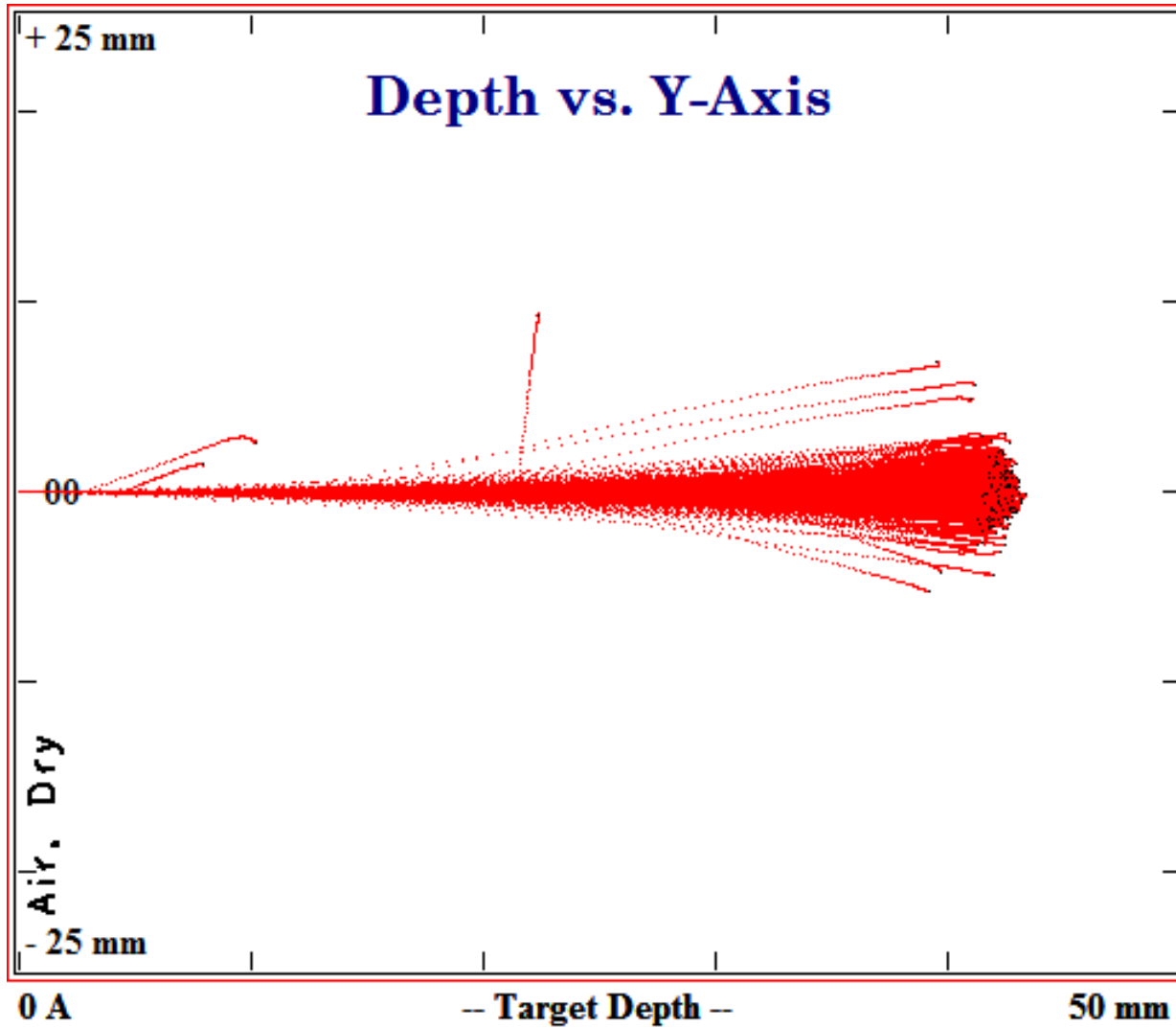


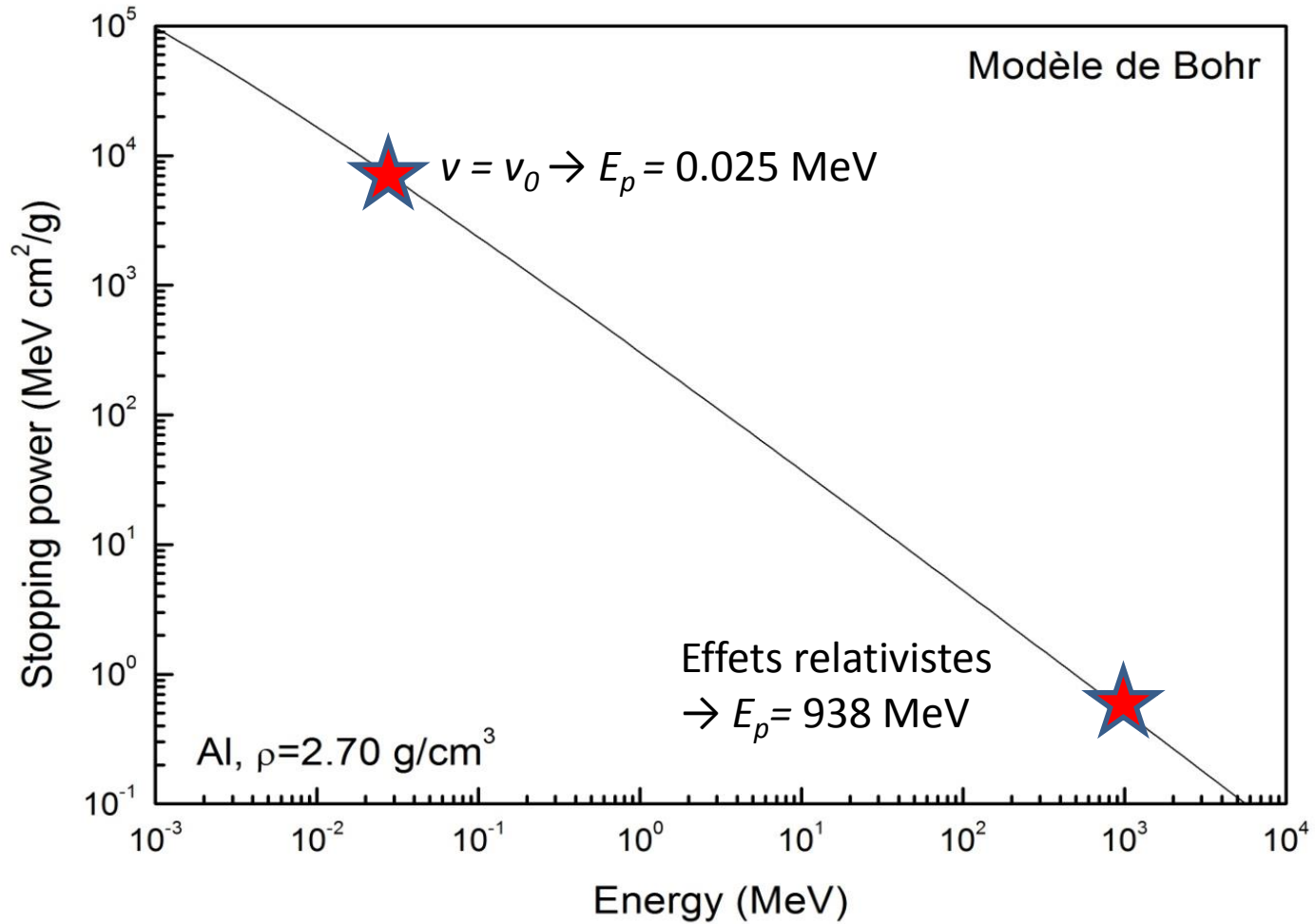
Chapitre 2: Interaction des ions avec la matière

Trajectoires de particules α de 5.5 MeV



Source: SRIM
www.srim.org

Proton incident sur Al: Modèle de Bohr



Contenu

- Modèle semi-classique du pouvoir d'arrêt électronique
 - Vitesses intermédiaires
 - Grandes vitesses
 - Petites vitesses
- Pouvoir d'arrêt nucléaire (faibles vitesses)
- Parcours et courbe de Bragg

Énergie transférée: Oscillateur classique (1)

- Avant de regarder le traitement quantique → détails du traitement classique: électron = oscillateur harmonique classique de pulsation ω_0 → e^- lié à son site par une force de rappel de module $-m\omega_0^2 r$ → équation du mouvement →

$$\frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + \omega_0^2 \vec{r} = -\frac{e}{m} \vec{E}(\vec{r}, t)$$

avec $\vec{E}(\vec{r}, t)$ le champ électrique généré par le projectile (perturbation)

- Équation non-linéaire → simplification →

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}(t), t) \equiv \vec{E}(t)$$

Énergie transférée: Oscillateur classique (2)

- En supposant une absence de champs électrique en $t = -\infty$ et $r(-\infty) = 0 \rightarrow$ une solution particulière de l'équation s'écrit \rightarrow

$$\vec{r}(t) = -\frac{e}{m\omega_0} \int_{-\infty}^t dt' \vec{E}(t') \sin \omega_0(t - t')$$

- En supposant que le champs électrique \searrow après la distance minimale d'approche \rightarrow on peut trouver un temps t_1 pour lequel le champs électrique agissant sur l' e^- devient négligeable \rightarrow pour $t > t_1 \rightarrow$ on peut étendre la borne supérieure de l'intégrale à $+\infty$ puisque les contributions de l'intégrale sont négligeables pour $t_1 < t' < +\infty$

Énergie transférée: Oscillateur classique (3)

- Dans ce cas la solution s'écrit \rightarrow

$$\vec{r}(t) = -\frac{e}{m\omega_0} (\vec{C} \sin \omega_0 t - \vec{S} \cos \omega_0 t)$$

avec

$$\vec{C} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \vec{E}(t') \cos \omega_0 t' \quad \text{et} \quad \vec{S} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \vec{E}(t') \sin \omega_0 t'$$

- Pour déterminer l'énergie cédée par le projectile à l'oscillateur
 \rightarrow détermination de la vitesse de l'électron $v_e \rightarrow$

$$\vec{v}_e(t) = -\frac{e}{m} (\vec{C} \cos \omega_0 t + \vec{S} \sin \omega_0 t)$$

Énergie transférée: Oscillateur classique (4)

- Ainsi l'énergie transférée T vaut \rightarrow

$$T = -\frac{e^2}{2m} (\vec{C}^2 + \vec{S}^2)$$

- Qui se note aussi \rightarrow

$$T = -\frac{e^2}{2m} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \vec{E}(t') e^{i\omega_0 t'} \right|^2$$

Oscillateur classique: Approximation dipolaire (1)

- Considérons le champs de Coulomb généré par la particule incidente \rightarrow

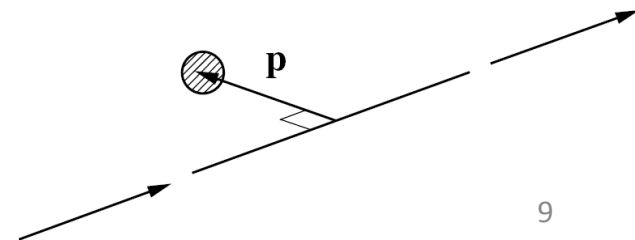
$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\nabla\Phi(\vec{r}, t)$$

avec Φ , \vec{R} et \vec{v} les potentiel, trajectoire et vitesse de la particule:

$$\Phi(\vec{r}, t) = \frac{e_1}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|} \quad \text{et} \quad \vec{R} = \vec{p} + \vec{v}t$$

- On remarque que

$$\vec{p} \cdot \vec{v} = 0$$



Oscillateur classique: Approximation dipolaire (2)

- Considérons les transformées de Fourier à 1 et 3 dimensions →

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt f(t) e^{-i\omega t}$$

$$f(\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 \vec{r} f(\vec{r}) e^{-i \vec{q} \cdot \vec{r}}$$

- Pour obtenir la transformée de Fourier du potentiel → on utilise la relation →

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 \vec{q} \frac{1}{q^2} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}}$$

Oscillateur classique: Approximation dipolaire (3)

- Le champs électrique s'écrit donc \rightarrow

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{ie_1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{q} \frac{\vec{q}}{q^2} e^{[i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{p} - \vec{v}t)]}$$

- Pour des petits déplacements par rapport à l'équilibre \rightarrow
approximation dipolaire \rightarrow

$$e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \simeq 1 + i\vec{q} \cdot \vec{r} \simeq 1$$

- La transformée de Fourier du champs électrique se note dans l'approximation dipolaire \rightarrow

$$\vec{E}(\omega) = -\frac{ie_1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{q} \frac{\vec{q}}{q^2} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{p}} \delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v})$$

Oscillateur classique: Approximation dipolaire (4)

