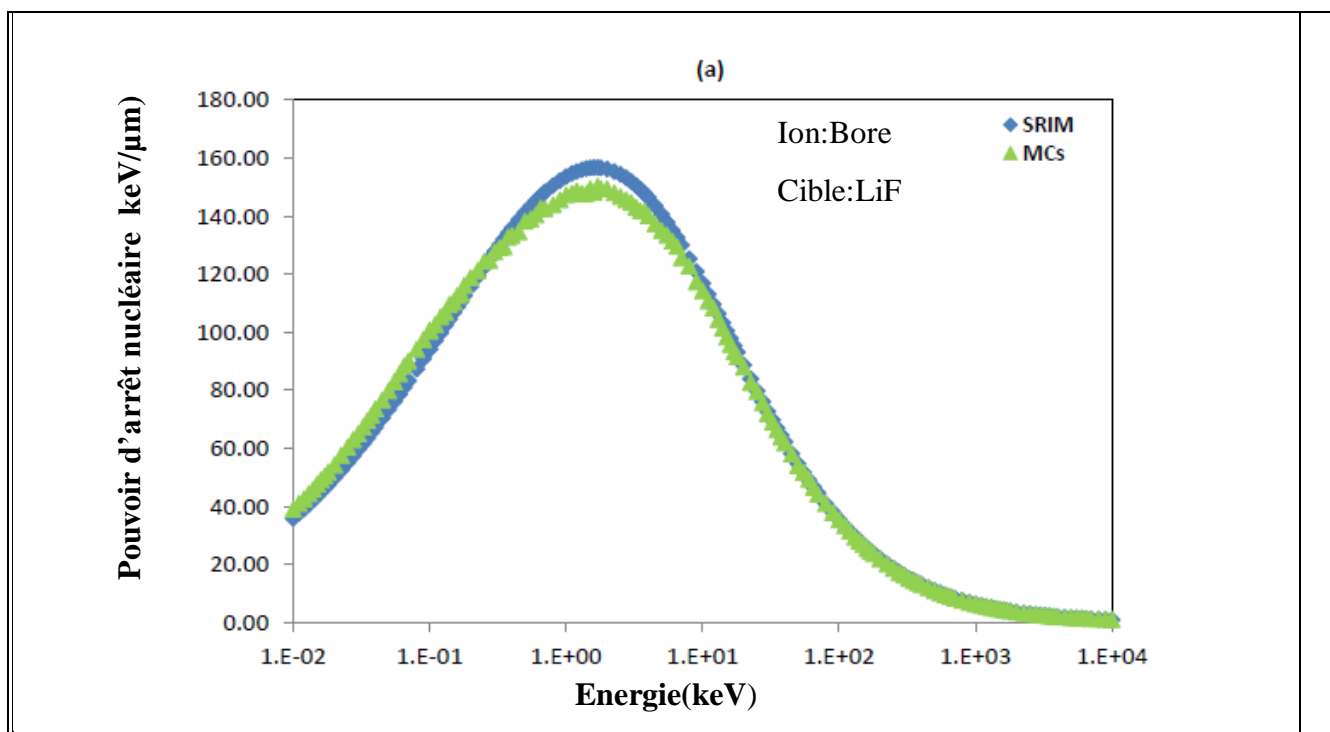


Figure III-8(a) : Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire du LiF en fonction de l'énergie de l'ion incident ⁵B.

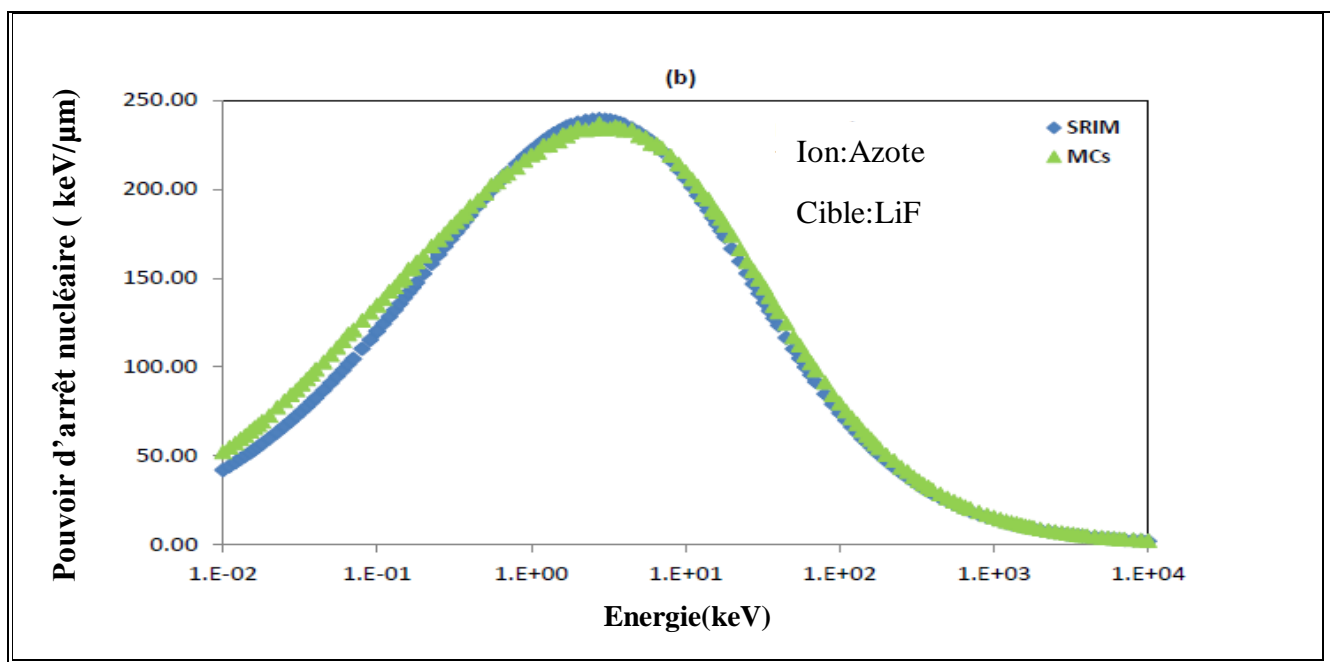


Figure.III8(b): Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire du LiF en fonction de l'énergie de l'ion incident ^{14}N .

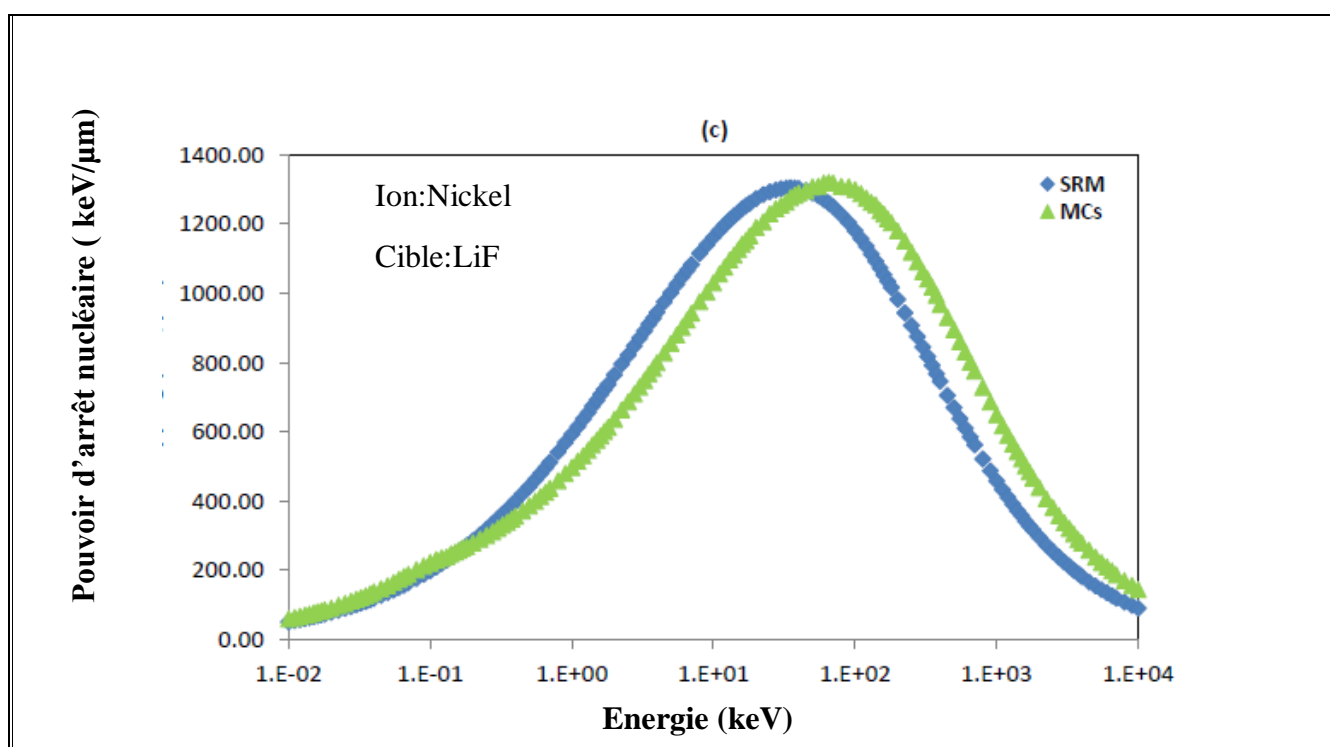


Figure.III8.(c): Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire du LiF en fonction de l'énergie de l'ion incident ^{28}Ni .

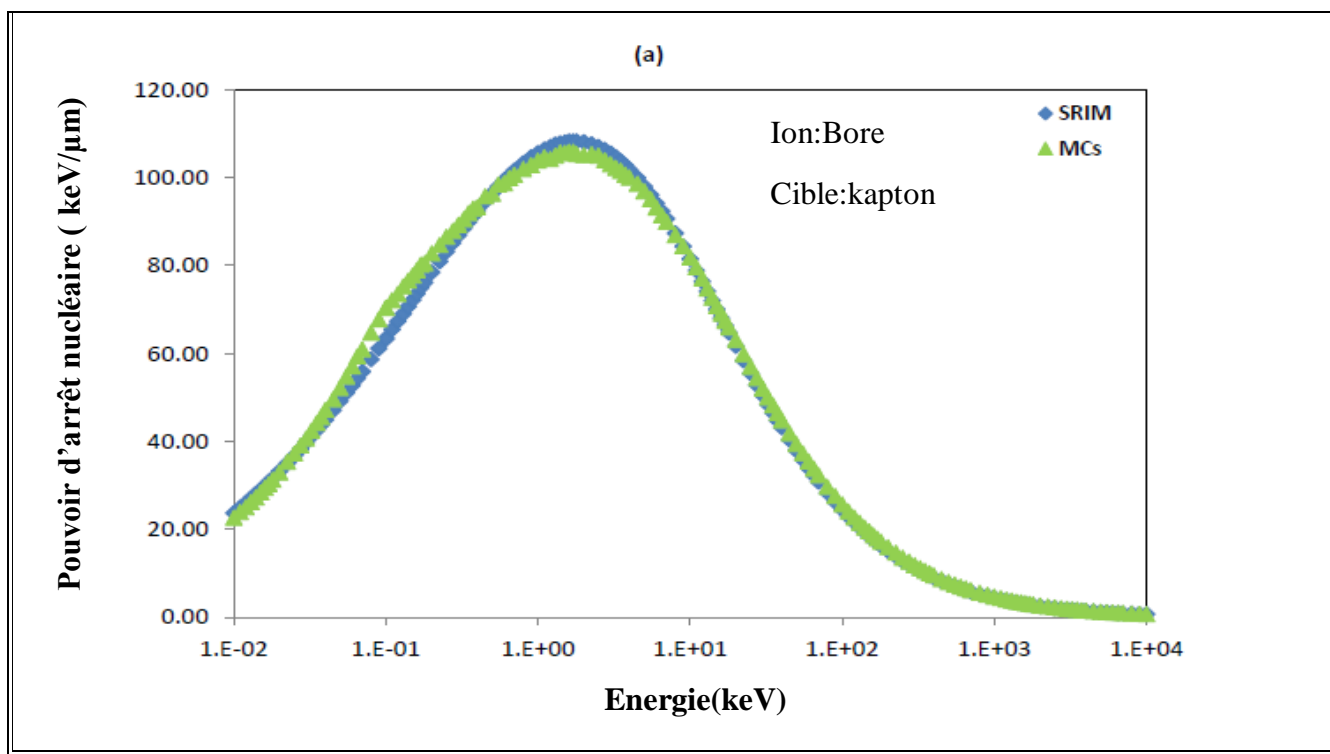


Figure III-9(a): Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire de Kapton en fonction de l'énergie de l'ion incident ^5B .

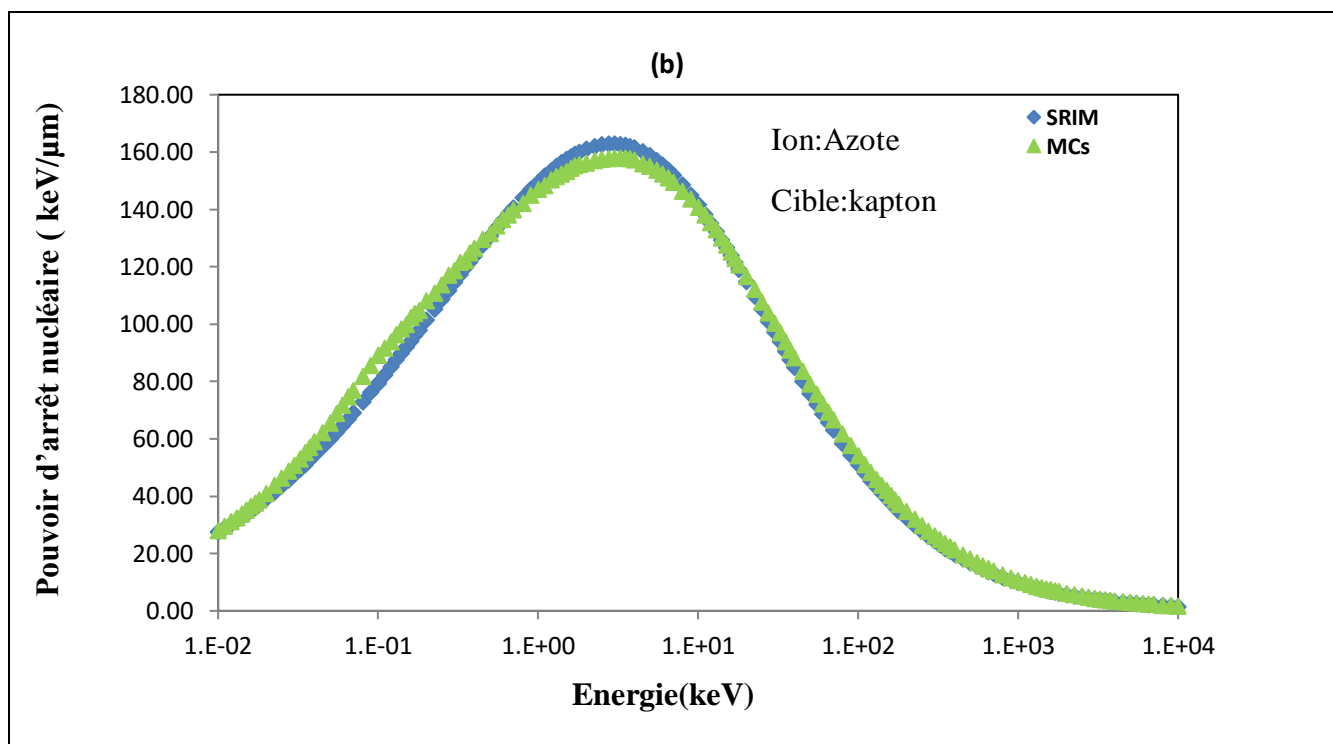


Figure III-9(b) : Variation du pouvoir d'arrêt nucléaire du Kapton en fonction de l'énergie de l'ion incident de ^{14}N .

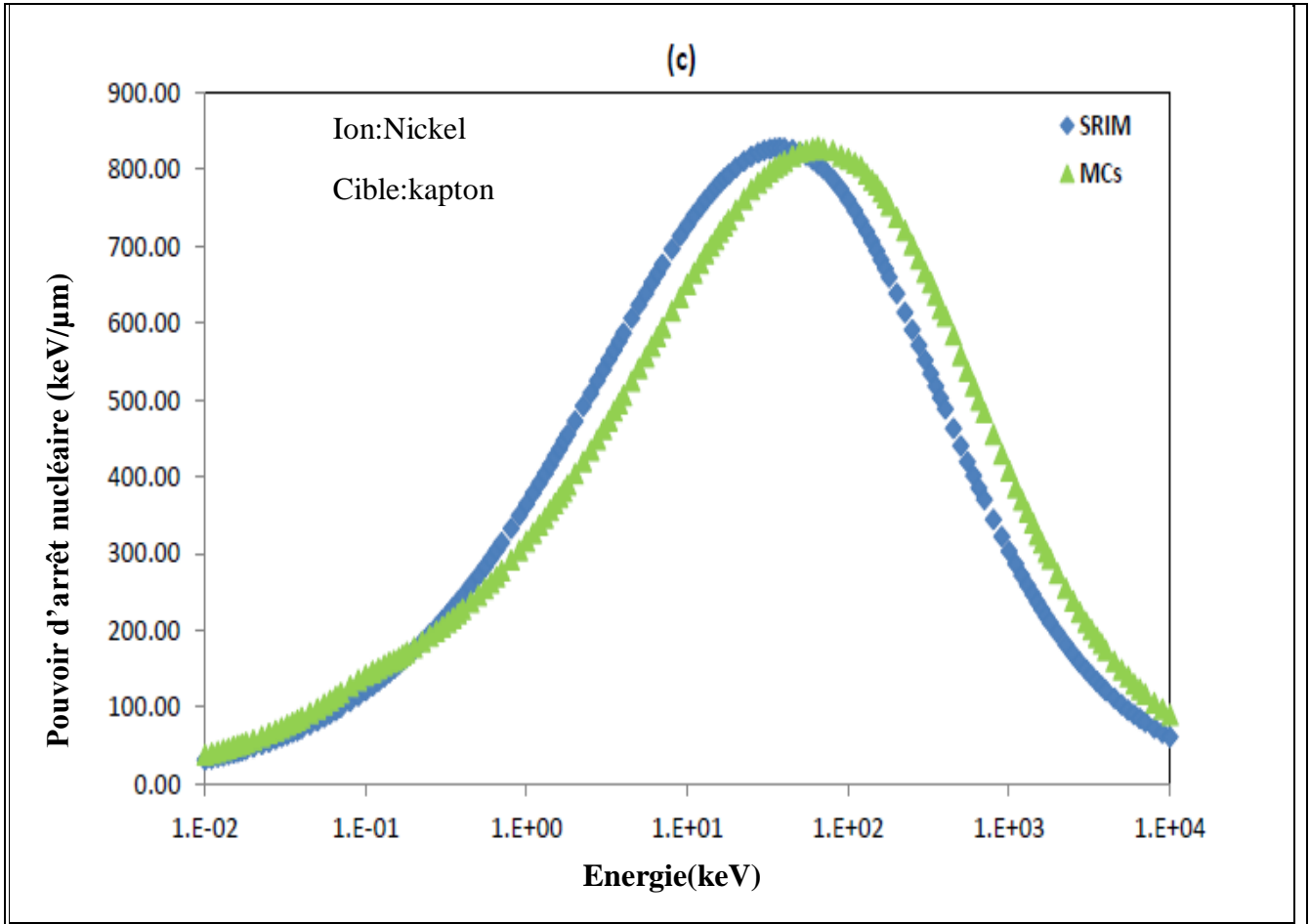


Figure III: III-9(c) : Variations du pouvoir d'arrêt nucléaire du Kapton en fonction de l'énergie de l'ion incident ^{28}N .

Pour compléter notre étude et valider nos résultats, nous avons aussi déterminé le parcours moyen des ions lourds Au, Bi, Br et Hg dans la cible amorphe SiO₂ dans une gamme d'énergie variant de 10 à 400 keV, et ce, par utilisation de la méthode de simulation de Monte Carlo. En comparant nos résultats à ceux obtenus expérimentalement et théoriquement dans études antérieures, nous constatons un parfait accord [27-30].

Nous constatons également que le parcours moyen des ions lourds devient plus grand dans la cible amorphe (SiO₂) quand l'énergie cinétique des ions incidents augmente, alors que pour une énergie fixe le parcours moyen diminue avec l'augmentation du numéro atomique.

Parcours (A°)								
Energie(keV)	Au (Z=79)				Bi (Z=83)			
	P.L.Grande et al EXP[27]	SRIM	Wange-Min et al[28]	Notre méthode de calcul	P.L.Grande et al EXP[27]	SRIM	Wange-Min et al[28]	Notre méthode de calcul
10	---	116		120	94	118	135	112
15	135	143	162	141	112	144	166	123
20	142	166	187	152	140	167	191	155
30	200	207	234	205	185	207	238	192
50	315	278	313	317	260	277	316	271
70	365	341	382	374	345	339	386	351
100	469	428	481	473	395	425	483	403
150	---	562	---	581	---	555	---	578
200	700	688	773	708	655	677	770	667
250	---	810	---	837		794	---	826
300	---	928	---	958		908	---	931
350	---	1044	---	1081		1020	---	1038
400	1230	1159	1310	1243	1150	1129	1290	1163

Tableau III 2 : Représente la comparaison des parcours expérimentales et calculées pour les ions Au et Bi dans SiO2

Parcours (A°)								
Energie (keV)	Brome(Z=35)				Mercure : Hg(Z=80)			
	Wang ke-Ming et al [29]	SRIM	Wang ke-Ming et al[28]	Notre méthode calcul	Wang ke-Ming et al[30]	SRIM	Wang ke-Ming et al[28]	Notre méthode calcul
10	---	115	---	140	---	117	---	143
15	---	149	---	161	---	144	---	165
20	---	181	---	192	---	167	---	180
30	---	242	---	266	---	208	---	266
50	411	356	352	423	368	279	323	375
70	---	468	---	518	---	342	---	395
100	668	635	627	690	497	429	482	506
150	1028	916	900	1045	583	562	636	595
200	1233	1202	1175	1249	754	687	773	766
250	1542	1493	1451	1550	883	808	914	892
300	1696	1791	1729	1708	1012	925	1050	1025
350	1902	2096	2008	1915	1184	1040	1178	1195
400	2055	2407	2286	2073	1269	1154	1300	1278

Tableau III.3 : Représente la comparaison des parcours expérimentales et calculées pour les ions Br et Hg dans SiO₂.

III-5. CONCLUSION :

Dans cette partie de notre travail, nous nous sommes intéressés à la détermination de la perte d'énergie nucléaire. Pour cela nous avons développé un code permettant, en utilisant la méthode de Monte Carlo, pour l'évaluation des pouvoirs d'arrêt nucléaire des matériaux semi- conducteurs (SiO₂, LiF et Kapton), et ce, pour les alpha (${}^4_2\text{He}$) et les protons (${}^1_1\text{H}$) de différentes énergies.

Nous avons constaté une bonne concordance entre nos résultats et ceux obtenus en employant le code SRIM et le PSTAR et ASTAR .l'écart est inférieur d'environ de 5%.

Dans la seconde partie de notre étude nous sommes intéressés à l'étudié de l'évolution la perte d'énergie nucléaire des ions ${}^{28}\text{Ni}$, ${}^7\text{N}$ et ${}^5\text{B}$ de différentes énergies allant de 10^{-2} keV à 10 MeV dans les matériaux semi- conducteurs (SiO₂, LiF et Kapton). Nous constatons que le pouvoir d'arrêt nucléaire des cibles amorphes augmente lors de l'augmentation de l'énergie cinétique incidente jusqu'à une valeur maximale puis diminue. Cette variation dépend à la fois de l'énergie et du numéro de l'ion incident.

La contribution de la section efficace d'arrêt nucléaire totale n'est dominante qu'à basse énergie.

Cependant, son importance dans la théorie des effets des rayonnements, tels que les dommages causés par les derniers rend l'étude des collisions nucléaires importante.

Nous avons déterminé le parcours moyen des ions lourds Au, Br, Bi et Hg pour des énergies comprise entre 10 keV et 400 keV dans la cible amorphe SiO₂, en utilisant la simulation de Monte Carlo basée sur la théorie de transport. Nos résultats sont en bon accord avec ceux obtenus expérimentalement (moins de 5% d'écart).

Le code basé sur la méthode de Monte Carlo, développé dans ce travail, à l'avantage d'être rapide (quelques secondes de calculs sur un simple micro- ordinateur), et tient compte de l'échange entre l'ion incident et les atomes cibles. Il présente aussi l'avantage par le choix du pas d'énergie. C'est un bon outil pour effectuer un calcul du genre.

REFERENCES:

- [1] : **N. Bohr**, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 18 (8) (1948) 1.
- [2] : **J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schiøtt**,
Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33 (14) (1963) 1.
- [3] :**J.F. Ziegler, Biersack, U. Littmark**,
The Stopping and Range of Ions in Solids, vol. 1. Pergamon, New York (1985).
- [4] : **P. Sigmund**.
Stopping of Heavy Ions: A Theoretical Approach, Springer tracts in modern physics.
Springer, 204 (2004).
- [5] : **H. Erramli, O. El Bounagui, M.A. Misdaq, A. Merzouki**,
Monte Carlo computer code for evaluating energy loss of 10 keV to 10 MeV ions in
amorphous silicon materials, Nucl. Instr. Meth. B 263 (2007) 127–131.
- [6] : **M. T. Robinson**.
The binary collision approximation: Background and introduction, Rad. Eff. Def. in Sol,
130 (1994) 3-20.
- [7] : **O. El Bounagui, H. Erramli**,
Channeling energy loss in silicon by using numerical and experimental methods, Modern
Physics Letters B25 (2011) 2171-2181.
- [8] : **K. Parodi, S. Squarcia**,
“Improvement of low-energy stopping power algorithms in the FLUKA simulation
program,” Nucl. Instr. Meth A 456 (2001) 352-368
- [9] : **O. Geithner, P. Andreo, N. Sobolevsky, G. Hartmann, O. Jokel**,
Physics in Medicine and Biology 51 (2006) 2279.

- [10] : **J.F. Ziegler**,
Nucl. Instr. Meth. B 219–220 (2004) 1027.
- [11] : **H.Paul**.
<https://www-nds.iaea.org/stopping/MSTAR V.3.12> <<https://www-nds.iaea.org/stopping/>>.
- [12] : **J. P. Biersack and L. G. Haggmark, A Monte Carlo**
Computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets, Nucl. Instr. Meth. 174 (1980) 257.
- [13] : **J. El Asri, O. El Bounagui, N. Tahiri, H. Erramli, A. Chetaine**,
Electronic Stopping Powers of Formvar and Mylar Polymeric Materials for Heavy Ions: LSS Modified Theory and Monte Carlo Simulation, ” Nuclear Technology, 205 (2019) 1236-1244.
- [14] : **E. Balanzat, S. Bouffard**,
Materials under Irradiation, Trans Tech. Publication (1993).
- [15] : **T. Ishitani, R. Shimizu, K. Murata, Monte Carlo**
Simulations on Scattering of Bombarded Ions in Solids, Japanese. J. App. Phys, 11 (1972) 125-133.
- [16] : **M. T. Robinson, I. M. Torrens**.
Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-icollision approximation, Phys. Rev. B 9 (1974) 5008.
- [17] : **A. A. Pasternak et al**.
The stopping power of heavy ions for energies below 0.2 MeV/nucleon measured by the semithick target method, Nucl. Instr. and Meth. A 774 (2015) 82–88.
- [18] : **Pawanpreet Kaur, K. K. Sharma, Rabia Pandit, Ravi Kumar**.
Journal of Magnetism and Magnetic Materials (2015) 39

[19] :**J. Lindhard and M. Scharff.**

Energy dissipation by ions in the keV région. Phys Rev., 124-1 (1961) 128.

[20] :**J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, P.V. Thomsen.**

Integral equation governing radiation effects. (Notes on atomic collisions, III), Kgl. Danske Videnskab., Selskab. Mat. Fys. Medd. 33 (1963).

