République **A**lgérienne **D**émocratique et **P**opulaire

Ministère de l'**E**nseignement **S**upérieur et de la **R**echerche **S**cientifique

Université 20 août 1955-Skikda

Faculté des Sciences

Département de Physique

N° :D02P202603M

Mémoire de Master

Filière : Physique

Spécialité : Physique Médicale

Thème

Étude théorique du comportement de l'or à l'interface du système Au/Si soumis à des rayonnements ionisants et son utilisation en radiothérapie.

Présenté par :

BENYOUCEF Zineb Heifa
MAKABROU Lyna

Soutenu le 24/06/2026 devant le jury composé de:

Sihem Djellab	MCA	Université de Skikda	Présidente
Soraya Kadid	MCA	Université de Skikda	Encadreur
Mouloud Boukadjane	MCA	Université de Skikda	Examinateur

Année Universitaire : 2025/2026





Remerciements :

Bismillah Ar-Rahman Ar-Rahim. Louange à Dieu grâce à qui les actions s'accomplissent. Par sa grâce, sa miséricorde et son aide, nous avons pu achever ce travail scientifique. J'exprime ma profonde gratitude à ma directrice, le Dr Kadid Soraya, pour ses précieux conseils, ses orientations pertinentes et son soutien continu tout au long de la réalisation de cette mémoire. Nous remercions le Dr Sihem Djellab pour avoir accepté la présidence du jury de soutenance de cette mémoire. Nous remercions également le Dr Mouloud Boukadjane pour l'attention portée à ce travail en acceptant de participer au comité d'évaluation. Nous exprimons aussi notre sincère reconnaissance au département de physique ainsi qu'à tous les enseignants et membres du corps professoral pour leurs efforts pédagogiques et scientifiques, qui ont grandement contribué à notre formation académique tout au long de nos années d'études.

Remerciements : Benyoucef Zineb Heifa

﴿وَأَن لَّيْسَ لِلْإِنسَانِ إِلَّا مَا سَعَىٰ وَأَنَّ سَعْيَهُ سَوْفَ يُرَىٰ﴾

(سورة النجم الآية 39)

2026

الحمد لله على لذة الانجاز، الحمد لله عند البدء وعند الختام

Au puits qui n'a jamais tari, à celle qui a porté la charge seule et qui a été pour moi à la fois une mère et un père depuis mon enfance, à mon premiersoutien et mon refuge sûr

Ma chère maman.

À l'âme pure qui nous a quittés, à celui que j'aurais tant voulu voir partager la joie de ce jour et contempler le fruit de son effort, ***À mon cher père*** *que Dieu ait son âme, et puisse-t-il être fier de ce que j'ai accompli*

À celui qui a été mon pilier, mon inspirent et la première raison de mon choix de cette spécialité et de ma passion pour elle, ***À mon frère Zinou*** *tu as quitté ce monde mais tu n'as pas quitté mon cœur, que Dieu ait son âme, et j'espère que tu es fier de moi depuis ton ciel*

À mon deuxième maman, la source d'amour et de tendresse, qui m'a appris la vraie signification de la force, de la détermination et de la patience, à ma maîtresse de la vie

Ma chère sœur Houda

À notre petit trésor, qui a illuminé nos vies et apporté joie et bonheur par sa venue

Mon neveu Chihab

À mes compagnes de route et de pas

Mes chères amies : Samar, Manel , Malak , et à toutes les chères amies de la famille,

chacune nommée et appréciée pour l'empreinte belle qu'elle a laissée

À ma directrice de mémoire, ***Madame Kadid Soraya****, pour sa bienveillance, sa disponibilité et son soutien constant qui ont éclairé mon chemin jusqu'à cette réussite.*

Mille mercis

À tous ceux qui m'ont soutenue et encouragée moralement et psychologiquement, même par une parole aimable qui a touché mon cœur

Je vous aime tous, et je vous remercie du fond du cœur



Remerciements : Lina Makabrou

«وَأَن لَّيْسَ لِلْإِنسَانِ إِلَّا مَا سَعَىٰ وَأَنَّ سَعْيَهُ سَوْفَ يُرَىٰ»

(سورة النجم الآية 39)

الحمد لله على لذة الانجاز، الحمد لله عند البدء وعند الختام

2026

Tout d'abord, je rends grâce à Allah, le Tout-Puissant, qui m'a accordé la force, la patience et la persévérance nécessaires pour mener à bien ce modeste travail.

À mes très chers parents

Aucun mot ne saurait exprimer pleinement ma profonde reconnaissance, mon respect et mon amour envers mes précieux parents. À mon père, mon soutien inébranlable, et à ma mère, la lumière de ma vie, je dédie ce travail avec une immense gratitude.

Merci pour votre affection sans limites, vos innombrables sacrifices, vos encouragements constants et vos prières qui m'ont accompagnée tout au long de mon parcours. Vous avez été la source de ma détermination et de ma réussite. Ce travail est avant tout le vôtre.

À mon cher fiancé Houssem

Je tiens à te remercier du fond du cœur pour ton soutien indéfectible, ta présence rassurante et ton affection sincère. Merci d'avoir cru en moi, de m'avoir encouragée dans les moments de doute et d'avoir partagé avec moi les défis comme les réussites. Ta confiance et ton soutien ont été une source précieuse de motivation et de sérénité.

À mes chers frères Sraij et Rayene

Je vous remercie pour votre affection, votre bienveillance et vos encouragements permanents. Votre présence à mes côtés a toujours représenté une force et un soutien inestimables tout au long de ce parcours.

À ma tendre nièce Rahaf

Une pensée toute particulière à ma petite Rahaf, dont le sourire innocent et la joie de vivre ont illuminé de nombreux moments de fatigue. Tu as été pour moi une véritable source de bonheur, de douceur et de motivation.

À ma directrice de mémoire Madame Soraya kadid

Je tiens à lui exprimer ma profonde gratitude et mon profond respect pour son encadrement exemplaire. Je la remercie sincèrement pour sa disponibilité, sa patience, sa rigueur scientifique ainsi que pour ses précieux conseils et orientations. Travailler sous sa direction a constitué un véritable privilège et une expérience enrichissante tant sur le plan scientifique qu'humain.



Enfin

الحمد لله

Sommaire

Introduction générale : 9

Chapitre I :Interaction des rayonnements ionisants avec la matière et bases de la radiothérapie.....

1. Introduction : 12
2. Interactions rayonnements-matière : 12

2.1. Définition des rayonnements ionisants : 12
2.2. Type de rayonnements utilisées en radiothérapie : 13

3. Interactions ion lourd- matière : 14

3.1. Ralentissement des ions : 14
3.2. Défauts créés : 17

4. Paramètres dosimétriques : 17

4.1. Dose absorbée : 17
4.2. Le KERMA : 17
4.3. Le coefficient d'atténuation : 18

5. Principe physique de la radiothérapie : 18

5.1. Objectif thérapeutique : 19
5.2. Dépôt d' énergie dans les tissus : 19
5.3. L'optimisation de la dose : 19

Références……20

Chapitre Ⅱ :État de l'art sur les matériaux sous irradiation .....

1. Introduction : 22
2. Silicium cristallin sous irradiation : 22
3. Les métaux :……24

Références …… 25

Chapitre Ⅲ :L'utilisation de l'or en radiothérapie.....

1. Introduction : 27
2. Les nanoparticulesd'or : 28

2.1. Définition les nanoparticulesd'or : 28
2.2. La radiosensibilisation : 30
3. Les propriétés optiques d'or : 30
4. Application médicales des nanoparticules : 31
4.1. Pourquoi les nanoparticules d'or en radiothérapie : 31
4.2. Nanoparticules d'or en thérapie: 32
4.3. Thérapie photothermique et traitement du cancer : 32
4.4. Avantage des nanoparticules d'or en radiothérapie: 32
Références 35

Chapitre Ⅳ :Modèle théorique : Modèle de la pointe thermique

1. Introduction : 38
2. Le modèle de la pointe thermique : 39
3. Description mathématique du modèle de la pointe thermique : 41
3.1. Caractéristiques du gaz d'électrons : 41
3.2. Caractéristiques du sous-système atomique : 41
3.3. Le libre parcours moyen de l'interaction électron-phonon : 42
3.4. La répartition spatio-temporelle du dépôt d'énergie *A(r, t)* : 42
4. La discrétisation des équations de chaleur appliquée au modèle de la pointe thermique : 44
4.1. Le code pour les matériaux massifs : 44
4.2. Le code pour multicouches : 49
5. Choix de la taille du cylindre (rayon $N_r\Delta r$) et de la durée explorés : 50
5.1. Le Choix de Δr : 50
5.2. Le Choix de Δt : 51
6. Le super échauffement (superheating) : 51
7. Données d'entrée (input data) dans le calcul numérique : 52
Références 53

Chapitre Ⅴ :Résultats et discussion

1. Introduction : 55

2. La multicouche Au 10 nm / Si 10 nm / Si : 57
3. Les paramètres thermodynamique de l'or : 57
4. les paramètre impliqué dans le code de calcul : 57
4.1. La chaleur spécifique en fonction de la température : 57
4.2. La conductivité thermique en fonction de la température : 58
5. Résultats de la simulation : 58
.5.1 .... Variations de températures électroniques et atomiques en fonction du temps : 58
5.2. Variation de la température maximale du réseau T_{max} normalisée par la température de fusion T_f en fonction de l'épaisseur : 68
Références……74
Conclusion générale : 77

Introduction générale :

La physique médicale et la science des matériaux se rejoignent aujourd'hui au cœur des avancées thérapeutiques, particulièrement dans le domaine de la radiothérapie où la maîtrise des interactions rayonnement-matière est essentielle pour optimiser l'efficacité des traitements tout en minimisant les effets secondaires.

Parmi les matériaux étudiés pour leurs propriétés spécifiques sous irradiation, l'or (Au) occupe une place singulière en raison de ses caractéristiques chimiques, physiques et biologiques qui font un candidat prometteur pour améliorer le contraste d'imagerie, augmenter l'absorption locale d'énergie et potentialiser les effets thérapeutiques des rayonnements ionisants.

L'objectif principal de ce travail est d'étudier théoriquement le comportement de l'or à l'interface du système Au/Si sous rayonnement ionisant à travers l'analyse de ses propriétés structurales, électroniques et physiques, afin d'évaluer son potentiel en tant qu'agent radiosensibilisant et de mieux comprendre les mécanismes susceptibles d'améliorer le dépôt local de dose au niveau des tissus tumoraux. Ainsi, la problématique centrale de cette étude peut être formulée comme suit : Comment l'or à l'interface du système Au/Si se comporte-t-il sous rayonnement ionisant et dans quelle mesure ses propriétés peuvent-elles contribuer à l'optimisation de l'effet de radiosensibilisation en radiothérapie ?

La présente étude porte sur l'analyse, par le biais d'un modèle numérique fondé sur le modèle de la pointe thermique, des mécanismes de dépôt d'énergie et des modifications structurales locales induites par l'irradiation.

Le contexte de travail dans cette mémoire s'organise en cinq chapitres complémentaires :

Le premier chapitre introduit les bases théoriques de l'interaction des rayonnements ionisants avec la matière et les bases de la radiothérapie : définition les interactions rayonnements-matière et les interactions ion lourd- matière, paramètres dosimétriques, principe physique de la radiothérapie.

Le deuxième chapitre constitue un état de l'art sur les matériaux sous irradiation

Le troisième chapitre est consacré à l'utilisation de l'or en radiothérapie : nous parlons sur les nanoparticules d'or et ses utilisations on thérapie.

Le quatrième chapitre présente le modèle théorique adopté, à savoir le modèle de la pointe thermique en 2D et 3D.

Le cinquième chapitre nous présentons les résultats de simulation obtenus.

Nous terminons ce mémoire par une conclusion générale.

Chapitre I : Interaction des rayonnements ionisants avec la matière et bases de la radiothérapie

Chapitre I : Interaction des rayonnements ionisants avec la matière et bases de la radiothérapie

1. Introduction :

La radiothérapie (RT) a fortement évolué lors du siècle dernier [1, 2]. Les changements observés ces dernières décennies sont fortement liés aux développements technologiques en parallèle de l'imagerie médicale à laquelle la RT est désormais intimement liée [3].

Les rayonnements ionisants peuvent être classés en deux catégories : les rayonnements directement ionisants (particules chargées) et les rayonnements indirectement ionisants (particules neutres et rayonnements électromagnétiques) [4].

Dans ce chapitre, nous nous limiterons aux rayonnements couramment utilisés en radiothérapie, à savoir les électrons, les photons (rayons X, γ et les ions lourds).à l'exclusion des neutrons qui ne sont pas encore employés en pratique médicale courante [4].

2. Interaction rayonnement-matière :

2.1. Définition des rayonnements ionisants :

Les rayonnements ionisants sont des rayonnements qui possèdent une énergie suffisante pour arracher des électrons aux atomes de la matière qu'ils traversent, les transformant ainsi en ions [5].

Le terme " rayonnement ionisant " désigne tout rayonnement qui possède suffisamment d'énergie pour arracher des électrons aux molécules du milieu qu'il traverse, c'est-à-dire pour les ions [5].

Les rayonnements ionisants se répartissent généralement en deux grandes catégories : les rayonnements électromagnétiques et les rayonnements particulaires [5].