- On intègre habituellement cette intégrale en choisissant l'axe x selon la vitesse du projectile et l'axe y selon le paramètre d'impact \rightarrow

$$\vec{E}(\omega) = -\frac{e_1\omega}{\pi v^2} \left(iK_0 \left(\frac{\omega_{j0}p}{v} \right), K_1 \left(\frac{\omega_{j0}p}{v} \right), 0 \right)$$

avec K_0 et K_1 , les fonctions de Bessel modifiées d'ordre 0 et 1

- Ainsi T devient \rightarrow

$$T = \frac{2e_1^2 e^2}{mv^2 p^2} f_{dist}(p)$$

avec

$$f_{dist}(p) = \left[\frac{\omega_0 p}{v} K_0 \left(\frac{\omega_0 p}{v} \right) \right]^2 + \left[\frac{\omega_0 p}{v} K_1 \left(\frac{\omega_0 p}{v} \right) \right]^2$$

- Pour $(\omega_0 p/v) \ll 1 \rightarrow f_{dist} \simeq 1 \rightarrow$ on retrouve le résultat de Bohr

Modèle semi-classique du pouvoir d'arrêt: $v_0 \ll v \ll c$ (1)

- Modèle semi-classique développé par Bethe (1930) → le mouvement du noyau se traite par la mécanique classique et celui des électrons liés par la mécanique quantique → les électrons ne sont plus traités comme des oscillateurs classiques mais occupent des états quantiques dans l'atome cible
- Considérons un atome de la cible contenant Z_2 électrons (de masse m) et les états stationnaires $|j\rangle$ d'énergies ϵ_j , avec j qui représente un ensemble complet de nombres quantiques et $j = 0$ qui indique l'état fondamental → les fréquences de résonance pour un atome dans son état initial sont données par

$$\hbar\omega_{j0} = \epsilon_j - \epsilon_0$$

- Les électrons sont au repos durant l'interaction →

$$v \gg v_0$$

Modèle semi-classique du pouvoir d'arrêt: $v_0 \ll v \ll c$ (2)

- Pour une énergie Q perdue par l'ion incident \rightarrow Bethe a posé:

$$S = \sum_j \int Q d\sigma_R f_{j0}(Q)$$

- σ_R est la section efficace de Coulomb pour un transfert d'énergie Q (R pour Rutherford)
- Les fonctions $f_{j0}(Q)$ sont appelées les forces d'oscillateur généralisées (acronyme GOS en anglais) qui incluent tous les effets quantiques pour la section efficace d'arrêt et qui décrivent les probabilités de transition entre les états pour une énergie transférée Q donnée
- Détermination de $f_{j0}(Q)$?

Résolution de l'équation de Schrödinger (1)

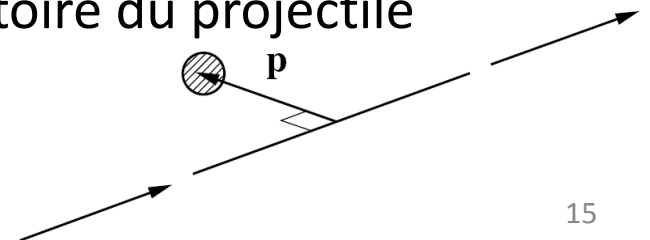
- Le mouvement électronique est gouverné par l'équation de Schrödinger dépendant du temps \rightarrow

$$(H + V)\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{d\Psi(\vec{r}, t)}{dt}$$

avec H , le hamiltonien d'un atome isolé de la cible, Ψ , la fonction d'onde dépendant du temps d'un état lié de l'atome, V , le potentiel décrivant l'interaction avec le projectile donné par

$$V(\vec{r}, t) = \sum_{\nu=1}^{Z_2} \frac{-e_1 e}{|\vec{r}_{\nu} - \vec{R}(t)|}$$

où le vecteur \vec{r} représente $(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{Z_2})$ avec \vec{r}_{ν} l'opérateur position du $\nu^{\text{ème}}$ électron et $\vec{R} = \vec{p} + \vec{v}t$, la trajectoire du projectile



Résolution de l'équation de Schrödinger (2)

- La fonction d'onde dépendant du temps Ψ peut être développée en terme d'états stationnaires \rightarrow

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_j c_j(t) e^{-i\epsilon_j t} |j\rangle$$

où les $|j\rangle$ sont solutions de:

$$H|j\rangle = \epsilon_j |j\rangle$$

- Dans le cadre de la méthode des perturbations au premier ordre (approximation de Born 1^{er} ordre) \rightarrow les coefficients c_j peuvent être développés en puissance du potentiel perturbatif $V \rightarrow$

$$c_j(t) = \delta_{j0} + c_j^{(1)}(t) + c_j^{(2)}(t) + \dots$$

Résolution de l'équation de Schrödinger (3)

avec

$$\delta_{j0} = \begin{cases} 1 & \text{pour } j = 0 \\ 0 & \text{pour } j \neq 0 \end{cases}$$

et

$$c_j^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_{j0}t'} \langle j | V(\vec{r}, t') | 0 \rangle$$

$$c_j^{(2)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \sum_k \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_{jk}t'} \langle j | V(\vec{r}, t') | k \rangle \\ \times \int_{-\infty}^{t'} dt'' e^{i\omega_{k0}t''} \langle k | V(\vec{r}, t'') | 0 \rangle$$

et ainsi de suite... (remarque \rightarrow état fondamental en $t = -\infty$)

Résolution de l'équation de Schrödinger (4)

- Dans le cadre de la méthode des perturbations au 1^{er} ordre → uniquement les coefficients $c_j^{(1)}(\infty)$ sont importants → ils représentent les amplitudes de transition → important de les calculer
- En insérant dans $c_j^{(1)}(\infty)$ l'expression explicite du potentiel, en considérant la transformée de Fourier et en intégrant sur t' →

$$c_j^{(1)}(\infty) = \frac{-e_1 e}{i\pi\hbar} \int d\vec{q} \frac{e^{-i\vec{q} \cdot \vec{p}}}{q^2} F_{j0}(\vec{q}) \delta(\omega_{j0} - \vec{q} \cdot \vec{v})$$

avec

$$F_{j0}(\vec{q}) = \left\langle j \left| \sum_{\nu=1}^{Z_2} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_\nu} \right| 0 \right\rangle$$

Notons $Q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$

Probabilités de transition

- Les probabilités de transition sont données par (Postulat IV) →

$$P_j(p) = |\langle j | \Psi(\infty) \rangle|^2$$

- Et donc dans le cadre de la méthode des perturbations au 1^{er} ordre →

$$P_j(p) = \left| c_j^{(1)}(\infty) \right|^2$$

- Attention → $c_j^{(1)}(\infty) \neq 0$ pour $\omega_{j0} < qv$ → condition sur Q →

$$\omega_{j0}^2 < q^2 v^2 \Rightarrow 2mv^2 Q > (\epsilon_j - \epsilon_0)^2$$

Approximation des collisions distantes - Approximation dipolaire (1)

- Considérons les $c_j^{(1)}(\infty)$ à grand p (collisions distantes) \rightarrow on peut utiliser l'approximation dipolaire \rightarrow

$$e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \simeq 1 + i\vec{q} \cdot \vec{r}$$

- On obtient donc

$$F_{j0}(\vec{q}) \simeq i\vec{q} \left\langle j \left| \sum_{\nu=1}^{Z_2} \vec{r}_{\nu} \right| 0 \right\rangle$$

- Avec cette approximation et en choisissant l'axe x selon la vitesse du projectile et l'axe y selon le paramètre d'impact \rightarrow

$$c_j^{(1)}(\infty) = -\frac{2e_1 e \omega_{j0}}{i\hbar v^2} \left\langle j \left| \sum_{\nu} \vec{r}_{\nu} \right| 0 \right\rangle \times \left(iK_0 \left(\frac{\omega_{j0} p}{v} \right), K_1 \left(\frac{\omega_{j0} p}{v} \right), 0 \right)$$

Approximation des collisions distantes - Approximation dipolaire (2)

avec K_0 et K_1 , les fonctions de Bessel modifiées d'ordre 0 et 1

- Les probabilités de transitions deviennent donc \rightarrow

$$P_j(p) = -\frac{2e_1^2 e^2 Z_2}{mv^2 p^2 \hbar \omega_{j0}} f_{j0} \times \left\{ \left[\frac{\omega_{j0} p}{v} K_0 \left(\frac{\omega_{j0} p}{v} \right) \right]^2 + \left[\frac{\omega_{j0} p}{v} K_1 \left(\frac{\omega_{j0} p}{v} \right) \right]^2 \right\}$$

- La grandeur f_{j0} est appelée la force d'oscillateur dipolaire et a comme expression \rightarrow

$$f_{j0} = \frac{2m}{3\hbar^2 Z_2} (\epsilon_j - \epsilon_0) \left| \left\langle j \left| \sum_{\nu} \vec{r}_{\nu} \right| 0 \right\rangle \right|^2$$

avec la règle de somme de Thomas-Reiche-Kuhn: $\sum_j f_{j0} = 1$

Comparaison classique \leftrightarrow semi-classique

- Considérons l'énergie transférée moyenne T_{moy} telle que

$$T_{moy}(p) = \sum_j P_j(p) \hbar \omega_{j0}$$

- Comparons cette expression avec le résultat classique \rightarrow

$$T = \frac{2e_1^2 e^2}{mv^2 p^2} f_{dist}(p)$$

$$f_{dist}(p) = \left[\frac{\omega_0 p}{v} K_0 \left(\frac{\omega_0 p}{v} \right) \right]^2 + \left[\frac{\omega_0 p}{v} K_1 \left(\frac{\omega_0 p}{v} \right) \right]^2$$

- Expression identique avec

$$f_{dist}(p) = \sum_j f_{j0} \left[\frac{\omega_{j0} p}{v} K_0 \left(\frac{\omega_{j0} p}{v} \right) \right]^2 + \left[\frac{\omega_{j0} p}{v} K_1 \left(\frac{\omega_{j0} p}{v} \right) \right]^2$$

Au-delà des collisions distantes

- Afin de généraliser les fonctions f_{j0} précédentes aux grandes valeurs de Q , Bethe a posé \rightarrow

$$f_{j0}(Q) = \frac{1}{Z_2} \frac{\epsilon_j - \epsilon_0}{Q} |F_{j0}(\vec{q})|^2$$

appelées les forces d'oscillateur généralisées

- À la limite des petites valeurs de $Q \rightarrow$

$$f_{j0}(Q) \Big|_{Q \simeq 0} = f_{j0}$$

Pouvoir d'arrêt: Formule de Bethe: $v_0 \ll v \ll c$ (1)

- Distinction nécessaire entre collisions distantes ou proches (via p) \leftrightarrow collisions avec grande ou petite quantité de mouvement transférée (via q) \leftrightarrow collisions avec grande ou petite énergie transférée (via Q)
- Séparation de l'intégrale:

$$S = \sum_j \int Q d\sigma_R f_{j0}(Q)$$

en 2 parties par rapport à $Q_0 \rightarrow$ Pour $Q < Q_0 \rightarrow$ approximation dipolaire valide (Q_0) \rightarrow

$$S_{dist} = \sum_j f_{j0} \int_{(\epsilon_j - \epsilon_0)^2 / 2mv^2}^{Q_0} Q d\sigma_R$$

Pouvoir d'arrêt: Formule de Bethe: $v_0 \ll v \ll c$ (2)

- Pour $Q > Q_0 \rightarrow$ nécessité de déterminer la borne supérieure de l'intégrale \rightarrow pour un ion interagissant avec un e^- ($m_1 \gg m$) \rightarrow

$$\begin{aligned} T_{max} &= \gamma E \\ &= \frac{4m_1 m}{(m_1 + m)^2} \frac{m_1 v^2}{2} \\ &\simeq 2m v^2 \end{aligned}$$

- Ce qui donne \rightarrow

$$S_{proche} = \int_{Q_0}^{2mv^2} Q d\sigma_R \sum_j f_{j0}(Q)$$

Pouvoir d'arrêt: Formule de Bethe: $v_0 \ll v \ll c$ (3)

- Bethe a démontré que \rightarrow

$$\sum_j f_{j0}(Q) = 1$$

- On a donc \rightarrow

$$S_{proche} = \int_{Q_0}^{2mv^2} Q d\sigma_R \equiv \sum_j f_{j0} \int_{Q_0}^{2mv^2} Q d\sigma_R$$

- En combinant collisions proches et distantes \rightarrow

$$S = S_{proche} + S_{dist} = \sum_j f_{j0} \int_{(\epsilon_j - \epsilon_0)/2mv^2}^{2mv^2} Q d\sigma_R$$

Pouvoir d'arrêt: Formule de Bethe: $v_0 \ll v \ll c$ (4)

- Considérons l'expression explicite de $d\sigma_R \rightarrow$

$$d\sigma_R = 2\pi \frac{e_1^2 e_2^2}{m_2 v^2} \frac{dQ}{Q^2}$$

- On obtient donc

$$S = \frac{4\pi e_1^2 e^2}{m v^2} Z_2 \sum_j f_{j0} \ln \frac{2m v^2}{\epsilon_j - \epsilon_0}$$

Pouvoir d'arrêt: Formule de Bethe: $v_0 \ll v \ll c$ (5)