[21] : **G. Moliere, Z. Naturforsch. A 2 (1947) 133.**

[22] :**J.Von.NEUMANN.**

“Various Techniques Used in Connection with Random Digits,” J. Res. Nat. Bur. Stand. Appl. Math. Series, 12 (1951) 36.

[23] :**J. P. NOUGIER.**

Méthode de calculs numérique, p. 325, 3rd ed., Elsevier Masson, Paris (1991)

[24] :**F. Ziegler.**

SRIM 2008.04, <<http://www.srim.org>>.

[25] : **ICRU (1993).** International Commission on Radiation Units and Measurements.

Stopping Power and Ranges for Protons and Alpha Particles, ICRU Report 49 (International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD).

[26] : **ICRU (2014).** International Commission on Radiation Units and Measurements.

ICRU Report 90, Key Data for Ionizing-Radiation Dosimetry: Measurement Standards and Applications. ICRU Report 90, J. ICRU 14 (Oxford University Press, Oxford).

[27] :**P. L. Grande, P.F.P Fichtner, M. Behar, R.P. Livi, F.C. Zawislak, J.P. Biersack, D. Fink and P. Mertens,** Nucl. Instrum. Meth. B. 19/20 (1987) 25.

[28] :**Wang Ke-Ming and Shi Bo-Rong,** J. Phys. D: Appl. Phys. 23 (1990) 1282-1289.

[29] :**Wang Ke-Ming, Wang Yi-Hua and Liu Ji-Tian.** Sci. Sinica A 6 (1987) 597.

[30] : **Wang Ke-Ming, Liu Xi-Ju, Wang Yi-Hua, Liu Ji-Tian, Guo Hai-Yan and Shi Bo-Rong,**Phys.Lett.A125(1987)366.

CHAPITRE IV

***CALCUL DE LA PERTE D'ENERGIE
ELECTRONIQUE DES IONS LOURDS FAIBLES DES
ENERGIES***

Introduction:

La théorie du LSS a été développée par Lindhard, Scharff et Schiott [1] pour calculer et évaluer la perte d'énergie électronique à basse énergie. Cependant, la décélération et la diffusion des particules chargées dans la matière est considérablement utilisée dans plusieurs techniques et phénomènes de la physique tels que : la canalisation d'ions, les dommages de rayonnement, la pulvérisation, la réflexion et la transmission des particules chargées, et l'analyse par activation aux particules chargées [2,3]. À basse énergie, la formule de Bethe [4] ne peut pas être utilisée pour calculer la perte d'énergie électronique, car la contribution de l'enveloppe interne à la perte d'énergie est relativement négligeable. En fait, la perte d'énergie devient proportionnelle à la vitesse du projectile. Des études expérimentales et théoriques ont été effectuées sur la perte d'énergie électronique pour différents ions et différents matériaux cibles [5-7]. En outre, la simulation de Monte Carlo (SMC) a un certain nombre d'avantages par rapport aux formulations analytiques basées sur la théorie du transport [8-10]. De plus, la perte d'énergie électronique des ions légers et lourds dans les matériaux composés a attiré l'attention, de plusieurs physiciens, ces dernières années [11-14] en raison de leurs utilisations croissantes dans les applications de faisceaux ioniques et la science des matériaux différents mesures de la perte d'énergie ont été effectuées et comparées aux valeurs calculées pour les ions plus lourds [15]. En outre, de nombreuses expériences ont été menées pour déterminer le pouvoir d'arrêt électronique différents ions lourds avec ($Z = 5$ à 29) et ce, dans le dioxyde de silicium et divers matériaux polymères tels que le polyéthylène téréphtalate ou PET ($C_{10}H_8O_4$) $_n$, polycarbonate/PC ($C_{16}H_{14}O_3$) $_n$, et le polyéthylène naphthalate/PEN ($C_{14}H_{10}O_4$) $_n$ [16]. Dans le cadre de ce travail, des calculs de pouvoir d'arrêt des ions lourds de ^{19}F , ^{23}Na , ^{24}Mg , ^{27}Al , ^{28}Si , ^{31}P , ^{32}S , ^{35}Cl et ^{40}Ar ont été effectués pour les polymères Formvar et Mylar pour la région énergétique de $0,1$ à $1,0$ MeV/nucléon [17].

Dans le présent chapitre, nous étudions la perte d'énergie électronique dans les polymères (nitrate de cellulose LR-115, feuille de polyimide de Kapton, SiO_2 et Al_2O_3) pour différents particules projectile, telles que ions les 9Be , ^{11}B , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O et ^{35}Cl , à faible énergie à l'aide de simulations de Monte Carlo et de la théorie LSS modifiée. Aussi, tous résultats obtenus par de simulation de la méthode de Monte Carlo et la théorie LSS modifiée ont été comparées à ceux calculés par les codes informatiques SRIM et MSTAR et ceux obtenus expérimentalement valeurs.

IV.1.Méthode et calcul :

La perte d'énergie électronique pour $V < V_0 Z_1^{2/3}$ où V_0 et Z_1 sont respectivement la vitesse de Bohr et numéro atomique de l'ion incident, tel que décrit par La théorie du LSS pour les ions lourds à faibles énergies est donnée par l'expression :

$$(S_e)_{LSS} = \xi_e 8\pi e^2 N a_0 Z_1^{2/3} \left(\frac{Z_2 Z_1}{Z} \right) V_r \quad (IV. 1)$$

Z_1, Z_2 : numéros atomiques de l'ion incident et de l'atome cible respectivement.

ξ_e : facteur de corrélation égal à $Z_1^{1/6}$

a_0 : rayon de Bohr.

N : densité atomique du matériau exprime en cm^3 .

La vitesse réduite des ions est donnée par : $V_r = \frac{V}{V_0 Z_1^{2/3}}$

V : vitesse de l'ion projectile et $Z = \left(z_1^{2/3} + z_2^{2/3} \right)^{3/2}$

La perte d'énergie électronique donnée par l'utilisation la théorie LSS [1] contient la constante ξ_e qui est environ égal à $Z_1^{1/6}$. Ce facteur ne dépend pas uniquement de Z_1 mais aussi du numéro atomique de la cible Z_2 .

Dans ce cas ξ'_e s'écrit sous forme:

$$\xi'_e = a(Z_1^b Z_2^c) \quad (IV. 2)$$

Où les paramètres sont : $a = 0,956$; $b = -0,573$ et $c = 0,237$.

Nous avons tenté d'inclure une formule semi –empirique en prenant en compte, dans notre approche, du concept de la charge effective et de la fonction d'ajustement exponentielle [17]. En se basant sur nos résultats ultérieurs obtenus dans le cadre de ce travail, nous proposons l'équation suivante pour évaluer le pouvoir d'arrêt [17] de différents matériaux cibles, et ce, à faible énergie s'écrit sous la forme:

$$(S_e)_{LSS-Modifier} = (S_e)'_{LSS} f(E) \quad (IV.3)$$

Avec :

$$(S_e)'_{LSS} = \xi'_e (S_e)_{LSS} \quad (IV.4)$$

Chapitre IV : Détermination de la perte d'énergie

$$f(E) = a_1 e^{(-b_1 E)} \quad (IV.5)$$

Où a_1 et b_1 sont des paramètres réglables comprises entre : $1,587 < a_1 < 1,993$ et $2,301 < b_1 < 2,549$

Cependant l'équation (IV-3), peut s'écrire sous la forme:

$$(S_e)_{LSS-Modifiee} = \xi'_e 8\pi e^2 N a_0 Z_1^{2/3} \left(\frac{Z_{1eff} Z_2}{Z} \right) \frac{V}{V_0} a_1 e^{(-b_1 E)} \quad (IV.6)$$

L'expression semi-empirique (Eq.IV.5) de la fonction exponentielle peut être considérée comme une fonction de l'énergie de la particule incidente E.

Pour des valeurs a_1 et b_1 données, la perte d'énergie électronique devient donc proportionnelle à la vitesse de l'ion incident. Ce qui nous considérons de corrélérer la perte d'énergie avec le paramètre d'impact de chaque collision (Figure. IV.1). L'énergie moyenne transférée dans la collision s'écrit sous forme :

$$\langle T \rangle = \int_{b_{min}}^{b_{max}} d\sigma T(b) \quad (IV.7)$$

Où $d\sigma(T) = 2\pi \frac{Z_1 e^4}{m_e v^2} \frac{dT}{T^2}$

σ : la section efficace de l'interaction

b : le paramètre d'impact.

En fait, les transferts d'énergie, à un système quantique d'électrons liés, ne peuvent être arbitrairement faibles. Même si on ne néglige pas le ralentissement par interaction avec les électrons dits libres du milieu, il faut néanmoins que la particule incidente cède une énergie suffisante pour faire passer l'électron d'une bande d'énergie à une autre ou au moins supérieure à l'énergie d'une excitation élémentaire du milieu.

On considère que la cible à la forme d'un cylindre de rayon $r = b_{max}$ et de hauteur $h = L$

$$b_{max}^2 \pi \cdot L = N^{-1} \quad (IV. 8)$$

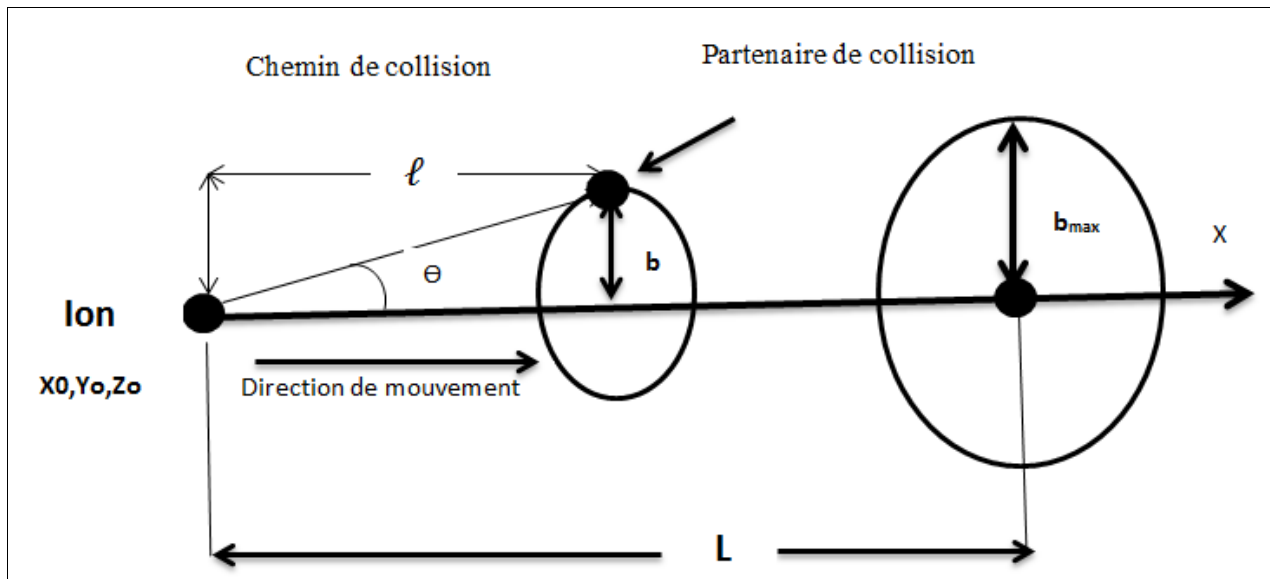


Figure IV.1: Collision schématique dans des cibles amorphes

La cible est suffisamment mince (quelques microns). Le programme génère une distribution homogène de la position des particules (X, Y, Z) dans un cylindre caractérisé par le rayon b_{\max} , qui représentent le volume irradié.

On génère trois nombres pseudo aléatoires ξ_1 , ξ_2 et ξ_3 en utilisant le programme subroutine aléatoire basé sur la méthode congruentielle [7,18] (figure IV.2).

Où ξ_i est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 ($0 \leq \xi_i < 1$).

X est généré de manière homogène dans l'intervalle $[0, L]$, en utilisant une procédure d'échantillonnage aléatoire.

$$X = \xi_1 L \quad (IV.9)$$

Des couples homogènes $\{Y, Z\}$ répartis dans un cercle de rayon b_{\max} sont obtenus en générant des couples $\{Y, Z\}$ de façon isotrope dans un carré de deux côtés maximum,

Avec $Y \in [-b_{\max}, b_{\max}]$ et $Z \in [-b_{\max}, b_{\max}]$

$$Y = -b_{\max} + 2b_{\max}\xi_2 \quad (IV.10)$$

$$Z = -b_{\max} + 2b_{\max}\xi_3 \quad (IV.11)$$

Chapitre IV : Détermination de la perte d'énergie

La génération isotrope du couple {Y, Z} dans le cercle de rayon b_{max} est obtenu par :

$$Y^2 + Z^2 \leq b_{max}^2 \quad (IV.12)$$

L'angle de diffusion est généré par échantillonnage aléatoire [17,19]. Notre programme utilise la distribution angulaire des collisions d'ions dans le système du laboratoire(S.L), qui peut être calculé par l'expression [20].

$$\theta = \arccos(1 - 2\zeta_4) \quad (IV.13)$$

$$\text{avec } \begin{cases} 0 \leq \zeta_4 < 1 \\ 0 \leq \theta < \pi \end{cases}$$

Chaque ion est caractérisé par les paramètres qui sont l'identifiant, le numéro atomique, la masse atomique, l'énergie, la direction et la coordonnée cartésienne tridimensionnelle. L'évolution de ces paramètres peut être suivie par la simulation Monte Carlo [7, 17,21]. On suppose que la particule change sa direction à la suite de collisions électroniques binaires et se déplace en ligne droite entre deux collisions consécutives. L'énergie de la particule est réduite à la suite de chaque collision.

La cible est supposée être amorphe et les propriétés directionnelles applicables à un matériau cristallin étant ignorées [3,10]. Ce programme calcule les distributions tridimensionnelles finales des ions, le transfert d'énergie, la perte d'énergie et le pouvoir d'arrêt électronique. La trajectoire est arrêtée lorsque l'énergie ionique est plus petite que l'énergie d'excitation moyenne I Ou lorsque la particule projectile se trouve en dehors de la cible. Une simulation classique a été réalisée avec un nombre élevé de trajectoires ioniques (10^6) afin que les fluctuations statistiques soient négligeables.

Le tableau IV.1 représente les valeurs du nombre atomique moyen Z_2 , la masse atomique moyenne A_2 et l'énergie d'excitation moyenne I .

L'énergie d'excitation moyenne I est de la forme : [8,22].

$$\ln(I) = \frac{\sum_i n_i z_i \ln(I_i)}{\sum_i n_i z_i} \quad (IV-14)$$

Ou

I_i : l'énergie d'excitation moyenne.

Z_i : le nombre atomique.

Chapitre IV : Détermination de la perte d'énergie

n_i : la concentration atomique du matériau cible composite

Polymères	\bar{Z}	\bar{A}	\bar{I} (eV)
Kapton	5,03	9,80	80,13
LR-115	5,20	10,08	83,07
SiO ₂	9,99	19,99	130,39
Al ₂ O ₃	10	20,40	132,07

Tableau IV -1 : Nombre atomique moyen, la masse atomique moyenne et l'énergie d'excitation moyenne I.

IV.2.RESULTS ET DISCUSSION :

Il est utile d'étudier l'effet du facteur de corrélation inclus dans l'expression(IV.1) et la fonction exponentielle sur le comportement de la perte d'énergie électronique pour plusieurs différentes particules chargées incidentes, à savoir les ions ⁹Be, ¹¹B, ¹²C, ¹⁴N et ¹⁶O dans des cibles amorphes. Ces comportements sont illustrés dans les figures 2(a) et 2(b). La figure 2(a) montre qu'en l'absence de facteur de corrélation, la perte d'énergie électronique augmente avec l'augmentation de l'énergie. Dans cette région énergétique, le pouvoir d'arrêt électronique est proportionnelle à la vitesse ionique et pour les systèmes avec différents numéros atomiques Z_1 et Z_2 .

D'autre part, la figure 2(b) montre qu'en présence du facteur de corrélation et de la fonction exponentielle, comme indiqué par l'équation (IV.5), la perte d'énergie électronique augmente avec l'augmentation de l'énergie incidente jusqu'à ce qu'elle atteigne un maximum, puis diminuer.

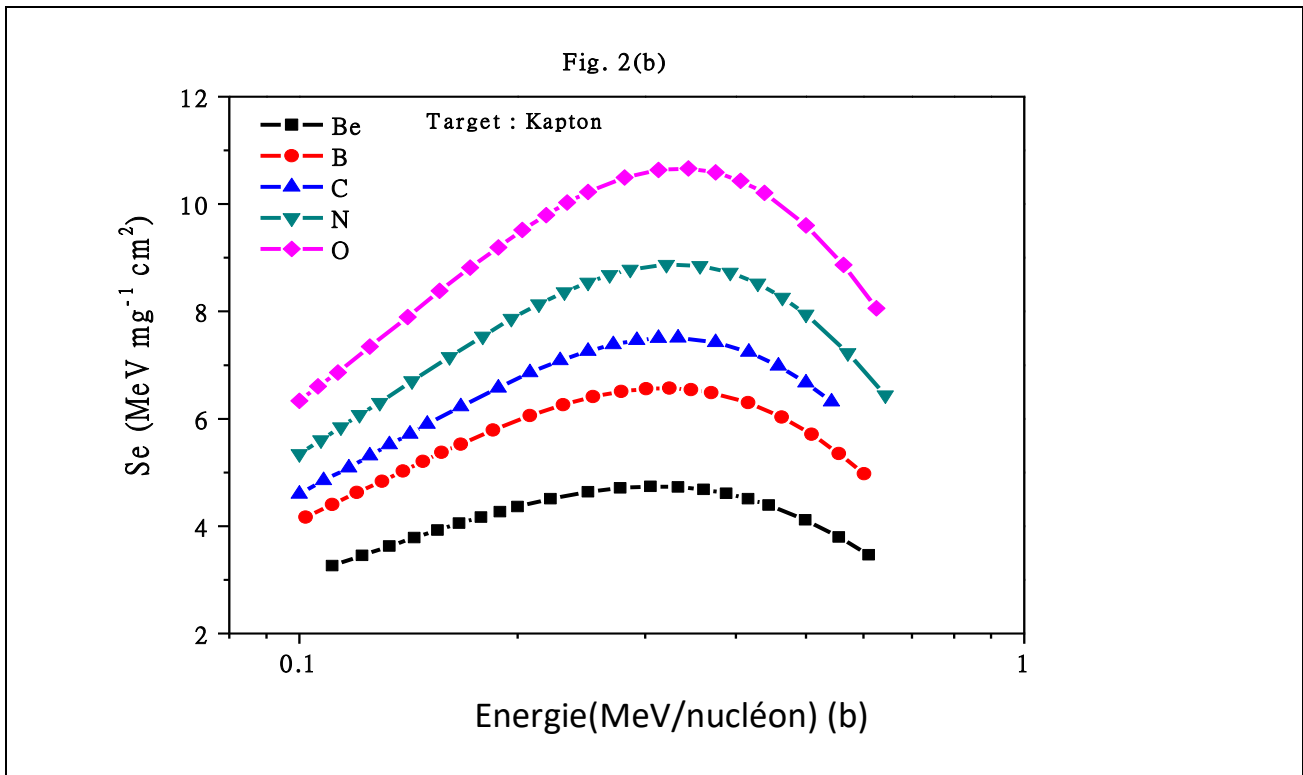
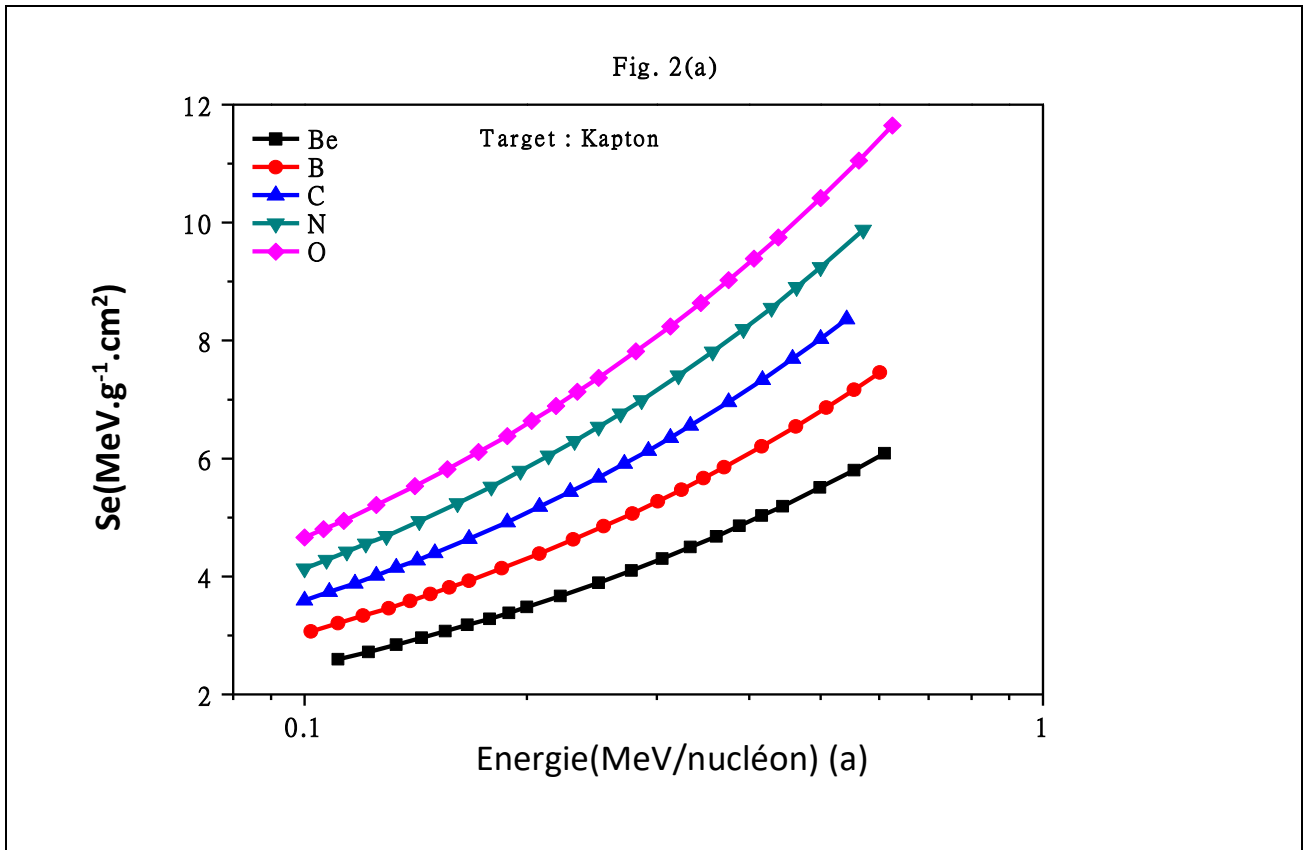


Figure IV.2: La perte d'énergie électronique en fonction de l'énergie des ions incidents pour différents ions lourds dans le film polyimide Kapton (C₂₂H₁₀O₅N₂) (a) Théorie LSS et (b) théorie-modifiée-LSS.

Chapitre IV : Détermination de la perte d'énergie

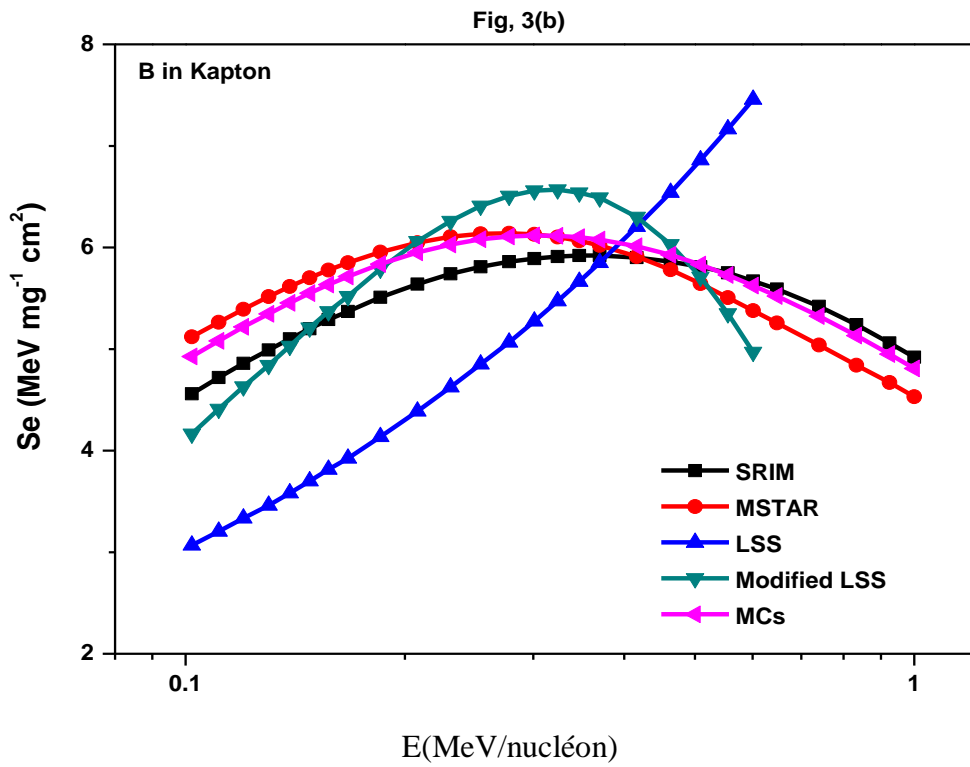
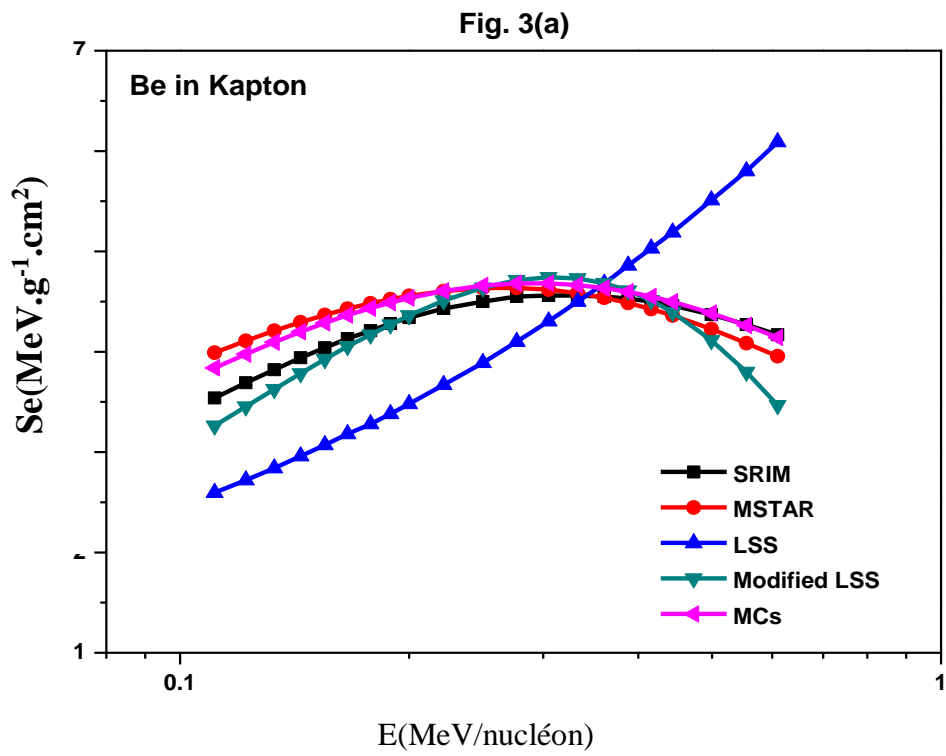
Les figures IV-3 et IV-4 montrent la variation de $\left(\frac{dE}{dx}\right)_e$ en fonction de l'énergie de l'ion incident dans la Kapton et dans leLR-115.