Les rayons X et les rayons gamma γ sont tous deux des rayonnements électromagnétiques de haute énergie, indistinguables par leur nature physique. Leur distinction repose uniquement sur leur origine : les rayons X proviennent de transitions électroniques extranucléaires (par exemple, freinage de Bremsstrahlung ou recombinaison dans les coquilles atomiques). Tandis que les rayons gamma γ résultent de processus intranucléaire (désintégration radioactive,). Ces rayonnements sont classées parmi les rayonnements ionisants indirects en raison de leur interaction avec la matière via des effet photoélectriques, Compton ou production de paires [5].

Ces rayonnements exercent un rôle essentiel dans le traitement des tumeurs malignes; en radiothérapie, ils sont appliqués de façon contrôlée pour induire la mort cellulaire des néoplasmes via des lésions irréversibles de l'ADN [5].

2.2. Type de rayonnements utilisés en radiothérapie :

Les rayonnements ionisants se classement en deux grandes catégories : les rayonnements électromagnétiques (rayons X et gamma γ) et les rayonnements particulaires.

En radiothérapie les principaux rayonnements employés sont les photons et les électrons, ainsi que dans des techniques plus sophistiquées, les protons et ion lourd rapide.

2.2.1. Les rayonnements électromagnétiques :

Les photons X et gamma γ partagent les mêmes propriétés et constituent les formes les plus énergétiques des ondes électromagnétiques, au-delà des ultraviolets [6].

- Les photons (ou rayons) X sont produits dans des tube à rayon X ou par des accélérateurs de particules.
- Les photons (ou rayons) gamma proviennent de la désintégration nucléaire de substances radioactives comme le cobalt, le césium ou l'iridium.

Ce sont des rayonnements indirectement ionisants, car ils sont électriquement neutres. Ils ionisent la matière par l'intermédiaire d'électrons secondaires, produits au cours de leur interaction dans les tissus [6].

2.2.2. Les rayonnements particulaires:

2.2.2.1. Les électrons :

Ils agissent principalement en superficie et sont générés par des accélérateurs de particules. Ils sont porteurs d'un chargé électrique négatif et ionisent directement la matière.

Ils sont utilisés principalement en radiothérapie externe, Ils distribuent une dose relativement homogène en surface. Dans des cas très spécifiques, l'utilisation des électrons issus de substances radioactive comme le phosphore 32, le strontium 92 ou le ruthénium 106 [6].

2.2.2.2. Les protons :

Les protons ce sont des particules produits par des cyclotrons, ces particules sont chargées électriquement positivement permettent une irradiation très précise de certains organes.

Grâce à cette précision, ils sont utilisés pour traiter, par exemple, les mélanomes de la choroïde de l'œil, les tumeurs cérébrales de la base du crâne [6].

2.2.2.3. Les neutrons :

Ce sont des particules générés par des cyclotrons, Les neutrons peu sensibles à l'effet oxygène et restent efficaces pour traiter contre les tumeurs nécrotiques ou à croissance lente [6].

Leur utilisation reste encore limitée et fait l'objet de recherches [6].

2.2.2.4. Les ions lourds :

La thérapie par ions lourds est une nouvelle technique de radiothérapie externe de haute précision qui délivre des doses élevées directement à la tumeur, en préservant les tissus sains et excellente particulièrement contre les tumeurs résistantes aux radiations [7].

3. Interactions ion lourd- matière :

3.1. Ralentissement des ions :

L'ion traversant la matière perd progressivement son énergie cinétique. Cette perte est définie par le pouvoir d'arrêt $-\frac{dE}{dX}$. La perte d'énergie cinétique est globalement due à deux mécanismes d'interaction considérés comme indépendant : " Collisions élastiques et Collisions inélastiques " [8].

3.1.1. Collisions élastiques :

Collisions élastiques ou interactions coulombiennes directes entre la particule incidente et les noyaux de la cible. Ce processus est majoritaire pour des énergies de quelque keV par unité de masse atomique (uma) [8].

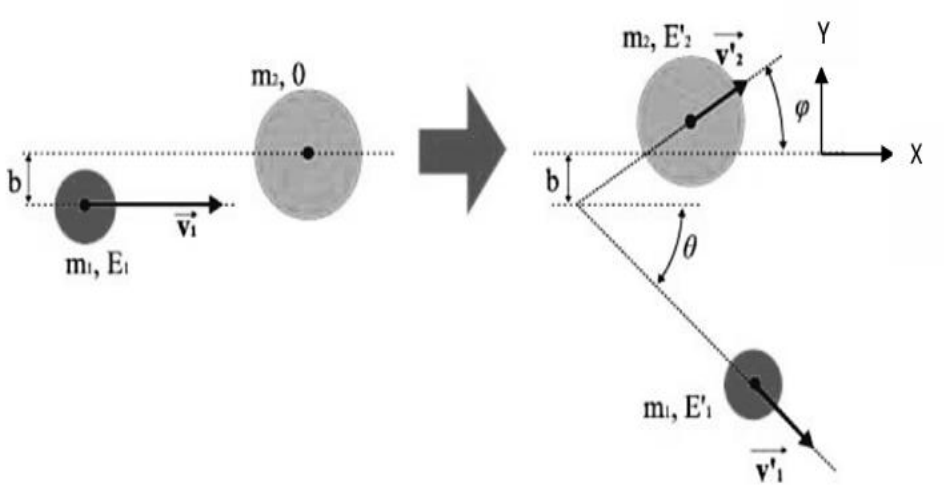


Figure I.1 : Schéma d'une collision élastique entre deux particules.

3.1.2. Collisions inélastiques :

Collisions inélastiques avec les électrons atomiques : C'est le mécanisme prépondérant qui conduit à l'ionisation ou l'excitation du milieu traversé. Elles sont prépondérantes pour des ions ayant des énergies supérieures à dizaines de keV /uma [8].

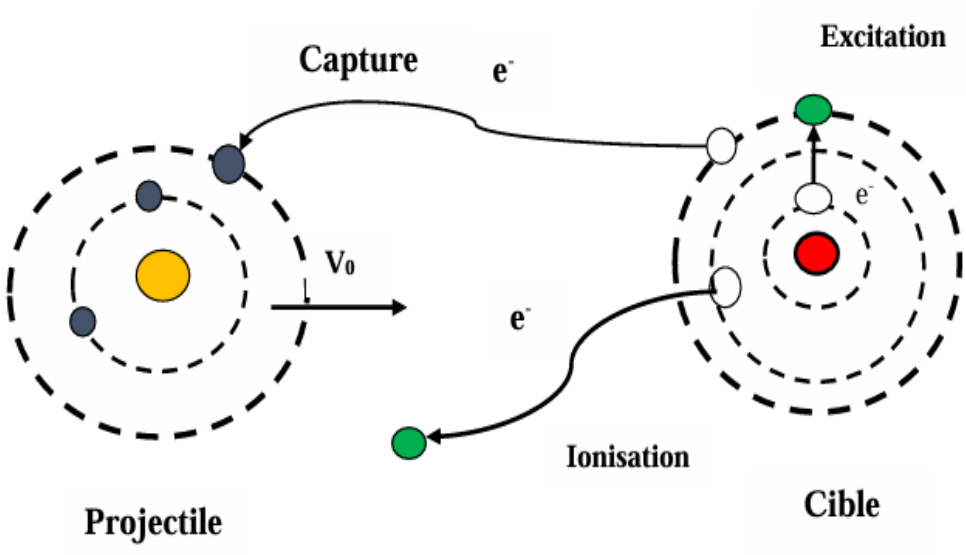


Figure I.2 : Processus inélastiques pendant l'interaction projectile chargé – atome.

3.1.3. Parcours de l'ion :

Le parcours est désigné par le parcours projeté (noté R_p) dans la direction incident des ions projectiles et non pas la distance réelle qu'ils effectuent dans la cible. Ce parcours se détermine en fonction du pouvoir d'arrêt total du matériau dépendante lui-même de l'énergie :

$$\left(\frac{dE}{dx}\right) = \left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{dx}}\right)_\mathrm{e} \qquad \text{(I.1)}$$

$$\mathrm{R_p(E)} = \int_\mathrm{E}^0 - \left(\frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{dx}}\right)^{-1} \mathrm{dE} \qquad \text{(I.2)}$$

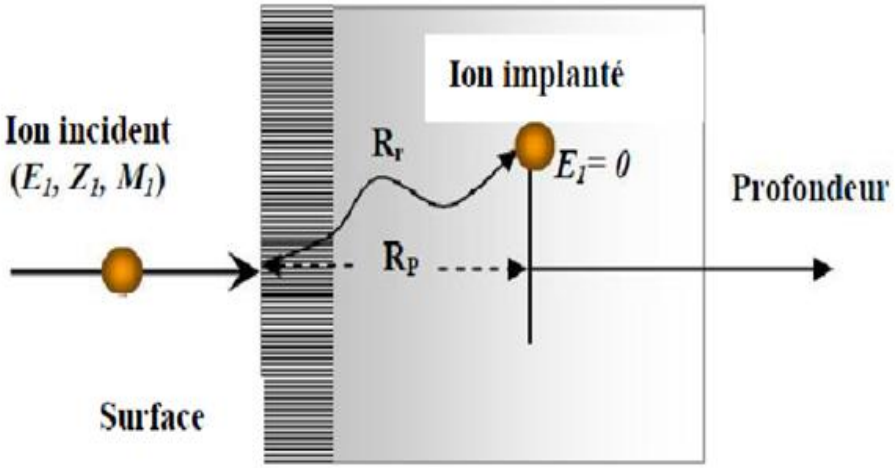


Figure I.3 : Parcours projeté Rp d'un ion dans un solide.

Pour une cible polyatomique, il suffit de pondérer les pertes d'énergie induites par chaque type d'atome i selon leurs densités atomiques N_i et leurs masses molaires A_i respectives par la relation de Bragg :

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{total} = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{n} N_i A_i \left(-\frac{dE}{dx}\right)_i \qquad \text{(I.3)}$$

avec $M = \sum_{i=1}^{n} N_i A_i$

Dans le domaine d'énergies de plusieurs MeV/uma, cette règle d'additivité est bien vérifiée [9].

Nous utiliserons souvent ce paramètre à la place de l'énergie pour localiser les phénomènes physiques qui se produisent dans le matériau [8].

3.2. Défauts créés :

Les processus de création de défauts sont reliés au type reliés au type d'interaction entre le projectile et la cible. Une théorie consensuelle des effets d'irradiation sur les matériaux tels que semi-conducteurs et isolants n'existe pas à ce jour. La manière dont le solide réagit à l'excès d'énergie déposée lors du passage de l'ion projectile dépend de la nature de ses liaisons chimiques [8]. Ces dernières conditionnent l'évolution de sa microstructure sur les temps longs de l'ordre de 10^{-6} s alors que la durée d'une collision est de 10^{-15} s. La caractérisation de l'évolution des matériaux sous irradiation est une branche de la physico-chimie basée sur la physique statistique hors équilibre [10].

4. Paramètres dosimétriques :

4.1. Dose absorbée :

Lors d'une irradiation, la dose absorbée est l'énergie E cédée par les électrons qui ont interagit avec les atomes de la matière dans l'élément de volume de masse m.

$$D = \frac{E}{m} = \frac{Energie}{masse} \qquad \text{(I.4)}$$

Unité (SI) : le Gray (Gy).

4.2. Le KERMA :

Le KERMA (Kinetic Energy Released per unit MAss) représente la somme des énergies cinétiques E_{tr} de toutes les particules chargées au directement ionisantes (électrons, protons) libérées par des particules non directement ionisantes (photons) dans un élément de volume de masse m.

$$K = \frac{E_{tr}}{m} \qquad \text{(I.5)}$$

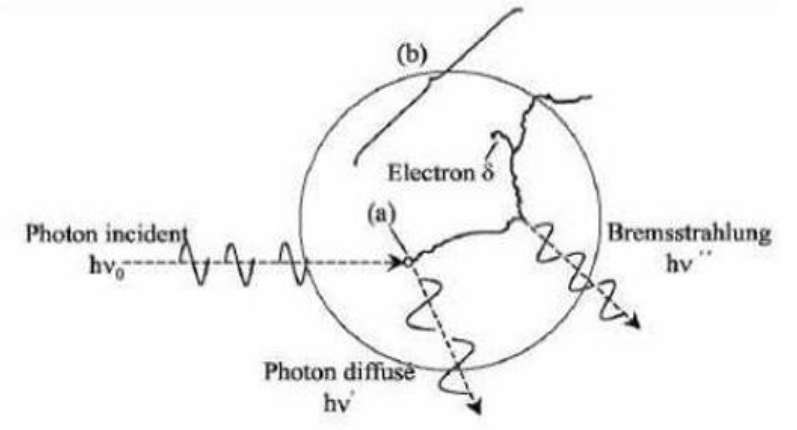


Figure I.4 : Représentation schématique du transfert d'énergie d'un photon au milieu traversé.

4.3. Le coefficient d'atténuation :

Lorsqu'un faisceau de photons traverse un matériau, certains le traversent sans interagir, tandis que d'autres interagissent et sont absorbés par le matériau. La probabilité de cette interaction augmente dépend de l'énergie du rayonnement incident et de la nature du matériau traversé. Cette interaction est appelée coefficient d'atténuation " μ " et apparaît dans l'équation August Beer-Johann Heinrich Lanbert :

$$I = I_0 e^{-\mu x} \qquad \text{(I.6)}$$

I_0 : L'intensité incidente.