- La formule du pouvoir d'arrêt de Bethe se note généralement \rightarrow

$$S_e = \frac{4\pi e_1^2 e^2}{mv^2} Z_2 \ln \frac{2mv^2}{I}$$

avec I défini comme l'énergie moyenne d'excitation telle que \rightarrow

$$\ln I = \sum_j f_{j0} \ln (\epsilon_j - \epsilon_0)$$

- Rappelons les conditions d'application \rightarrow

$$m_1 \gg m$$

$$v \gg v_0 \Rightarrow mv^2 \gg \hbar\omega_0$$

Comparaison Bethe \leftrightarrow Bohr

$$S_e = \frac{4\pi Z_2 e_1^2 e^2}{mv^2} L_e$$

avec $L_e = \ln \frac{Cmv^3}{|e_1 e| \omega_0}$ pour Bohr

avec $L_e = \ln \frac{2mv^2}{I}$ pour Bethe

Dépendances principales du pouvoir d'arrêt

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{elec} = NS_e = \frac{4\pi e_1^2 e^2}{mv^2} NZ_2 \ln \frac{2mv^2}{I}$$

$\frac{4\pi e_1^2 e^2}{mv^2} \Rightarrow$ Dépendance principale dans la vitesse

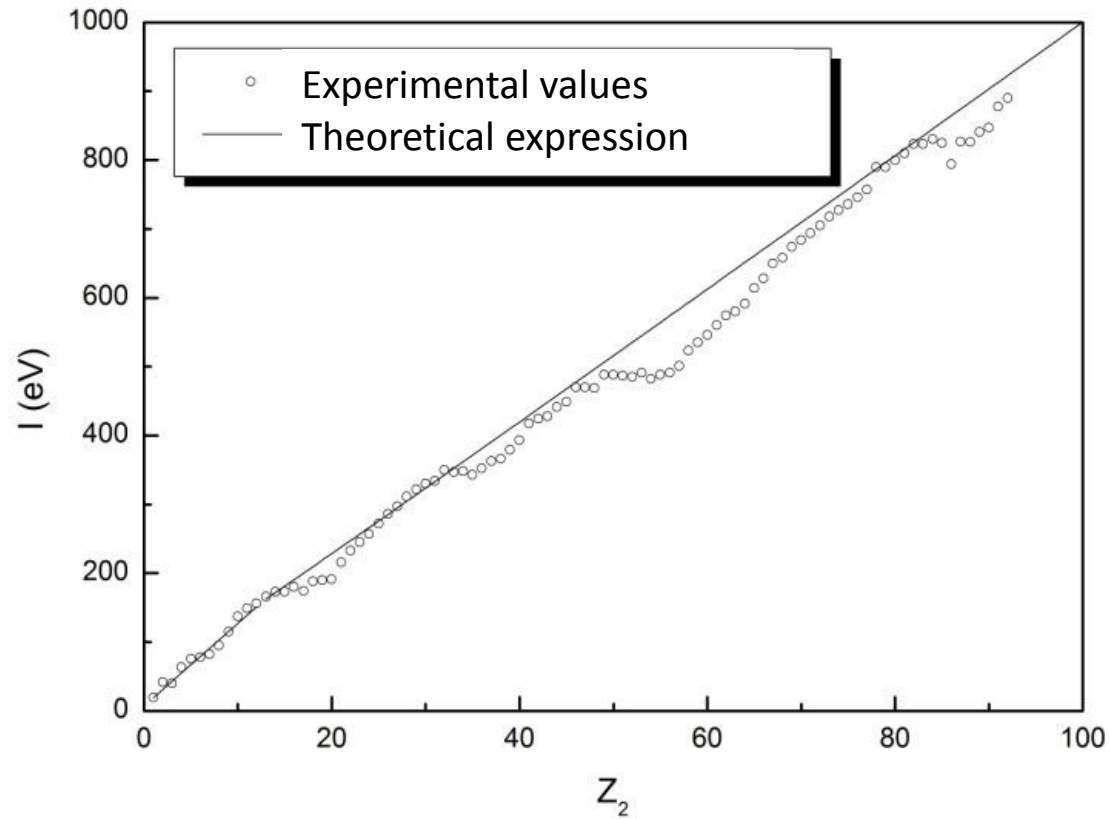
$NZ_2 \Rightarrow$ Dépendance principale dans le matériau

$\ln \frac{2mv^2}{I} \Rightarrow$ Dépendance faible dans la vitesse et dans le matériau

Énergie moyenne d'excitation (1)

- L' énergie moyenne d'excitation I ne dépend que du matériau (pas du projectile)
- Difficile à calculer \rightarrow obtenu par l'expérience
- I intervient dans le terme logarithmique de $S \rightarrow$ pas nécessaire de connaître sa valeur avec précision
- I varie linéairement (de manière approximative) avec $Z \rightarrow$ modèle de l'atome de Thomas-Fermi (les électrons atomiques forment un gaz)
- Les irrégularités de la variation en Z sont dues à la structure en couches de l'atome
- La plupart du temps \rightarrow évaluation de I grâce à une formule empirique

Énergie moyenne d'excitation (2)



$$\frac{I}{Z} = \begin{cases} 12 + 7/Z & Z < 13 \\ 9.76 + 58.8Z^{-1.19} & Z \geq 13 \end{cases}$$

I pour des matériaux composites

- Pour des matériaux composites \rightarrow le pouvoir d'arrêt du matériau composé peut être approché par la somme des pouvoirs d'arrêt de ses constituants élémentaires \rightarrow relation identique pour les énergies moyennes d'excitation
- Règle d'additivité de Bragg pour n matériaux $i \rightarrow$

$$NZ = \sum_i^n N_i Z_i$$

$$NZ \ln I = \sum_i^n N_i Z_i \ln I_i$$

avec Z_i , le numéro atomique des atomes de type i , N_i le nombre d'atomes de type i par unité de volume et $N = \sum_i N_i$ le nombre total d'atomes par unité de volume

Équation de Bethe-Bloch: $v_0 < v \simeq c$ (1)

- À partir de l'équation de Bethe → nombreuses corrections apportées → équation de Bethe-Bloch →

$$S_e = \frac{4\pi r_e^2 mc^2}{\beta^2} Z z^2 L(\beta)$$

- Expression « standard » du pouvoir d'arrêt électronique pour des ions avec $\beta = v/c$, $z = e_1/e$, $r_e = e^2/(mc^2)$ (r_e : rayon classique de l'électron) et $L(\beta)$, le nombre d'arrêt
- Dans la formule de Bethe-Bloch « standard » →

$$L(\beta) = L_0(\beta) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2mc^2 \beta^2 W_m}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \ln I - \frac{C}{Z} - \frac{\delta}{2}$$

Équation de Bethe-Bloch: $v_0 < v \simeq c$ (2)

- Avec W_m l'énergie maximale transférée en 1 collision à un électron libre (expression relativiste non-approchée) \rightarrow

$$W_m = \frac{2mc^2\beta^2}{1-\beta^2} \left[1 + \frac{2m}{m_1(1-\beta^2)^{1/2}} + \left(\frac{m}{m_1} \right)^2 \right]^{-1}$$

- Pour $m_1 \gg m \rightarrow$ on retrouve bien $2m\gamma_1^2v^2$

Correction relativiste: $v \simeq c$ (1)

- Si $v \simeq c$ ou $\beta = v/c \simeq 1 \rightarrow$ corrections relativistes doivent être apportées aux expressions précédentes \rightarrow terme $\gamma_1 = (1-\beta^2)^{-1/2}$
- On a aussi $\rightarrow p_{max} \sim \gamma_1 v / \omega_0 \rightarrow \nearrow$ de la limite maximale du paramètre d'impact quand $v \nearrow$
- Un calcul relativiste classique (idem en quantique) complet montre que E devient \rightarrow

$$\vec{E}(\omega) = -\frac{e_1 \omega}{\pi \gamma_1 v^2} \left(\frac{i}{\gamma_1} K_0 \left(\frac{\omega_{j0} p}{\gamma_1 v} \right), K_1 \left(\frac{\omega_{j0} p}{\gamma_1 v} \right), 0 \right)$$

- On a ainsi une modification relativiste de $f_{dist}(p) \rightarrow$

$$f_{dist}(p) = \frac{1}{\gamma_1^2} \left[\frac{\omega_0 p}{\gamma_1 v} K_0 \left(\frac{\omega_0 p}{\gamma_1 v} \right) \right]^2 + \left[\frac{\omega_0 p}{\gamma_1 v} K_1 \left(\frac{\omega_0 p}{\gamma_1 v} \right) \right]^2$$

Correction relativiste: $v \simeq c$ (2)

- Et donc une modification de la composante principale en la vitesse \rightarrow

$$\frac{4\pi e_1^2 e^2}{mv^2} \Rightarrow \frac{4\pi e_1^2 e^2}{m\gamma_1^2 v^2} = \frac{4\pi e_1^2 e^2}{mv^2} (1 - \beta^2)$$

- De plus la quantité de mouvement de la particule incidente devient $m\gamma_1 v \rightarrow$

$$T_{max} = 2m\gamma_1^2 v^2$$

- Et donc une modification de la composante logarithmique \rightarrow

$$\ln \frac{2mv^2}{I} \Rightarrow \ln \frac{2m\gamma_1^2 v^2}{I} = \ln \frac{2mv^2}{I(1 - \beta^2)}$$

- La combinaison des modifications implique que S \nearrow quand v \nearrow

Correction de densité (1)

- Correction de densité $\rightarrow -\delta/2$
- Dans la formule de Bethe \rightarrow interactions avec des atomes isolés \rightarrow valable pour un gaz de faible densité
- Dans un milieu condensé (solide) \rightarrow interactions peuvent se faire avec un grand nombre d'atomes à la fois \rightarrow il faut tenir compte des effets collectifs
- Modèle de Fermi (1940) \rightarrow milieu assimilé à un gaz d'oscillateurs soumis au champ électrique de la particule
- Particule chargée incidente \rightarrow polarisation du milieu \rightarrow le champ électrique produit par la particule chargée perturbe les atomes en leur donnant un moment dipolaire électrique \rightarrow production d'un champ électrique qui s'oppose à celui produit par la particule chargée \rightarrow réduction du champ électrique à cause de l'effet d'écrantage des dipôles

Correction de densité (2)

- La polarisation implique que les atomes lointains sont soumis à un champ électrique plus faible \rightarrow leur contribution au pouvoir d'arrêt est donc réduite
- L'effet de densité apparaît surtout aux énergies élevées à cause du facteur γ_1 dans p_{max} qui augmente l'erreur commise en ignorant la polarisation du milieu $\rightarrow v \nearrow \rightarrow p_{max} \nearrow \rightarrow \delta/2 \nearrow \rightarrow S \searrow$
- La correction de densité peut s'écrire \rightarrow

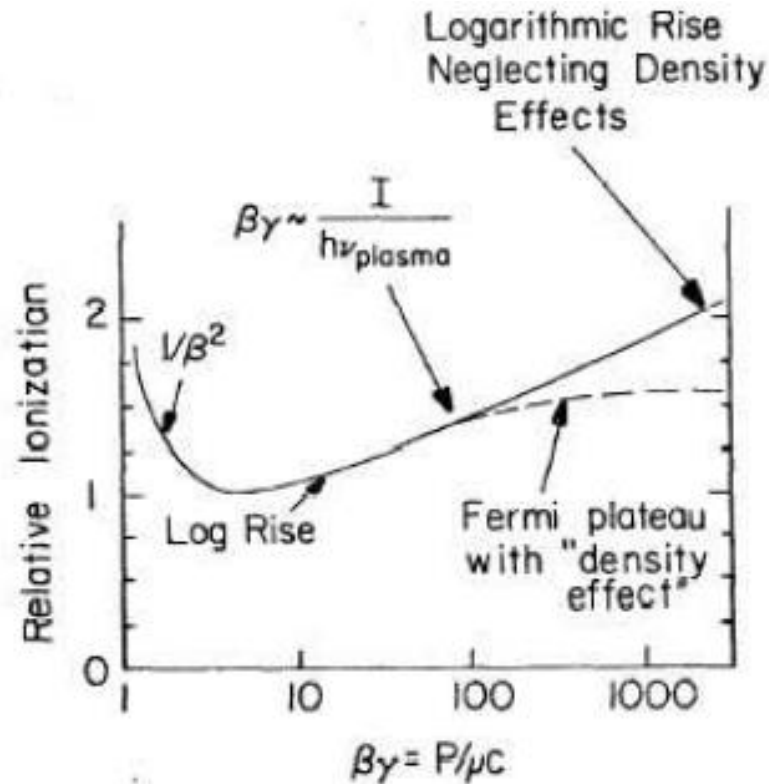
$$\frac{\delta}{2} = \ln \frac{\hbar\omega_p}{I} + \ln \gamma_1 \beta - \frac{1}{2}$$

avec ω_p , la pulsation plasma pour une densité électronique $n = NZ$ (ϵ_0 : constante diélectrique) \rightarrow

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0 m}}$$

Correction de densité (3)