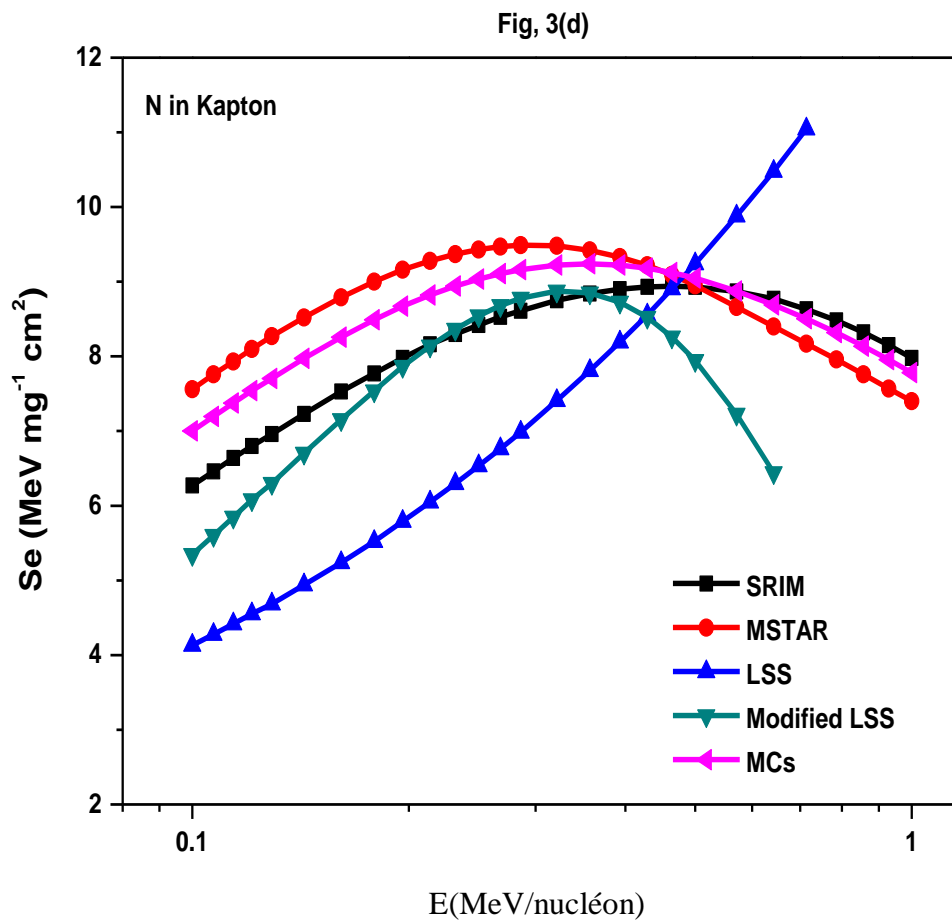
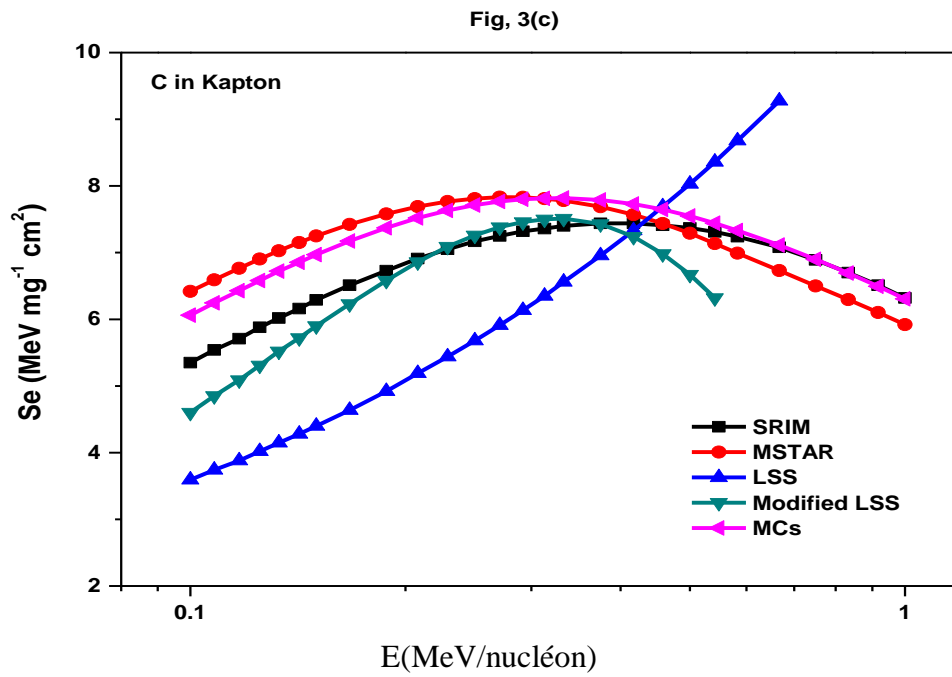
On remarque que les résultats obtenus pour la théorie LSS sont fortement sur estimés (~25%) par rapport à ceux obtenus par utilisation du code SRIM, MSTAR, Simulation par MC ou la théorie LSS modifiée. En outre, tous les résultats obtenus par utilisation de la méthode de Monte Carlo sont en bon accord avec ceux obtenus par les codes SRIM et MSTAR respectivement.

Cependant, sur les figures IV.4 (a, e) et pour l'énergie $E < 0,3 \text{Mev/nucleon}$, la $\left(\frac{dE}{dx}\right)_e$ augmente avec l'augmentation de l'énergie de la particule incidente. Dans cette gamme d'énergie, les résultats obtenus les différentes méthodes de calcul sont qualitativement en bon accord.

Pour l'énergie $E < 0,3 \text{Mev/nucleon}$, la variation de $\left(\frac{dE}{dx}\right)_e$ obtenu par utilisation de la théorie LSS augmente continuellement comparée aux valeurs obtenues, pour l'utilisation des autres codes de calcul Celles-ci passe par un maximum et diminue ensuite avec l'augmentation de l'énergie

Il est donc important de constater que les écarts importants (~25%) observés pour utilisation de la théorie LSS (non modifiée) ont été réduits de façon significative (jusqu'à 10%) après modification de l'équation(IV.6) pour introduction du facteur de corrélation ξ_e et de la fonction exponentielle.





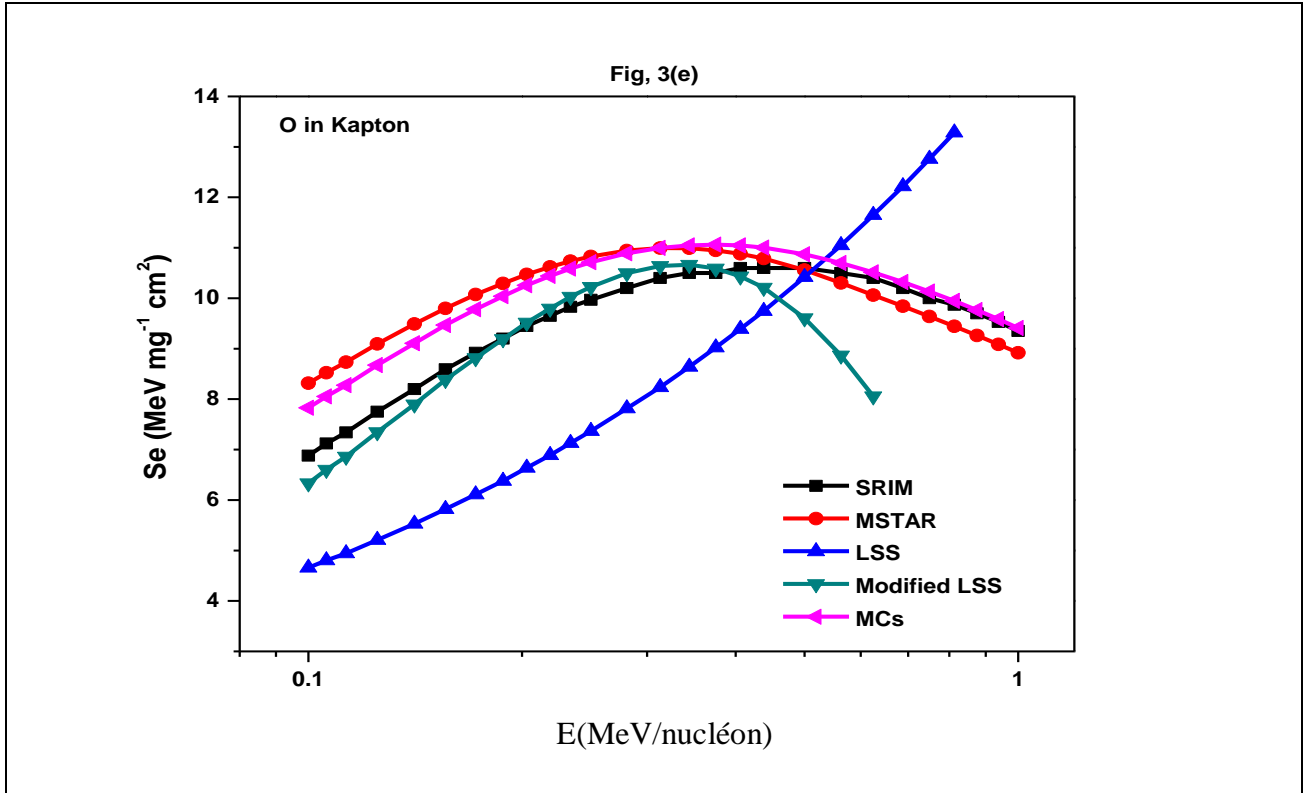


Figure IV. 3: La perte d'énergie électronique dans la cible Kapton (C₂₂H₁₀O₅N₂) en fonction de l'énergie pour différentes particules chargées incidentes. (a) ⁹Be, (b) ¹¹B, (c) ¹²C, (d) ¹⁴N et ¹⁶O(e).

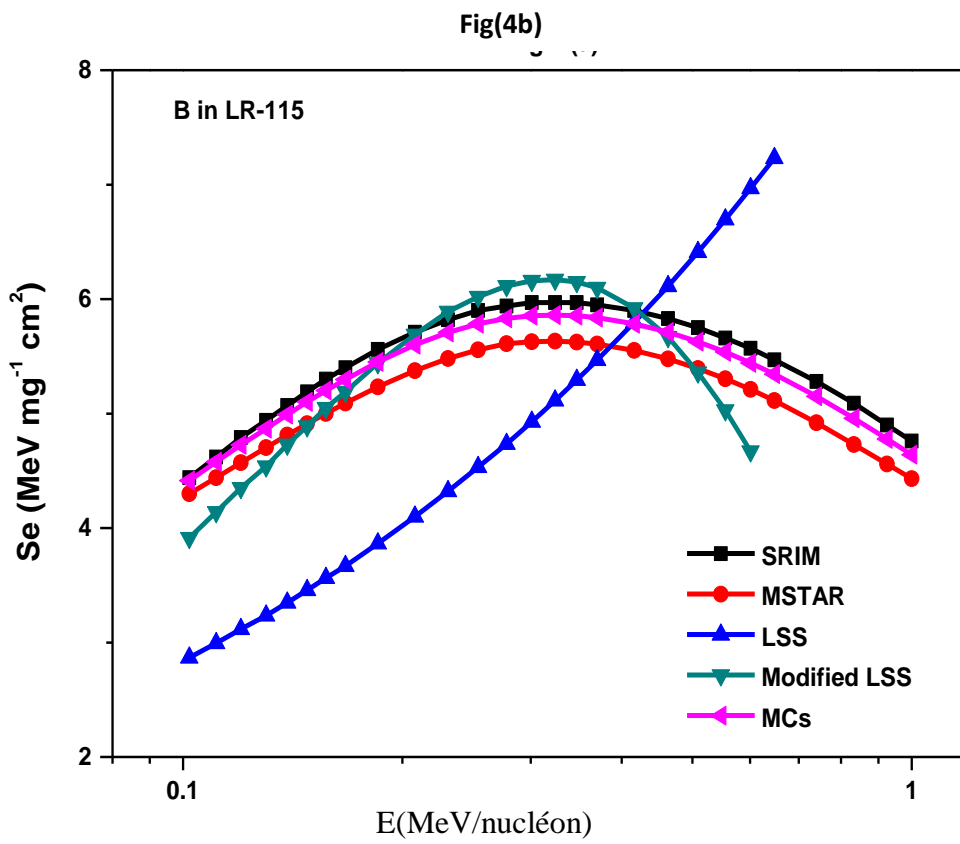
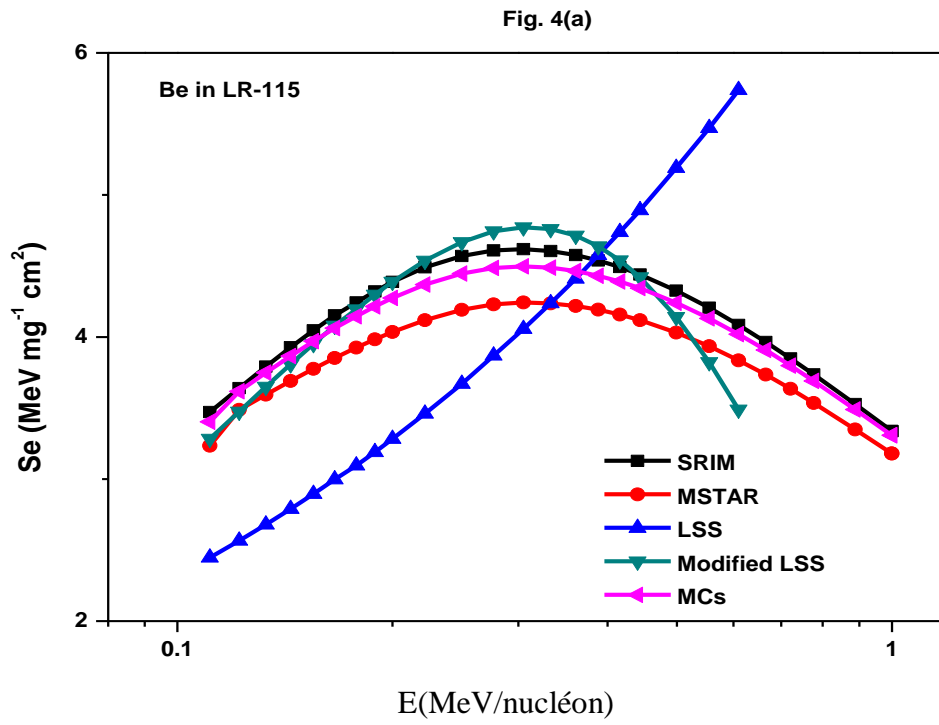


Fig. 4(c)

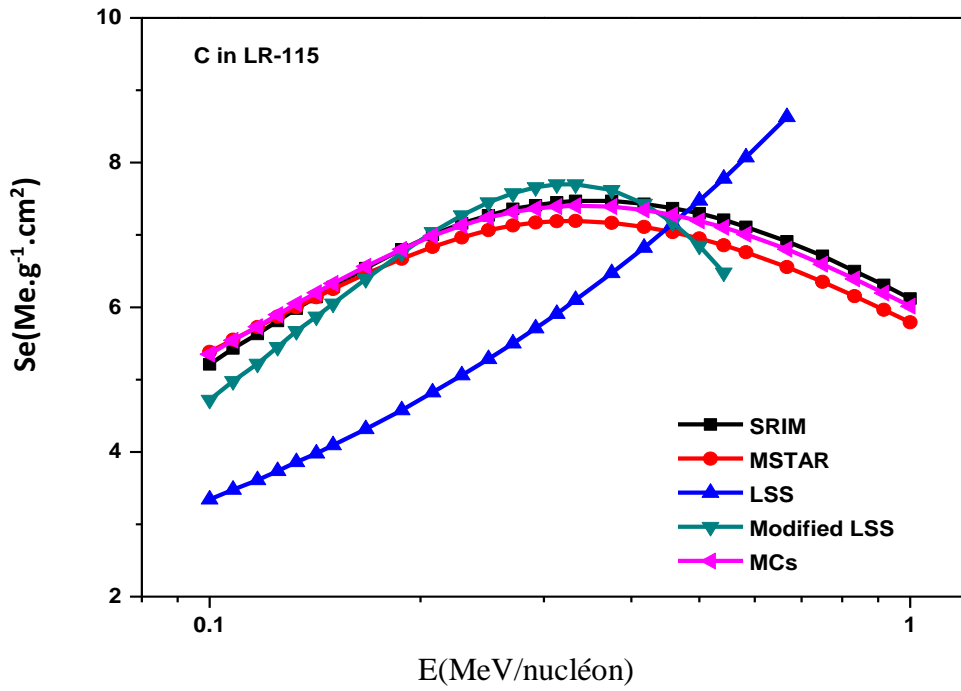
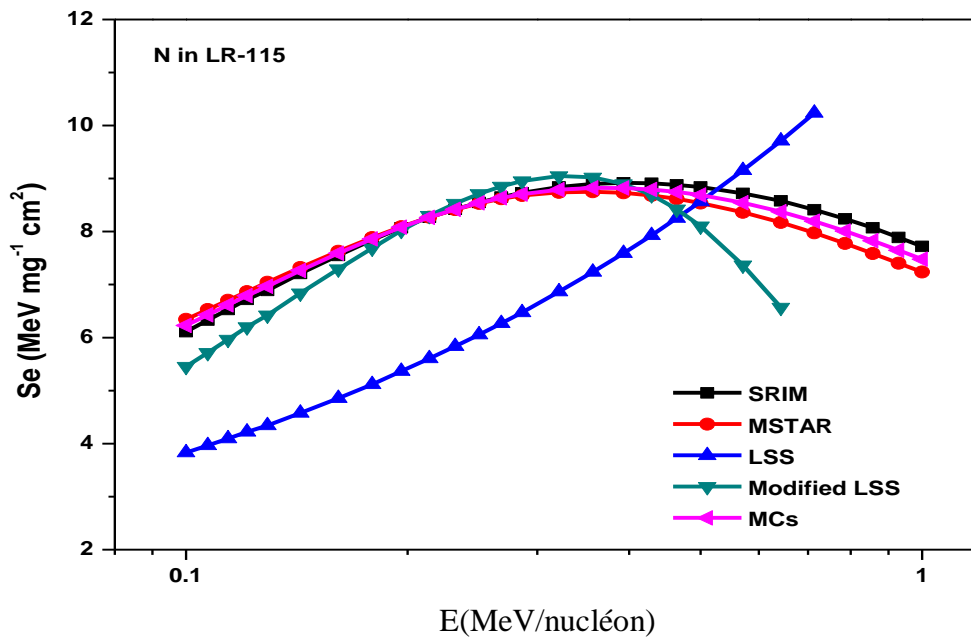


Fig (4d)



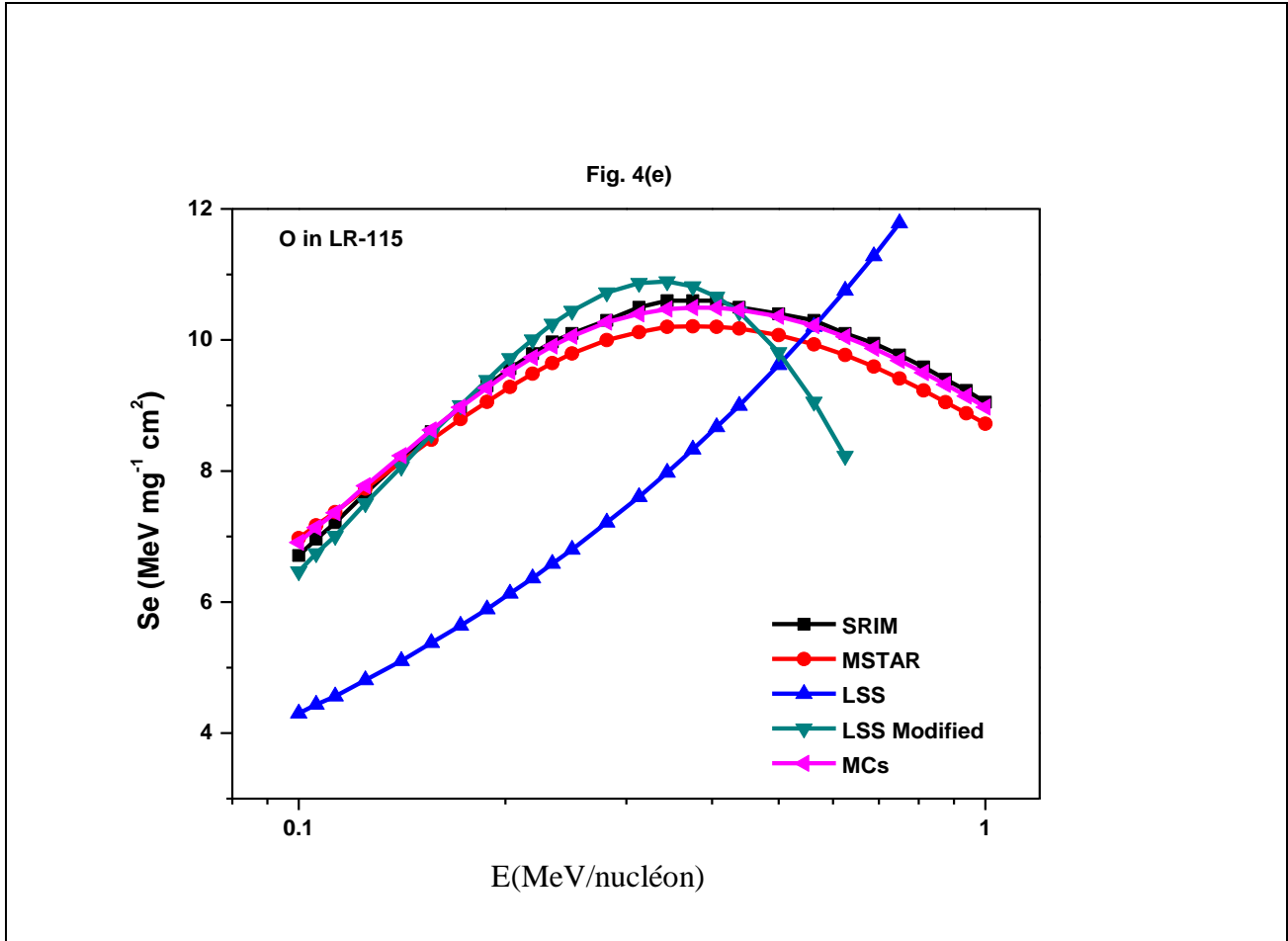


Figure IV.4: La Perte d'énergie électronique dans LR-11 (C₂₂H₁₀O₅N₂) en fonction de l'énergie pour différentes des particules chargées incidentes. (a) ⁹Be, (b) ¹¹B, (c) ¹²C, (d) ¹⁴N et (e) ¹⁶O

Chapitre IV : Détermination de la perte d'énergie

Tableau IV.2 présente les valeurs du pouvoir d'arrêt électronique des polymères LR-115 et Kapton pour l'ion ^{35}Cl dans une gamme d'énergie comprise entre 0,5 et 1,0 MeV/nucléon, obtenues par la simulation de Monte Carlo et la théorie LSS modifiée.

Pouvoir d'arrêt (MeV mg ⁻¹ cm ²)						
Cible	Energie (MeV/n)	SRIM	MSTAR	Résultat Expérimental	SMC	Théorie-Modifiée.LSS
LR-115(C ₆ H ₉ O ₉ N ₂)n	0,5	24,47	23,24	25,52	24,08	26,12
	0,6	24,84	23,61	25,75	24,40	26,27
	0,7	24,98	23,69	25,91	24,51	26,75
	0,8	24,93	23,59	26,01	24,39	25,97
	0,9	24,64	23,41	26,04	24,43	24,46
	1,0	24,45	23,19	26,03	23,95	22,56
Kapton(C ₂₂ H ₁₀ O ₅ N ₂)n	0,5	27,45	24,36	24,92	26,03	28,15
	0,6	28,08	24,37	25,09	26,33	28,63
	0,7	28,40	24,30	25,22	26,43	29,01
	0,8	28,39	24,15	25,33	26,34	28,45
	0,9	28,09	23,95	25,40	26,12	26,76
	1,0	27,85	23,71	25,44	25,84	24,45

Tableau IV.2: les valeurs des pouvoirs d'arrêt électroniques des polymères LR-115 et Kapton pour l'ion lourd ^{35}Cl basées sur la simulation de Monte Carlo (MC) et la théorie modifiée-LSS

Ce tableau présente également les valeurs des pouvoirs d'arrêt électronique correspondantes obtenues par SRIM et MSTAR, Afin de confirmer la validité de nos calculs, nous avons comparés nos résultats calculés à ceux publiés par P, K, Diwan et coll. [14].

De plus, les figures-IV-5 et IV-6 représente la perte d'énergie électronique des ions lourds ^9Be dans SiO_2 et ^{16}O dans Al_2O_3 en fonction de l'énergie.

Dans la figure-IV-5, nous comparons nos résultats des pouvoirs d'arrêt électronique du SiO_2 pour le béryllium à basse énergie avec les résultats obtenues par le code MSTAR, la théorie LSS modifiée et ceux obtenues expérimentalement par Zhang et al [16].

Des comportements similaires ont été observés pour l'oxygène dans l'alumine Al_2O_3 à basse énergie, les résultats des pouvoirs d'arrêt électronique sont comparés avec les résultats de code MSTAR, la théorie LSS modifiée et celles obtenues expérimentales par Pascual-Izarra et al [23]. (figure-IV-6).

Nous constatons qu'il y a une bonne concordance entre nos valeurs et celle obtenus par le code MSTAR et expérimentalement avec un écart inférieure (10%) dans les matériaux SiO_2 et Al_2O_3 d'énergie variant de 0,1 à 1,0 MeV/nucléon.

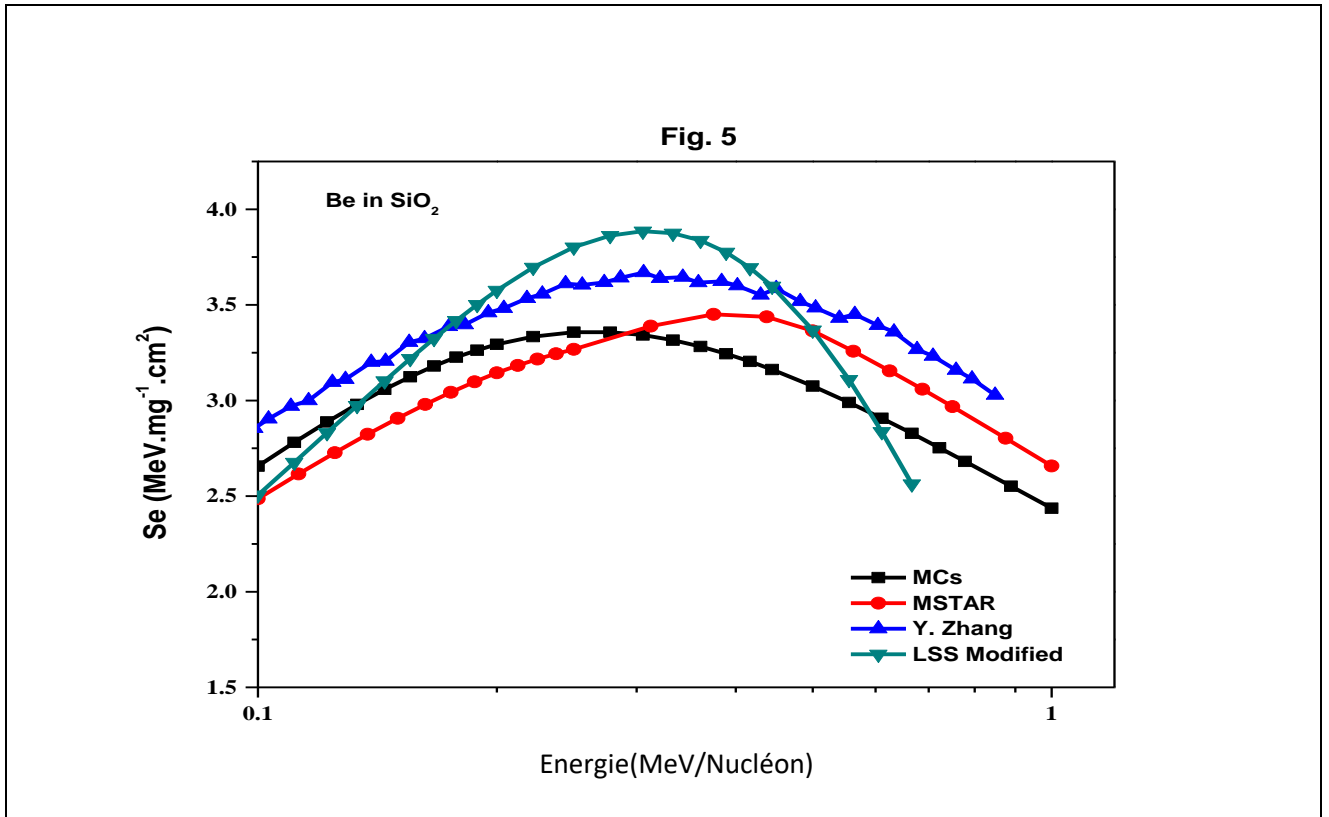


Figure IV. 5: Perte d'énergie électronique du ⁹Be dans SiO₂ en fonction de l'énergie incidente.