I : L'intensité transmise.

x : L'épaisseur traversée.

μ : Coefficient d'atténuation.

Unité (SI) : cm^{-1}.

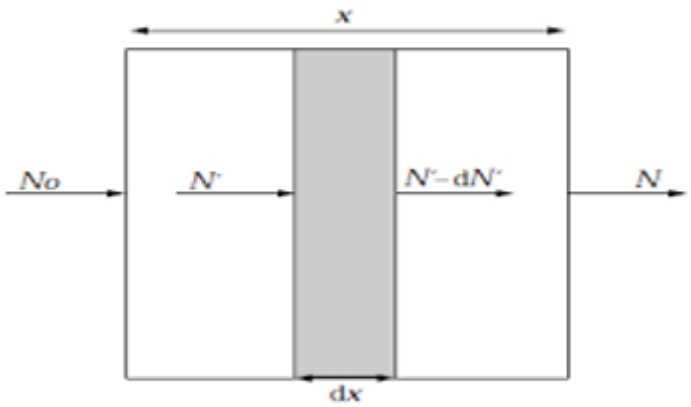


Figure I.5 : L'atténuation d'un faisceau de photons dans la matière.

5. Principe physique de la radiothérapie :

La radiothérapie s'appuie sur le principe physique des interactions entre rayonnements ionisants et matière biologique, En traversant les tissus, ces rayonnements ionisant et excitent les atomes, transférant de l'énergie aux structures cellulaires. Cela déclenche une chaîne d'événements physiques, chimiques et biologiques qui entraînent des lésions cellulaires importantes [11].

5.1. Objectif thérapeutique :

L'objectif de la radiothérapie est de détruire les cellules cancéreuses (tumorales) tout en préservant au maximum les tissus sains voisins. Cela s'appuie sur l'induction de dommages à l'ADN, soit directement par interactions avec les rayonnements, soit indirectement via les radicaux libres produits par la radiolyse de l'eau. L'efficacité du traitement se mesure par la probabilité de contrôle tumoral (TCP), tandis que les risques sont évalués par la probabilité de complications des tissus normaux (NTCP) [11].

5.2. Dépôt d'énergie dans les tissus :

Le dépôt d'énergie dans les tissus est une étape clé du processus. Il s'agit de l'énergie transférée par les rayonnements aux électrons atomiques, Produisant des électrons secondaires et des espèces réactives de l'oxygène (ROS). Ces dernières endommagent principalement l'ADN et des structures cellulaires, entraînant la mort cellulaire [11].

5.3. L'optimisation de la dose :

L'optimisation de la dose représente un pilier essentiel en radiothérapie. Elle vise à délivrer une dose tumoricide adéquate tout en minimisant les effets secondaires, grâce à des approches comme le fractionnement, les techniques avancées (radiothérapie conformationnelle ou l'IMRT) et les agents radio-sensibilisants [11].

Références:

[1] Bernier J, Hall EJ, Giaccia A. Radiation oncology: A century of achievements. Nat Rev Cancer 2004;4:737-47.

[2] Thariat J, Hannoun-Levi JM, Sun Myint A, et al. Past, present, and future of radiotherapy for the benefit of patients. Nat Rev Clin Oncol 2013;10:52-60.

[3] Coucke PA, Withofs N, Jansen N, Janvary ZL, Hustinx R. Vers une radiothérapie chirurgicale : nécessité d'une radiothérapie guidée par l'imagerie. Rev Med Liege 2010;65:17-22.

[4] Georges Broun, Claude Moreau, M. Fauchet, Les équipements bio-médicaux à l'hôpital et au laboratoire, La radiothérapie, 431, 1980

[5] Mark A. Hill and Robert L. Ullrich, Ionizing radiation, Chapter 18, part 2,176.

[6] Poletto, Bernard. "Les Rayonnements. "Infocancer - ARCAGY-GINECO, 11 Novembre2025, (http://www.aracagy.org/infocancer/traitement-du-cancer/radiotherapie/les-rayonnements).

[7] Association pour la promotion du traitement des tumeurs par ions lourds, (www.gsi.de/informationen/verein-tuthe/).

[8] A. Kabir, thèse de doctorat, Université 20 Août 1955 Skikda,15/06/2009.

[9] W. Neurwith, U. Hausser, E. Kuhn , Z. Physics. 220,241, (1969).

[10] G. Martin, P. Bellon, "Driven alloys", Solid State Physics, 50 (1996) 3645-3652.

[11] S. Penninckx, A. Heuskin, C. Michiels, S. Lucas. S (2020). Gold Nanoparticles as a Potent Radiosensitizer : A Transdisciplinary Approach from Physics to Patient. Cancers, 12(7), 2021.

Chapitre Ⅱ : État de l’art sur les matériaux sous irradiation

1. Introduction :

Les matériaux sous irradiation aux ions subissent un très grand réarrangement atomique. L'exemple le plus simple de ce phénomène est le mélange atomique (Atomic intermixing) et la formation des alliages au niveau des interfaces qui séparent deux matériaux différents. L'irradiation par les ions est susceptible d'initier un processus de transport atomique très efficace même à basse température [1].

Plusieurs travaux ont été lancés afin d'expliquer les différents mécanismes de ce transport atomique. Des résumés concernant les résultats de ces études sur les métaux, semi-conducteurs et isolants se trouvent, à titre d'exemple, dans les références suivantes : Cheng et al. [2], Nastasi et al. [3], Bolse et al. [4], Kelly et al. [5].

Comme nous l'avons mentionné précédemment, on distingue deux régimes d'irradiation par les ions lourds : le premier à basse énergie, quelques KeV/u, où la perte d'énergie se fait principalement par collisions nucléaires. Le deuxième, c'est le régime des pertes d'énergie par excitations et ionisations électroniques à hautes énergies (MeV/u). Seulement le premier régime a été considéré jusqu'au début des années 90, c'est-à-dire le mélange induit par collisions nucléaires. L'effet des ions lourds rapides sur le mélange des bi- et multicouches n'a été étudié systématiquement que très récemment [1].

2. Silicium cristallin sous irradiation :

La création des défauts, tels que des traces latentes, après irradiation avec des ions lourds de moyenne énergie, a été observée dans beaucoup d'isolants (CaF_2 [6], LiF [7], SiO_2 quartz [8], $Y_3Fe_5O_{12}$ [9], etc.). Le cas des semi-conducteurs semble être un cas spécifique, car les excitations électroniques intenses avec des ions ne produisent pas de défauts équivalents à ceux créés dans les isolants. Récemment, les irradiations avec des agrégats ont permis d'observer la création des traces amorphes dans les semi-conducteurs comme Ge [10], Si [11] ou GaAs [12].

Dorénavant, nous nous attachons uniquement à l'étude du silicium [13]. Il est possible de créer dans le silicium cristallin, irradié avec des ions d'une énergie voisine de 3.5 GeV (Kr et Xe) et des pertes d'énergie prédominantes de type électroniques ($(dE/dx)_e$ = 3.7 – 14.0 keV/ nm), des défauts, qui modifient la résistance électronique du silicium[14]. Bien que ce domaine d'énergie corresponde aux excitations électroniques intenses, les défauts créés ont été attribués aux processus de collisions élastiques

nucléaires avec les noyaux cibles. Dans ce cas l'excitation électronique forte s'avère inefficace pour la création de l'endommagement [13].

Suite aux irradiations avec différents ions (O – U) [15], à des pertes d'énergie électronique élevées (jusqu'à 23 keV/nm pour l'uranium de 3.6 GeV) les mesures de DLTS (Deep Level Transient Spectroscopy) montrent que le dépôt d'énergie électronique s'avère peu efficace dans la création des défauts dans le silicium.

Il existe pourtant les observations de Furuno[16] dans lesquelles la création des traces dans le silicium a lieu à une perte d'énergie électronique de 17 keV/nm (Au 207 MeV), mais elle n'a pas lieu à 12 keV/nm (In 150 MeV). Les cibles irradiées sont des cibles spéciales, amorphes, d'une épaisseur de 5 nm, obtenues par évaporation. La nature de ces traces de diamètre autour de 7 nm pour une perte d'énergie électronique de 17 keV/nm n'a pas été bien comprise [13].

Contrairement aux irradiations avec des ion, les agrégats qui ont une énergie de l'ordre de 0.05 MeV/u et des $(dE/dx)_e$> 30keV/nm, créent des traces latentes dans le silicium cristallin. Les agrégats ont l'avantage qu'on peut atteindre des pertes d'énergie électronique, bien supérieures à celles obtenues avec les ions. En effet, les clusters de C ($30\ MeV\ C_{60}^{2+} et\ 40\ MeV\ C_{60}^{3+}$) ont des pouvoirs d'arrêt de 48 et respectivement 57 keV/nm. La création de traces latentes de diamètres 8.5 et 10.5 nm au voisinage de la surface a été observée par microscopie électronique à transmission (TEM)[17]. Dans la même période et indépendamment, Dunlop et al.[18] confirment les résultats précédents. Des agrégats de C_{60}, de 30 MeV (S_e = 64 keV/nm) induisent des zones amorphes de 10 nm de diamètre au voisinage de la surface, que l'irradiation soit faite en incidence normale (figure II.1) ou rasante (à 10° par rapport à la surface). Le nombre de défauts trouvés correspond au nombre d'agrégats envoyés sur la surface du silicium.

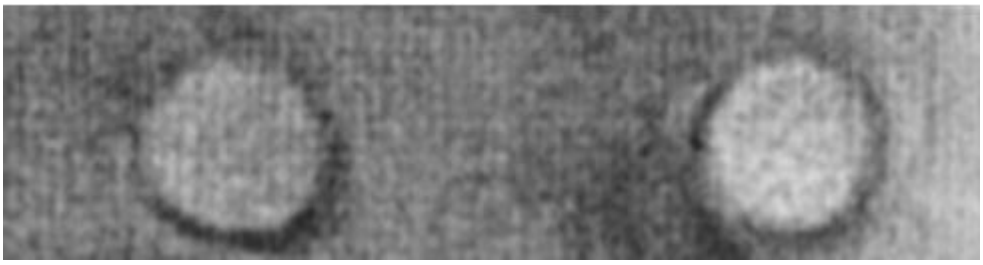


Figure Ⅱ.1 : Images de microscopie électronique à transmission à haute résolution pour deux traces voisines générées dans le silicium par des agrégats de 30 MeV C_{60} ; incidence normale.

Une étude théorique, à partir du modèle de la pointe thermique, sur la création des défauts, dans le silicium cristallin, a été faite par Wang et al. [19]. Il est montré que, avec un couplage électron – phonon de $1.8*10^{12}$ $W.cm^{-3}.K^{-1}.s^{-1}$ et pour une perte d'énergie électronique de (5 – 10 keV/nm) la création des défauts est expliquée par l'apparition de la phase liquide qui ne recristallise pas complètement en surface, contrairement à ce qui se passe en volume.

3. Les métaux

Contrairement aux isolants, l'effet des excitations électroniques a été considéré pour longtemps comme négligeable dans les métaux, a cause (i) de la grande mobilité des électrons de conduction, l'énergie déposée sur les électrons est rapidement transmis dans un large volume, et (ii) les électrons de conduction vont écranter très efficacement les charges des ions crées dans le sillage du projectile. Cependant, durant ces quinze dernières d'années, beaucoup de travaux ont montré qu'en analogue avec les isolants, l'énergie déposée sur les électrons peut provoquer des réarrangements atomiques très importants conduisant à la création ou l'annihilation des défauts , la déformation plastique, et la formation des traces latentes.

Références:

[1] A. Chettah, Thèse de doctorat, Université 20 Août 1955 Skikda, 26/11/2006.

[2] Y.T. Cheng, Mat. Sci. Rep. 5 (1990) 45.

[3] M.Nastasi, J.W. Mayer, Mat. Sci. Eng, R12. (1994)1.

[4] W. Bolse, Mat. Sci. Eng, R12. (1994) 53.

[5] R. Kelly, A. Miotello, Surf. Coat. Technol. 83 (1996)134.

[6] N. Khalfaoui 2003, Thèse de l'Université de Caen (2003).

[7] C. Trautmann, Nucl. Instrum. Methods B 164-165 (2000) 365.

[8] A.Meftah, F. Brisard, J. M. Constantini, E. Doryhée, M.Hage-Ali, M. Hervieu, J. P. Stoquert, F. Studer, M. Toulemonde Phys. Rev. B 49 (1994) 12457.

[9] A.Meftah, F. Brisard, J. M. Constantini, M.Hage-Ali, J. P. Stoquert, F. Studer, M. Toulemonde Phys. Rev. B 48 (1993) 920.

[10] A. Colder, O. Marty, B. Canut, M. Levalois, P. Marie, X. Portier, S. Ramos, M. Toulemonde, Nucl. Instrum. Methods B 174, (2001) 491.

[11] B. Canut, N. Bonardi, S. M. M. Ramos, S. Della-Negra, Nucl.Instr. and Meth.in Phys. Res.B 146 (1998) 296.