- Les effets relativistes et de densité tendent à se compenser → plateau de Fermi



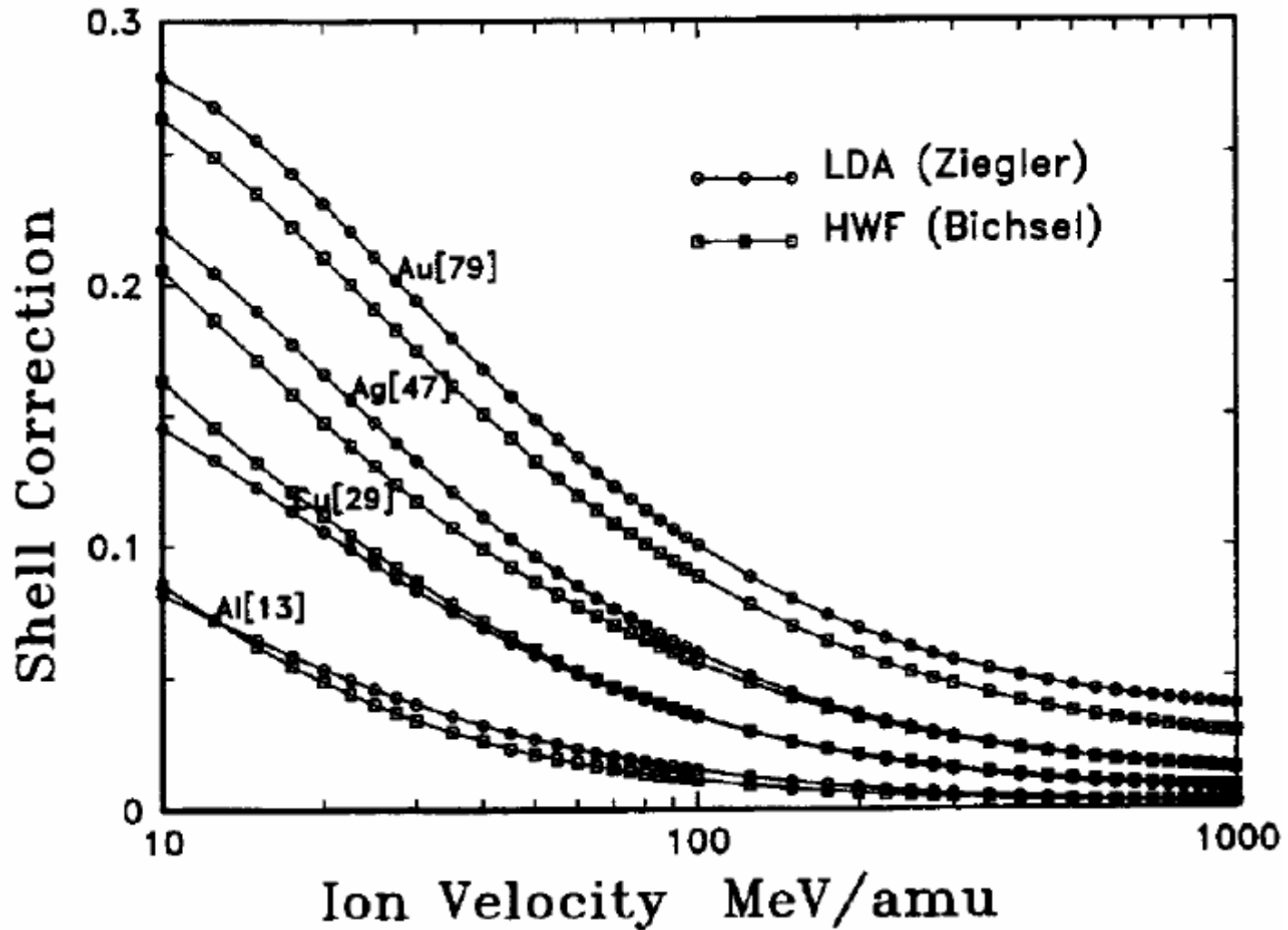
Correction shell (« en couches ») (1)

- Correction shell $\rightarrow -C/Z$
- Les formules de Bethe et Bohr sont basées sur l'hypothèse $v \gg v_0$ (vitesse des e^- atomiques) \rightarrow l'évaluation d'un I moyen repose sur cette hypothèse
- Quand ce n'est pas le cas \rightarrow il faut calculer explicitement les interactions ions-électrons pour chaque couche et chaque énergie de liaison des électrons
- Quand $v \searrow \rightarrow$ les contributions à S des électrons des couche les plus liées \searrow (d'abord K, puis L, ...)
- Terme correction « moyen » qui réduit S (correction maximale de 6%) \rightarrow identique pour toutes les particules chargées (e^- compris) \rightarrow ne dépend que de la vitesse et du matériau

Correction shell (2)

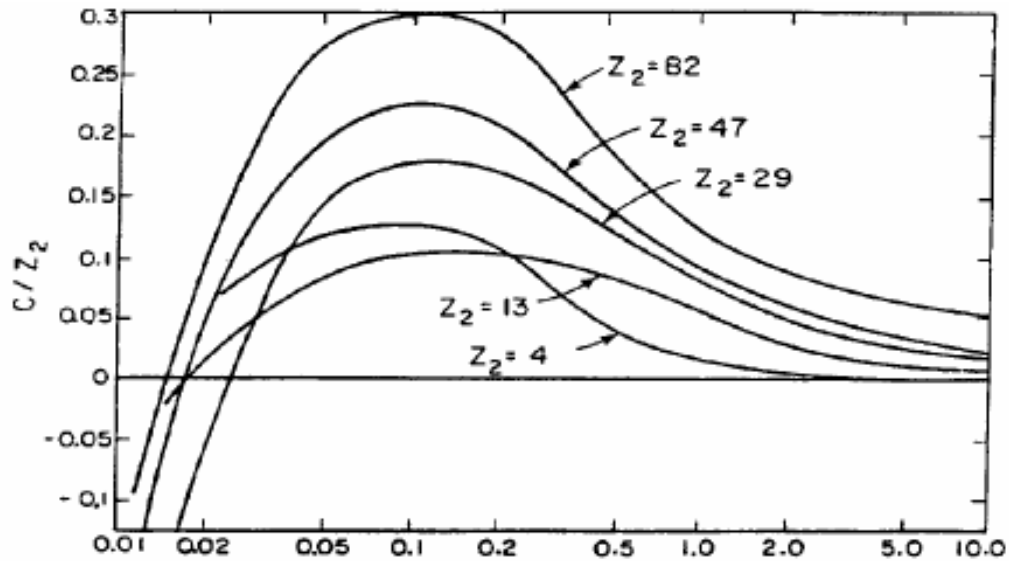
- Il existe 2 modèles pour calculer $C/Z \rightarrow$
 1. La méthode des fonctions d'ondes hydrogénoïdes (HWF: e^- liés décrits par des fonctions d'ondes hydrogénoïdes)
 2. La méthode de l'approximation en densité locale (LDA: e^- liés constituent un gaz d' e^- de densité variable)

Correction shell (3)

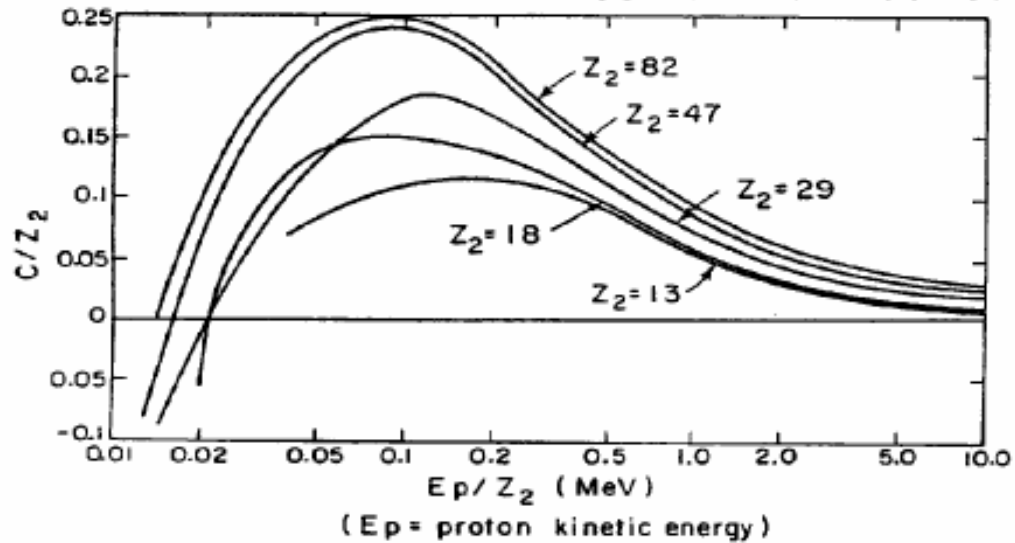


Correction shell (4)

LDA



HWF



Corrections au-delà de l'approximation de Born au 1^{er} ordre

- Le nombre d'arrêt L_0 n'est valable que si la vitesse du projectile est grande par rapport aux vitesses des électrons atomiques
- Pour $v_0 \lesssim v \rightarrow$ l'approximation de Born au 1^{er} ordre (sur laquelle est basé le calcul de Bethe) n'est plus valable
- Il faut ajouter des termes correctifs à $L_0 \rightarrow$ développement de L en puissance de $z \rightarrow$

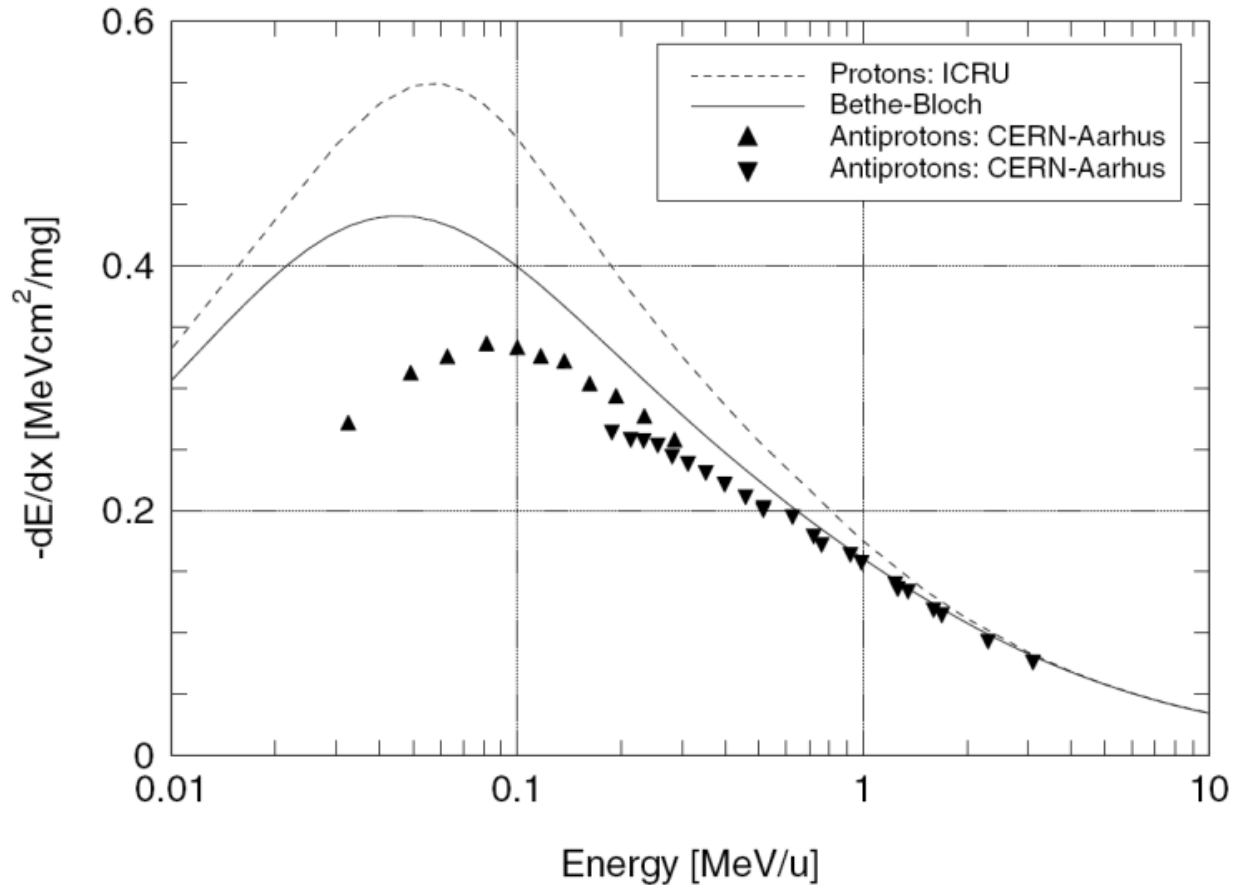
$$L(\beta) = L_0(\beta) + zL_1(\beta) + z^2L_2(\beta)$$