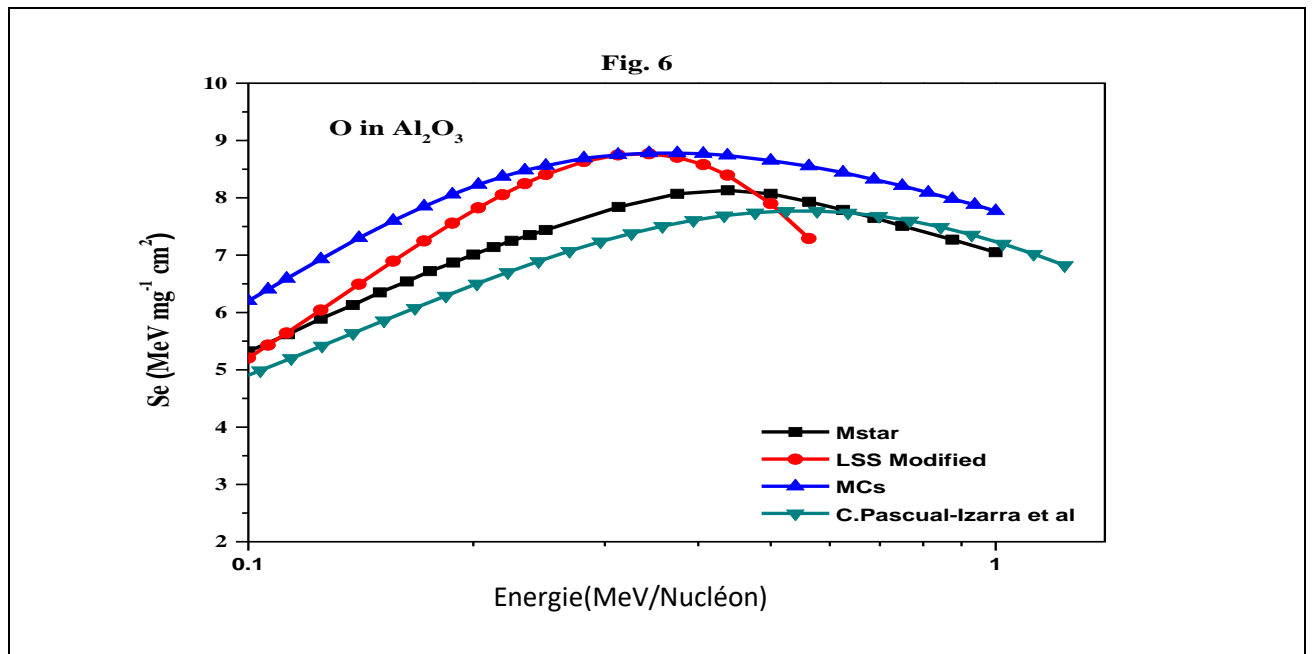


Figure IV. 6: Perte d'énergie électronique de l'oxygène dans Al₂O₃ en fonction de l'énergie incidente

IV.3. CONCLUSION :

Nous avons présenté dans ce chapitre les résultats de la perte d'énergie des ions ^9Be , ^{11}B , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O et ^{35}Cl des énergies variantes de 0,1 à 1 MeV dans les matériaux polymères Kapton et LR-115.

Les valeurs des pouvoirs d'arrêt électronique basées sur la théorie Lindhard, Scharff et Schiott (LSS), avec la fonction actuellement modifiée ξ_e et $f(E)$, fournissent un accord étroit dans Kapton et LR-115 pour les ions lourds de $Z_1 = 4-9$ et $Z_1 = 17$ dans une gamme d'énergie de 0,1 à 1 MeV/nucléon.

Les valeurs théoriques LSS modifiées sont en accord étroit avec les simulations de Monte Carlo et les données de SRIM et MSTAR.

D'autre part, les valeurs des pouvoirs d'arrêt obtenues de Kapton et LR-115 pour les ions ^{35}Cl sont en bon accord avec les valeurs expérimentales celles obtenues par les codes SRIM et MSTAR dans intervalle d'énergie 0,5 ; 1,0 MeV/nucléon (inférieur 10%).

REFERENCES:

- [1] : J, Lindhard, M, Scharff and H,E, Schiott.
Mat, Fys, Medd, Dan, Vid, Selsk, 33 (1963) 1.
- [2] :H, Erramli and O, El Bounagui.
Charged Particle Activation Analysis: Applications, in: Encyclopedia of Analytical Chemistry: Applications, Theory and Instrumentation, Wiley Online Library, United Kingdom (2017) 365,
- [3] :O, El Bounagui and H, Erramli,
Nucl, Instrum, Meth, Phys, Res, B 268 (2010) 1361,
- [4] :H,A, Bethe, Phys, Rev, 89 (1953) 1256,
- [5] : D, Tahir, Suarga, Yulianti et al., Atom Indones, 38 (2012) 100,
- [6] : J,F, Ziegler, J,P, Biersack and U, Littmark,
The Stopping and Range of Ions in Solids, Vol, 1, Pergamon Press, New York, (1985) 1,
- [7] : H, Erramli, O, ElBounagui, M,A, Misdaq et al.
Nucl, Instrum, Meth, Phys, Res, B 263 (2007) 127.
- [8] : U, Fano, Ann, Rev, Nucl, Sci, 13 (1963) 1.
- [9] : L,C, Northcliffe, Ann, Rev, Nucl, Sci, 13 (1963) 67
- [10] : O, El Bounagui and H, Erramli, Mod, Phys, Lett, B 25 (2011) 2171,
- [11] :L,E, Porter and H, Lin, J, App, Phys, 67 (1990) 6613,
- [12] : H, Geissel, H, Weick, C, Scheidenberger et al.
Nucl, Instrum, Meth, Res, B 195 (2002) 3,

- [13] : J,M, Fernández-Varea and N,R, Arista, Radiat, Phys, Chem, 96 (2014) 88,
- [14] : P,K, Diwan, V, Sharma, Pratibha et al, Nucl, Instrum, Meth, B 266 (2008) 4738,
- [15] : A, Sharma, P,K, Diwan, S, Kumar et al. Nucl, Instrum, Meth, B 194 (2002) 7.
- [16] : Y, Zhang, W,J, Weber, D,E, McCready et al. App, Phys, Let, 87 (2005) 104103,
- [17] : J, El Asri, O, El Bounagui, N, Tahiri et al. Nucl, Technol, 205 (2019) 1236,
- [18] : D,E, Knuth, The Art of Computer Programming (TAOCP), Wesley (1969).
- [19] :W,E, Burcham, Elements of Nuclear Physics, Harlow, Longman (1979).
- [20] :J, Von Neumann, J, Res, Nat, Bur, Stand, Appl, Math, 12 (1951) 36.
- [21] : J, Giber, I, Nagy and J, Laszlo, Nucl, Instrum, Meth, Res, B 2 (1984) 135.
- [22] :W,H, Barkas and M,J, Berger:
in Studies in Penetration of Charged Particles in Matter, National Academy of Sciences, National Research Council Publication No, 1133, NAS-NRC, Washington, DC (1967).
- [23] : C, Pascual-Izarra and G, Garcia, Nucl, Instrum, Meth, B 228 (2005) 388.



CONCLUSION GENERALE

Conclusion Générale

Le travail présenté dans ce mémoire consiste en la détermination de la perte d'énergie électronique et nucléaire des ions de diverses énergies et dans divers polymères.

Afin de tester la validité de la théorie LSS, nous avons représenté graphiquement le pouvoir d'arrêt électronique des matériaux polymères Formvar et Mylar en fonction de la vitesse réduite des ions pour divers ions lourds de charge Z_1 comprise entre 9 et 18.

Nous avons constaté, d'une part, que l'utilisation la théorie LSS prédit une tendance linéaire de la variation du pouvoir d'arrêt électronique en fonction de la vitesse des ions incidents.

D'autre part, en utilisant la théorie LSS modifiée, le comportement du pouvoir d'arrêt électronique des matériaux cibles atteint une valeur maximale pour une vitesse réduite donnée de l'ion incident.

Nous avons développé, dans le cadre de ce travail un programme basée sur la théorie LSS modifiée et permettent de calculer la perte d'énergie pour une large gamme d'ions incidents et pour différentes énergies. Les résultats obtenus pour des ions dont l'énergie varie dans la gamme 0,1 à 0,65 MeV / nucléon présente un accord statistique cohérent comparés à ceux obtenus par d'autres méthode de calcul ainsi que ceux obtenus expérimentalement.

Dans la seconde partie de ce travail, nous avons développé un nouveau programme de simulation, basé sur la méthode de Monte Carlo afin de déterminer la perte d'énergie nucléaire.

Ce programme de simulation a été conçu dans le langage **FORTRAN 99** sous Windows. Le programme simule les trajectoires de la particule incidente dans la matière, à l'aide de la procédure random. Il nous a permis d'attribuer à tout ion et dans tout milieu une énergie, une direction et de suivre l'évolution de ces paramètres lorsque l'ion traverse le milieu ralentisseur.

La particule est définie par son seul angle, la génération de la direction est effectuée d'une manière équiprobable pour un tirage aléatoire sur l'intervalle angulaire $[0, \pi]$.

Cette étude a été réalisée pour le proton et l'hélium dans les matériaux SiO_2 , LiF et Kapton et pour des énergies comprises entre 0,01 keV et 10 MeV.

Conclusion Générale

Les résultats que nous avons obtenus sont en excellent accord avec ceux obtenus par les codes SRIM et PSTAR et ASTAR.

D'autre part, la perte d'énergie nucléaire du proton incident est faible, ceci est dû au fait que la particule incidente est légère, et le paramètre d'impact est très important par rapport à l'ion hélium dans des cibles amorphes telles que SiO_2 , LiF et Kapton.

Nous avons aussi déterminé les valeurs du parcours moyen des ions lourds Au, Br, Bi et Hg pour des énergies comprise entre 10 keV et 400 keV dans la cible amorphe SiO_2 , en utilisant la simulation de Monte Carlo basée sur la théorie de transport. Nous avons obtenus des résultats encourageant.

Le code basé sur la méthode de Monte Carlo qui est développé dans le cadre de ce travail a l'avantage d'être rapide (quelques secondes de calculs sur un simple micro-ordinateur), et tient compte de l'échange entre l'ion incident et les atomes cibles. Il présente également l'avantage du choix du pas d'énergie. C'est un bon outil pour effectuer un calcul du genre.

ARTICLES



Electronic Stopping Powers of Formvar and Mylar Polymeric Materials for Heavy Ions: LSS Modified Theory and Monte Carlo Simulation

J. El Asri, O. El Bounagui, N. Tahiri, H. Erramli & A. Chetaine

To cite this article: J. El Asri, O. El Bounagui, N. Tahiri, H. Erramli & A. Chetaine (2019): Electronic Stopping Powers of Formvar and Mylar Polymeric Materials for Heavy Ions: LSS Modified Theory and Monte Carlo Simulation, Nuclear Technology, DOI: [10.1080/00295450.2019.1590071](https://doi.org/10.1080/00295450.2019.1590071)

To link to this article: <https://doi.org/10.1080/00295450.2019.1590071>



Published online: 12 Apr 2019.



Submit your article to this journal [↗](#)



View Crossmark data [↗](#)



Electronic Stopping Powers of Formvar and Mylar Polymeric Materials for Heavy Ions: LSS Modified Theory and Monte Carlo Simulation

J. El Asri,^a O. El Bounagui,^{b*} N. Tahiri,^c H. Erramli,^d and A. Chetaine^a

^aMohammed V University in Rabat, Nuclear Reactor and Nuclear Security, Faculty of Sciences, Rabat, Morocco

^bMohammed V University in Rabat, EPHE-SM, Faculty of Sciences, Rabat, Morocco

^cMohammed V University in Rabat, LaMCScl, Faculty of Sciences, Rabat, Morocco

^dCadi Ayyad University, Faculty of Sciences Semlalia, Marrakech, Morocco

Received October 24, 2018

Accepted for Publication February 28, 2019

Abstract — The stopping power of Formvar and Mylar polymeric materials for energy region (0.1 to 1.0) MeV/nucleon ¹⁹F, ²³Na, ²⁴Mg, ²⁷Al, ²⁸Si, ³¹P, ³²S, ³⁵Cl, and ⁴⁰Ar ions have been determined. The energy loss and stopping power of Mylar were calculated for ¹¹B having energies between 0.31 and 0.85 MeV/nucleon. In fact, the factor ξ_e and exponential function $f(E)$ involved in Lindhard, Scharff, and Schiott (LSS) theory has been modified in light of the available simulation electronic stopping power values. The results obtained by the LSS modified theory and Monte Carlo simulations are compared with MSTAR, the SRIM predictions code, and experimental data. The obtained results show a close agreement qualitatively with MSTAR, experimental data, and those generated by the SRIM computer code.

Keywords — Monte Carlo simulations, Lindhard, Scharff, and Schiott modified theory, electronic energy loss, heavy ions, polymers.

Note — Some figures may be in color only in the electronic version.

I. INTRODUCTION

The electronic energy loss of crossing ions in matter has been of significant interest in the past decades both from a theoretical and experimental point of view. The theoretical concepts are given by Lindhard, Scharff, and Schiott¹ (LSS theory). This theory uses the Thomas-Fermi statistical model to describe the screening function that moderates the coulomb potential and to predict electronic stopping power values proportional to the projectile velocity.^{2,3} In addition, it is used to evaluate the stopping power phenomena at low velocities of incident-charged particles. On other hand, the experimental electronic stopping power values differ appreciably from those obtained by LSS formula in the ion velocity range $v < v_0 Z_1^{2/3}$ (Refs. 4, 5, and 6). Many authors tried to modify the correction factor ξ_e involved in the theory

but only for a very limited number of ion-target combinations.^{7–12} Furthermore, the slowing down of ions in matter based on transport theory is of considerable interest in various fields of materials physics: analysis techniques, such as ion backscattering, elastic recoil detection method, and heavy ion-induced X-ray emission or the realization of new materials by high-energy implantation using both heavy ions and high energies.^{13–16} Plastic detectors are used to detect heavy ions in nuclear physics, cosmic ray, solar particle physics, and in medical applications. Over several decades, a large number of experimental and theoretical studies have been conducted on the electronic stopping power for different ions and target materials, but found that experimentally it is not possible to measure electronic stopping power for the large number of ion/target combinations.^{17–24}

In the present work, the electronic stopping powers of Formvar (C₅H₈O₂) and Mylar (C₁₀H₈O₄) for ¹¹B, ¹⁹F, ²³Na, ²⁴Mg, ²⁷Al, ²⁸Si, ³¹P, ³²S, ³⁵Cl, and ⁴⁰Ar ions in the energy region ≈ 0.1 to 1.0 MeV/nucleon have been

*E-mail: elbounagui@gmail.com

calculated by Monte Carlo simulation and LSS modified theory.

The calculated electronic stopping powers using Ziegler et al. and Ziegler (SRIM-2013) (Refs. 25 and 26), Paul and Schinner (MSTAR V3.12) (Refs. 27 and 28), and experimental results^{5,6} have been compared with those obtained using LSS theory formulation.¹ Hence, it is estimated that such additional calculations of electronic stopping power will lead to the development of better theoretical or empirical models for evaluating electronic stopping powers of heavy ions in different materials. In future work, electronic stopping power calculations using the LSS modified theory formulation and Monte Carlo simulations will be extended to other incident ion/target combinations in the ion energy domain of LSS theory.

II. THEORETICAL APPROACH

At low ion velocities, $v < v_0 Z_1^{2/3}$ (where v_0 represents Bohr velocity and Z_1 is the atomic number of projectile ion), the stopping power is well represented by the statistical parameter $\left(\frac{dE}{dx}\right)$, which is defined by the LSS formula as the probability that describes the energy lost by the incident particle through a given thickness of target material. The LSS theory predicts a linear trend with ion velocity for the electronic stopping power given as

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{LSS}} = \xi_e 8\pi e^2 a_0 N \left(\frac{Z_1 Z_2}{Z}\right) \left(\frac{v}{v_0}\right), \quad (1)$$

where

Z_1, Z_2 = atomic numbers of incident ion and target atom, respectively

ξ_e = correction factor equal to $Z_1^{1/6}$

v_0, a_0 = Bohr velocity and Bohr radius, respectively

N = atomic density

v = velocity of the projectile ion

$$Z = \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{3/2}.$$

At low velocities, the electronic stopping power calculations based on LSS theory predicted a linear trend with reduced ion velocity v_r (Ref. 3). The quoted validity of LSS theory, in terms of ion-reduced velocity ($v_r \leq 1$) is

$$v_r = \frac{v}{v_0 Z_1^{2/3}}, \quad (2)$$

where the maximum of v_r is up to 1 ($v_r \leq 1$).

The electronic stopping power given by LSS formula contains the correlation factor ξ_e , which is approximately equal to $Z_1^{1/6}$. For incident-heavy-charged particles with $Z_1 = 5$ to 18 in different polymeric materials, we have evaluated ξ_e for different ion-polymer target combinations at various ion energy. In light of these ξ_e^* values, the following fitted formula is given by

$$\xi_e^* = a(Z_1^b Z_2^c), \quad (3)$$

where $a = 0.956$, $b = -0.573$, and $c = 0.237$ are the fitting parameters.

For that, we have calculated ξ_e^* for different ion-polymeric target combinations at different ion energies.

In Eq. (1), the basic equation of LSS theory is modified by incorporating the correction factor and the effective charge $Z_{1\text{eff}}$ of moving heavy-charged particles penetrating inside matter at low-velocity regions ($v < v_0 Z_1^{2/3}$) (Refs. 29 and 30). The effective charge is given by the following formula proposed in Ref. 31:

$$Z_{1\text{eff}} = (1 - \exp(-1.25x))Z_1, \quad (4)$$

where $x = 100\beta/Z_1^{2/3}$ and $\beta = \frac{v}{c}$.

We have attempted to include a semi-empirical formula in our calculational approach, whereby we change the Z_1 by the effective charge $Z_{1\text{eff}}$ in the LSS formula.

Through this work, we have proposed the following formula in Eq. (5) to evaluate the electronics stopping power (Se) for heavy ions crossing polymeric targets at low energies:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{LSS-Modified}} = \xi_e^* 8\pi e^2 a_0 N \left(\frac{Z_{1\text{eff}} Z_2}{Z}\right) \times \left(\frac{v}{v_0}\right) f(E), \quad (5)$$

where Z_1 is replaced by $Z_{1\text{eff}}$ given in Eq. (4). The $f(E)$ is an exponential function expressed as

$$f(E) = a_1 e^{(-b_1 E)}, \quad (6)$$

where a_1 and b_1 are adjustable parameters taken as follows:

Formvar: $0.508 < a_1 < 1.181$ and $1.623 < b_1 < 3.912$

and

Mylar: $0.531 < a_1 < 1.012$ and $1.899 < b_1 < 3.598$.

However, the expression of Eq. (5) can be given as

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{LSS-Modified}} = \xi_c^* 8\pi e^2 a_0 N \left(\frac{Z_{1\text{eff}} Z_2}{Z}\right) \times \left(\frac{v}{v_0}\right) \left(a_1 e^{(-b_1 E)}\right). \quad (7)$$

The semi-empirical expression [Eq. (7)] suggested can be considered as a function of incident ion energy E and the determining empirical values for a_1 and b_1 that would fit the calculation of stopping power data.

First, we calculated the electronic stopping data; second, we extended our study by fitting different ion-target combinations which were chosen for $Z_1 = 5$ to 18 heavy ions in solid target.

III. MONTE CARLO SIMULATIONS

Each ion is characterized by the parameters, which are the identifier, the atomic number, the atomic mass, the energy, the direction, and the parameters of the three positions in the space X , Y , and Z . We can follow the evolution of these parameters using Monte Carlo simulation.^{23,24} The particle is assumed to change direction as a result of binary electronic collisions and to move in a straight path between two consecutive collisions. The energy of the particle is reduced as a result of electronic collision, and a trajectory is terminated either when the energy drops below a prespecified value or when the particle position is outside the target. The

target is considered amorphous with atoms at random locations and the directional properties applicable for a crystalline material are ignored.^{24,32} This program calculates the final three-dimensional distributions of the ions, the energy transfer, the energy loss, and the electronic stopping power. The trajectory is stopped when the ion energy is smaller than I (mean excitation energy). We performed a conventional simulation run with such a high number of ion trajectories (1 000 000) that statistical fluctuations are negligible.

For the energy loss T to an electron in solid as a function of impact parameter b , in order that such a collision leads to an energy transfer in an interval $(T, T + dT)$, the differential cross-sectional area for each transfer energy is given by

$$d\sigma(T) = \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{m_e v^2} \frac{dT}{T^2}. \quad (8)$$

The formula for electronic energy loss is given by

$$\langle T \rangle = \int_{b_{\min}}^{b_{\max}} d\sigma T(b), \quad (9)$$

where σ is the cross section of the interaction and b is the impact parameter.

Let's consider a typical interaction, where the target is described by assuming a cylinder with radius equal to the impact parameter b_{\max} and l is the average free flight path (see Fig. 1).

The polymeric target is sufficiently thin (a few microns). The program generates a homogeneous distribution of particle position (X, Y, Z) in a cylinder characterized by radius b_{\max} , which represent the bombarded volume.

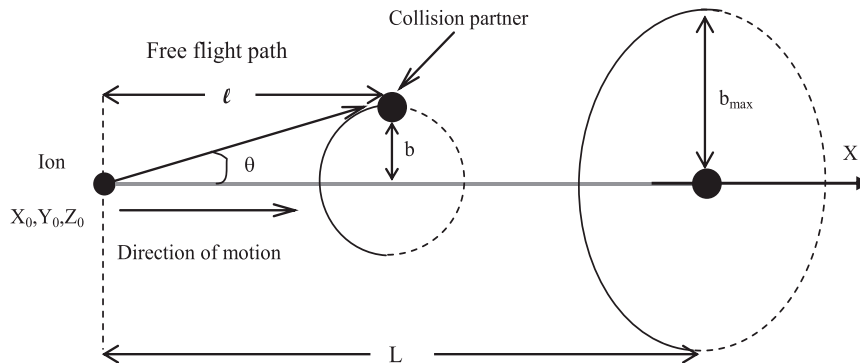


Fig. 1. Schematic collision in amorphous targets.

A triplet of numbers $\zeta_1, \zeta_2,$ and ζ_3 is generated using a random number generator based on a congruential method,³³ where ζ_i is a random number ($0 \leq \zeta_i < 1$):

$$\zeta_1 = \text{random}(t_1) ,$$

$$\zeta_2 = \text{random}(t_2) ,$$

and

$$\zeta_3 = \text{random}(t_3) . \tag{10}$$

We generate homogeny in the interval $[0, L]$ to obtain X position and a couple of the space positions $\{Y, Z\}$ in a circle of radius b_{\max} :

$$X = \zeta_1 L ,$$

$$Y = -b_{\max} + 2 b_{\max} \zeta_2 ,$$

and

$$Z = -b_{\max} + 2 b_{\max} \zeta_3 , \tag{11}$$

where $Y \in [-b_{\max}, b_{\max}]$ and $Z \in [-b_{\max}, b_{\max}]$.

The isotropic generation of the couple $\{Y, Z\}$ in the circle of radius b_{\max} is obtained by

$$Y^2 + Z^2 \leq b_{\max}^2 . \tag{12}$$

The emission angle θ is generated according to the selected angular distribution using the Von Neumann mathematical method.^{34,35} To establish the rotational invariance, an azimuthally angle φ is randomly calculated in the range $[0, 2\pi]$. The initial direction is

specified by the directional cosines using the beam trajectory as the x -axis:

$$\theta = \ar \cos(1 - 2\zeta_4) , \tag{13}$$

where ζ_4 is a random number ($0 \leq \zeta_4 < 1$).

IV. RESULTS AND DISCUSSIONS

In our study, we used Formvar and Mylar as polymeric materials that are characterized by some known parameters: the average atomic number \bar{Z} , the average atomic weight \bar{A} , and the mean excitation energy I (Ref. 36). The parameter values used for Formvar and Mylar are displayed in Table I. The constituent mean excitation energies are 19.2 eV for hydrogen, 81 eV for carbon, and 106 eV for oxygen.³⁷

In order to test the validity of the LSS theory, we illustrate in Figs. 2a and 2b the electronic stopping power of the Formvar polymeric material as a function of reduced ion velocity for different heavy ions with $Z_1 = 9$ to 18, for the LSS theory and LSS modified theory, respectively. In fact, it is found that the LSS theory predicted a linear trend with ion velocity for the electronic stopping power (see Fig. 2a). On the other hand, using the LSS modified theory, the behavior of the electronic stopping power of Formvar for heavy ions reaches a maximum value. This behavior is due to incorporating the factor ξ_e and the exponential function $f(E)$ (see Fig. 2b). The computed stopping power values based on Eq. (1) after incorporating the modified ξ_e^* factor and

TABLE I

Average Atomic Number \bar{Z} , Average Atomic Weight \bar{A} , Mean Excitation Energy I , and Concentrations of Mylar and Formvar*

Polymer Foil	Element	Concentration (at. %)	\bar{Z}	\bar{A}	I (eV)
Formvar (C ₅ H ₈ O ₂) $\rho = 1.23 \text{ g/cm}^3$	H	53.33	3.60	6.67	70.87
	C	33.33			
	O	13.33			
Mylar (C ₁₀ H ₈ O ₄) $\rho = 1.40 \text{ g/cm}^3$	H	36.36	4.55	8.73	78.70
	C	45.45			
	O	18.18			

*Concentrations in atomic percent.

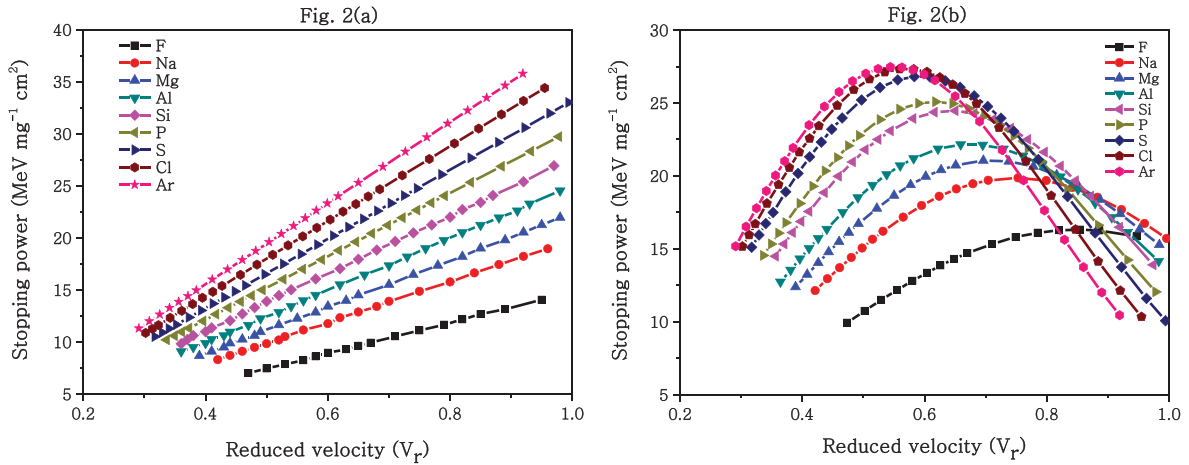


Fig. 2. Electronic stopping power as a function of reduced velocity for different heavy ions in Formvar ($C_5H_8O_2$): (a) LSS theory and (b) LSS modified theory.

exponential function $f(E)$, will be compared with the other theoretical and experimental data.