[12] A. Colder, B. Canut, M. Levalois, P. Marie, X. Portier, S. M. M. Ramos, J. Appl. Phys., 91 (9), (2002) 5853.

[13] C. Cristina. Thèse doctorat, Université de Caen, 05/03/2004.

[14] M. Toulemonde, J. Dural, G. Nouet, P. Mary, J. F. Hamet, M. F. Beaufort, J. C. Desoyer, C. Blanchard, J. Autleyner, Phys. Stat. Sol. (a) 114 (1989) 467.

[15] M. Levalois, P. Bogdanski, M. Toulemonde, Nucl. Instrum. Methods B 63, (1992) 14.

[16] S. Furuno, H. Otsu, K. Hojou, K. Izui, Nucl. Instrum. Methods B 107 (1996) 223.

[17] B. Canut, N. Bonardi, S. M. M. Ramos, S. Della-Negra, Nucl.Instr. and Meth.in Phys. Res.B 146 (1998) 296.

[18] A.Dunlop, G.Jaskierowicz, S.Della-Negra, Nucl.Instr. and Meth.in Phys. Res.B 146 (1998) 302.

[19] Z. G. Wang, M. Kac, H. Kucal, M. Toulemonde, soumis à publication.

Chapitre Ⅲ :L'utilisation de l'or en radiothérapie

1. Introduction :

Les nanoparticules existe dans l'environnement produisent par l'activité volcanique par exemple elles sont aussi le résultat de pollution comme le smog on les appels alors ultras fine mais sont généralement de synthèse fabriqué soit par fractionnement de matériaux d'origine soit par agglomération d'atome. Elle se présente sous la forme de poudre de gel ou de solution. Par ailleurs on peut aussi constater que les nanomédicament, en plus de l'amélioration de l'efficacité du traitement permettent aussi dans une certaine mesure d'améliorer le diagnostic, car ils peuvent apporter un élément détectable sur une zone d'intérêt comme une tumeur par exemple : Les domaines d'applications de la nanomédecine en santé sont très variés, la cancérologie est un des domaines où l'on trouve le plus d'applications du fait des possibilités de ciblage, ou vectorisation des tumeurs offertes par les nanoparticules[1].

De plus, elles sont utilisées comme de transporteur de principe active au cœur de la cellule malade évitant de traite de cellule sienne [1].

Notamment dans le domaine médical, les nanoparticules les plus couramment utilisées sont souvent :

Les nanoparticules inorganiques (non-métalliques) : Sont des nanoparticules biocompatibles avec une stabilité importante par rapport les produits organiques aussi hydrophiles, tel que la silice mésoporeuse et sont un bon choix pour l'imagerie cellulaire [2].

Les nanoparticules métalliques : Elles possèdent des propriétés particulières en fonction du métal utilisé, (par exemple l'utilisation des nanoparticules d'or pour renforcer l'efficacité de la radiothérapie grâce à leur forte absorption des rayons X). [2]

Les nano-objets organiques : des nanostructures d'**ADN**, des polymères **PLA46** et des polymères nature [2].

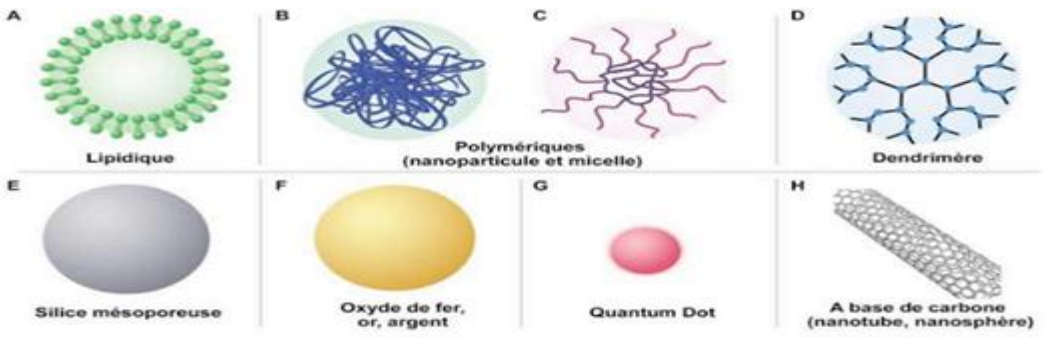


Figure Ⅲ.1 : Les différents types des nanoparticules.

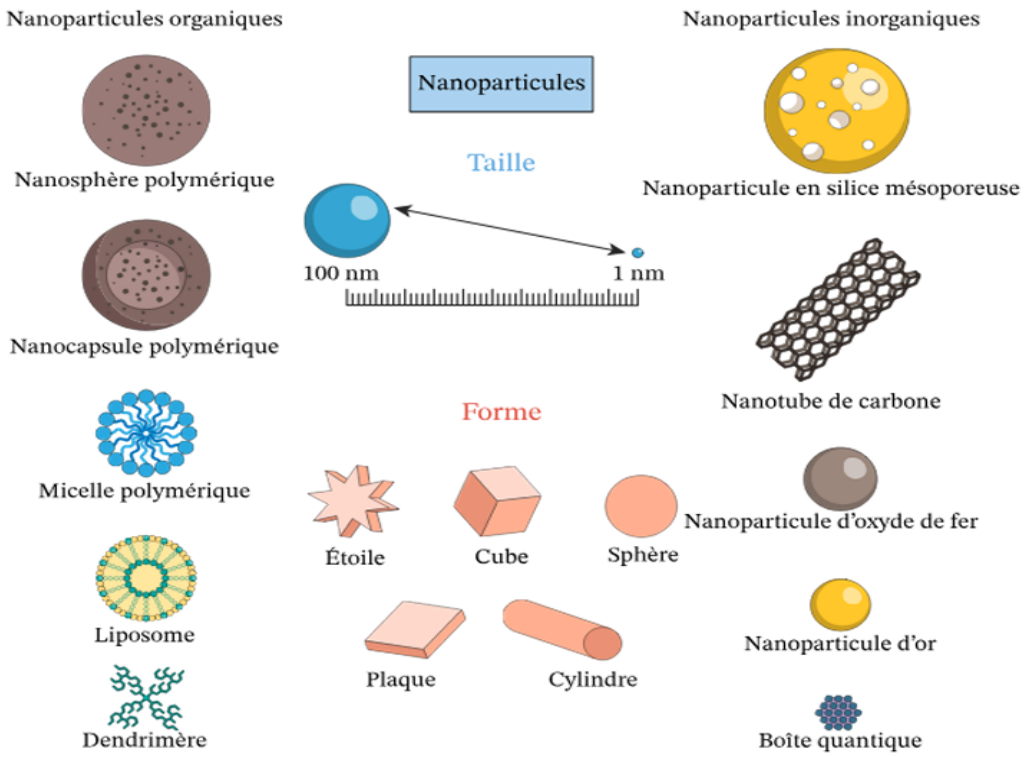


Figure Ⅲ.2 : Les différents types, tailles et formes des nanoparticules.

2. Les nanoparticules d'or :

2.1. Définition des nanoparticules d'or :

L'or est un métal de transition appartenant au groupe «11» du tableau périodique, et sa composition atomique est [Xe] $4f_{14}$ $5d_{10}$ $6s_1$ [3-4]. Contrairement à d'autres métaux, l'or est relativement mou mais possède toujours une conductivité électrique et des propriétés thermiques élevées. Les atomes d'or prennent une forme cristalline en utilisant la méthode cubique face centre (CFC) [4].

Les nanoparticules d'or (NPAu) sont des particules de l'ordre nanométrique **(1nm = 10^{-9}m)**, sont constituées d'atomes d'or emballés par des couches protectrices qui font stabiliser et empêcher leur agrégation [1].

Les nanoparticules en mélange homogène dans un liquide appelé nanoparticules colloïdales sont stabilisées par des ligands ou des tensioactifs. Parmi les autres métaux précieux, les atomes d'or bien organisés le rendent plus électronégatif. Au^{+3}, Au^{+}, Au^{0} représentent divers états d'oxydation largement connus. Composé d'une quantité

spécifique d'atomes, le noyau métallique affiche une structure polyédrique qui suit une forme cohérente [4].

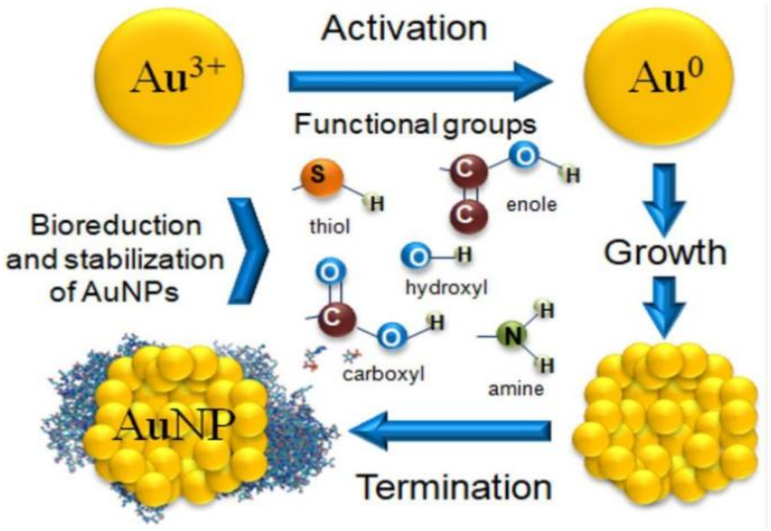


Figure Ⅲ.3 : Schéma du mécanisme de biosynthèse des nanoparticules d'or (AuNPs) et des groupements fonctionnels impliqués dans la réduction des ions or et la stabilisation des AuNPs.

Elles représentent des objets parfaitement adaptés non seulement par leur non-toxicité mais aussi par leur gamma de taille qui coffre une bonne biocompatibilité et biodisponibilité. Leurs possibilités d'applications sont non seulement liées aux propriétés intrinsèques de leur cœur métallique mais aussi et surtout à leurs énormes capacités de fonctionnalisation en surface par greffage de molécules soufrées (notamment biologiques). Les nombreuses méthodes de synthèses développées pour l'élaboration de nanoparticules d'or permettent tout d'abord l'accès à des particules stables et de taille adaptable en fonction de l'application sur une gamma de **2 à 200 nm** [1].

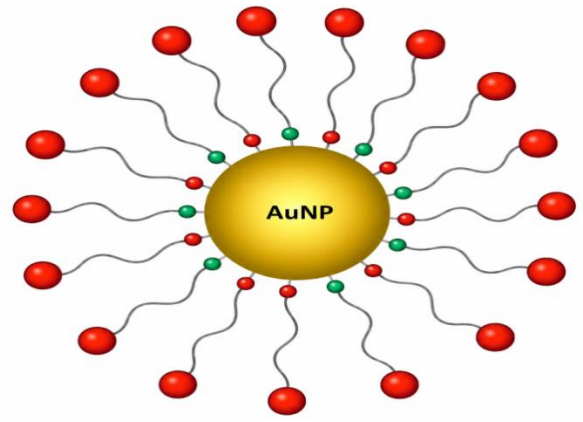


Figure Ⅲ.4 : Représentation schématique de nanoparticule d'or .

En outre, des matériaux à base de nanoparticules d'or sont utilisés dans certains médicaments (purification du sang et autres médicaments) [4-5].

2.2. La radiosensibilisation :

Les nanoparticules d'or servent de radiosensibilisateur dans la radiothérapie, en augmentant la dose de rayonnement absorbée par la tumeur. Les nanoparticules d'or sont injectées sur le site de la tumeur pour potentialiser les effets de la radiothérapie et éventuellement renforcer son efficacité dans l'éradication des cellules cancéreuses [6].

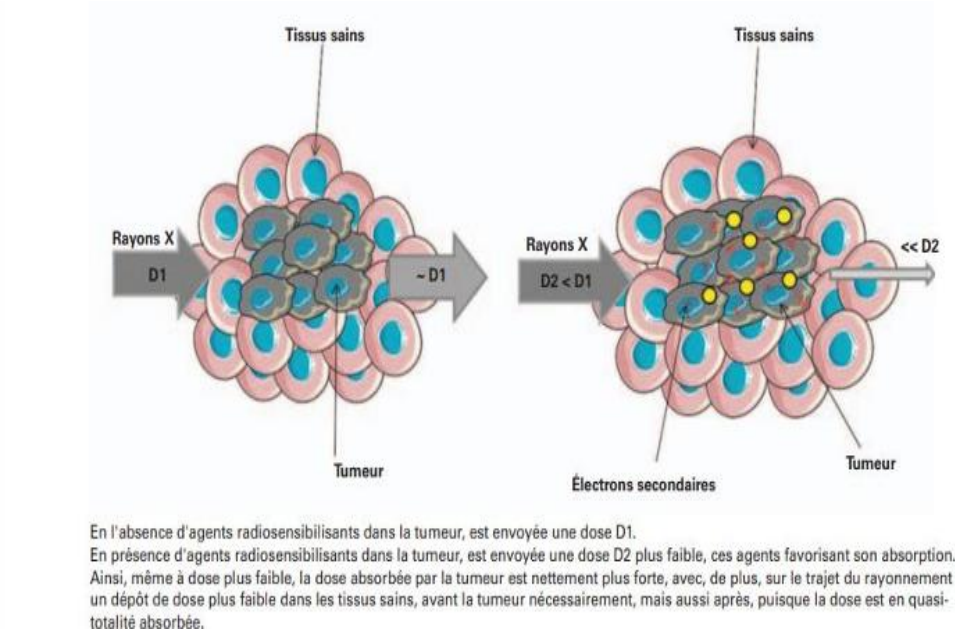


Figure Ⅲ .5 : Principe de l'utilisation d'agents radiosensibilisant pour la radiothérapie.