Correction de Barkas-Andersen

- Correction de Barkas-Andersen $\rightarrow zL_1(\beta)$
- La correction de Barkas-Andersen est proportionnelle à une puissance impaire de la charge du projectile $\rightarrow S$ pour des particules négatives est légèrement plus faible que pour des particules positives $\rightarrow S \neq$ entre particules et antiparticules correspondantes
- Une charge positive attire les $e^- \rightarrow$ les interactions $\nearrow \rightarrow S \nearrow$
- Une charge négative repousse les $e^- \rightarrow$ les interactions $\searrow \rightarrow S \searrow$

Exemple d'effet de Barkas-Andersen

Protons et antiprotons incidents sur une cible de silicium →



Correction de Bloch

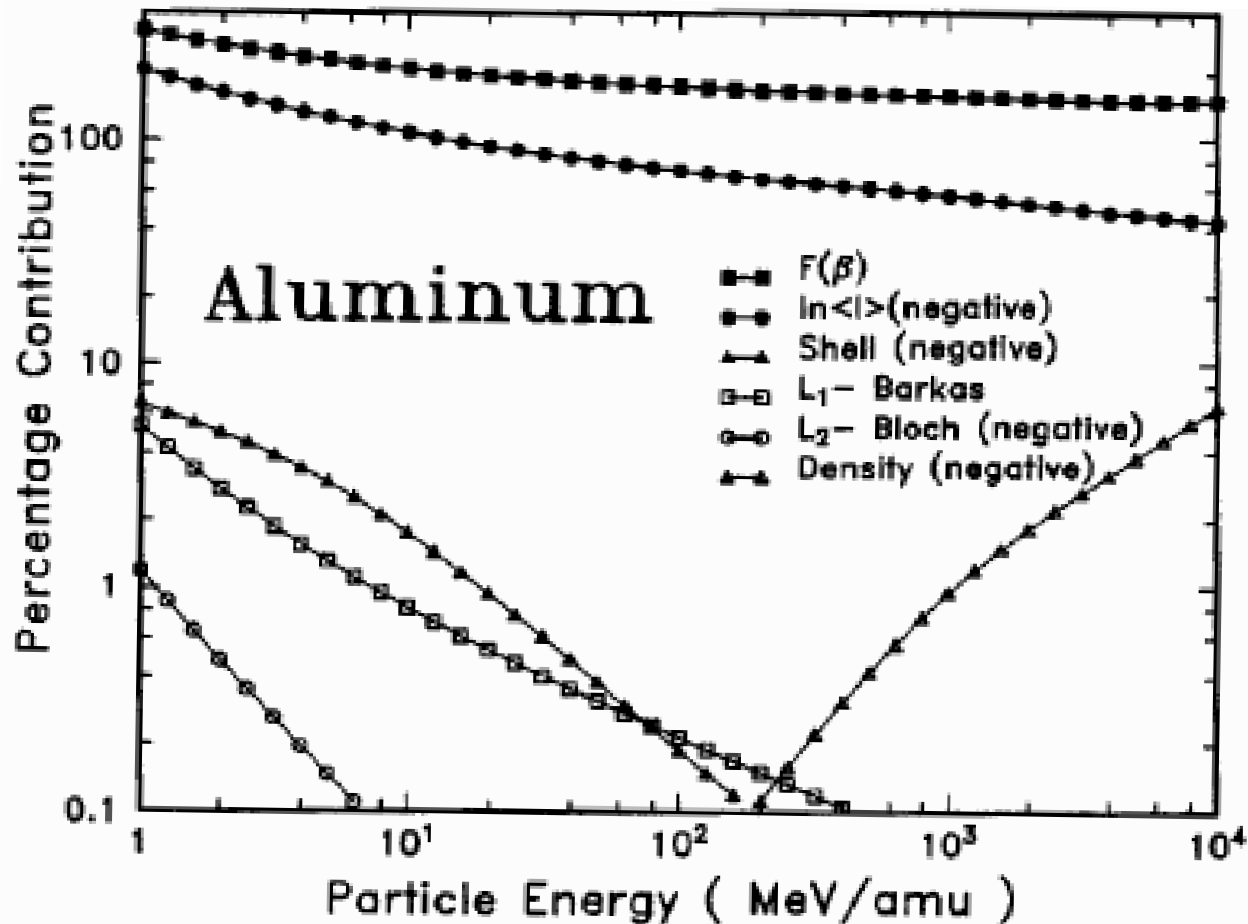
- Correction de Bloch $\rightarrow z^2 L_2(\beta)$
- Modèle semi-classique tenant précisément en compte les collisions distantes (à grand paramètre d'impact)
- Généralement on considère l'évaluation de Bichsel de la correction de Bloch \rightarrow

$$z^2 L_2(y) = -y^2 [1.202 - y^2 (1.042 - 0.855y^2 + 0.343y^4)]$$

avec $y = z\alpha/\beta$ et $\alpha=1/137$ (constante de structure fine)

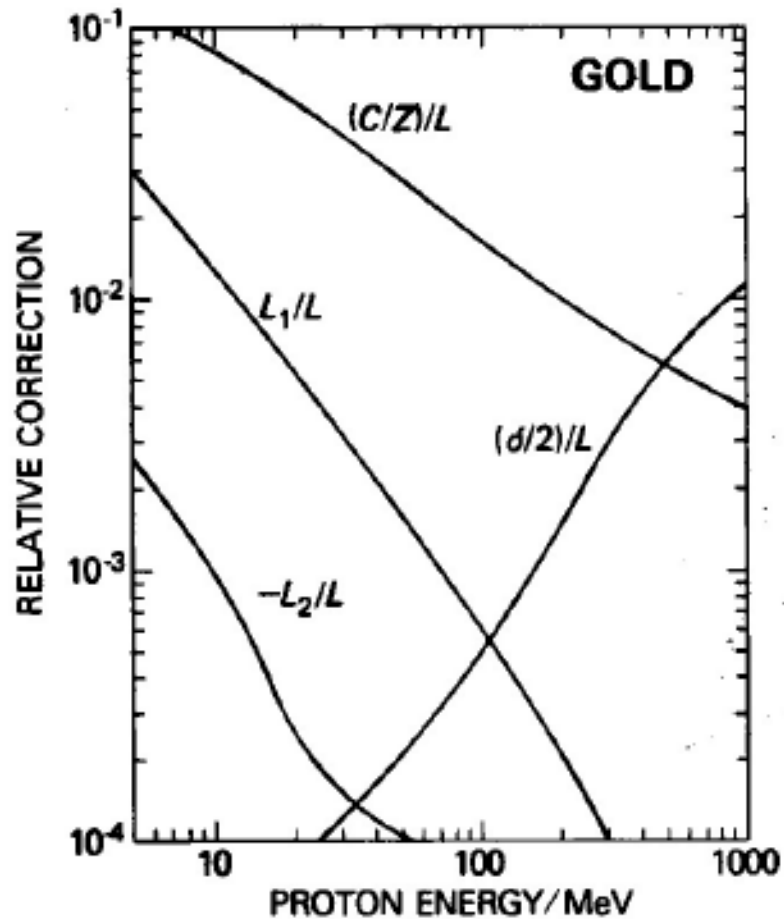
Évaluation des \neq corrections (1)

Protons incidents sur une cible d'aluminium \rightarrow



Évaluation des ≠ corrections (2)

Protons incidents sur une cible d'or →



Pouvoir d'arrêt électronique aux vitesses très élevés

- Équation ultra-relativiste de Lindhard-Sørensen ($E \sim 100$ GeV
→ largement au-delà des applications du cours)

$$L \rightarrow \ln \frac{1.64c}{R\omega_p}$$

avec R , le rayon du projectile

- Attention: pour $E \nearrow \rightarrow$ la création de paires électron-positron devient le mécanisme dominant

Section efficace d'arrêt électronique pour les faibles vitesses

- Pour $v \lesssim v_0 \rightarrow$ la méthode des perturbations n'est pas applicable
- De plus processus de capture électronique par l'ion incident (par exemple: $\text{He}^{++} \rightarrow \text{He}^+ \rightarrow \text{He}^0$) \rightarrow l'état de charge z^* de l'ion est variable (théorie de Thomas-Fermi) \rightarrow

$$z^* = z \left(1 - e^{-v/(z^{2/3}v_0)} \right)$$

- Un certain nombre de théories mais aucune n'est aussi précise que celle de Bethe-Bloch pour les grandes vitesses \rightarrow utilisation d'expressions semi-empiriques basées sur une « tendance » \rightarrow

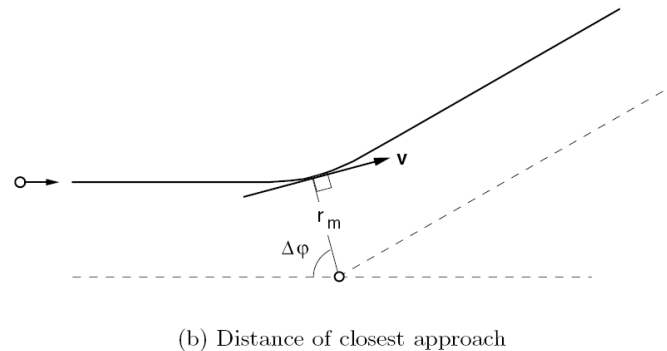
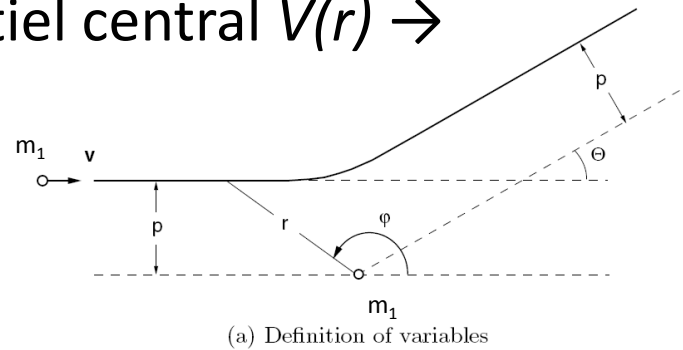
$$S_e \propto E^{0.5}$$

Section efficace d'arrêt nucléaire (1)

- Comme vu au chapitre 1 → les collisions nucléaires pour des ions incidents sont rares → contribuent très peu au pouvoir d'arrêt total
- Elles se produisent presque exclusivement pour des ions incidents de faible vitesse et même alors leur contribution est faible
- Cependant → elles peuvent avoir des effets à posteriori → dégâts radiatifs

Section efficace d'arrêt nucléaire (2)

Dans le système du centre de masse \rightarrow diffusion par un angle θ due à un potentiel central $V(r) \rightarrow$



$$\Rightarrow S_n = \int T d\sigma = \int T 2\pi p dp = 2\pi\gamma E \int \sin^2(\theta/2) p dp \quad \text{with} \quad \gamma = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2}$$

Section efficace d'arrêt nucléaire (3)

On obtient avec E_r l'énergie initiale (dans le CM) \rightarrow

$$\frac{m_0}{2} \left[\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right] + V(r) = \frac{m_0}{2} v^2 \equiv E_r$$

$$m_0 r^2 \frac{d\varphi}{dt} = -m_0 p v$$

$$\Rightarrow \theta = \pi - 2 \int_{r_m}^{\infty} dr \frac{p}{r^2} \left(1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{p^2}{r^2} \right)^{-1/2}$$

Potentiel d'interaction

- Potentiel de Coulomb \rightarrow divergence de la section efficace totale aux grands paramètres d'impact car portée infinie \rightarrow il faut tenir compte de l'effet d'écrantage par les électrons atomiques qui diminue la portée du potentiel
- Insertion d'une exponentielle décroissante telle $\exp(-r/r_s)$ suffit
- Modèle plus précis \rightarrow insertion d'une fonction $F_s(r/r_s) \rightarrow$ le potentiel d'interaction devient \rightarrow

$$V(r) = \frac{z_1 Z_2 e^2}{r} F_s\left(\frac{r}{r_s}\right)$$

- La fonction d'écrantage $F_s(r/r_s)$ avec r_s , la longueur d'écrantage de Thomas-Fermi, est obtenue par ajustement aux résultats expérimentaux \rightarrow « fonction d'écrantage universelle »