Furthermore, a comparison was made to examine the validity of the modification parameters [ξ_e and $f(E)$] in the LSS theory for a large range of the calculation data obtained by the LSS modified theory, Monte Carlo calculation, SRIM code, and some experimental results obtained in literature. We plot in Figs. 3 and 4 the electronic stopping power as a function of incident energy in the Formvar and Mylar polymeric materials for atomic number $Z_1 = 9$ to 18, respectively. In fact, the results calculated by Monte Carlo simulation and SRIM code are the same qualitatively with those obtained by the LSS modified theory (see Figs. 3a through 3i and Figs. 4a through 4i). In addition, it is shown that the calculated electronic stopping power values based on the LSS modified theory in the energy range 0.1 to 0.65 MeV/nucleon for heavy ions provide generally a close agreement qualitatively with those obtained by Monte Carlo simulation, SRIM code, and experimental data,^{5,6,29} whereas this behavior decreases rapidly for $E > 0.6$ MeV/nucleon.

It is clear from Fig. 3 that for heavy ions like ^{19}F , ^{27}Al , ^{28}Si , ^{35}Cl , and ^{40}Ar in Formvar, the LSS modified theory values are in close agreement (about 10%) with the SRIM code at the energy region ($0.1 \leq E < 0.63$), in addition, at the same energy range the heavy ions ^{23}Na , ^{24}Mg , ^{31}P , and ^{32}S in Formvar show the discrepancy (about 12%). For Fig. 4, the incident heavy ions like ^{19}F , ^{35}Cl , and ^{40}Ar in Mylar, the LSS modified theory values are in close agreement (about 10%) with the SRIM code at the energy region ($0.1 \leq E < 0.63$). However, the heavy ions ^{23}Na , ^{24}Mg , ^{27}Al , ^{28}Si , ^{31}P ,

and ^{32}S in Mylar show the discrepancy (about 13%) at the same energy region.

For all ion projectiles with $Z_1 = 9$ to 18, the present formulation shows a good agreement ($\sim 8\%$) only within the $E = 0.3$ to 0.6 MeV/nucleon. But above $E = 0.65$ MeV/nucleon, the LSS modified theory highly underestimates.

Table II presents the calculated electronic stopping power values based on the application of the SRIM code, MSTAR code, LSS modified theory, and Monte Carlo simulations at low energies. By comparison with the experimental data (column 6 in Table II) it is clearly indicated that the calculated electronic stopping power values using our calculations provide generally a good agreement with the experimental values. Also from Table II we can notice that for light ion ^{11}B Mylar, the LSS modified theory values are in a good agreement (about 5%) with the SRIM code, MSTAR code, and experimental data in the energy range 0.31 to 0.85 MeV/nucleon.

V. CONCLUSION

In the present study, we have calculated the energy loss of heavy ions ^{19}F , ^{23}Na , ^{24}Mg , ^{27}Al , ^{28}Si , ^{31}P , ^{32}S , ^{35}Cl , and ^{40}Ar transported through the polymeric materials Formvar and Mylar using several methods: SRIM, LSS modified theory, and Monte Carlo simulation. We have calculated the stopping power of polymer materials for heavy ions with $9 \leq Z \leq 18$ in energy region from 0.1 to 1.0 MeV/nucleon. In addition, we have calculated the electronic energy loss of ^{11}B in Mylar at the energy range ≈ 0.31 to 0.85 MeV/nucleon

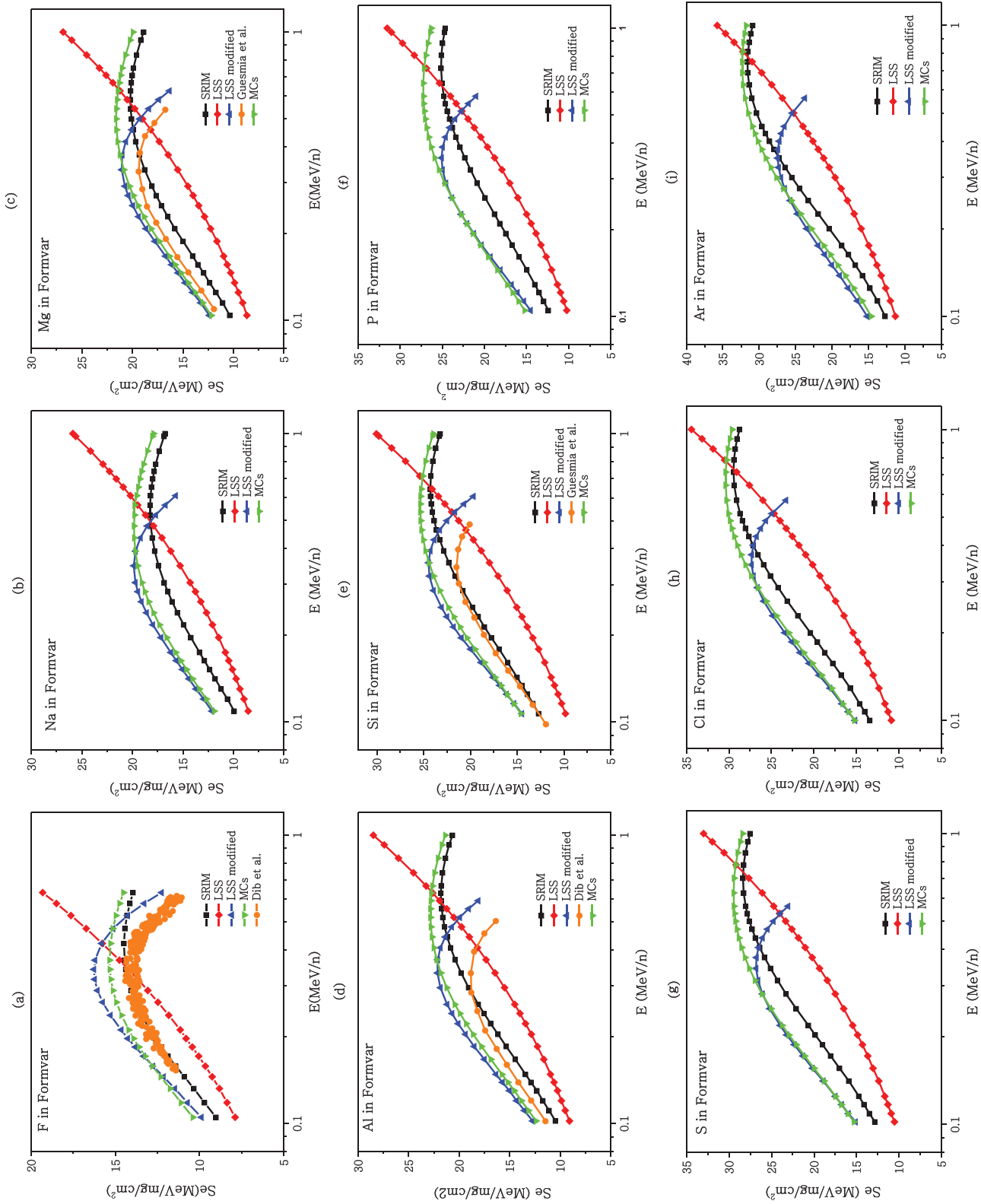


Fig. 3. Electronic stopping power of Formvar C₅H₈O₂ polymeric target for heavy ions: (a) ¹⁹F, (b) ²³Na, (c) ²⁴Mg, (d) ²⁷Al, (e) ²⁸Si, (f) ³¹P, (g) ³²S, (h) ³⁵Cl, and (i) ⁴⁰Ar.

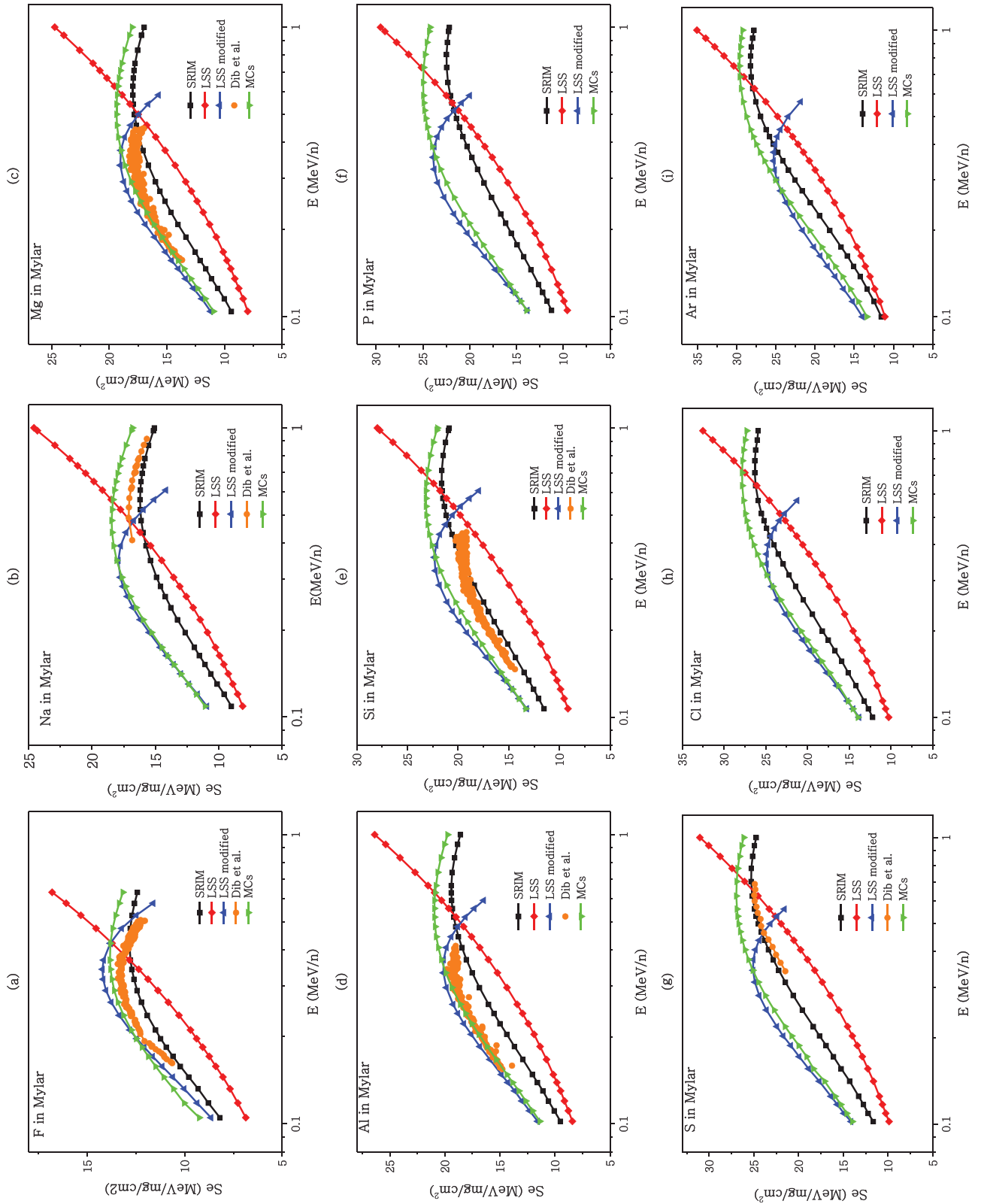


Fig. 4. Electronic stopping power of Mylar ($\text{C}_{10}\text{H}_8\text{O}_4$) polymeric target for heavy ions: (a) ^{19}F , (b) ^{23}Na , (c) ^{24}Mg , (d) ^{27}Al , (e) ^{28}Si , (f) ^{31}P , (g) ^{32}S , (h) ^{35}Cl , and (i) ^{40}Ar .

TABLE II
Electronic Stopping Power of Mylar for ^{11}B Ion

Energy (MeV/nucleon)	Stopping Power (MeV/mg/cm ²)				
	Monte Carlo	LSS Modified	SRIM Code	MSTAR Code	Raisanen and Rauhala ⁶
0.31	6.43	6.23	6.13	6.30	6.18
0.35	6.38	6.21	6.15	6.22	6.20
0.38	6.35	6.19	6.14	6.14	6.16
0.42	6.28	6.11	6.11	6.04	6.09
0.46	6.21	6.03	6.08	5.91	6.05
0.50	6.12	5.96	6.03	5.79	5.96
0.54	6.02	5.89	5.96	5.66	5.83
0.58	5.93	5.78	5.90	5.54	5.78
0.62	5.84	5.53	5.83	5.44	5.67
0.66	5.75	5.34	5.75	5.34	5.56
0.70	5.65	5.16	5.66	5.23	5.45
0.78	5.50	4.66	5.50	5.06	5.25
0.85	5.31	4.26	5.34	4.90	5.10

and compared it with MSTAR data. A comparison with Monte Carlo simulations, SRIM, and experimental data clearly indicates that the calculated electronic stopping power values using our formulation provides generally a close agreement qualitatively with the LSS modified theory values within the acceptable limits for all the projectile ions considered in the present work for Formvar and Mylar polymeric materials at low energy ~ 0.65 MeV/nucleon.

ORCID

O. El Bounagui  <http://orcid.org/0000-0002-4720-8437>

References

- J. LINDHARD, M. SCHARFF, and H. E. SCHIOTT, "Range Concepts and Heavy Ion Ranges," *Mat. Fys. Medd. Dans. Viden. Selskab.*, **33**, 1 (1963).
- E. B. BAKER, "The Application of the Fermi-Thomas Statistical Model to the Calculation of Potential Distribution in Positive Ions," *Phys. Rev.*, **36**, 630 (1930); <https://doi.org/10.1103/PhysRev.36.630>.
- L. H. THOMAS, "The Calculation of Atomic Fields," *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, **26**, 542 (1927); <https://doi.org/10.1017/S0305004100011683>.
- P. NEETU et al., "Electronic Stopping Power of Polymers for Heavy Ions in the Ion Energy Domain of LSS Theory," *Radia. Meas.*, **44**, 363 (2009); <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2009.03.031>.
- A. DIB et al., "Electronic Stopping Power Data of Heavy Ions in Polymeric Foils in the Ion Energy Domain of LSS Theory," *Nucl. Instr. Meth. Res. B*, **362**, 171 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2015.09.083>.
- J. RAISANEN and E. RAUHALA, "Stopping Powers and Energy Loss of Mylar, Kapton, Havar, and Ni for $Z = 3-17$ Ions in the Energy Range 0.2–2.1 MeV/amu," *Phys. Rev.*, **41**, 3951 (1990); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.3951>.
- P. BANERJEE, B. SETHI, and J. M. CHATTERJEE, "A Semiempirical Method Based on the LSS Formalism for Estimating Electronic Energy Loss," *Nucl. Instr. Meth.*, **B14**, 527 (1986); [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(86\)90149-7](https://doi.org/10.1016/0168-583X(86)90149-7).
- N. K. ARAS, M. P. MENON, and G. E. GORDON, "Ranges of Fragments from Fission of U^{235} with Thermal Neutrons and the Kinetic Energy Deficit," *Nucl. Phys.*, **69**, 337 (1965); [https://doi.org/10.1016/0029-5582\(65\)90055-6](https://doi.org/10.1016/0029-5582(65)90055-6).
- S. HONTZEAS and H. BLOK, "Ranges in Tungsten of ^{99}Mo and ^{132}Te Fragments from the Thermal Neutron Fission of ^{235}U ," *Phys. Scr.*, **4**, 229 (1971); <https://doi.org/10.1088/0031-8949/4/6/001>.
- Y. LAICHTER and N. H. SHAFRIR, "Range Determination of Individual ^{252}Cf Fission Fragments in Solids and Gases," *Nucl. Phys. A*, **371**, 45 (1981); [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(81\)90744-2](https://doi.org/10.1016/0375-9474(81)90744-2).
- A. IZMEN, O. BIRGUL, and N. K. ARAS, "Ranges of ^{99}Mo and ^{140}Ba in Several Stopping Media from the Spontaneous Fission of ^{252}Cf ," *J. Inorg. Nucl. Chem.*, **36**, 25 (1974); [https://doi.org/10.1016/0022-1902\(74\)80651-2](https://doi.org/10.1016/0022-1902(74)80651-2).

12. N. BOHR, "The Penetration of Atomic Particles Through Matter," *Pk. Danske. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, **18**, 1 (1948); [https://doi.org/10.1016/S1876-0503\(08\)70172-5](https://doi.org/10.1016/S1876-0503(08)70172-5).
13. U. FANO, "Penetration of Protons, Alpha Particles, and Mesons," *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, **13**, 1 (1963); <https://doi.org/10.1146/annurev.ns.13.120163.000245>.
14. A. MANGIAROTTI et al., "A Survey of Energy Loss Calculations for Heavy Ions Between 1 and 100 keV," *Nucl. Instr. Meth. A*, **580**, 114 (2007); <https://doi.org/10.1016/j.nima.2007.05.048>.
15. L. C. NORTHCLIFFE and R. F. SCHILLING, "Range and Stopping-Power Tables for Heavy Ions," *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, **13**, 67 (1963); [https://doi.org/10.1016/S0092-640X\(70\)80016-X](https://doi.org/10.1016/S0092-640X(70)80016-X).
16. P. SIGMUND, "Energy Loss of Charged Particle in Solids," *Appl. Sci.*, **8**, 1 (1975).
17. J. CHANG et al., "A Simple Method to Calculate the Displacement Damage Cross Section of Silicon Carbide," *Nucl. Eng. Technol.*, **46**, 475 (2014); <https://doi.org/10.5516/NET.01.2013.051>.
18. J. F. ZIEGLER, "Stopping of Energetic Light Ions in Elemental Matter," *J. Appl. Phys.*, **85**, 1249 (1999); <https://doi.org/10.1063/1.369844>.
19. H. ERRAMLI and O. EL BOUNAGUI, "Charged Particle Activation Analysis: Applications, Encyclopedia of Analytical Chemistry," *Encyclopedia of Analytical Chemistry: Applications, Theory and Instrumentation*, pp. 1–24, Wiley Online Library, United Kingdom (2017); <https://doi.org/10.1002/9780470027318.a6203.pub3>.
20. P. SIGMUND and A. SCHINNER, "Progress in Understanding Heavy-Ion Stopping," *Nucl. Instr. Meth. Res. B*, **382**, 15 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2015.12.041>.
21. C. C. MONTANARI and P. DIMITRIOU, "The IAEA Stopping Power Database, Following the Trends in Stopping Power of Ions in Matter," *Nucl. Instr. Meth. Res. B*, **408**, 50 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2017.03.138>.
22. H. GEISSEL et al., "Experimental Studies of Heavy-Ion Slowing Down in Matter," *Nucl. Instr. Meth. Res.*, **B195**, 3 (2002); [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(02\)01311-3](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(02)01311-3).
23. H. ERRAMLI et al., "A Monte Carlo Computer Code for Evaluating Energy Loss of 10 keV to 10 MeV Ions in Amorphous Silicon Materials," *Nucl. Instr. Meth. Res. B*, **263**, 127 (2007); <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2007.04.072>.
24. O. EL BOUNAGUI and H. ERRAMLI, "Monte Carlo Calculation of Energy Loss of Hydrogen and Helium Ions Transmitted Under Channelling Conditions in Silicon Single Crystal," *Nucl. Instr. Meth. Res. B*, **268**, 1361 (2010); <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.01.010>.
25. J. F. ZIEGLER, J. P. BIRSACK, and U. LITTMARK, *The Stopping and Ranges of Ions in Solids*, Vol. 1, p. 321, Pergamon, New York (1985).
26. J. F. ZIEGLER, "SRIM-2013"; <http://www.srim.org> (current as of Oct. 24, 2018).
27. H. PAUL and A. SCHINNER, "An Empirical Approach to the Stopping Power of Solids and Gases for Ions from ${}^3\text{Li}$ to ${}^{18}\text{Ar}$," *Nucl. Instr. And Meth. B*, **179**, 299 (2001); [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(01\)00576-6](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(01)00576-6).
28. H. PAUL and A. SCHINNER, "An Empirical Approach to the Stopping Power of Solids and Gases for Ions from ${}^3\text{Li}$ to ${}^{18}\text{Ar}$ Part II," *Nucl. Instr. And Meth. B*, **195**, 166 (2002); [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(02\)01027-3](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(02)01027-3).
29. A. GUESMIA et al., "Semi Empirical Formula for Electronic Stopping Power Determination of ${}^{24}\text{Mg}$, ${}^{27}\text{Al}$ and ${}^{28}\text{Si}$ Ions Crossing Formvar Foil in the Ion Energy Domain of LSS Theory," *Rad. Phys. Chem.*, **96**, 205 (2014); <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2013.10.003>.
30. C. NORTHCLIFFE and R. F. SCHILLING, "Range and Stopping-Power Tables for Heavy Ions," *Nucl. Data Tables A*, **7**, 233 (1970); [https://doi.org/10.1016/S0092-640X\(70\)80016-X](https://doi.org/10.1016/S0092-640X(70)80016-X).
31. W. H. BARKAS, *Nuclear Research Emulsions*, Vol. 1, p. 518, Academic Press, New York and London (1963).
32. O. EL BOUNAGUI and H. ERRAMLI, "Channeling Energy Loss in Silicon by Using Numerical and Experimental Methods," *Mod. Phys. Lett. B*, **25**, 2171 (2011); <https://doi.org/10.1142/S0217984911027418>.
33. D. E. KNUTH, *The Art of Computer Programming. Vol. 1, Fundamental Algorithms*, p. 634, Addison-Wesley (1969).
34. J. von NEUMANN, "Various Techniques Used in Connection with Random Digits," *J. Res. Nat. Bur. Stand. Appl. Math. Series*, **12**, 36 (1951).
35. J. P. NOUGIER, *Méthode de calculs numérique*, p. 325, 3rd ed., Elsevier Masson, Paris (1991).
36. W. H. BRAGG and R. KLEEMAN, "On the α Particles of Radium, and Their Loss of Range in Passing Through Various Atoms and Molecules," *Philos. Mag.*, **10**, 318 (1905); <https://doi.org/10.1080/14786440509463378>.
37. "Stopping Power and Ranges for Protons and Alpha Particles," INIS Vol. 26, Report ICRU-49, International Commission on Radiation Units and Measurements (1993).

Nuclear Energy Loss and Range of Heavy Ions in SiO₂, LiF and Kapton Polyatomic Targets: A Monte Carlo study

J. El Asri¹, O. El Bounagui^{2,*}, N. Tahiri³, H. Erramli⁴ and A. Chetaine¹

¹Nuclear Reactor, Nuclear Security and Environment Group Energy Centre. Faculty of Sciences, Mohammed V University in Rabat, Morocco.

²EPHE-SM, Faculty of Sciences, Mohammed V University in Rabat, Morocco.

³LaMCScl, Faculty of Sciences, Mohammed V University in Rabat, Morocco.

⁴Faculty of Sciences Semlalia, University Cadi Ayyad, Marrakech, Morocco.

Abstract

This paper is dedicated to study the nuclear energy loss in amorphous targets SiO₂, LiF and Kapton for different charged incident particles at energy $E > 0.01$ keV, by using Monte Carlo simulations. The nuclear stopping power and mean range are investigated. However, the nuclear stopping power and its maximum increases with increasing the atomic number of charged particles. All results are compared with existing SRIM data, PSTAR and ASTAR values. Finally, using the Monte-Carlo simulation, a determination was also made of mean range of ions in amorphous targets at energies from 10 to 400 keV. Our results were compared with experimental data.

Keywords: Nuclear energy loss; Amorphous targets; Monte Carlo simulations; Charged particles; Mean range of ions.

1. INTRODUCTION

The energy loss of ions in amorphous targets has mainly been investigated mainly in the low, intermediate and high ion energy [1-5]. The binary collision approximation has long been used in slowing down simulations of the interactions of charged particles with target materials, as well as being the basis of large analytical theory in this area [6-8]. There is a long-standing of interest in stopping powers for heavy charged particles in matter, because such information is needed in many areas of basic and applied physics such as: Radiological physics and biomedical dosimetry [9]. Today proton and helium penetration of matter are already well known experimentally and are inventoried in the SRIM data and PSTAR/ASTAR programs [10,11]. The Monte Carlo simulation has many numbers of advantages over present analytical formulation based on transport theory. It allows more rigorous treatment of elastic scattering, explicit consideration of energy of surfaces and interfaces. By using this method it's easy determination of energy and angular distributions [12].

The Monte Carlo simulation thus takes into account a wide range of possibilities and helps us reduce uncertainty. This calculation method is very flexible; it allows us to vary risk

assumptions under all parameters and thus model a range of possible outcomes.

2. NUCLEAR STOPPING POWER

The interactions of an ion with the matter gather a whole of the following process which an incident particle yields its energy to target. The kinetic energy communicated to these materials produces modifications of the target atom. It is thus the transferred energy which is responsible for the defects created. The transfers of the energy are divided on two parts: (i) the inelastic collisions constitute the principal mode of energy loss; it acted of exchange of loads between the projectile and target atoms, of an ionization of the target atoms or excitation of the electrons [13-16] and (ii) the elastic collisions result primarily by displacements of the target atoms and thus in crystalline defects in the structure [7]. The stopping power of heavy charged particles at low energy using the semi-thick target method is described in detail in the literature [17].

The nuclear energy losses may be associated with significant angular deflection dependent on ion and target mass whereas electronic processes exert a rather minor influence on the scattering angle. This mode of energy loss occurs mainly at low energy (figure 1). There are very few experimental results quantifying these energy losses; loss of nuclear energy is therefore often evaluated theoretically. The Coulombian diffusion cross section of the charged particles by the nuclei of the medium is calculated, as well as the energy transfer during this process.

The energy loss of particles in matter is of considerable interest in several different branches of physics. Ion implantation is a widely used technique in for instance semiconductor fabrication and different branches of materials science.

At very high energies (larger than several hundred MeV), the slowing down of all charged particles is contributed to by bremsstrahlung, Cherenkov radiation and nuclear reactions.

At lower energies, the slowing down of ions is traditionally separated into two distinct processes: electronic and nuclear

* Corresponding Author : elbounagui@gmail.com

slowing down or stopping power. The sum of these two processes is called the total stopping power

$$S(E) = S_e(E) + S_n(E) \quad (1)$$

With nuclear stopping one means elastic collisions between the ion and atoms in the sample. If one knows the form of the repulsive potential $V(r)$ between two atoms, it is possible to calculate the nuclear stopping power $S_n(E)$. Nowadays, the repulsive potential between two atoms can be obtained to great accuracy from quantum mechanical calculations.

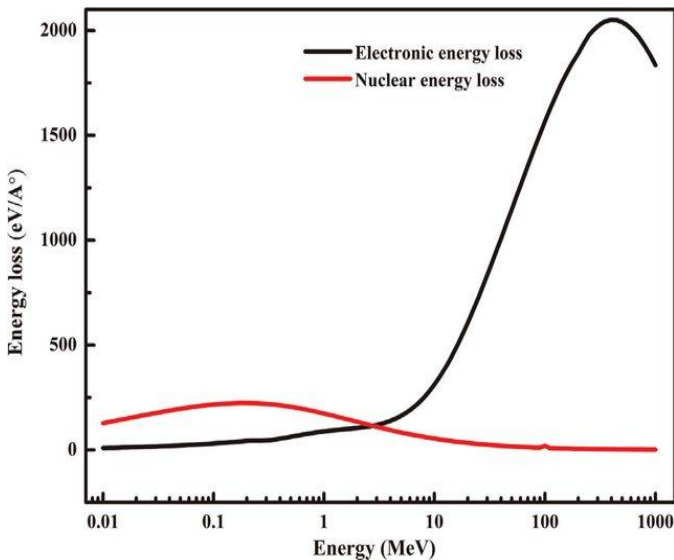


Figure 1: Ratio between nuclear and electronic stopping power [18]

The interaction treatment requires taking into account the effective charge of the incident ion and an appropriate form of potential taking into account the shielding effect due to the electrons of the nucleus. The potential is described in the following form:

$$V(r) = \frac{zZe^2}{r} \phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (2)$$

Where the first factor corresponds to the coulombian potential with a charge ze for the projectile and Ze for the nucleus making up the medium being traversed. The ϕ factor represents the screen term and a , the screening length due to electrons. Common expressions of the screen parameter are:

$$a = \frac{0,8853a_0}{(z^{2/3} + Z^{2/3})^{1/2}}$$

or :

$$a = \frac{0,8853a_0}{(z^{1/2} + Z^{1/2})^{3/2}}$$

with a_0 the Bohr radius ($a_0 = 0.528\text{\AA}$). These formulae take into account the interpenetration electronic clouds of the incident

particle and nucleus. A high energy, the calculation of energy loss by nuclear collision neglects the screen effect due to electrons [12, 19].