3. Les propriétés optiques d'or :

En raison de leurs propriétés uniques, les nanoparticules d'or ont fait l'objet d'une attention considérable ces dernières années ces propriétés dépendent de la taille et de la forme et diffèrent considérablement de celles des matériaux massifs [7-8].L'origine physique de ces propriétés est liée à la résonance psalmodique de surface (SPR). Les NPsAu sphériques présentent une gamme de couleurs (par exemple, marron, orange, rouge et violet) en solution aqueuse à mesure que la taille du noyau augmente de 1 à 100 nm, et présentent généralement des tailles de pic d'absorption relative de 500 à 550 nm [9]. Cette bande d'absorption est causée par des oscillations collectives de la conduction électronique causées par l'excitation résonnante des photons incidents (Figure Ⅲ.6), appelée « Bande de Plasmons de Surface » cependant, cette bande est absente à la fois dans les petites nanoparticules (d < 2 nm) et dans les matériaux massifs [10]. Le phénomène n'est pas seulement affecté par la taille, mais aussi par la forme, le solvant,

les ligands de surface, la charge du noyau et même la proximité d'autres nanoparticules. La surface de la bande plasmon s'élargit en raison de l'agrégation de nanoparticules qui provoque un décalage significatif vers le rouge de la fréquence SPR [4].

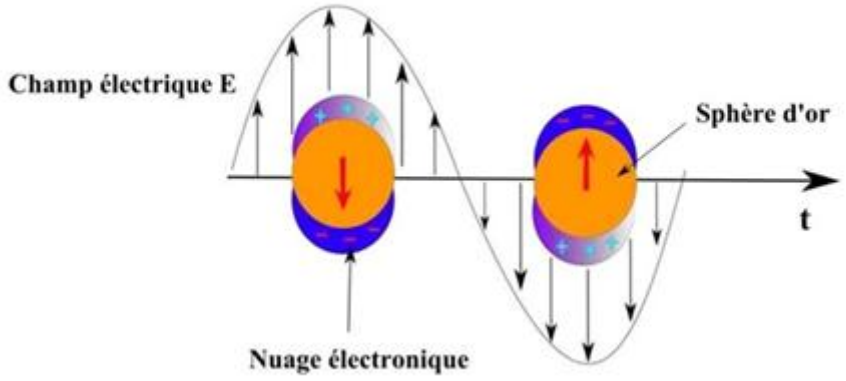


Figure Ⅲ.6 : Oscillation périodique du nuage électronique de la surface des nanoparticules d'or induite par une radiation incidente.

4. Application médicales des nanoparticules :

Les nanoparticules d'or ont suscité un intérêt croissant dans le domaine médicale en raison de leurs propriétés uniques et de leurs multiples applications. En raison de leur petite taille et de leurs caractéristiques particulières, ces nanoparticules offrent de nombreuses opportunités pour le diagnostic, le traitement et la recherche biomédicale [1].

4.1. Pourquoi les nanoparticules d'or en radiothérapie :

Les nanoparticules d'or améliorent l'effet du rayonnement sur une grande zone de tumeur, éliminant ainsi le besoin des nanoparticules d'être livrées à toutes les cellules du tissu tumoral [11].

Les nanoparticules d'or sont assemblé de atome a quelque milles atomes de taille compris entre 1 et 100 nanomètre [12], elles ont aussi d'autre intérêt, en effet, en interagissant avec la lumière infrarouges elle transforme l'énergie absorbée en chaleur. Cette technique leur permet de tuer les cellules cancéreuses, sans endommager les autres [13].

4.2. Nanoparticules d’or en thérapie:

Les nanoparticules d’or sont également utilisées dans le domaine de la thérapie anticancéreux par rayonnement, où elles jouent un rôle prometteur dans l’amélioration de l’efficacité et de la précision des traitements [1].

4.3. Thérapie photothermique et traitement du cancer :

Sous l’action d’un rayonnement électromagnétique, les nanoparticules absorbent fortement la lumière dans la région du visible du spectre de la lumière. Une proportion de la lumière incidente est alors diffusée tandis que la quantité absorbée est convertit en chaleur en quelque picosecondes causant une augmentation locale de la température [14]. Cet échauffement local des nanoparticules est exploité dans différentes thérapies photo-thermales parmi lesquelles on peut citer l’hyperthermie [15-16], la nano thermolyse [17], les nano bombes [18] et la radiothérapie [19-20].

4.4.Avantage des nanoparticules d’or en radiothérapie:

Pour un traitement de radiothérapie bien précis et pour avoir une efficacité thérapeutique et dans le but d’éviter les dommages des cellules sains avoisinants et pour mieux préserver on utilise les nanoparticules pour l’amélioration de cette méthode de thérapie particulièrement les nanoparticules d’or puisqu’ils ont biocompatibles et on sait que l’or est un meilleur absorbeur des rayons X, étant très inerte [1].

Lorsque les atomes d’or sont touchés par les rayons, ils libèrent en retour des électrons qui majorent leur action. Ici encore, il s’agit de concentrer les nanoparticules dans la tumeur, puis ensuite de les soumettre à la radiothérapie pour tuer les cellules cancéreuses [1].

Notamment pour étudier les effets des nanoparticules d’or en combinaison avec la radiothérapie dans des cancers spécifiés. Afin d’étudié l’effet des nanoparticules d’or dans la sensibilisation des cellules et des tumeurs du glioblastome à la radiothérapie [21].

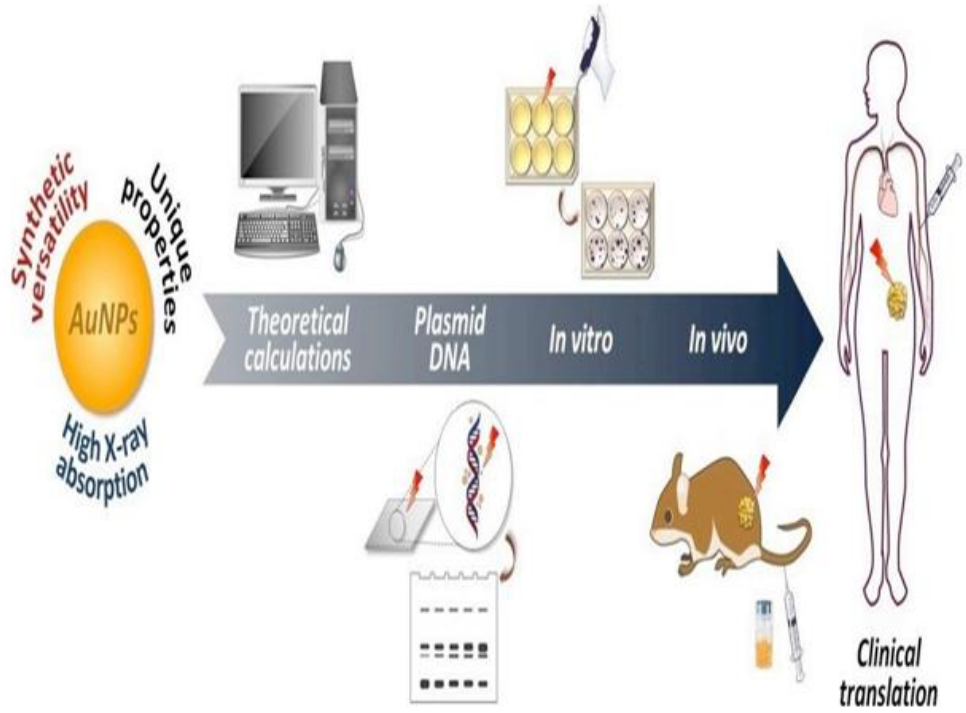
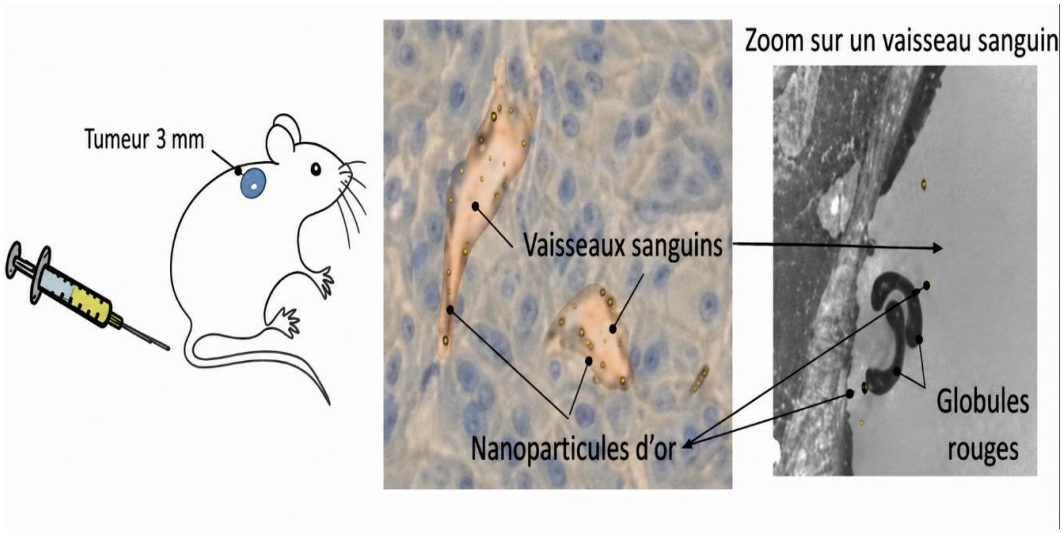


Figure Ⅲ.7 : L'effet des nanoparticules d'or dans la radiothérapie.

On découvre que les nanoparticules d'or non seulement amélioraient les effets des radiations, mais aussi a augmenté le taux de survie des souris atteintes de tumeurs orthoptiques du glioblastome multiforme [1].



FigureⅢ .8 : étude de l'effet des nanoparticules d'or dans la sensibilisation des cellules.

L'or est un excellent absorbeur de rayon X. Si les tumeurs pouvaient être chargées d'or, cela conduirait à une dose plus élevée aux tissus cancéreux par rapport à la dose reçue par les tissus normaux pendant un traitement de radiothérapie [1]. Les calculs indiquent que cette augmentation de dose peut être significative, même 200 % ou plus.

Les nanoparticules d’or ont montré une efficacité thérapeutique dans les essais sur les animaux et ces résultats sont passés en revue. 86% de cures à long terme de souris mammaires sous-cutanées, des tumeurs ont été atteint avec une injection intraveineuse de nanoparticules d’or avant l’irradiation avec photons de 50 KeV, alors que seulement 20% ont été durcis avec le rayonnement seul .

Références:

[1] Nougrara Mohammed Seddik, diplôme de Master, Université Belhadj Bouchaib d'Ain-Temouchent, 26/06/2023.

[2] Claude Ostiguy et Brigitte Roberge, Service soutien à la recherche et à l'expertise, Les nanoparticules de synthèse Connaissances actuelles sur les risques et les mesures de prévention en SST, 2010.

[3] J.C. Fierro-Gonzalez et B.C. Gates, J. Phys. Chem. B, 2004, 108, 16999 17002.

[4] S. Saïdi et I.Khmies, diplôme de Master, Université Abou-Bekr Belkaid Tlemcen, 07/06/2023.

[5] R.R. Arvizo, S. Bhattacharyya, R.A. Kudgus, et al, Chemical Society Reviews, 2012, 41, 2943-2970.

[6] "Quel Rôle Les Nanoparticules d'or Dans Le Traitement Du Cancer ?" TORSKAL, 2 May 2024,https://www.torskal.com/fr/what-role-do-gold-nanoparticles-play-in-cancer-treatment/?srsltid=AfmBOoonNqOxp34DyLDIFEvp6lbWAICLNSmWgjWFtwigTxHgfh-CbZod.

[7]M.A. El-Sayed, Accounts of Chemical Research (2001) 34, 257.

[8] M.A. El-Sayed, Accounts of Chemical Research (2004) 37, 326.

[9] P. K. Jain, K. S. Lee, I. H. El-Sayed and M. A. El-Sayed, J. Phys. Chem. B, 2006, 110, 7238–7248.

[10] V. Sharma, K. Park, M. Srinivasarao, Materials Science and Engineering: R:Reports(2009) 65, 1.

[11] Gautier Laurent. Synthèse de nanoparticules multifonctionnelles pour la radiothérapi eguidée par imagerie. Chimie organique. Université de Franche-Comté, 2014.

[12] DeepKwatra, Anand Venugopal, ShrikantAnant, Nanoparticules en radiothérapie : un résumé des différentes approches pour améliorer la radiosensibilisation dans le cancer ,2013.

[13] Mégane Fleury , Des nanoparticules d'or permettent de soigner le cancer de la prostate ,2009.

[14] Djoumessi Lekeufack Diane Elodie, Thèse de doctorat, Université Claude Bernard Lyon 1, 07/08/2006, Publier 06/12/2010.