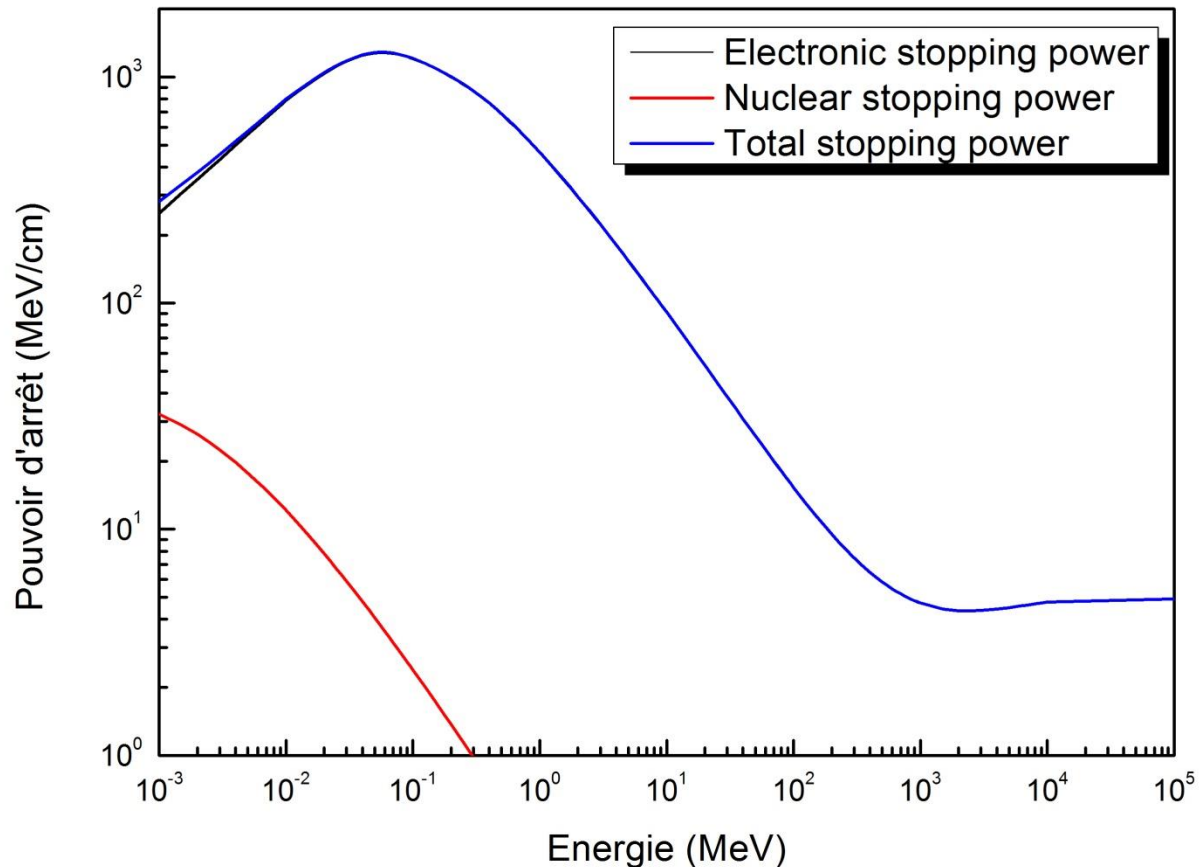
Fonction d'écrantage universelle

$$F_s(r/r_s) = 0.1818 \exp(-3.2r/r_s) + 0.5099 \exp(-0.942r/r_s) \\ + 0.2802 \exp(-0.4029r/r_s) + 0.2817 \exp(-0.2016r/r_s)$$

avec $r_s = 0.88534a_0 (z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})^{-1}$ et $a_0 = 0.529\text{\AA}$

Pouvoir d'arrêt pour des ions: Exemple

Protons incidents sur une cible d'aluminium $\rightarrow S = S_{elec} + S_{nucl} \approx S_{elec} = S_{coll}$



Pouvoir d'arrêt massique électronique (1)

- Le pouvoir d'arrêt massique d'un matériau est le rapport du pouvoir d'arrêt linéique et de la masse volumique ρ de ce matériau (unités usuelles: $\text{MeV cm}^2 \text{g}^{-1}$) \rightarrow

$$\frac{NS(E)}{\rho} = -\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx}$$

- Comme $\rho = M_A N / N_A$ (avec M_A , la masse molaire, N , la densité atomique et N_A , le nombre d'Avogadro) et $M_A = A M_u$ (avec A , le nombre de masse et $M_u = m_u N_A = 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}$, la constante de masse molaire et m_u , la constante de masse atomique) \rightarrow

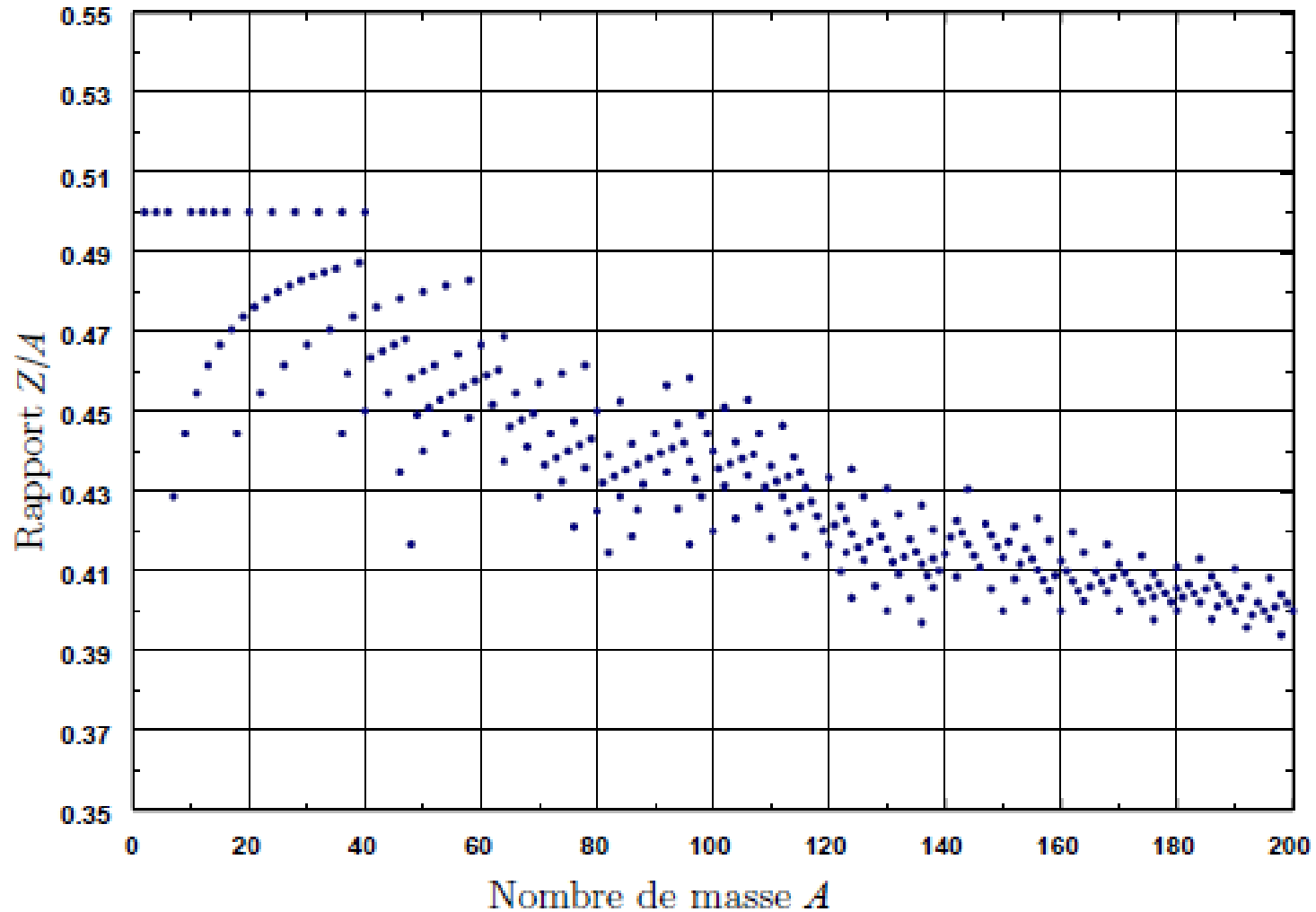
$$-\frac{1}{\rho} \frac{dE_{elec}}{dx} = 4\pi r_e^2 m c^2 \frac{N_A}{M_u} \frac{Z}{A} \frac{z^2}{\beta^2} L(\beta)$$

Pouvoir d'arrêt massique électronique (2)

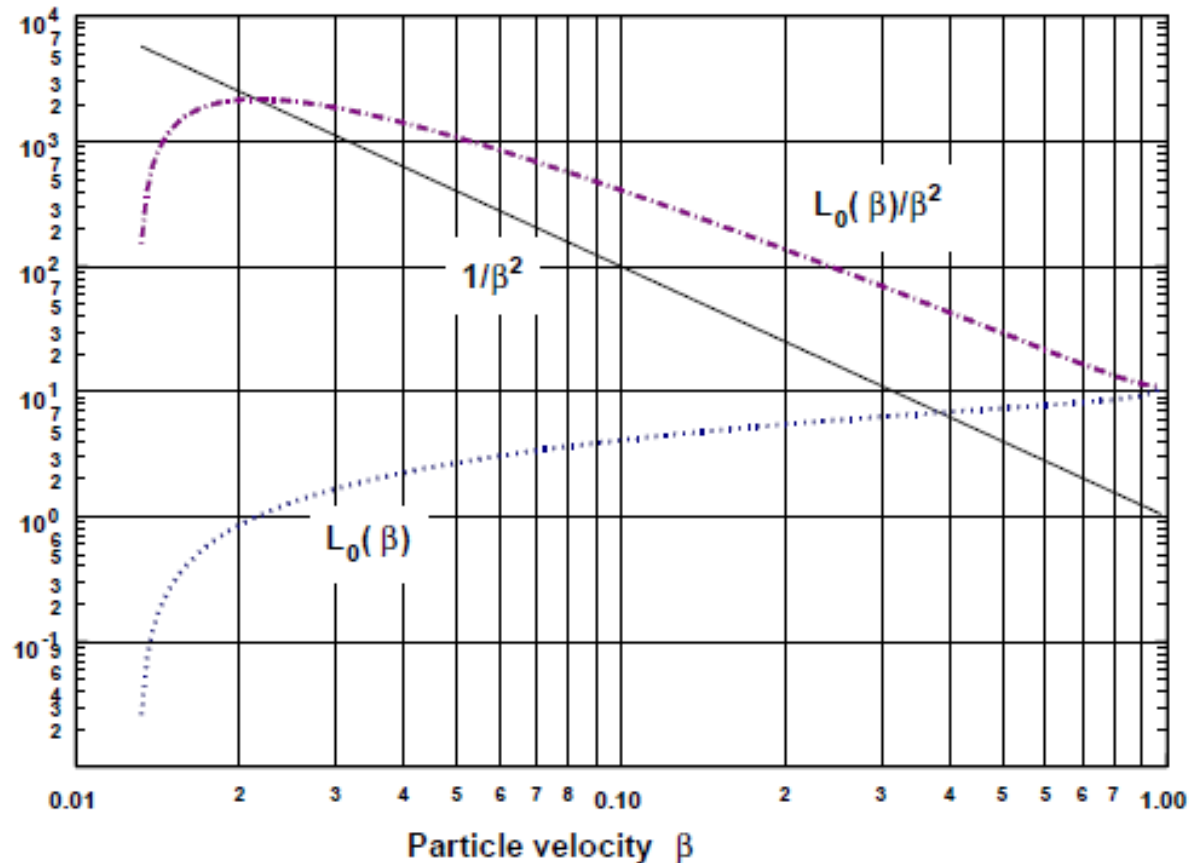
Le pouvoir d'arrêt massique électronique est donc le produit de 4 facteurs:

1. Le facteur constant $4\pi r_e^2 mc^2 N_A / M_u = 0.307 \text{ MeV cm}^2 \text{ g}^{-1}$ → qui donne l'ordre de grandeur du pouvoir d'arrêt massique
2. Le facteur Z/A qui est compris entre 0.4 et 0.5 pour tous les isotopes stables (excepté l'hydrogène) → faible dépendance dans le matériau
3. Le facteur β^{-2} → fonction monotone décroissante de la vitesse de l'ion qui tend vers 1 pour les grandes énergies → explique la diminution du pouvoir d'arrêt avec l'énergie
4. Le nombre d'arrêt $L(\beta)$ → pour $L(\beta) = L_0(\beta)$ → fonction monotone croissante (lente) de la vitesse et de Z (via I : $-\ln I$)