The energy transfer T to the target atom in a single collision is given by

$$T = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2} E \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \gamma E \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (3)$$

Where M_1 and M_2 are the atomic masses of the particle and the target respectively, E is the incident energy.

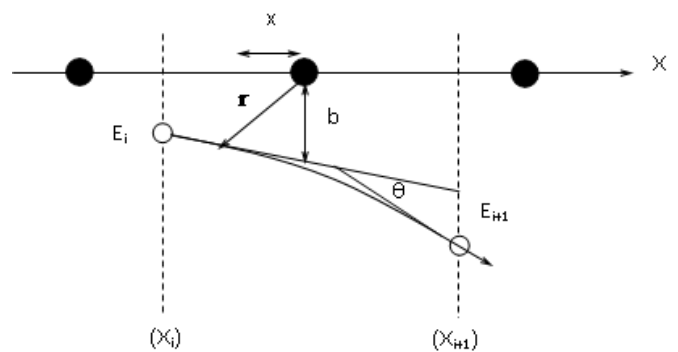


Figure 2: Schematic collision between ions and target

The nuclear stopping power is related to the kinetic-energy transfer from the incoming ion to the target atoms [21]. Then the mean energy-loss per unit path due to elastic collisions is:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_n = N \int_0^\infty T(b) d\sigma = NS_n(E) \quad (4)$$

Where N is the atomic density of the target, S_n is the nuclear stopping cross-section, b is the impact parameter and σ is the scattering cross section.

For heavy ions, the nuclear stopping power is predominant and the mean range can be simply obtained by the integration of the nuclear stopping power as:

$$R(E) = \int_0^E \frac{dE'}{NS_n(E')} \quad (5)$$

2.1. Calculation method

Each incident ion is characterized by its atomic number, its atomic mass, its energy, its direction, and its space position. Using Monte-Carlo simulation, we can thus follow the evolution of these parameters. The particle is assumed to change direction as a result of binary collisions and to move in a straight path between two consecutive collisions. The energy of the particle is reduced as a result of elastic collision. The target is considered amorphous with atoms at random locations

and the directional properties applicable for a crystalline material are ignored [7].

The calculation of the nuclear energy loss has been performed by considering elastic collisions:

$$\langle T \rangle = \int T(b)d\sigma \quad (6)$$

The collision impact parameter b is determined by random numbers which are evenly distributed between 0 and 1, and then the scattering angle θ in the center of mass system is calculated from the formalism for nuclear scattering based on the Moliere potential [20]

To determine the distance dl between collisions, equations (7) is used:

$$dl = -\frac{1}{N\sigma} \ln(\xi) \quad (7)$$

ξ is the random number uniformly distributed between 0 and 1.

The mean range R is obtained by using this expression:

$$R = \int \langle \cos\theta \rangle dl \quad (8)$$

Each path length element dl of the ion incident trajectory is projected on the x axis by multiplying with the corresponding directional cosine.

The emission angle θ is generated according to the selected angular distribution using the Von Neumann mathematical method [22, 23]. The initial direction is specified by the directional cosines using the beam trajectory as the x -axis:

$$\theta = \cos^{-1}(1 - 2\xi') \quad (9)$$

where ξ' is a random number.

The azimuthal scattering angle ϕ is randomly sampled in the range $[0, 2\pi]$, selected using the relation:

$$\phi = 2\pi\xi'' \quad (10)$$

ξ'' is a random number uniformly distributed between 0 and 1;

The maximum energy transfer, T_{max} , is given by :

$$T_{max} = \gamma E$$

And the minimum energy transfer T_{min} is :

$$T_{min} = \gamma E \sin^2\left(\frac{\theta_{min}}{2}\right)$$

where θ_{min} is the minimum scattering angle (in this program, usually θ_{min} in the laboratory system is 1 degree).

The calculations are treated by the application of computer

simulation technique. The random number is given by using a subroutine to generate the number ξ . The program simulates the trajectories of the incidental particle in the matter, with the assistance of the random procedure. Knowing the energy, initial direction and to follow the evolution of these parameters when the ion crosses the matter by using the Monte Carlo simulation. The particle defined by its only angle, the generation of the direction carried out by an equiprobable pulling on the angular interval $[0, \pi]$.

2.2. Choice of Materials

We have used, for this theoretical calculations of nuclear stopping powers, different amorphous targets such SiO₂, LiF and Kapton. The average atomic number and the average atomic weight based on current values of constituent of amorphous targets are presented in table 1.

Table 1. Average atomic number (\bar{Z}) and average atomic weight (\bar{A}) of Silicon dioxide, Lithium fluoride and Kapton polyimide film

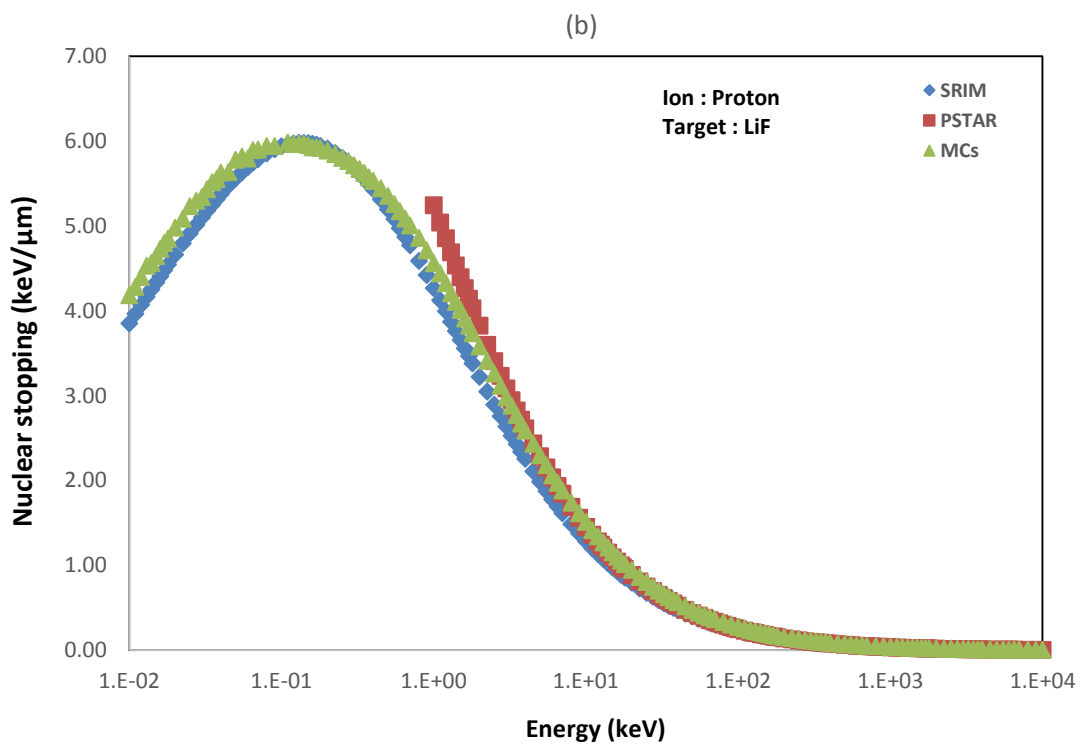
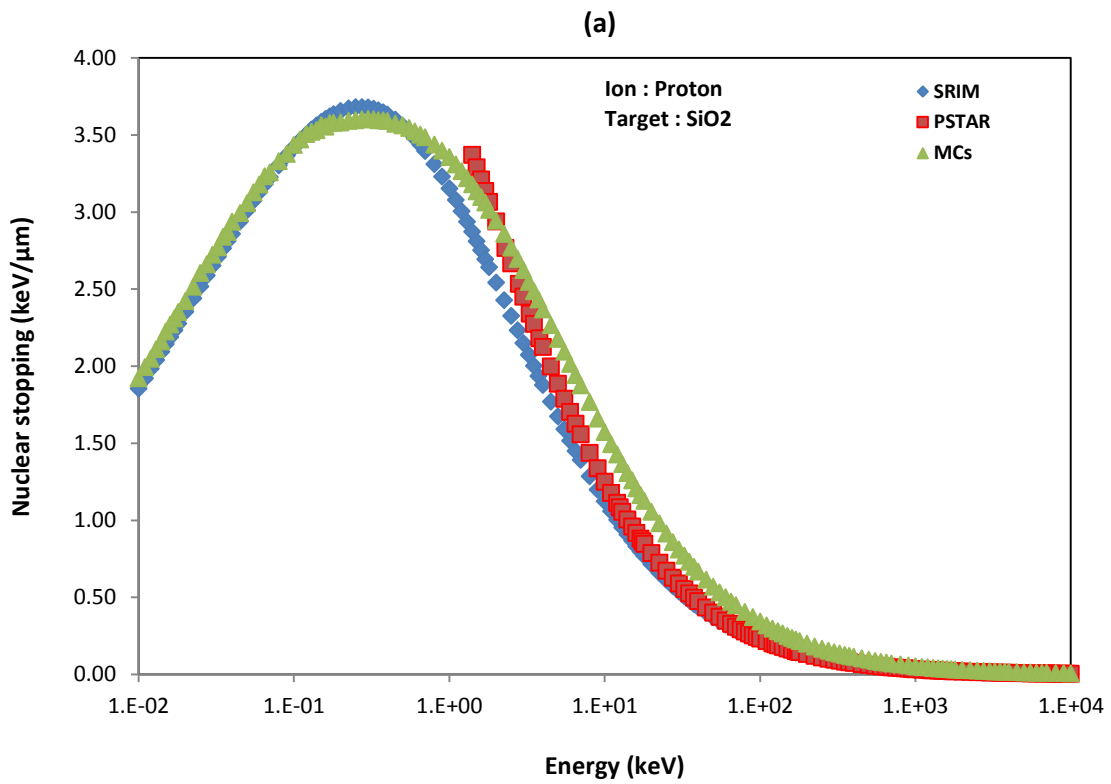
Target	\bar{Z}	\bar{A}
Silicon dioxide (SiO ₂) $\rho = 2.210 \text{ g/cm}^3$	9.99	19.99
Lithium fluoride (LiF) $\rho = 2.635 \text{ g/cm}^3$	4.55	8.73
Kapton polyimide film (C ₂₂ H ₁₀ O ₅ N ₂) $\rho = 1.420 \text{ g/cm}^3$	5.03	9.80

3. RESULTS AND DISCUSSIONS

The results of the calculation using the Monte Carlo simulation are shown in figures 3 and 4. These figures show the variation of the nuclear energy loss as a function of the incident particle energy. This study was carried out for proton and helium in SiO₂, LiF and Kapton at energies from 0.01 keV to 10 MeV.

Our results were found to be in excellent agreement with those obtained by SRIM code [24] and PSTAR/ASTAR [25, 26]. On the other hand, the nuclear energy loss of incident proton is low, this is due to the fact that the incident particle is light, and the impact parameter is very important, compared with helium ion in SiO₂, LiF and Kapton amorphous targets.

A common feature for all ions is that the nuclear stopping as a function of ion energy has a maximum at a relatively low energy, and that the nuclear stopping of the ion decreases as the energy of the ion increases. This means that the nuclear stopping is important only for low ion velocities.



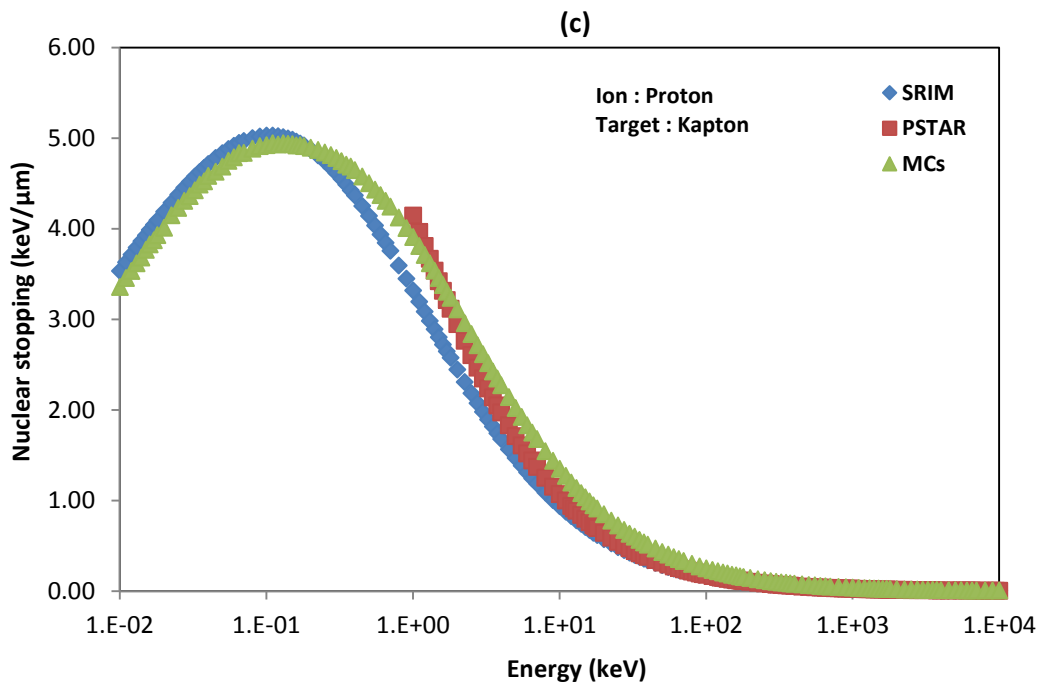
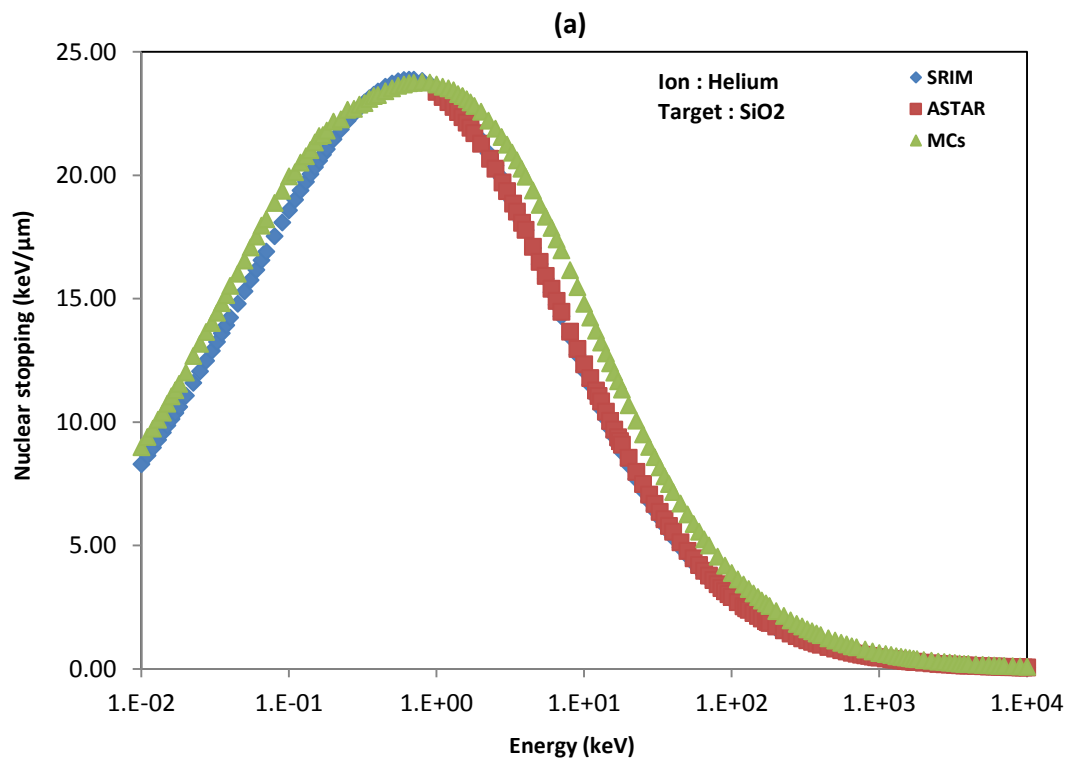


Figure 3. Nuclear stopping power behaviour in the energy range of interest for protons particles in SiO_2 (a), LiF (b) and Kapton (c)



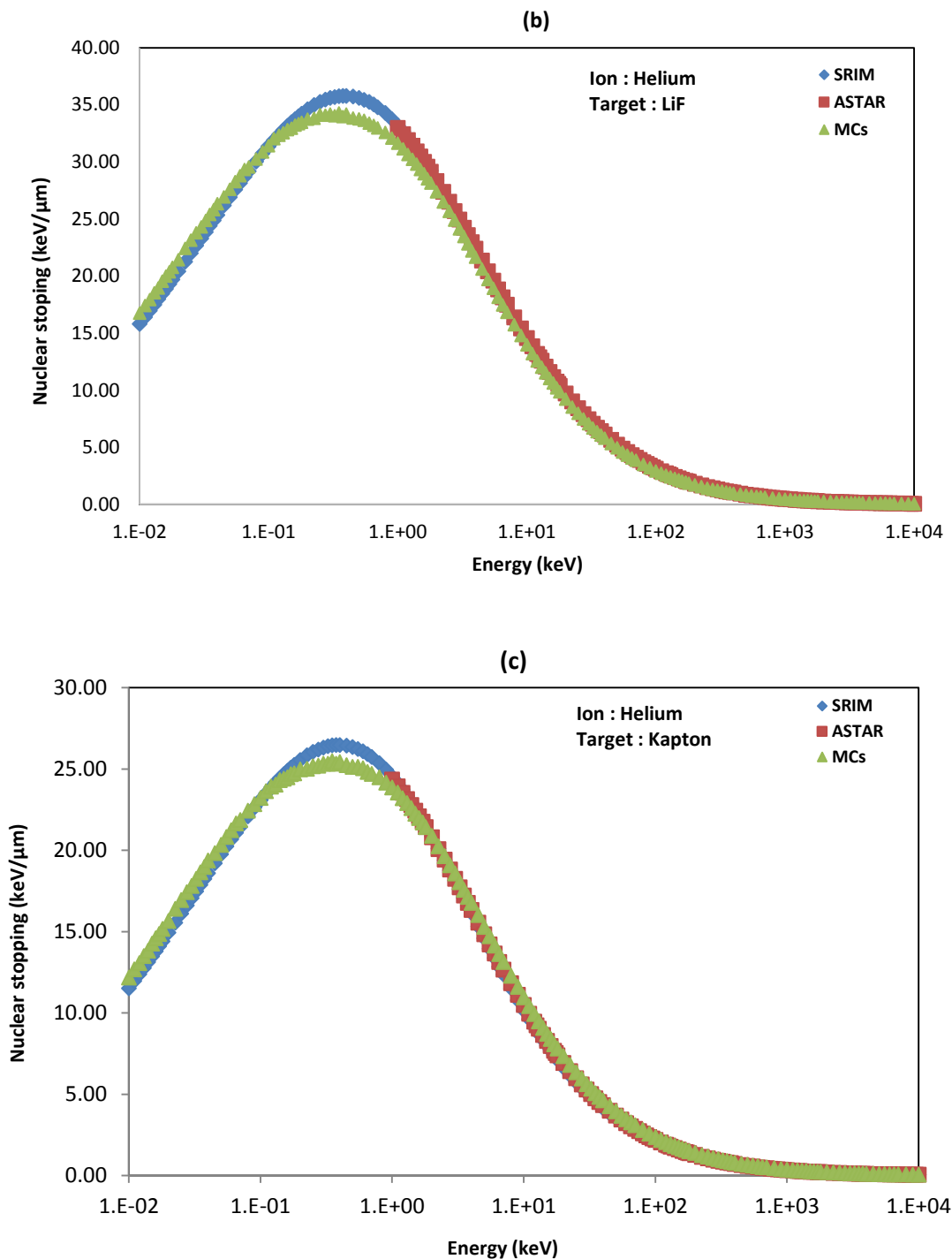


Figure 4. Nuclear stopping power behaviour in the energy range of interest for helium particles in SiO₂ (a), LiF (b) and Kapton (c)

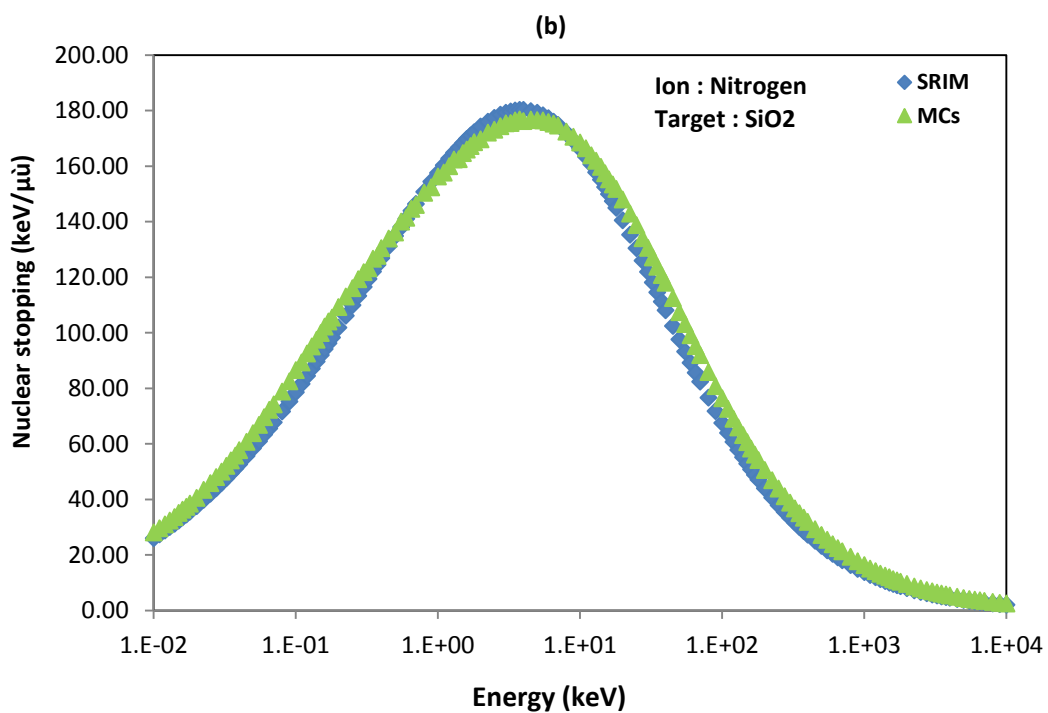
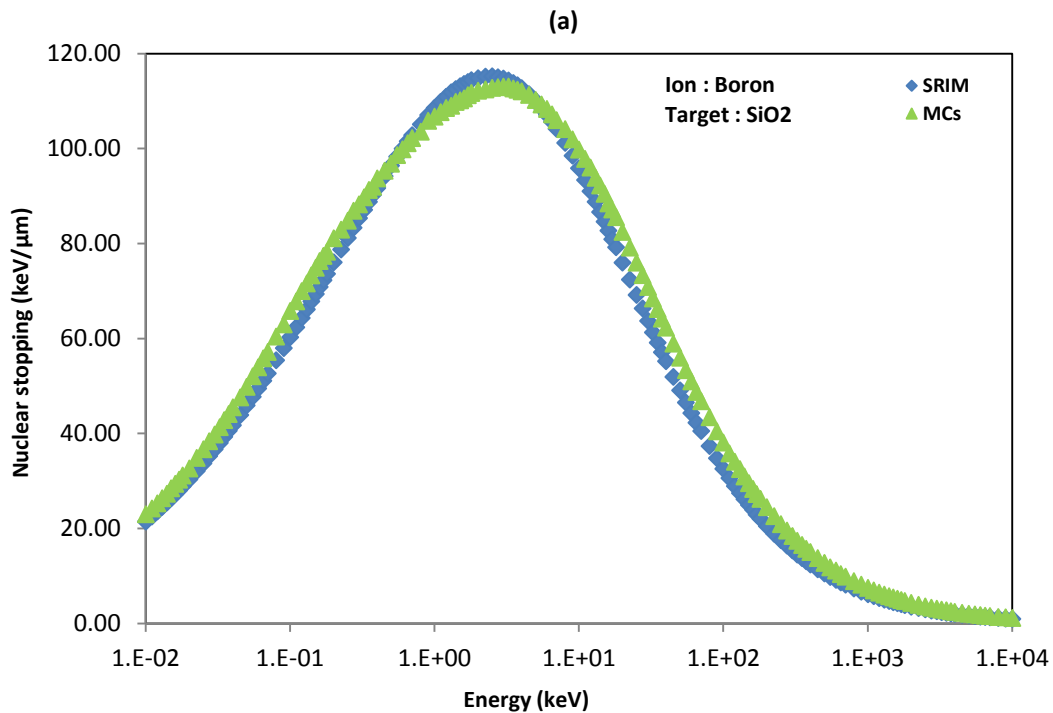
Figures. 5, 6 and 7 shows the behaviour of nuclear energy loss versus of kinetic energy for ¹¹B, ¹⁴N and ⁵⁸Ni in SiO₂, LiF and Kapton. All curves of the nuclear stopping increase when increasing the incident energy until a maximum, and then decreases as the energy of the ion increases. The curve of nuclear energy loss has a maximum at 113.36 keV/μm for ¹¹B, 177.1 keV/μm for ¹⁴N and 1087.7 keV/μm for ⁵⁸Ni in target

SiO₂, see figures. 5(a), (b) and (c), respectively. In addition, the figures. 6(a), (b) and (c), shows the maximum of nuclear energy loss in target LiF at 150.5 keV/μm, 236.2 keV/μm and 1303.2 keV/μm for ¹¹B, ¹⁴N and ⁵⁸Ni, respectively. For target kapton, the curve of nuclear energy loss has a maximum at 105.8 keV/μm for ¹¹B, 158.1 keV/μm for ¹⁴N and 828.2 keV/μm for ⁵⁸Ni, see figures. 7(a), (b) and (c), respectively.

However, it is shown that when increasing the atomic number of each incident particle, the nuclear energy loss increases, whereas, this nuclear stopping increase with increasing the incident energy in different amorphous targets until maximum values. These results showed that the contribution, of atomic number of incident heavy ions is important on a nuclear energy loss. This is probably due to the fact that when the number of incident particles is increased, the number of interactions

increases, which leads to an increase in the energy lost.

Indeed, the majority of low-energy incident particle deposit their energy in a short distance inside of the target materials. On the other hand, the results obtained by our method of calculation are in good agreement, compared with those obtained by using SRIM code theoretical predictions [24].