[15] Seol. Y, Carpenter. A. E. and Perkins. T. T., Optics Letters, 2006, 31, 2429.

[16] Huang. X, El-Sayed. T. H, Qian . W.and El-Sayed. M. A., J. Am. Chem. Soc., 2006, 128, 2115-2120.

[17] Zharov. D. O, Lukianova. E. N. and Oreavsky. A. A., Lasers Surg. Med.,2006, 38, 631 642.

[18] Zharov. V. P, Galitovska. E. N, Johnson. C. and Kelly. T., Lasers Surg. Med.,2005, 37, 219-226.

[19]Hainfeld. J. F, Slatkin. S. D. and Smilowitz. H. M., Phys. Med. Biol., 2004, 49, 309 315.

[20] Cho. S. H., Phys. Med. Biol., 2005, 50, N163-N173.

[21] Robin Fabbro. Modélisation d'un accélérateur linéaire clinique en vue de l'exploitation d'un détecteur à transmission dédié au contrôle qualité en radiothérapie. Physique Médicale [physics.med-ph]. Université Grenoble Alpes, 2017.

Chapitre Ⅳ : Modèle théorique : Modèle de la pointe thermique

1. Introduction :

Dans la formulation du modèle de la pointe thermique [1-2], le matériau cible est considéré comme un ensemble de deux systèmes physiques continus en interaction : le gaz d'électrons et le réseau atomique. Ces deux systèmes seront traités comme des plasmas hors d'équilibre l'un par rapport à l'autre qui se mettront en équilibre par interaction électron-phonon. Les phénomènes de transport électrique et thermique sont régis par l'équation de transport de Boltzmann de laquelle découlent les définitions de diffusivité électrique applicables aussi bien au gaz d'électrons qu'au réseau atomique. Les données expérimentales qui nous sont fournies prennent nécessairement en compte les caractéristiques des deux systèmes en interaction sans distinction de la contribution de chacun d'eux aux valeurs de conductivité électrique et thermique. Si les électrons constituaient effectivement un gaz d'électrons libres, la diffusivité thermique électronique serait infinie [3].

A la suite d'une excitation, les électrons ne peuvent se thermalisés que par interaction électron-électron et électron-réseau. Les élections subissent trois types d'interaction :

1) Les interactions électron-électron.
2) L'interaction avec le potentiel périodique du réseau.
3) Les interactions avec les vibrations du réseau ou les phonons.

Nous introduirons les deux premiers types d'interaction dans la diffusivité thermique électronique qui caractérise la vitesse de transport de l'énergie thermique dans le gaz d'électrons quasi-libre. Nous choisirons les valeurs données par un gaz d'électrons quasi libre tel qu'il existe dans les métaux nobles (Au, Cu ou Ag). Le troisième type d'interaction concerne les collisions des électrons avec les phonons que nous reprendrons dans le terme de couplage électron-phonon [3].

Les deux systèmes se présentent comme suit :

- Le système électronique (gaz d'électrons quasi-libres) décrit par la distribution de Fermi-Dirac :

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{exp(\frac{\varepsilon-\mu}{K_B T_e})+1} \qquad \text{(IV.1)}$$

où :ε est l'énergie d'un électron,

μ est le potentiel chimique dont la valeur à 0 K est égale à l'énergie de Fermi ;

T_e est la température des électrons.

- Le système du réseau atomique considéré comme un ensemble de phonons est décrit par la distribution de Bose-Einstein :

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{exp(\frac{\hbar\omega}{K_B T_a})-1} \qquad \text{(IV.2)}$$

Où : ħω est l'énergie d'un phonon dont la valeur maximale est l'énergie de Debye $\hbar\omega_D$.

T_a est la température du réseau atomique.

A la suite du dépôt d'énergie sur les électrons, ces derniers se thermalisent à travers l'interaction électron-électron. L'énergie est ensuite transmise au réseau via l'interaction électron-phonon. Dans ce cas, la température du réseau peut atteindre une valeur importante pour entraîner un endommagement. L'élévation de température du réseau va dépendre des coefficients de diffusion de la chaleur sur les électrons et du temps d'interaction électron-phonon [3].

2. Le modèle de la pointe thermique :

Le modèle de la pointe thermique a été proposé pour la première fois par F. Dessauer en 1923 et développé par Seitz et Koehler[4] et appliqué aux métaux en 1956. Ce modèle a été développé aussi sous forme de code de calcul par Marcel Toulemonde est ses collaborateurs [5]. En effet, le modèle considère que le matériau cible est constitué de deux sous-système en interaction continue : le sous-système électronique (noté *e*) et le sous-système atomique (noté a). Le modèle considère que l'énergie de l'ion lourd rapide (l'énergie dans le régime des pertes d'énergie électronique) est déposé essentiellement sur le sous-système électronique autour du temps 10^{-15} s. Cette énergie est ensuite transférée aux noyaux via l'interaction électron-phonon [6].

Au fur et à mesure que le transfert d'énergie vers les atomes du réseau se rapproche du trajet des ion, il devient très important entre 10^{-14}_ 10^{-12} s et l'échauffement est très local[5]. L'élévation de température du réseau va dépendre des coefficients de diffusion de la chaleur sur les électrons et du temps d'interaction électron-phonon. Un équilibre thermique s'établit après environ 10^{-13} s, avec possibilité de changement de phase sur le parcours de l'ion, suivie d'un phénomène de trempe ultra-rapide, qui peut geler le matériau en une structure amorphe [5-6].

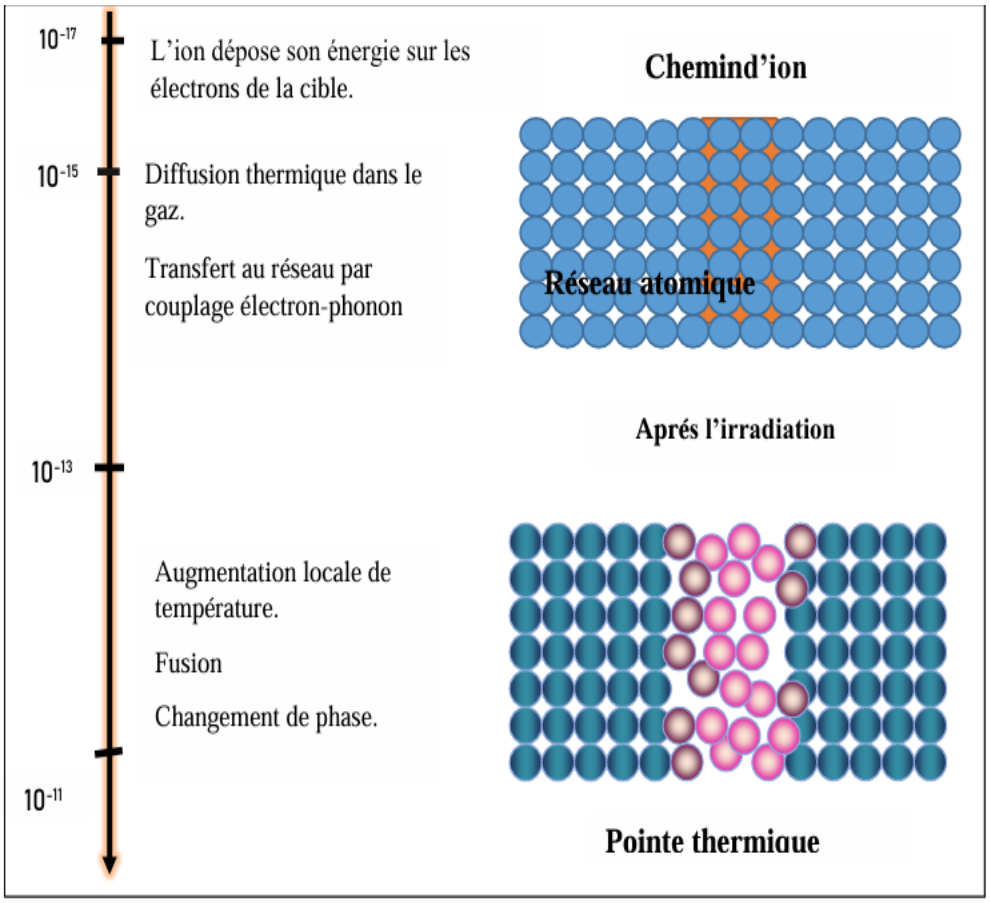


Figure Ⅳ.1 : Schéma du modèle de pointe thermique et de la formation de trace latente autour du trajet ionique dans le réseau atomique.

Le transfert de chaleur entre ces deux sous-systèmes est régit par le système d'équations différentielles non linéaires suivant :

$$C_e(T_e)\frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rK_e(T_e)\frac{\partial T_e}{\partial r}\right) - g(T_e - T_a) + A(r,t) \text{.....Pour les électrons (IV.3)}$$

$$C_a(T_a)\frac{\partial T_a}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rK_a(T_a)\frac{\partial T_a}{\partial r}\right) + g(T_e - T_a) \text{.....Pour les atomes (IV.4)}$$

Où : C est la chaleur spécifique, K est la conductivité thermique, $A(r, t)$ est l'énergie déposée par les ions incidents sur les électrons, g est la constante du couplage électron phonon, T est la température, t est le temps, et r est la position dans l'espace. L'évolution des températures du sous-système électronique et atomique en fonction du temps et de la distance radiale ($T_e(t, r)$ et $T_a(t, r)$) est obtenue par résolution numérique des deux équations [6].

Le passage au code pour multicouches se fait en rajoutant aux équations d'ou les nouvelles équations [3]:

$$\begin{cases} C_e(T_e)\frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rK_e(T_e)\frac{\partial T_e}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial x}(K_e(T)\frac{\partial T_e}{\partial x}) - g(T_e - T_a) + A(r\,,t) \\ C_a(T_a)\frac{\partial T_a}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rK_a(T_a)\frac{\partial T_a}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial x}(K_a(T)\frac{\partial T_a}{\partial x}) + g(T_e - T_a) \end{cases} \quad \text{(IV.5)}$$

Dans cette approche de la pointe thermique, la trace latente créée par l'ion est définie comme une zone cylindrique dont la température est supérieure à la température de fusion du matériau. Ce modèle permet une comparaison directe entre les prédictions théorique et les observations expérimentales à travers le calcul du rayon de fusion. Ceci est probablement la raison principale pour laquelle l'approche de l'explosion Coulombienne a été moins utilisée que l'approche de la pointe thermique [6].

3. Description mathématique du modèle de la pointe thermique :

3.1. Caractéristiques du gaz d'électrons :

Les paramètres thermiques C_e et K_e du sous-système électronique sont inconnus dans le cas des isolants. Baranov et al.[7] ont suggéré que les électrons chauds dans la bande de conduction d'un matériau isolant se comportent comme les électrons chauds d'un métal. Dans ce cadre, Toulemonde et al.[8] ont utilisé le modèle du gaz d'électron libre pour extraire les paramètres thermiques du gaz d'électron. Ils ont obtenu une valeur de C_e qui dépend du nombre d'électrons (N_e) qui participe dans la diffusion thermique : $C_e = \frac{3}{2}N_eK_B$, où K_B et la constante de Boltzmann. En supposant une densité électronique approximative de 5×10^{22} e/cm^3, la valeur de C_e = 1 Jcm^{-3}K^{-1} .

La conductivité thermique électronique est reliée à la diffusivité thermique avec la relation suivante : $$K_e = D_eC_e$$

L'expression de la diffusivité électronique D_e selon le modèle du gaz libre est donnée par$D_e = \frac{1}{3}lv_f$, où l est le libre parcours moyen de l'interaction électron-électron et v_f la vitesse de Fermi (autour de 10^8 cm/s). En utilisant une valeur du libre parcours moyen l égale à la distance interatomique, on trouve une valeur de D_e d'environ 2 cm^2/s et une valeur de K_e= 2 J cm^{-1} K^{-1} .

Dans les calculs, Ces mêmes valeurs de C_e et K_e sont utilisé quem que soit le matériau isolant ou semi-conducteur [6].

3.2. Caractéristiques du sous-système atomique :

Dans le cas du sous-système atomique, les valeurs de la conductivité thermique et la capacité spécifique (C_a et K_a) à l'état solide et liquide en fonction de la température

sont prises des mesures à l'équilibre [3-6]. La diffusivité thermique atomique au-delà de la température d'évaporation varie avec la racine carrée de la température [9]

3.3. Le libre parcours moyen de l'interaction électron-phonon :

La constante du couplage électron-phonon g et aussi inconnue pour isolant, il est lié au temps de l'interaction électron-phonon $\tau_a = C_e / g$ et au libre parcours moyen de interaction électron-phonon λ par la relation $\lambda^2 = D_e\tau_a = K_e/g$. Ce paramètre (λ) est utilisé comme le seulparamètre libre dans les calculs du modèle de la pointe thermique appliqué à un nombre important de matériaux isolants, afin de reproduire les rayons de traces latentes mesurées dans ces matériaux. Les valeurs déduites de λ ont été tracées en fonction de l'énergie de gap E_g de ces matériaux isolants et l'ajustement de ces point donne la formule suivant [6]:

$$\lambda = 3.8 + 9.1\ exp(-0.69E_g)$$

3.4. La répartition spatio-temporelle du dépôt d'énergie *A(r, t)* :

3.4.1. Le dépôt sur les électrons *A(r, t)* :

Le dépôt d'énergie de l'ion sur le système électronique s'étend radialement à partir de l'impact de l'ion par l'éjection d'électrons primaires et secondaires. Le dépôt d'énergie S_e(en KeV/Å) sur cette tranche est une donnée du faisceau. Or ce dépôt n'est ni instantané, ni ponctuel. Il convient donc de modéliser sa répartition sur la surface et dans le temps. Au rayon *r* et à l'instant *t, A(r, t)* peut s'écrire sous la forme [6]:

$$A(r,t) = S_e.F_e(t)G_e(r) \qquad \text{(IV.6)}$$

$F_e(t)$ et $G_e(r)$ sont respectivement la fonction de distribution gaussienne en temps et la fonction de distribution spatiale de l'énergie des électrons delta déposés dans la matière.