Variation de Z/A en fonction de A

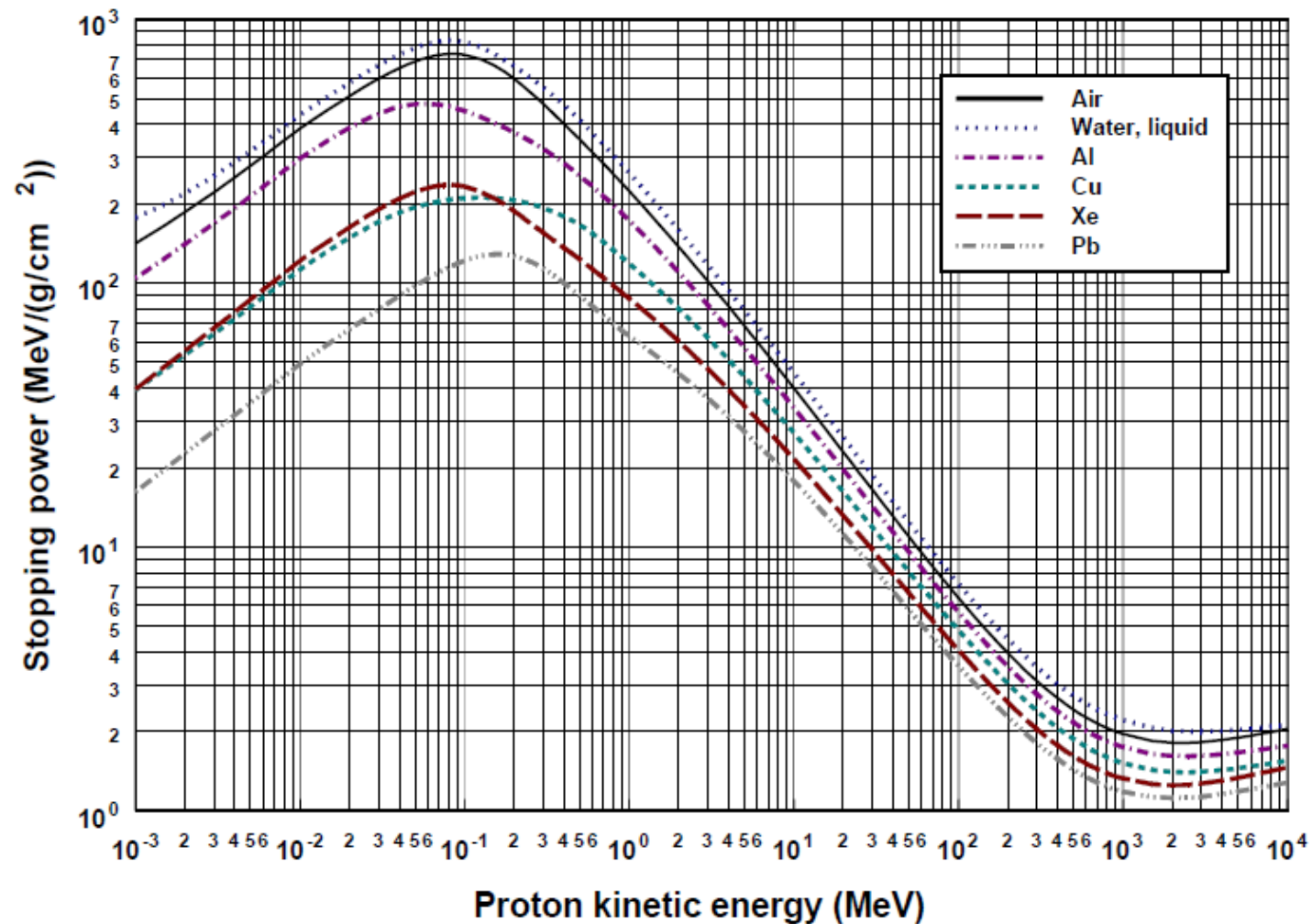


Dépendance en la vitesse



Protons incidents sur une cible de silicium \rightarrow les corrections shell et de densité sont négligées dans $L_0(\beta)$

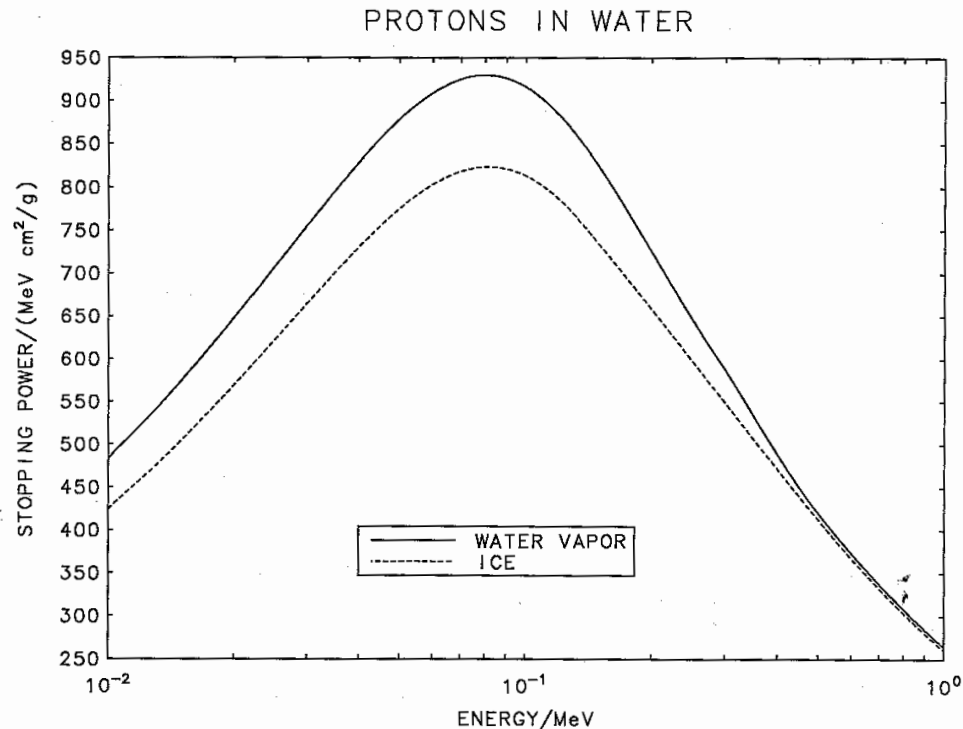
Pouvoir d'arrêt massique électronique: Exemples



Protons incidents sur différents matériaux

Influence de la phase

- Aux grandes énergies → influence de la correction de densité → correction grande dans les solides et faible dans les gaz
- Aux faibles énergies → influence des liaisons chimiques et intermoléculaires → modification de la valeur de I (exemple: eau liquide: $I = 75.0$ eV et vapeur d'eau: $I = 71.6$ eV)



Parcours des particules chargées (1)

- Les particules chargées perdent leur énergie dans la matière → elles parcourent une certaine distance dans la matière → distance variable à cause des pertes d'énergie et des déviations aléatoires (straggling) → plusieurs parcours doivent être définies:
 - Le parcours R d'une particule chargée d'énergie E dans un milieu est la valeur moyenne $\langle l \rangle$ de la longueur l de sa trajectoire suivie jusqu'à son arrêt (sans tenir compte du mouvement thermique)
 - Le parcours projeté R_p d'une particule chargée d'énergie E dans un milieu est la valeur moyenne de sa profondeur de pénétration $\langle d \rangle$ dans la direction initiale de la particule
- $R_p < R$ à cause du caractère sinueux des trajectoires → définition du facteur de détour = $R_p/R_{CSDA} < 1$

Parcours des particules chargées (2)

- Dans l'approximation CSDA \rightarrow

$$R_{CSDA} = \int_0^E \frac{dE'}{NS(E')}$$

- En remplaçant S par l'expression de Bethe (non-relativiste $\rightarrow dE = Mvdv$) \rightarrow

$$R_{CSDA} \propto \int_0^v \frac{v^3 dv}{L(v)}$$

- En négligeant la dépendance en la vitesse du nombre d'arrêt \rightarrow

$$R_{CSDA} \propto v^4 \propto E^2$$

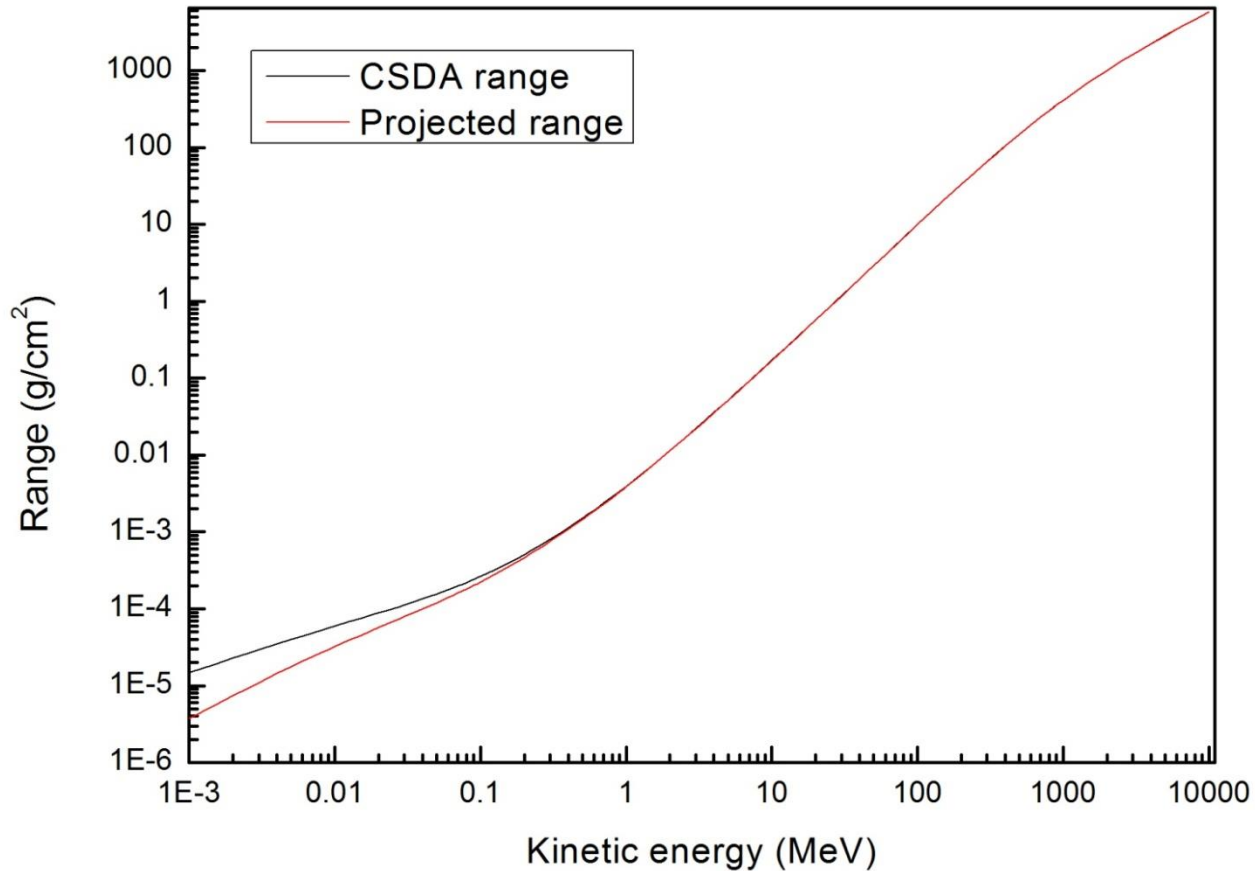
Parcours des particules chargées (3)

- En réalité → équation de Bethe (ou Bethe-Bloch) pas valable à faible vitesses → or pour arriver à l'arrêt → les faibles vitesses doivent être considérées
- En pratique → on considère la formule empirique →

$$\rho R_{CSDA} = \frac{E^{1.77}}{415} + \frac{1}{670}$$

Parcours des particules chargées: Exemple

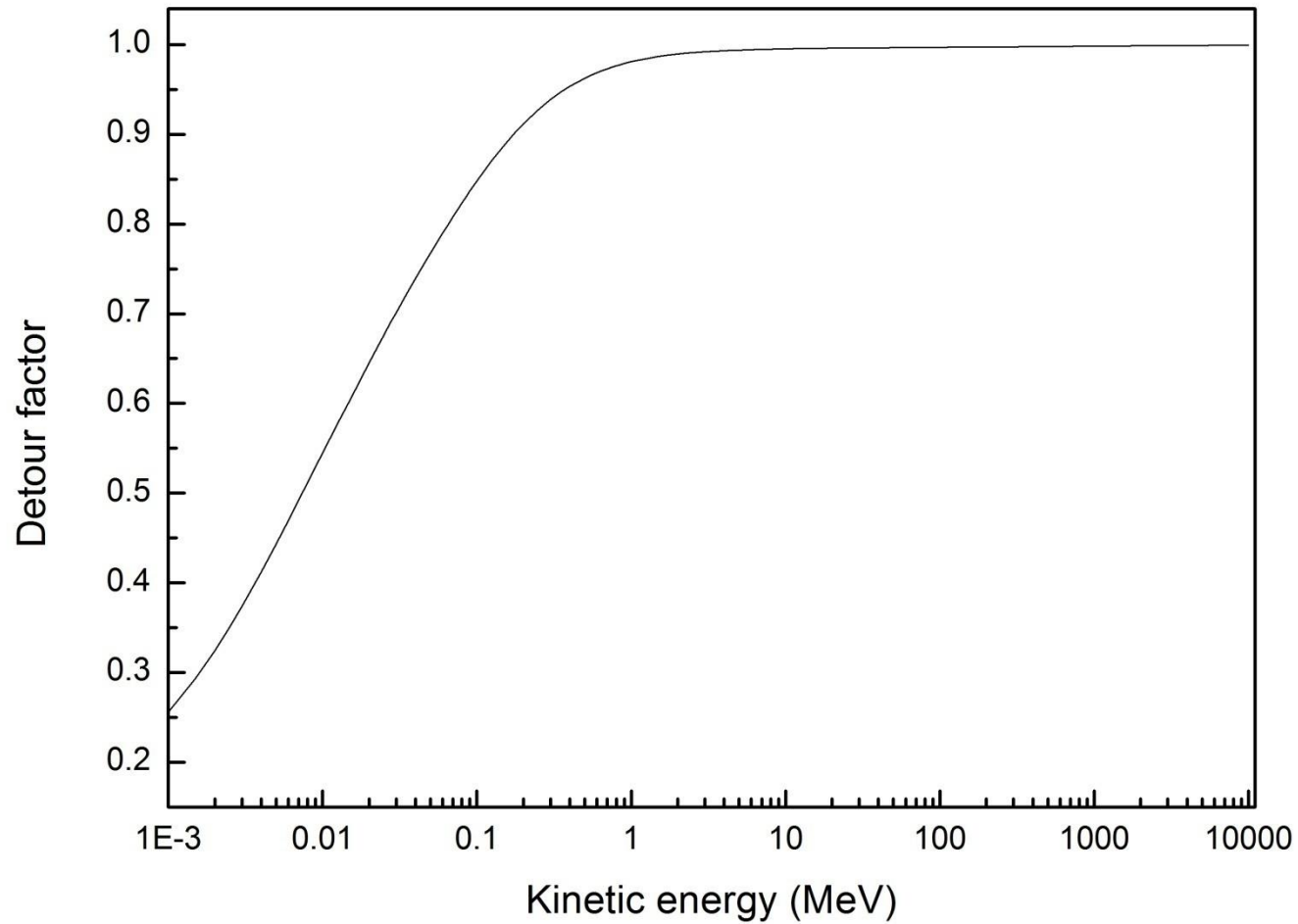
Proton incident sur une cible d'aluminium ($\rho = 2.70 \text{ g/cm}^3$)