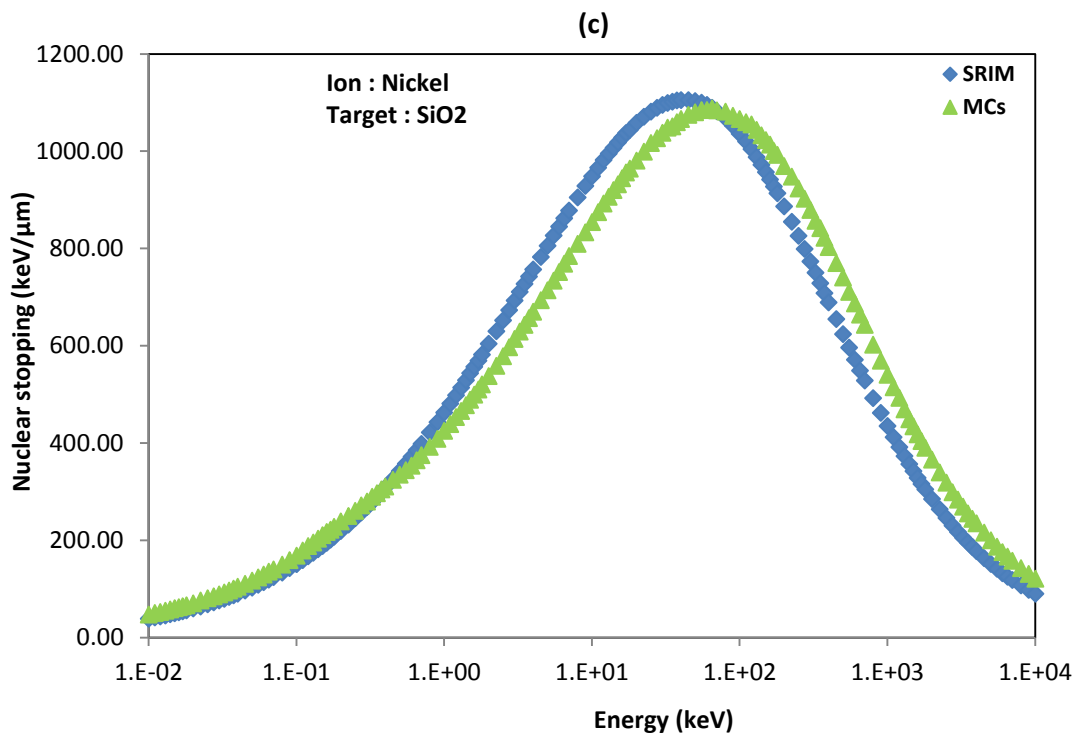
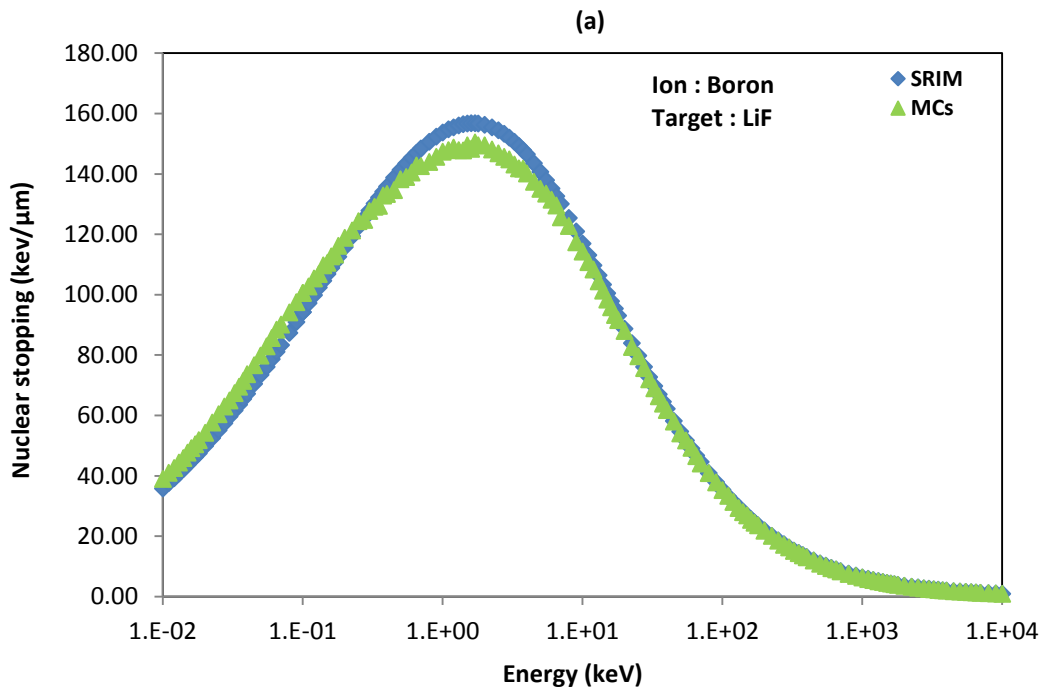


Figure 5 : Nuclear stopping power behaviour in the energy range of interest for ¹¹B (a), ¹⁴N (b) and ⁵⁸Ni (c) particles in SiO₂



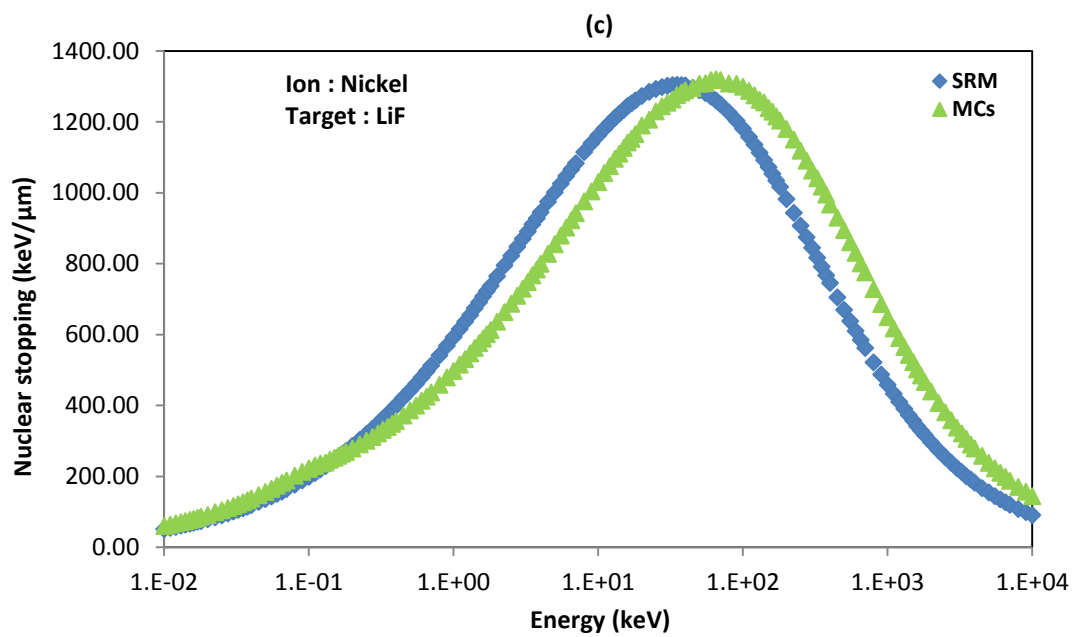
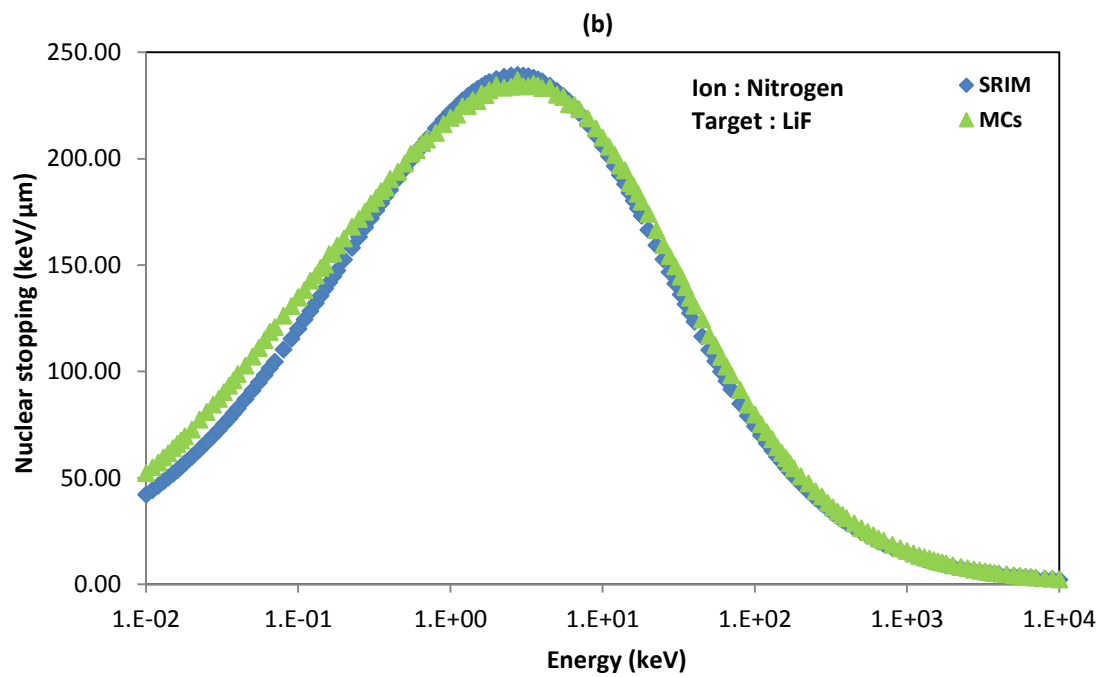
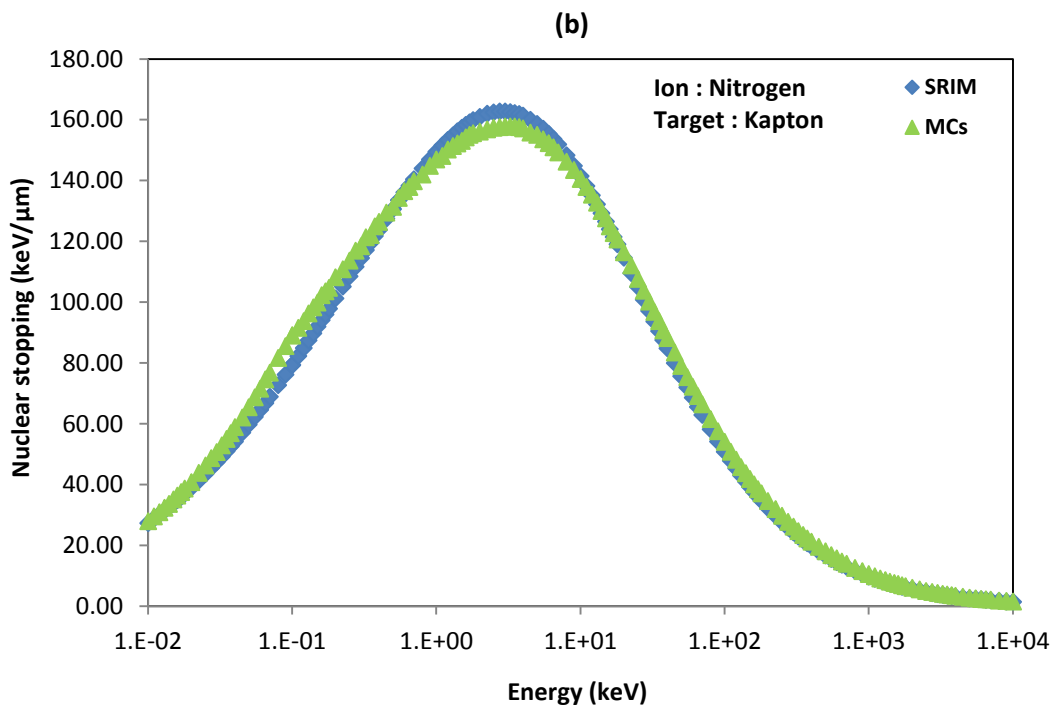
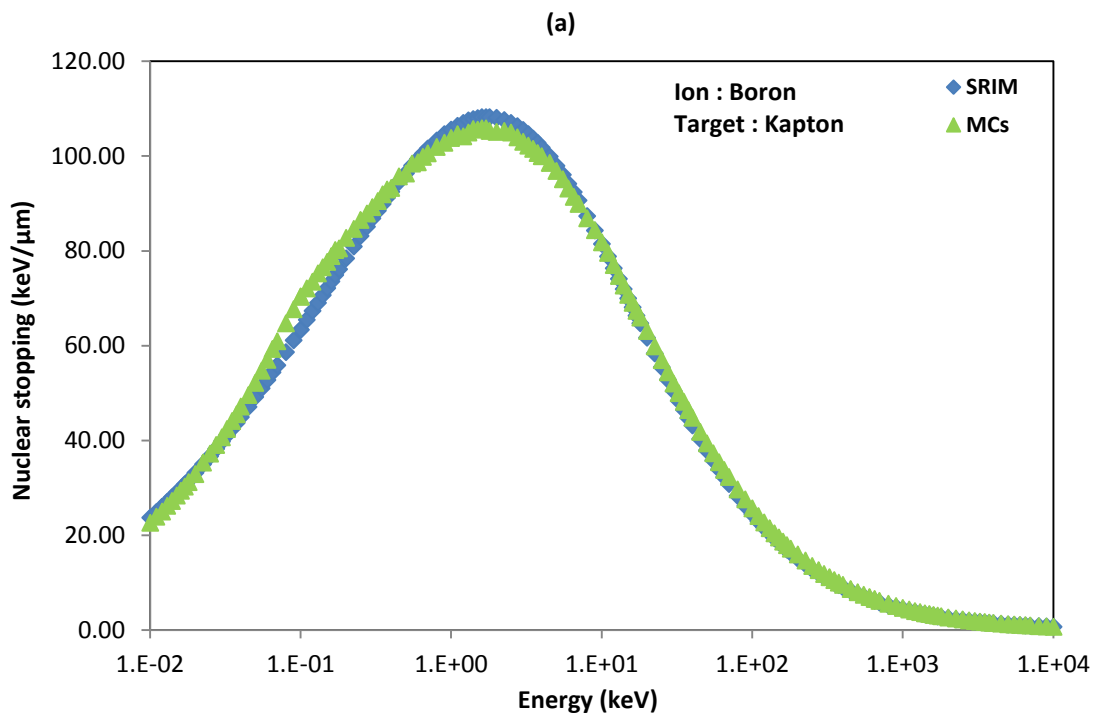


Figure 6 : Nuclear stopping power behaviour in the energy range of interest for ^{11}B (a), ^{14}N (b) and ^{58}Ni (c) particles in LiF



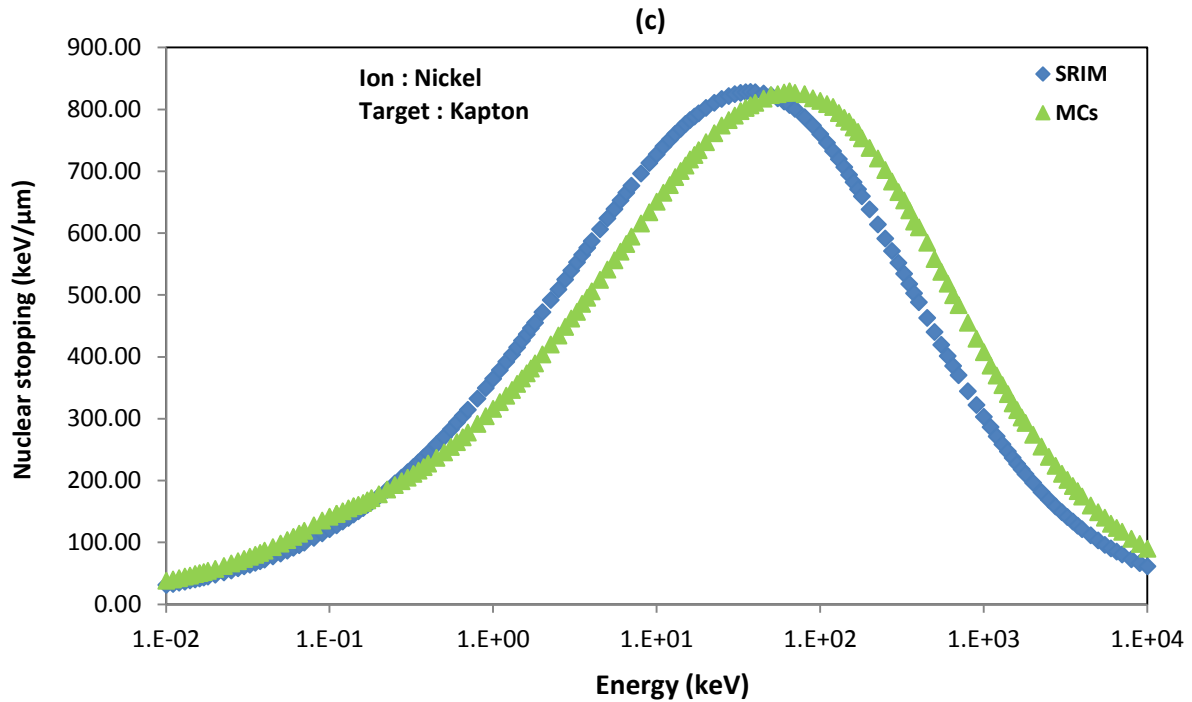


Figure 7 : Nuclear stopping power behaviour in the energy range of interest for ¹¹B (a), ¹⁴N (b) and ⁵⁸Ni (c) particles in Kapton

Using the Monte Carlo method, the mean range was also determined for Au, Bi, Br and Hg heavy ions in SiO₂ amorphous targets in the energy interval from 10 to 400 keV.

Table 2. Comparison of experimental and calculated range for ions Au and Bi in SiO₂.

Energy (keV)	Range (Å)							
	Au				Bi			
	Exp. [27]	SRIM	Other calc. [28]	Present work	Exp. [27]	SRIM	Other calc. [28]	Present work
10	---	116		120	94	118	135	112
15	135	143	162	141	112	144	166	123
20	142	166	187	152	140	167	191	155
30	200	207	234	205	185	207	238	192
50	315	278	313	317	260	277	316	271
70	365	341	382	374	345	339	386	351
100	469	428	481	473	395	425	483	403
150	---	562	---	581	---	555	---	578
200	700	688	773	708	655	677	770	667
250	---	810	---	837		794	---	826
300	---	928	---	958		908	---	931
350	---	1044	---	1081		1020	---	1038
400	1230	1159	1310	1243	1150	1129	1290	1163

In addition, we are calculated the values of mean range of some heavy ions such as Au, Bi, Br and Hg in SiO₂. To validate our results, the obtained values by our calculations program and those obtained experimentally and theoretically by other authors [27-30] are presented in table 2 and 3. Comparison with the previously works is performed and the result are found to be in close agreement.

In the light of these results, we notice that the mean range of ions, in amorphous targets increases with the increasing the kinetic energy, whereas, at fixed kinetic energy value the mean range decreases with the increasing of atomic number. Our results, obtained by Monte Carlo simulations, were found to be in close agreement with experiment results [27, 29].

Table 3. Comparison of experimental and calculated range for ions Br and Hg in SiO₂.

Energy (keV)	Range (Å)							
	Br				Hg			
	Exp. [29]	SRIM	Other calc. [28]	Present work	Exp. [30]	SRIM	Other calc. [28]	Present work
10	---	115	---	140	---	117	---	143
15	---	149	---	161	---	144	---	165
20	---	181	---	192	---	167	---	180
30	---	242	---	266	---	208	---	266
50	411	356	352	423	368	279	323	375
70	---	468	---	518	---	342	---	395
100	668	635	627	690	497	429	482	506
150	1028	916	900	1045	583	562	636	595
200	1233	1202	1175	1249	754	687	773	766
250	1542	1493	1451	1550	883	808	914	892
300	1696	1791	1729	1708	1012	925	1050	1025
350	1902	2096	2008	1915	1184	1040	1178	1195
400	2055	2407	2286	2073	1269	1154	1300	1278

4. CONCLUSION

In order to study the nuclear stopping power, we carried out by the calculations using the Monte Carlo method on the SiO₂, LiF and Kapton materials. However, in the range of our energies and materials, our results are in excellent agreement with those found the SRIM code, the PSTAR and ASTAR. (a very small discrepancies, less than 5%).

The corresponding behaviour of the nuclear stopping of the amorphous targets increases when increasing the incident kinetic energy until a maximum value and then decreases. The maximum of nuclear energy loss increases with increasing the atomic number of incident particle. The contribution of the nuclear stopping power to the total stopping cross section is dominant only at low energy. However, its significance in the theory of radiation effects, such as radiation damage and the relation between mean range and total range, makes the study of nuclear collisions important. The heavy ion mean ranges in amorphous target SiO₂, have been also calculated by using a Monte Carlo simulation based on the transport theory. Au, Br, Bi and Hg projectiles have been chosen as incident ion. Furthermore, it is found that the agreement between calculated values on mean range and the experiment is good (less than 5 %).

REFERENCES

- [1] N. Bohr, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 18 (8) (1948) 1.
- [2] J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schiøtt, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33 (14) (1963) 1.
- [3] J.F. Ziegler, Biersack, U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids, vol. 1. Pergamon, New York (1985).
- [4] P. Sigmund, Stopping of Heavy Ions: A Theoretical Approach, Springer tracts in modern physics. Springer, 204 (2004).
- [5] H. Erramli, O. El Bounagui, M.A. Misdaq, A. Merzouki, A Monte Carlo computer code for evaluating energy loss of 10 keV to 10 MeV ions in amorphous silicon materials, Nucl. Instr. Meth. B 263 (2007) 127–131.
- [6] M. T. Robinson, The binary collision approximation: Background and introduction, Rad. Eff. Def. in Sol, 130 (1994) 3-20.
- [7] O. El Bounagui, H. Erramli, Channeling energy loss in silicon by using numerical and experimental methods, Modern Physics Letters B25 (2011) 2171-2181.

- [8] K. Parodi, S. Squarcia, "Improvement of low-energy stopping power algorithms in the FLUKA simulation program," *Nucl. Instr. Meth A* 456 (2001) 352-368
- [9] O. Geithner, P. Andreo, N. Sobolevsky, G. Hartmann, O. Jokel, *Physics in Medicine and Biology* 51 (2006) 2279.
- [10] J.F. Ziegler, *Nucl. Instr. Meth. B* 219–220 (2004) 1027.
- [11] H. Paul, https://www-nds.iaea.org/stopping/MSTAR_V.3.12 <<https://www-nds.iaea.org/stopping/>>.
- [12] J. P. Biersack and L. G. Haggmark, A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets, *Nucl. Instr. Meth.* 174 (1980) 257.
- [13] J. El Asri, O. El Bounagui, N. Tahiri, H. Erramli, A. Chetaine, "Electronic Stopping Powers of Formvar and Mylar Polymeric Materials for Heavy Ions: LSS Modified Theory and Monte Carlo Simulation," *Nuclear Technology*, 205 (2019) 1236-1244.
- [14] E. Balanzat, S. Bouffard, *Materials under Irradiation*, Trans Tech. Publication (1993).
- [15] T. Ishitani, R. Shimizu, K. Murata, Monte Carlo Simulations on Scattering of Bombarded Ions in Solids, *Japanese. J. App. Phys*, 11 (1972) 125-133.
- [16] M. T. Robinson, I. M. Torrens, Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation, *Phys. Rev. B* 9 (1974) 5008.
- [17] A. A. Pasternak et al, The stopping power of heavy ions for energies below 0.2 MeV/nucleon measured by the semi-thick target method, *Nucl. Instr. and Meth. A* 774 (2015) 82–88.
- [18] Pawanpreet Kaur, K. K. Sharma, Rabia Pandit, Ravi Kumar, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (2015) 398
- [19] J. Lindhard and M. Scharff. Energy dissipation by ions in the keV région. *Phys Rev.*, 124-1 (1961) 128.
- [20] G. Moliere, *Z. Naturforsch. A* 2 (1947) 133.
- [21] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, P.V. Thomsen, Integral equation governing radiation effects. (Notes on atomic collisions, III), *Kgl. Danske Videnskab., Selskab. Mat. Fys. Medd.* 33 (1963).
- [22] J. von NEUMANN, "Various Techniques Used in Connection with Random Digits," *J. Res. Nat. Bur. Stand. Appl. Math. Series*, 12 (1951) 36.
- [23] J. P. NOUGIER, *Méthode de calculs numérique*, p. 325, 3rd ed., Elsevier Masson, Paris (1991).
- [24] F. Ziegler, SRIM 2008.04, <<http://www.srim.org>>.
- [25] ICRU (1993). International Commission on Radiation Units and Measurements. Stopping Power and Ranges for Protons and Alpha Particles, ICRU Report 49 (International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD).
- [26] ICRU (2014). International Commission on Radiation Units and Measurements. ICRU Report 90, Key Data for Ionizing-Radiation Dosimetry: Measurement Standards and Applications. ICRU Report 90, J. ICRU 14 (Oxford University Press, Oxford).
- [27] P. L. Grande, P.F.P Fichtner, M. Behar, R.P. Livi, F.C. Zawislak, J.P. Biersack, D. Fink and P. Mertens, *Nucl. Instrum. Meth. B.* 19/20 (1987) 25.
- [28] Wang Ke-Ming and Shi Bo-Rong, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 23 (1990) 1282-1289.
- [29] Wang Ke-Ming, Wang Yi-Hua and Liu Ji-Tian, *Sci. Sinica A* 6 (1987) 597.
- [30] Wang Ke-Ming, Liu Xi-Ju, Wang Yi-Hua, Liu Ji-Tian, Guo Hai-Yan and Shi Bo-Rong, *Phys. Lett. A* 125 (1987) 366.

Calculated Electronic Energy Loss of Heavy Ions at Low Energies in LR-115, Kapton, SiO₂, and Al₂O₃ Amorphous Materials

J. El Asri¹, O. El Bounagui^{2*}, N. Tahiri³, A. Chetaine¹, H. Erramli⁴

¹Nuclear Reactor, Nuclear security and Environment, Faculty of Sciences, Mohammed V University, 4 Avenue Ibn Batouta B.P. 1014 RP, Rabat, Morocco

²EPHE-SM, Faculty of Sciences, Mohammed V University, 4 Avenue Ibn Batouta B.P. 1014 RP, Rabat, Morocco

³LaMCScl, Faculty of Sciences, Mohammed V University, 4 Avenue Ibn Batouta B.P. 1014 RP, Rabat, Morocco

⁴Faculty of Science Semlalia, University Cadi Ayyad Marrakech, BP 511 Avenue Prince Abdellah Marrakech, Morocco

ARTICLE INFO

Article history:

Received 17 July 2020

Received in revised form 2 December 2020

Accepted 3 December 2020

Keywords:

Electronic stopping power;

Modified LSS theory;

Heavy ions;

Polymeric foils

ABSTRACT

The electronic stopping powers of LR-115 and Kapton polymeric foils have been estimated, using Monte Carlo simulations, for ⁹Be, ¹¹B, ¹²C, ¹⁴N, ¹⁶O, and ³⁵Cl ions covering the energy range ~0.1-1.0 MeV/n. Comparison of stopping power based on Lindhard, Scharff, and Schiott (LSS) theory with the corresponding values obtained by SRIM and MSTAR codes in LR-115 and Kapton polymeric foils illustrate a significantly large deviations. However, a semiempirical equation has been proposed here and tested for better stopping power calculations at low-energy regime in the domain of LSS theory for Z = 4-8 ions across materials. Furthermore, the electronic energy losses for ⁹Be and ¹⁶O ions in SiO₂ and Al₂O₃, respectively, have been calculated in the energy range of ~0.1-1.0 MeV/n. The calculated stopping powers exhibit up to 10 % deviation from the experimental values and MSTAR data.

© 2021 Atom Indonesia. All rights reserved

INTRODUCTION

The LSS theory was developed by Lindhard, Scharff, and Schiott [1] to calculate and evaluate the electronic energy loss at low energies. However, the deceleration and scattering of charged particle in matter is considerably used in several techniques and phenomenon of physics such as: ion channeling, radiation damage, sputtering, the reflection and transmission of charged particles, and charged particle activation analysis [2,3]. At low energies, the Bethe formula [4] cannot be used to calculate the electronic energy loss, because the inner-shell contribution to the energy loss is relatively negligible. In fact, the energy loss becomes proportional to the velocity of the projectile. Experimental and theoretical studies have been investigated on the electronic energy loss for different ions and target materials [5-7]. Moreover, the Monte Carlo simulation (MCs) has a number of

advantages in comparison to analytical formulations based on the transport theory [8-10]. Furthermore, the electronic energy loss of light and heavy ions in compound materials have attracted attention in recent years [11-14] due to their increasing use in ion beam applications and materials science. Several measurements of the energy loss have been conducted and compared with the calculated values for heavier ions [15]. Also, many experiments have been conducted to determine the electronic stopping power for different heavy ions with Z₁ = 5 to 29 in silicon dioxide and various polymeric materials such as polyethylene terephthalate or PET (C₁₀H₈O₄)_n, polycarbonate/PC (C₁₆H₁₄O₃)_n, and polyethylene naphthalate/PEN (C₁₄H₁₀O₄)_n [16]. In a previous paper, calculations of the stopping power data of the heavy ions of ¹⁹F, ²³Na, ²⁴Mg, ²⁷Al, ²⁸Si, ³¹P, ³²S, ³⁵Cl, and ⁴⁰Ar were reported for Formvar and Mylar polymeric materials for the 0.1 to 1.0 MeV/n energy region [17]. More experiments are needed for various ions and stopping targets to draw a definite conclusion about the usefulness of the LSS theory in the low-energy region. Until it is definitely

*Corresponding author.

E-mail address: elbounagui@gmail.com

DOI: <https://doi.org/10.17146/aij.2021.1080>

confirmed, we recommend the use of the modified LSS for low-energy ions.

In the present work, we investigate the electronic energy loss in amorphous materials (cellulose nitrate LR-115, Kapton polyimide film, SiO₂, and Al₂O₃) for different incident charged particles, such as ⁹Be, ¹¹B, ¹²C, ¹⁴N, ¹⁶O, and ³⁵Cl ions, at low velocities using Monte Carlo simulations and modified LSS theory. Also, all results obtained by Monte Carlo simulations and modified LSS theory are compared with those calculated by SRIM and MSTAR computer codes and experimental values.