3.4.2. La dépendance en temps :

L'énergie moyenne $\langle E_2 \rangle$ transmise aux électrons pendant le ralentissement est déduite de la relation [6]:

$$\langle E_2 \rangle = \frac{\int E_2 \sigma(E_1, E_2) dE_2}{\int \sigma(E_1, E_2)\, dE_2}$$

Où $\sigma(E_1, E_2)$ est la section efficace de Rutherford. Appliquée dans le cas des ions du GANIL, l'énergie moyenne des électrons est de l'ordre de 500 eV. Gervais [10] a montré qu'un électron de 500 eV peut être ralenti par interaction avec les électrons pour

atteindre l'énergie de Fermi en un temps de l'ordre de 10^{-15} s. Nous supposerons que ce temps correspond au temps de dépôt d'énergie sur l'ensemble des électrons. Les expériences lasers femtosecondes [11-12] montrent que ces électrons interagissent entre eux en un temps de l'ordre de 10^{-16} s beaucoup plus court que le temps du dépôt. On peut ainsi supposer qu'en 10^{-15} s, l'énergie déposée sur les électrons est thermalisée. Pour ces raisons, le terme d'énergie dépendra du temps par une fonction gaussienne centrée sur t_0= 10^{-15} s, comme le montre la figure IV.2, d'écart type σ tel que : $\sigma = t_0 = 10^{-15}$ s comme suit[3-6] :

$$F(t) = \frac{c_1}{\sigma\sqrt{2\pi}} exp\left[\frac{-(t-t_0)^2}{2\sigma^2}\right] \qquad \text{(IV.7)}$$

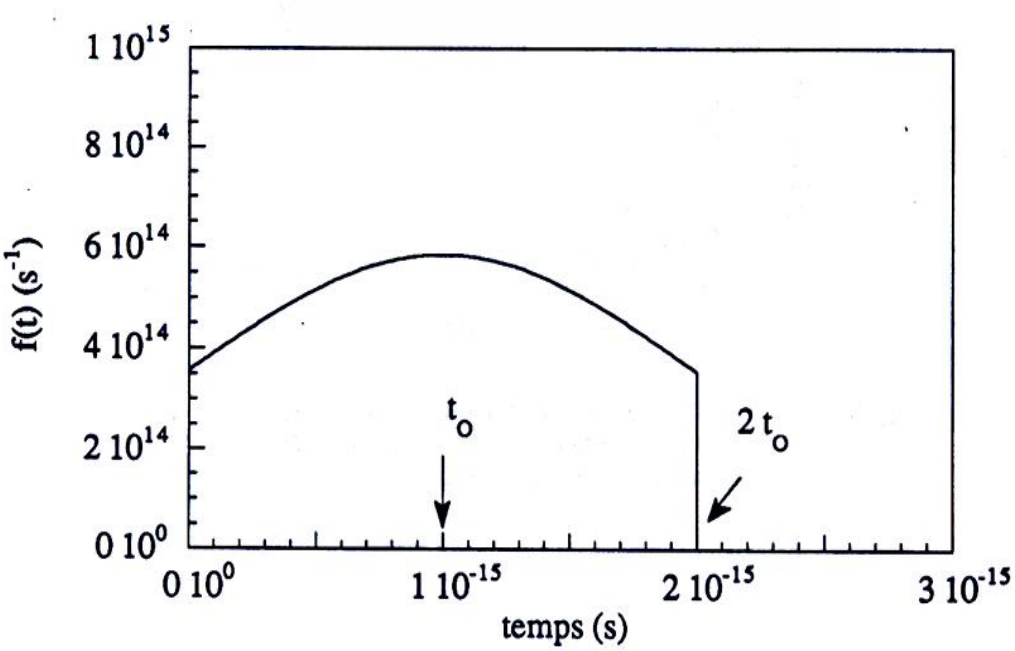


Figure IV.2 : Le terme de la dépendance en fonction du temps F(t) du dépôt d'énergie sur les électrons.

3.4.3. Dépendance spatiale :

La distribution spatiale de l'énergie est simulée par la fonction $D_e(r)$ (Figure IV.3) estimée par Waligorski et ses collaborateurs [13] et elle est définit comme suit :

$$D_e(r) = \frac{1}{r}\left(\frac{\left(1-\frac{r+\theta}{T+\theta}\right)^{\frac{1}{\alpha}}}{r+\theta}\right) \qquad \text{(IV.8)}$$

Où :

- r : est la distance radiale.
- θ : est la plage d'électrons delta d'énergie égale au potentiel d'ionisation.

- α : est une constante.

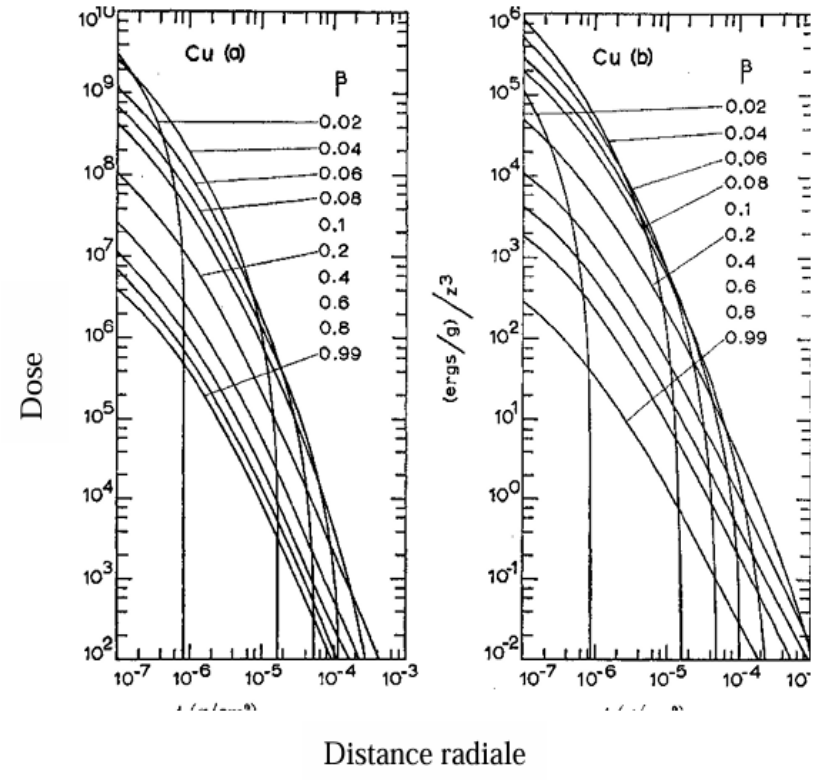


Figure IV.3 : Répartition radiale de l'énergie déposée sur les électrons des atomes cibles.

4. La discrétisation des équations de chaleur appliquée au modèle de la pointe thermique :

Nous allons montrer en détail la procédure suivie pour la résolution numérique du système d'équations différentielles couplées pour les matériaux massifs. Ensuite, on parlera de la méthode suivie dans le cas des multicouche [3].

4.1. Le code pour les matériaux massifs :

On convient de la notation indicielle suivante :

i : l'indice d'espace

j : l'indice de temps

Les pas d'espace Δr et du temps Δt définissent les rayons et les instants considérés :

r_i : $(i - 0.5)\,\Delta r$

t_j : $j\Delta t$

L'indice i varie de 1 à N_r, valeur maximale qui définit le rayon du exploré par le calcule et l'indice j varie de 1 à N_t. La durée sur laquelle, on calcule les températures est : $N_t \Delta t$.

Dans ce suit, T_e et T_a seront remplacées par T dans les équations de IV.3 et IV.4 qui se discrétisent de la façon suivante :

En utilisant les différences à droite pour t, $\frac{\partial T}{\partial t}$ devient : $\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\left(T_i^{j+1} - T_i^j\right)}{\Delta t}$

En utilisant les différences à centrées sur r, on obtient : $\frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\left(T_{i+1}^{j+1} - T_{i-1}^{j+1}\right)}{2\Delta r}$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(k\frac{\partial T}{\partial r}\right) = \frac{\partial}{\partial r}\left(k_i \frac{T_{i+1}^{j+1} - T_{i-1}^{j+1}}{2\Delta r}\right)$$

En remplaçant le symbole de dérivée par le symbole des différences finies à droite, nous obtenons :

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(k\frac{\partial T}{\partial r}\right) = \frac{\nabla K_i}{\Delta r}\left(\frac{T_{i+1}^{j+1} - T_{i-1}^{j+1}}{2\Delta r}\right) + K_i \nabla\left(\frac{T_{i+1}^{j+1} - T_{i-1}^{j+1}}{2\Delta r^2}\right)$$

$$= \frac{K_{i+1}^j}{2\Delta r^2}\left(T_{i+1}^{j+1} - T_i^{j+1}\right) - \frac{K_{i-1}^j}{2\Delta r^2}\left(T_i^{j+1} - T_{i-1}^{j+1}\right) + \frac{K_i^j}{2\Delta r^2}\left(T_{i+1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i-1}^{j+1}\right)$$

Ces relations appliquées au système d'équations différentielles IV.3 et IV.4 permettent d'écrire les deux équations sous la forme :

$$a_i T_{i-1}^{j+1} + b_i T_i^{j+1} + c_i T_{i+1}^{j+1} = d_i \qquad \text{(IV.9)}$$

Où les coefficients a_i , b_i , c_i et d_i sont définis en fonction des résultats du calcul à l'instant j.

$$a_i = -\frac{1}{2C_i^j \Delta r^2}\left(k_i^j + k_{i-1}^j - \frac{k_i^j}{(i-0.5)}\right)$$

$$b_i = -\left(\frac{C_i^j}{\Delta t} + \frac{1}{2\Delta r^2}\left(k_{i+1}^j + 2k_i^j + k_{i-1}^j\right)\right)$$

$$c_i = \frac{1}{2C_i^j \Delta r^2}\left(k_{i+1}^j + k_i^j + \frac{k_i^j}{(i-0.5)}\right)$$

Ces expressions sont valables aussi bien pour les phonons que pour les électrons, en remplaçant $K_i^j par\ K_e\left(T_{e_i}^{\ j}\right) ou\ K_a\left(T_{a_i}^{\ j}\right) et\ C_i^j\ par\ C_e\left(T_{e_i}^{\ j}\right) ou\ C_a\left(T_{a_i}^{\ j}\right)$.

$$d_i = -\frac{T_{a_i}^{\ j}}{\Delta t} - \frac{g\left(T_{e_i}^{\ j} - T_{a_i}^{\ j}\right)}{C_{a_i}^{\ j}} \qquad \text{Pour les phonons}$$

$$d_i = -\frac{T_{e_i}^{\ j}}{\Delta t} + \frac{g(T_{e_i}^{\ j} - T_{a_i}^{\ j})}{C_{a_i}^{\ j}} - \frac{A_i^j}{C_{e_i}^{\ j}}$$ Pour les électrons

Pour simplifier les écritures, on pose et $y_i = T_i^{j+1}$ on obtient l'expression suivante :

$$a_i y_{i-1} + b_i y_i + c_i y_{i+1} = d_i$$

Ce système peut être écrit sous la forme d'un produit de matrice de type :

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & . & . & . & . & . \\ a_2 & b_2 & c_2 & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & a_i & b_i & c_i & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ . & . & . & . & . & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ . \\ y_i \\ . \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ . \\ d_i \\ . \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}$$

Où n est le nombre de pas radial (couche) introduit dans le calcul.

L'algorithme de Choleski nous permet de tirer les températures inconnues à l'instant j+1 en fonction des températures connues à l'instant j (dans l'expression de d_i).La première équation du système donne [3] :

$$b_1 y_1 + c_1 y_2 = d_1 \Rightarrow y_1 = \frac{(d_1 - c_1 y_2)}{b_1} \qquad \text{(IV.10)}$$

La seconde équation du système permet d'écrire

$$a_2 y_1 + b_2 y_2 + c_2 y_3 = d_2 \Rightarrow y_2 = \frac{(d_2 - a_2 y_1 - c_2 y_3)}{b_2} \qquad \text{(IV.11)}$$

En injectant (IV.10) dans (IV.11), nous obtenons y_2 en fonction de y_3 :

$$y_2 = \frac{c_2 b_1}{b_1 b_2 - c_1 a_2} y_3 + \frac{b_1 d_2 - d_1 a_2}{b_1 b_2 - c_1 a_2}$$

D'une manière générale, la relation de récurrence s'écrit : $y_i = A_i\, yi_{+1} + B_i$

Avec $A_i = -\frac{c_i}{a_i A_{i-1} + b_i}$ (IV.12)

$B_i = \frac{d_i - a_i B_{i-1}}{a_i A_{i-1} + b_i}$ (IV.13)

Le but du premier balayage consiste à déterminer tous les éléments ses suites A_i et B_i. Reste à traiter les conditions aux limites (i=1 et i=N_r) qui vont déterminer l'ensemble des températures y_i par un " balayage " effectué dans le sens des indice i décroissants [3].