<http://www.nist.gov/pml/data/star/index.cfm>

Facteur de détour

Proton incident sur une cible d'aluminium



Considérations sur le parcours

- Reprenons l'approximation $NS(E) \propto 1/E$
- Considérons une particule incidente de masse M_i et de charge $z_i \rightarrow$

$$NS(E) = -\frac{dE}{dx} \Rightarrow -\frac{M_i}{z_i^2} \frac{dv^2}{dx} \propto \frac{1}{v^2}$$

- Pour deux particules incidentes (M_1, z_1) et (M_2, z_2) de même vitesse initiale \rightarrow

$$\frac{R_{CSDA}^1}{R_{CSDA}^2} = \frac{M_1 z_2^2}{M_2 z_1^2}$$



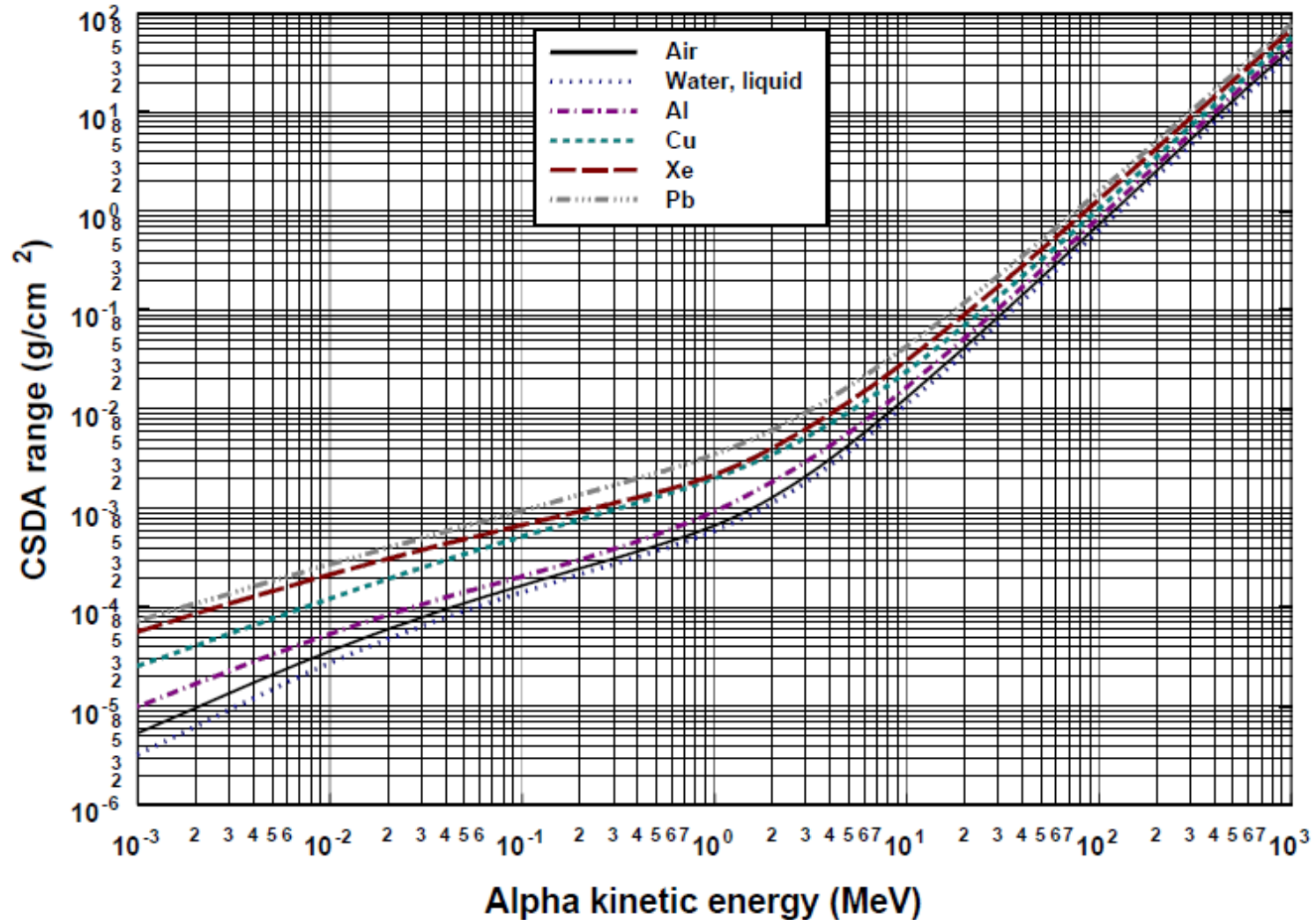
Même range pour des protons et des α de même vitesse

Exemples de parcours CSDA (1)

- 5.5 MeV α dans l'air: $R_{CSDA} = 4.2$ cm
- 4.0 MeV α dans l'air: $R_{CSDA} = 2.6$ cm
- 5.5 MeV α dans l'aluminium: $R_{CSDA} = 2.5 \cdot 10^{-3}$ cm
- 1 MeV proton dans l'air : $R_{CSDA} = 2.4$ cm
- 4 MeV proton dans l'air : $R_{CSDA} = 23.6$ cm
- 5.5 MeV proton dans l'aluminium: $R_{CSDA} = 2.3 \cdot 10^{-2}$ cm

<http://www.nist.gov/pml/data/star/index.cfm>

Exemples de parcours CSDA (2)



α incidents sur différents matériaux

Courbe de Bragg

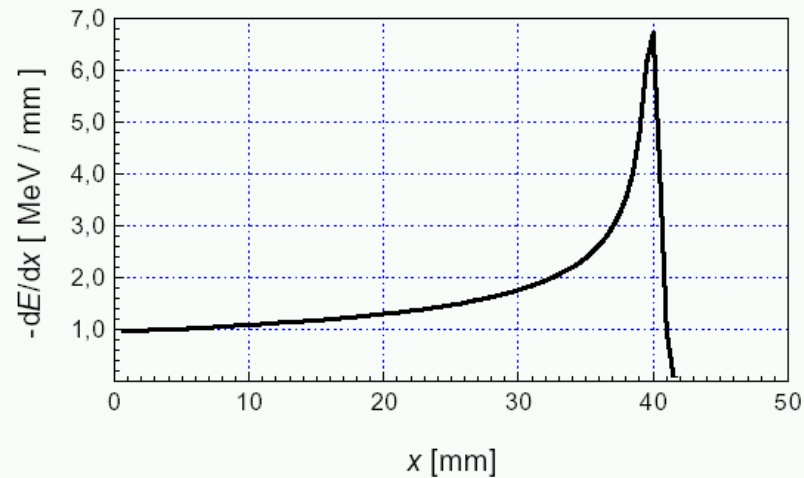
- On considère un milieu semi-infini et un faisceau parallèle de particules chargées identiques et de même $E \rightarrow$ elle s'arrêtent après une distance R_{CSDA}
- La courbe de Bragg est la courbe donnant la dose (énergie moyenne déposée par unité de masse de la cible) déposée par les particules chargées en fonction de la profondeur
- A une profondeur x la particule doit encore parcourir une distance $d = R_{CSDA} - x$
- L'énergie déposée $D \propto S \propto 1/v^2 \rightarrow R_{CSDA} \propto v^4$



$$D \propto \frac{1}{\sqrt{d}} = \frac{1}{\sqrt{R_{CSDA} - x}}$$

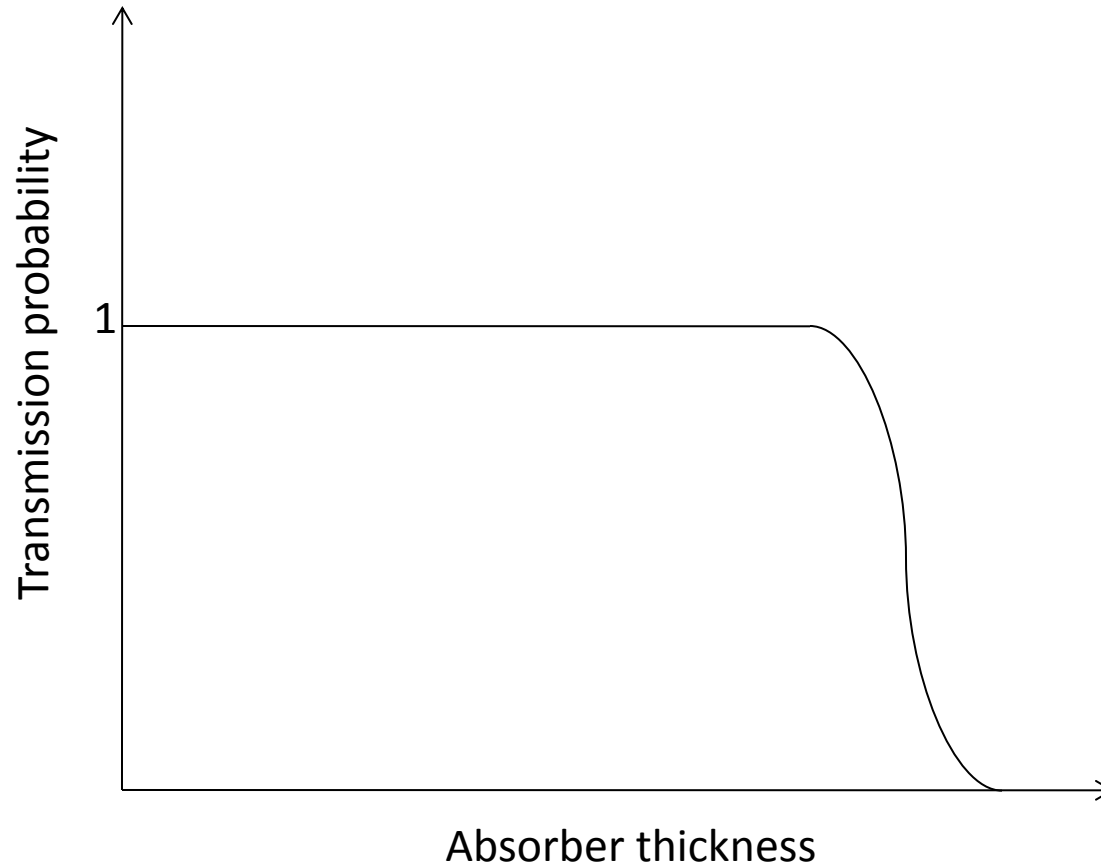
Exemple de courbe de Bragg

- Protons de 700 MeV dans l'eau →



- Applications: protonthérapie ou hadronthérapie

Transmissions d'ions



Interactions nucléaires fortes

- Si un ion s'approche très près d'un noyau → une interaction nucléaire forte devient possible → le noyau cible peut être brisé
- Un cas particulier: la collision d'un proton d'énergie élevée avec un noyau lourd (càd avec plus de neutrons que de protons (Pb: 82 protons et ≈ 125 neutrons) → les fragments vont rapidement expulser leur excès de neutrons → production d'un grand nombre de neutrons secondaires (pour un proton avec $E = 1$ GeV → production en moyenne de 25 neutrons dans le Pb)
- Ce processus de production de neutrons est appelé spallation → moyen efficace de produire des neutrons
- Tous les fragments interagissent avec la matière