EXPERIMENTAL METHODS

The electronic energy loss for $v \leq v_0 Z_1^{2/3}$, where v_0 and Z_1 are the Bohr velocity and incident atomic number, respectively, as described by LSS theory for heavy ions at low energies can be given by (1).

$$(S_e)_{LSS} = \zeta_e 8\pi e^2 a_0 N Z_1^{2/3} \left(\frac{Z_1 Z_2}{Z}\right) v_r \quad (1)$$

In (1), ζ_e represents the correlation factor (equal to $Z_1^{1/6}$, while N and a_0 denote the atomic density and atomic radius, respectively. Z_2 is the target atomic number and v_r is an ion reduced velocity given by:

$$v_r = \frac{v}{v_0 Z_1^{2/3}} \text{ and } Z = (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}$$

The electronic energy loss given by LSS formula [1] contain the constant ζ_e that is approximately equal to $Z_1^{1/6}$. This factor ζ_e is not only dependent on the ion atomic number Z_1 but also on the target atomic number Z_2 . In this case ζ_e can be rewritten as (2), where $a = 0.956$, $b = -0.573$, and $c = 0.237$.

$$\zeta_e' = a(Z_1^b Z_2^c) \quad (2)$$

We have attempted to include a semiempirical formula by taking into account, in our calculation approach, the concept of effective charge of moving ions and the exponential fit function [17]. Based on the previous work, through this study we propose the following equation to evaluate the electronic stopping power $(S_e)_{LSS}$ for heavy ions traversing the targets at low-energy region [17]. $(S_e)_{Modified-LSS}$ is given as (3).

$$(S_e)_{Modified-LSS} = (S_e)'_{LSS} \times f(E) \quad (3)$$

In (3), $(S_e)'_{LSS}$ and $f(E)$ are defined by Eqs. (4) and (5):

$$(S_e)'_{LSS} = \zeta_e' \times (S_e)_{LSS} \quad (4)$$

$$f(E) = a_1 e^{-b_1 E} \quad (5)$$

In (5), a_1 and b_1 are adjustable parameters and are taken as follows:

$$1.587 < a_1 < 1.993 \text{ and } 2.301 < b_1 < 2.549.$$

However, the expression of Eq. (3) can be given as in (6).

$$(S_e)_{Modified-LSS} = \zeta_e' 8\pi e^2 a_0 N Z_1^{2/3} \left(\frac{Z_{1eff} Z_2}{Z}\right) \left(\frac{v}{v_0}\right) (a_1 e^{-b_1 E}) \quad (6)$$

The semiempirical expression suggested as Eq. (5) can be considered as a function of incident ion energy E . The empirical values for a_1 and b_1 that would fit the calculation of stopping power data need to be determined.

However, at low energies, the electronic energy loss becomes proportional to ion velocity. In this case, it is considered to use an energy loss which is correlated with the impact parameter of each collision (see Fig. 1). The transfer energy in the collision is given by (7), where σ is the cross section of interaction and b is the impact parameter.

$$\langle T \rangle = \int_{b_{min}}^{b_{max}} T(\sigma) d\sigma \quad (7)$$

Here, a typical interaction is considered. The target is described by assuming a cylinder with radius equal to the impact parameter b_{max} and length L . The average free flight path can then be calculated by (8).

$$b^2 \pi l = N^{-1} \quad (8)$$

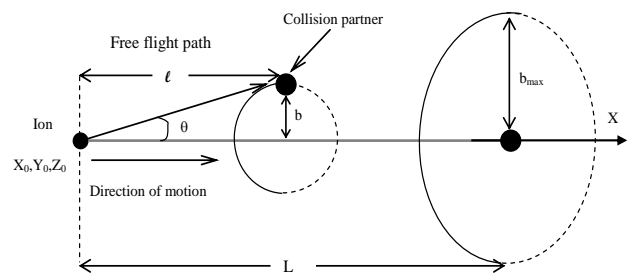


Fig. 1. Schematic of collision between ions and target.

The target is sufficiently thin (a few microns). The program generates a homogeneous distribution of particle position (X, Y, Z) in a cylinder characterized by radius b_{max} , which represent the bombarded volume.

Triples of numbers ξ_1 , ξ_2 , and ξ_3 were generated by using a program called Random

Subroutine on a congruential method [7,18], where ξ_i is a random number ($0 \leq \xi_i < 1$).

$$\xi_1 = \text{random}(t_1) \tag{9}$$

$$\xi_2 = \text{random}(t_2) \tag{10}$$

$$\xi_3 = \text{random}(t_3) \tag{11}$$

Here, X is generated homogeneously in the interval $[0, L]$, using a random sampling procedure.

$$X = \xi_1 L \tag{12}$$

Homogeneously-distributed $\{Y, Z\}$ couples in a circle of radius b_{\max} is obtained by generating $\{Y, Z\}$ couples isotropically in a square of $2b_{\max}$ sides, with $Y \in [-b_{\max}, b_{\max}]$ and $Z \in [-b_{\max}, b_{\max}]$ by (13 and 14).

$$Y = -b_{\max} + 2b_{\max}\xi_2 \tag{13}$$

$$Z = -b_{\max} + 2b_{\max}\xi_3 \tag{14}$$

The isotropic generation of the couple $\{Y, Z\}$ in the circle of radius b_{\max} is obtained by the test (15).

$$Y^2 + Z^2 \leq b_{\max}^2 \tag{15}$$

The emission angle is generated using random sampling procedure [17,19]. Our program uses the angular distribution of ions collision in the laboratory frame, where θ is randomly calculated by using relation (16) [20], where ξ_4 is a random number ($0 \leq \xi_4 < 1$).

$$\theta = \arccos(1 - 2\xi_4) \tag{16}$$

Each ion is characterized by the parameters which are the identifier, the atomic number, the atomic mass, the energy, the direction and the three-dimensional Cartesian coordinate. The evolution of these parameters can be followed using Monte Carlo simulation [7,17,21]. The particle is assumed to change direction as a result of binary electronic collisions and moves in a straight path between two consecutive collisions. The energy of the particle is reduced as a result of electronic collision, and a trajectory is terminated either when the energy drops below a prespecified value or when the particle position is outside the target. The target is assumed to be amorphous with atoms at random locations and the directional properties applicable for a crystalline material being ignored [3,10]. This program calculates the final three-dimensional distributions of the ions, the energy transfer, the energy loss, and the electronic stopping power. The trajectory is stopped when the ion energy is smaller than I (mean excitation energy). A conventional simulation run

was performed with such a high number of ion trajectories (1 000 000) that statistical fluctuations are negligible.

Table 1 illustrates the values of average atomic number Z_2 , average atomic weight A_2 , and mean excitation energy I . To calculate the average mean excitation energy, (17) can be used [8,22].

$$\ln(I) = \frac{\sum_i n_i Z_i \ln(I_i)}{\sum_i n_i Z_i} \tag{17}$$

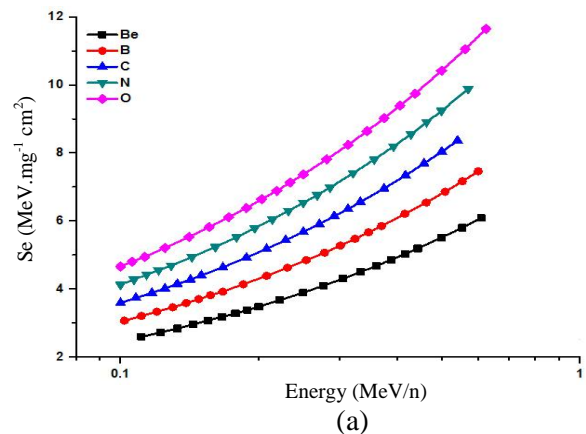
In (17), I_i , Z_i , and n_i denote the mean excitation energy, atomic number, and atomic concentration of the i th component of the composite target material, respectively.

Table 1. Averages of atomic number Z_2 , atomic weight A_2 , and mean excitation energy I for target materials used.

Target	Z_2	A_2	I (eV)
Kapton	5.03	9.80	80.13
LR-115	5.20	10.08	83.07
SiO ₂	9.99	19.99	130.69
Al ₂ O ₃	10	20.40	132.07

RESULTS AND DISCUSSION

It is useful to study the effect of correlation factor included in Eq. (1) and the exponential function on the behavior of electronic energy loss for several different incident charged particle species, namely Be, B, C, N, and O ions, in amorphous targets. These behaviors are illustrated in Figs. 2(a) and 2(b). From Fig. 2(a), it is found that, in absence of the correlation factor, the electronic energy loss increases with increasing energy. In this energy region, the electronic stopping power is proportional to the ion velocity and for systems with different atomic numbers $Z_1 \neq Z_2$. On the other hand, Fig. 2(b) shows that in the presence of the correlation factor and exponential function, as given by Eq. (5), the electronic energy loss increases with increasing incident energy until it reaches a maximum and then decreases.



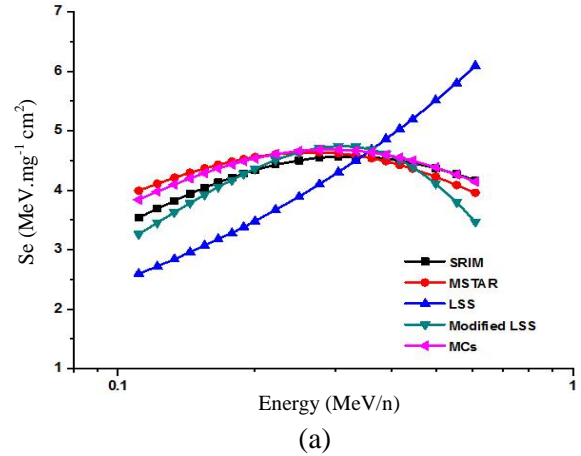
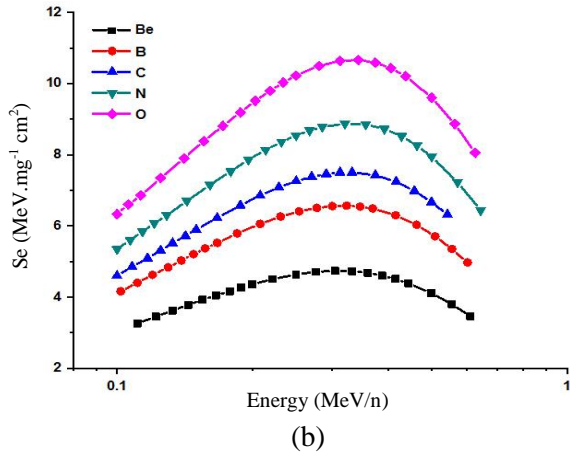
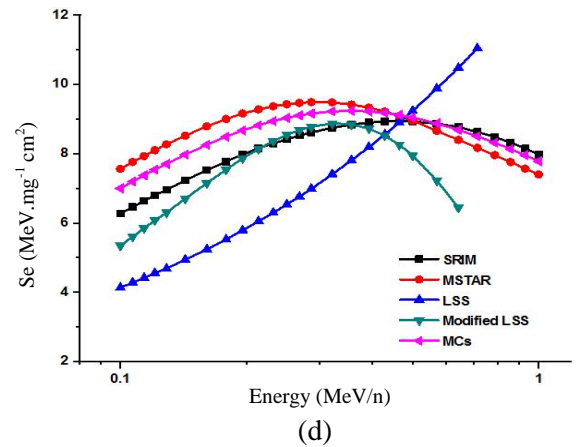
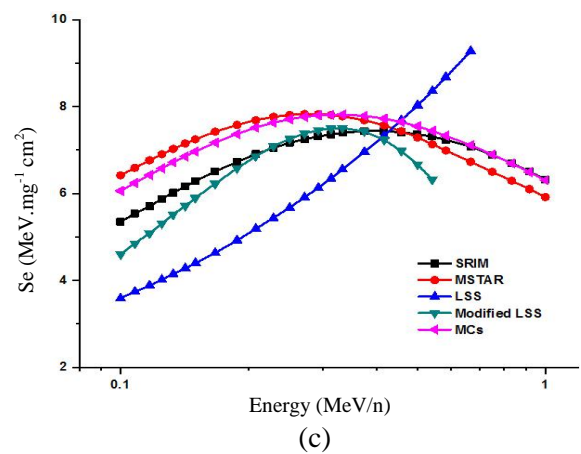
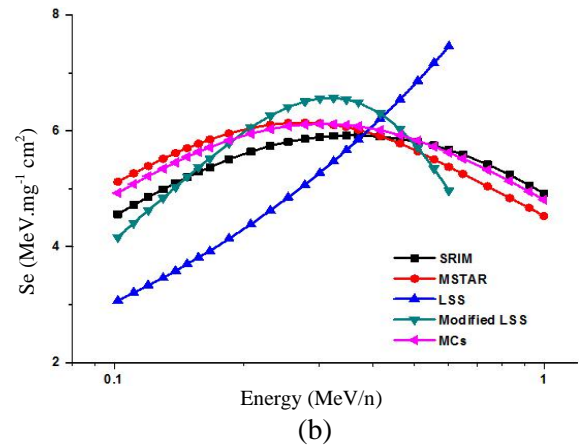


Fig. 2. The electronic energy loss as a function of incident ions energy for different heavy ions in Kapton polyimide film ($(C_{22}H_{10}O_5N_2)_n$ polymeric foil. (a) LSS theory and (b) modified LSS theory.

In Figs. 3 and 4, the corresponding behavior of electronic energy loss as a function of energy in Kapton and LR-115 are plotted for the aforespecified charged particles at low energy. In Figs. 3(a)-(e) and Figs. 4(a)-(e), the calculated electronic stopping power values of Be, B, C, N, and O ions in Kapton and LR-115 based on modified LSS theory formula given by Eq. (6) and Monte Carlo simulations in the energy range of $\sim 0.1-0.5$ MeV/n provide a close agreement with those calculated by SRIM and MSTAR codes. However, a significant discrepancy has been observed between the values calculated by the LSS equation in (1) and those obtained using Monte Carlo simulations, modified LSS theory expression in Eq. (6), SRIM code, and MSTAR code. In the range of energy $\sim 0.1-1.0$ MeV/n, the LSS formula considerably underestimates with our calculation values. The deviation of LSS theory calculate values from Monte Carlo simulations and modified LSS theory vary from 20 % to 25 %. It is apparent from Figs. 3(a)-(e) and Figs. 4(a)-(e) that the calculated electronic stopping power data using the modified LSS theory formula in Eq. (6) are in close agreement with SRIM and MSTAR electronic stopping power values in solid targets of Kapton and LR-115. In this case, the calculated values of electronic stopping power using Monte Carlo simulations present an excellent agreement in the energy range of $\sim 0.1-1.0$ MeV/n. Also, a small deviation is observed when the calculated values are compared with data from SRIM (about 6 %) and from MSTAR (about 9 %).



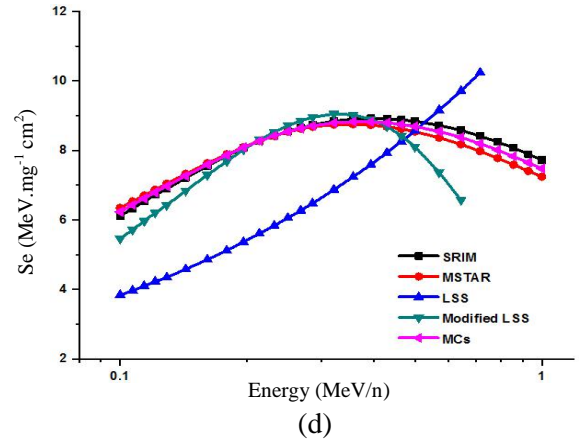
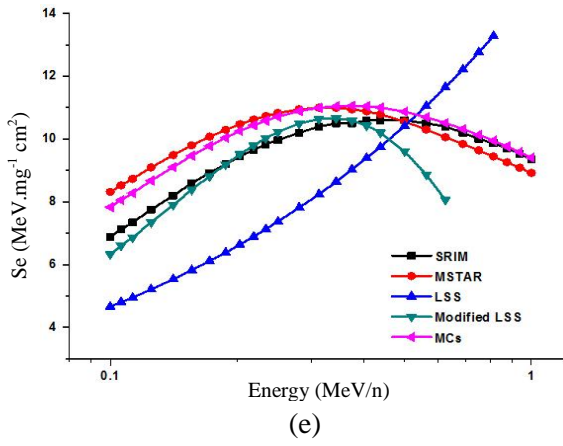


Fig. 3. Electronic energy loss in Kapton ($C_{22}H_{10}O_5N_2$)_n as a function of energy for different incident charged particles. (a) ⁹Be, (b) ¹¹B, (c) ¹²C, (d) ¹⁴N, and (e) ¹⁶O.

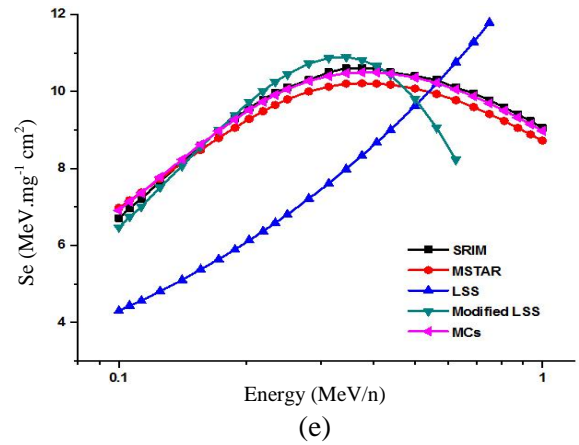
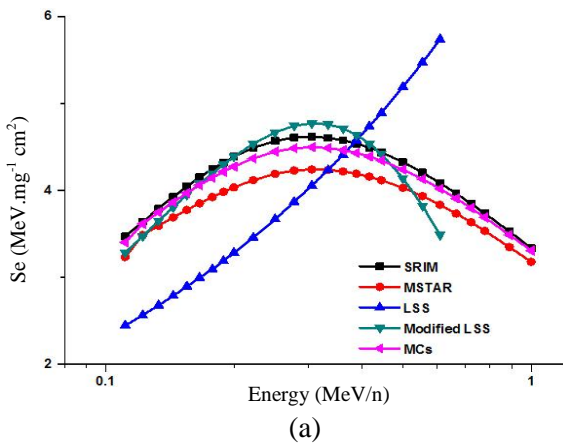


Fig. 4. Electronic energy loss in LR-115 as a function of energy for different incident charged particles. (a) ⁹Be, (b) ¹¹B, (c) ¹²C, (d) ¹⁴N, and (e) ¹⁶O.

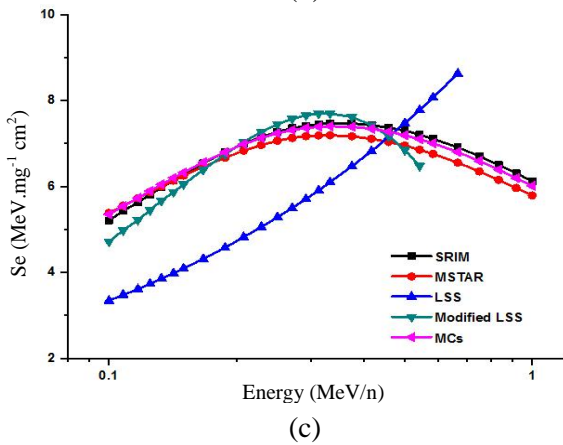
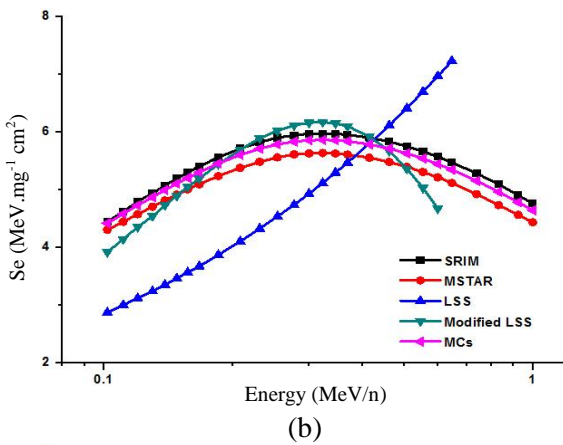


Table 2 presents the electronic stopping power values of LR-115 and Kapton polymers for ³⁵Cl ions in the energy range of ~0.5-1.0 MeV/n, obtained by Monte Carlo simulations and modified LSS theory.

Table 2. Electronic stopping power values based on the Monte Carlo simulations (MCs) and modified LSS theory in LR-115 and Kapton polymeric foils for Cl heavy ion.

Target	Energy (MeV/n)	Stopping power (MeV mg ⁻¹ cm ²)				
		SRIM	MSTAR	Experimental Results [14]	MCs	modified LSS theory
LR-115 (C ₆ H ₉ O ₉ N ₂) _n	0.5	24.47	23.24	25.52	24.08	26.12
	0.6	24.84	23.61	25.75	24.40	26.27
	0.7	24.98	23.69	25.91	24.51	26.75
	0.8	24.93	23.59	26.01	24.39	25.97
	0.9	24.64	23.41	26.04	24.43	24.46
Kapton (C ₂₂ H ₁₀ O ₅ N ₂) _n	1.0	24.45	23.19	26.03	23.95	22.56
	0.5	27.45	24.36	24.92	26.03	28.15
	0.6	28.08	24.37	25.09	26.33	28.63
	0.7	28.40	24.30	25.22	26.43	29.01
	0.8	28.39	24.15	25.33	26.34	28.45
	0.9	28.09	23.95	25.40	26.12	26.76
	1.0	27.85	23.71	25.44	25.84	24.45

This table also presents the corresponding electronic stopping power values obtained by SRIM and MSTAR. In order to confirm the validity of calculations in this work, the calculated values of electronic stopping power generated by the presented approach, following Eq. (6), have been compared to those published by P.K. Diwan *et al.*, see Ref. [14].

Furthermore, Figs. 5 and 6 illustrate the electronic energy loss of heavy ions ^9Be in SiO_2 and ^{16}O in Al_2O_3 as a function of energy. In Fig. 5, we compare our results of electronic stopping power of the SiO_2 crossing by Beryllium at low energy with data obtained by MSTAR data, modified LSS theory and experiment data obtained by Zhang *et al.* [16]. Similar behavior have been observed for Al_2O_3 crossing by oxygen at low energy, the electronic stopping results are compared with MSTAR data, modified LSS theory and experiment data obtained by Pascual-Izarra *et al.* [23], (see Fig. 6). However, we found that, the stopping power values in good agreement with experimental values and MSTAR data by deviation up to 10 %, of SiO_2 and Al_2O_3 materials in the energy range $\sim 0.1\text{-}1.0$ MeV/n.

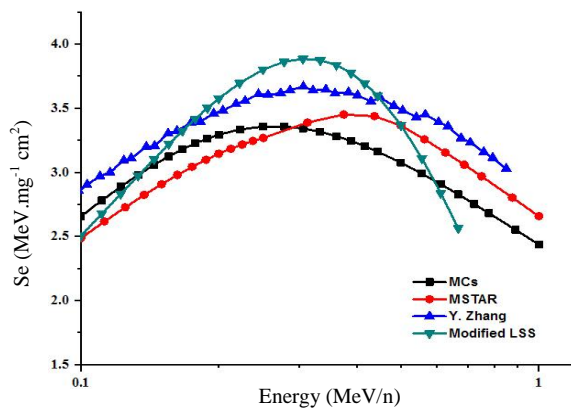


Fig. 5. Electronic energy loss of beryllium in SiO_2 as a function of incident energy.

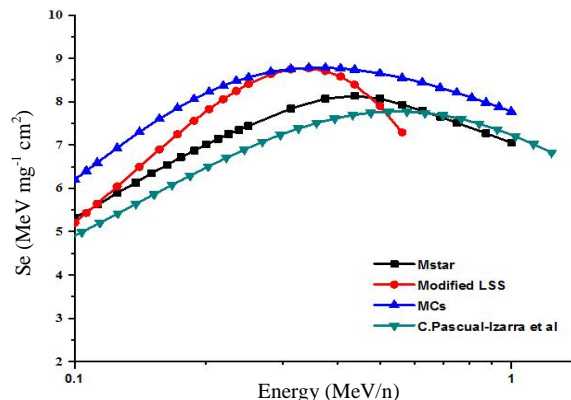


Fig. 6. Electronic energy loss of oxygen in Al_2O_3 as a function of incident energy.

CONCLUSION

We have presented calculation results for the stopping power of ^9Be , ^{11}B , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O , and ^{35}Cl in the energy range of interest for Kapton and LR-115 polymeric materials. LSS-theory-based electronic stopping power values, with presently modified ζ and $f(E)$ function, provide close agreement in Kapton and LR-115 for heavy ions with $Z_1 = 4\text{-}9$ and $Z_1 = 17$, in the energy range of $\sim 0.1\text{-}1.0$ MeV/n. The modified LSS theory values are in close agreement with Monte Carlo simulations and data from SRIM and MSTAR. Moreover, the stopping power values obtained of Kapton and LR-115 for ^{35}Cl ions are in good agreement with experimental values, SRIM, and MSTAR in the energy range $\sim 0.5\text{-}1.0$ MeV/n, with deviation generally lower by about 10 %. Good agreement between stopping powers values, MSTAR data, and experimental results are observed for ^9Be in SiO_2 and ^{16}O in Al_2O_3 in the energy range of $0.1\text{-}1.0$ MeV/n.

AUTHOR CONTRIBUTION

O. El Bounagui, J. El Asri, and N. Tahiri equally contributed as the main contributors of this paper. All authors read and approved the final version of the paper.

REFERENCES

1. J. Lindhard, M. Scharff and H.E. Schiott, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **33** (1963) 1.
2. H. Erramli and O. El Bounagui, *Charged Particle Activation Analysis: Applications*, in: *Encyclopedia of Analytical Chemistry: Applications, Theory and Instrumentation*, Wiley Online Library, United Kingdom (2017) 365.
3. O. El Bounagui and H. Erramli, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **268** (2010) 1361.
4. H.A. Bethe, *Phys. Rev.* **89** (1953) 1256.
5. D. Tahir, Suarga, Yulianti *et al.*, *Atom Indones.* **38** (2012) 100.
6. J.F. Ziegler, J.P. Biersack and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Vol. 1. Pergamon Press, New York, (1985) 1.
7. H. Erramli, O. ElBounagui, M.A. Misdaq *et al.*, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **263** (2007) 127.
8. U. Fano, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **13** (1963) 1.
9. L.C. Northcliffe, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **13** (1963) 67.

10. O. El Bounagui and H. Erramli, *Mod. Phys. Lett. B* **25** (2011) 2171.
11. L.E. Porter and H. Lin, *J. App. Phys.* **67** (1990) 6613.
12. H. Geissel, H. Weick, C. Scheidenberger *et al.*, *Nucl. Instrum. Meth. Res. B* **195** (2002) 3.
13. J.M. Fernández-Varea and N.R. Arista, *Radiat. Phys. Chem.* **96** (2014) 88.
14. P.K. Diwan, V. Sharma, Pratibha *et al.*, *Nucl. Instrum. Meth. B* **266** (2008) 4738.
15. A. Sharma, P.K. Diwan, S. Kumar *et al.*, *Nucl. Instrum. Meth. B* **194** (2002) 7.
16. Y. Zhang, W.J. Weber, D.E. McCready *et al.*, *App. Phys. Let.* **87** (2005) 104103.
17. J. El Asri, O. El Bounagui, N. Tahiri *et al.*, *Nucl. Technol.* **205** (2019) 1236.
18. D.E. Knuth, *The Art of Computer Programming (TAOCP)*, Wesley (1969).
19. W.E. Burcham, *Elements of Nuclear Physics*, Harlow, Longman (1979).
20. J. Von Neumann, *J. Res. Nat. Bur. Stand. Appl. Math.* **12** (1951) 36.
21. J. Giber, I. Nagy and J. Laszlo, *Nucl. Instrum. Meth. Res. B* **2** (1984) 135.
22. W.H. Barkas and M.J. Berger, in *Studies in Penetration of Charged Particles in Matter*, National Academy of Sciences, National Research Council Publication No. 1133, NAS-NRC, Washington, DC (1967).
23. C. Pascual-Izarra and G. Garcia, *Nucl. Instrum. Meth. B* **228** (2005) 388.