- i = N_r correspond à la limite extérieure du cylindre exploré par la calcul. Pour que le calcul puisse s'arrêter, il faut éviter l'utilisation d'un indice supérieur à N_r pour les y_i d'où :

  $A_{Nr} = 0$ soit $c_{Nr} = 0$

B_{Nr} est connue par la relation de récurrence et dépend de B_1

- i=1, l'équation de diffusion provenant du bilan énergétique vu plus haut n'est plus valable. En effet, pour le cœur du cylindre figure (IV.4), il n'y a diffusion de chaleur qu'à travers une seule paroi. Ce qui n'était pas le cas pour une tranche cylindrique. Il n'apparaît donc pas de dérivée seconde par à r (coordonnée radiale).Le bilan est le suivant :
  - Variation d'énergie du cœur de rayon Δr : $C\frac{\partial T}{\partial t}\pi\Delta r^2\Delta x$
  - Transfert d'énergie par conduction thermique à travers la paroi de surface dS : $K\frac{\partial T}{\partial r}2\pi\Delta r\Delta x$

Le transfert d'énergie par couplage électron-phonon et l'apport d'énergie par l'ion incident gardent la même forme que celle des autres tranches cylindriques.

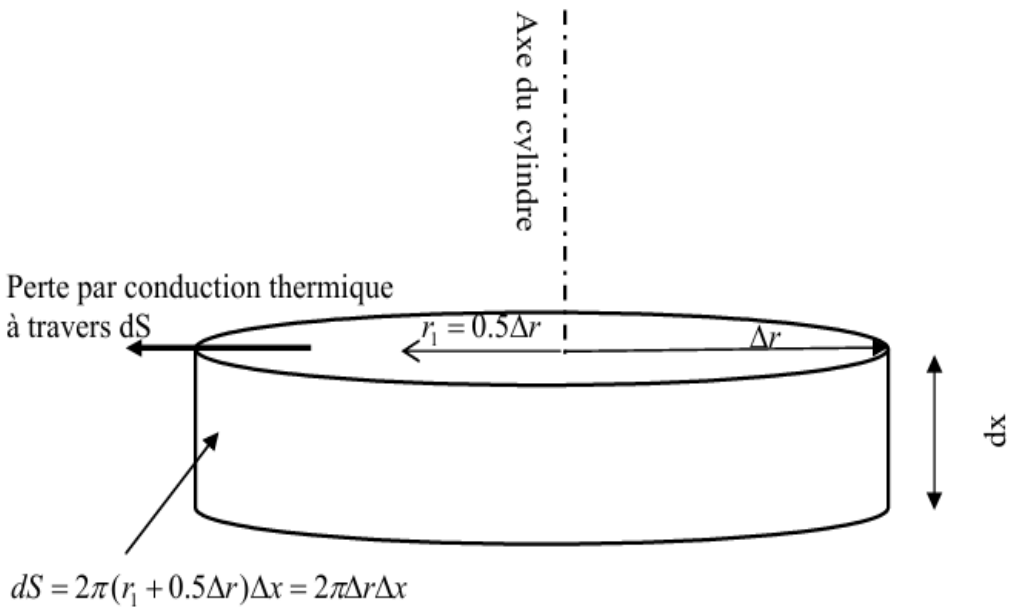


Figure **IV.4** : Bilan d'énergie pour le cœur de la trace.

Le système s'écrit maintenant, en raisonnant par unité de volume :

$$\begin{cases} C_e\frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{2k_e}{\Delta r}\frac{\partial T_e}{\partial r} - g(T_e - T_r) + A(r\,,t) \\ C_a\frac{\partial T_a}{\partial t} = \frac{2k_a}{\Delta r}\frac{\partial T_a}{\partial r} + g(T_e - T_a) \end{cases}$$

On remplace les dérivées spatiales et temporelles par les expressions ci-dessous :

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T_1^{j+1} - T_1^j}{\Delta t} \quad et \quad \frac{\partial T}{\partial r} \approx \frac{T_2^{j+1} - T_1^{j+1}}{\Delta r}$$

Et on déduit, de ces expressions, les valeurs de a_1, b_1, c_1 et d_1 :

$$a_1 = 0, \qquad b_1 = -\frac{2k_1^j}{C\Delta r^2} - \frac{1}{\Delta t}, \; c_1 = \frac{2k_1^j}{C\Delta r^2}$$

d_1 est définie de la même manière que pour les autres tranches d'où :

$A_1 = -c_1/b_1$; $B_1 = d_1/b_1$

Les équations (IV.11) et (IV.12) nous permettent de calculer aisément de proche en proche les couples (A_2 , B_2).....(A_i , B_i).....etc..... Le calcul des coefficients A_i, B_i est donc rendu possible, en un premier balayage de i =2 à N_r .

Le second balayage s'effectue de N_r à 1. Ce qui va nous permettre de calculer les inconnues y_i . Il suffit de constater que :

$a_{Nr}y_{Nr-1} + b_{Nr}y_{Nr} = d_{Nr}$ et $y_{Nr-1} = A_{Nr-1}y_{Nr} + B_{Nr-1}$

Soit après calcul : $y_{Nr} = \frac{d_{Nr} - a_{Nr}B_{Nr-1}}{a_{Nr}A_{Nr-1} + b_{Nr}} = B_{Nr}$

B_{Nr} ayant été déterminé lors du premier balayage, nous avons ainsi la valeur de y_{Nr} cherchée. Nous déduisons $y_{Nr-1} = A_{Nr-1}y_{Nr} + B_{Nr-1}$ puis y_{Nr-2} jusqu'à y_1 de proche en proche. Après ce double balayage, les températures sont connues à l'instant j+1.

En procédant ainsi, l'évolution des températures dans le temps et dans l'espace est réalisée. Notons que lorsque la température de fusion est atteinte et que le calcul de l'instant ultérieur donne une température supérieure à la température de fusion, nous transformons le Δt observé en quantité de chaleur C ΔT que l'on stocke dans une variable test. Tant que cette variable n'atteint pas la chaleur latente de fusion, la température reste égale à la température de fusion. Le palier de température étant franchi, le calcul continu de manière analogue à la première étape en utilisant les coefficients thermodynamiques du liquide [3].

Signalons aussi que la méthode implicite n'est pas adaptée aux changements de phase. Pour cela, nous utilisons un calcul par la méthode explicite pour déterminer la chaleur reçue et perdue lors des changements de phase. Comme nous l'avons vu, la méthode implicite discrétise l'équation considérée à l'instant t + Δt. Le terme de couplage $g[T_e(r, t+\Delta t) - T_a(r , t+\Delta t)]$ est ici inexploitable car $T_e(r, t+\Delta t)$ et $T_a(r , t+\Delta t)$ sont encore inconnues. Pour cela, nous l'avons pris égal à $g[T_e(r,t) - T_a(r,t)]$. Ce qui revient à faire le même raisonnement que pour la méthode explicite.

4.2. Le code pour multicouches :

L'idée utilisée pour la résolution du système Ⅳ.5 est de faire un double balayage. C'est-à-dire on s'occupe d'abord du transfert d'énergie dans le sens radial (par analogie au code pour massifs) puis on s'occupe du transfert dans le sens des x. C'est-à-dire, pour un instant donné. Les températures calculées sont considérées alors comme des températures intermédiaires à partir desquelles on peut traiter la diffusion axiale.

En effet, la méthode utilisée pour la résolution numérique de la diffusion axiale dans nos calculs est la méthode implicite [3].

Soit « j » l'indice temporel, « i » l'indice radial et « x » l'indice de profondeur.

Le bilan de transfert d'énergie dans la direction axial pendant l'intervalle de temps dt s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = C_x^j \frac{\partial T_x}{\partial t} dSdx = C_x^j \frac{T_x^{j+1} - T_x^j}{dt} dSdx$$

$$= \frac{K_{x-1} + K_x}{2}\left(\frac{T_{x-1}^{j+1} - T_x^{j+1}}{dx}\right) dS - \frac{K_x + K_{x+1}}{2}\left(\frac{T_{x+1}^{j+1} - T_x^{j+1}}{dx}\right) Ds$$

Sachant que $dS = 2\pi r_i dr = 2\pi(i - 0.5)dr^2$, on obtient l'égalité suivante :

$$C_x^j \frac{T_x^{j+1} - T_x^j}{dt} dSdx = \left[\frac{K_{x-1} + K_x}{2}\left(\frac{T_{x-1}^{j+1} - T_x^{j+1}}{dx}\right) - \frac{K_x + K_{x+1}}{2}\left(\frac{T_x^{j+1} - T_{x+1}^{j+1}}{dx}\right)\right] dS$$

D'où on peut exprimer la température T_x^j en fonction des températures à l'instant j+1 :

$$-\frac{T_x^j}{dt} = \left[\frac{K_{x-1}^j + K_x^j}{2C_x^j dx^2}\right] T_{x-1}^{j+1} + \left[\frac{-1}{dt} - \frac{K_{x-1}^j + 2K_x^j + K_{x+1}^j}{2C_x^j dx^2}\right] T_x^{j+1} + \left[\frac{K_x^j + K_{x+1}^j}{2C_x^j dx^2}\right] T_{x+1}^{j+1}$$

Pour simplifier, on l'écrit à l'instant j+1 :

$$d_x = a_x T_{x-1} + b_x T_x + c_x T_{x+1}$$

Cette équation est valable que ce soit pour les électrons ou bien pour les atomes. En faisant varier l'indice x de 1 à m, on obtient un système de m équations. Où m est le nombre de pas axiale introduit dans le calcul.

Ce système peut être écrit sous la forme d'un produit de matrice de type :

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & . & . & . & . & . \\ a_2 & b_2 & c_2 & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & a_x & b_x & c_x & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & a_{m-1} & b_{m-1} & c_{m-1} \\ . & . & . & . & . & a_m & b_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ . \\ T_x \\ . \\ T_{m-1} \\ T_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ . \\ d_x \\ . \\ d_{m-1} \\ d_m \end{pmatrix}$$

En utilisant l'algorithme de Choleski, nous pouvons tirer les températures inconnues à l'instant j+1 en fonction des températures connues à l'instant j (dans l'expression de d_i). On obtient alors la relation de récurrence suivante :

$$T_x = A_x T_{x+1} + B_x$$

Avec :

$$A_x = -\frac{c_x}{a_x A_{x-1} + b_x}$$

$$Bx = \frac{d_x - a_x B_{x-1}}{a_x A_{x-1} + b_x}$$

Un premier balayage consiste à déterminer tous les éléments des suites A_x et B_x. Reste à traiter les conditions aux limites x = 1 et x = m+1.

Pour x = 1 : Cette couche est en contact avec l'air (ou le vide). On suppose qu'il n'y a pas de conduction thermique avec l'air à la surface.

Pour x = m+1 : Il existe deux choix : soit qu'on suppose que la couche m+1 est isolé ou bien non.

5. Choix de la taille du cylindre (rayon $N_r\Delta r$) et de la durée explorés :

Dans le cadre de la méthode implicite, aucune condition de convergence n'est nécessaire. Cependant, il ne suffit pas de satisfaire à la condition de convergence pour obtenir un couple (Δr, Δt) judicieux. Dans la pratique, nous constatons un mauvais choix du couple (Δr, Δt) lorsque nous observons :

- Des oscillations de T(x, r, t) en fonction de x et r.
- Que l'énergie totale apportée par l'ion et celle absorbée par le réseau sont différentes.

5.1. **Le Choix de Δr :**

Ce choix dépond de la taille du cylindre d'une part et d'autre part de la valeur de r_0 utilisée. La première source d'erreur possible vient du fait que la constante c_2 normalise l'intégrale spatiale du dépôt d'énergie pour un rayon r allant de 0 à ∞. Or, le calcul s'arrête pratiquement à $N_r\Delta r$. Deux constatent s'imposent :

1) Plus N_r est grand, plus le calcul est précis.

2) Quel que soit le nombre de pas d'espace N_r choisi, si le rapport $\Delta t/r_0$ dépasse 0.2, il engendre une erreur relative comprise entre 10 et 50 % dans la sommation de l'énergie déposée.

Dans tous les calculs dont nous présenterons les résultats, la valeur de r_0 choisie pour les électrons est égale à 25 Å. Pour satisfaire à la deuxième constatation, Δr doit être au minimum égale à 5 Å [3].

5.2. **Le Choix de Δt :**

Il dépend des paramètres t_0 et Δt_0 du dépôt d'énergie et de la valeur du couplage (C_e/g a la dimension d'un temps). On adopte la règle suivante :

Pendant la durée du dépôt d'énergie par l'ion et jusqu'à 100 Δt_0 : $\Delta t=5.10^{-18}$s, ultérieurement : $\Delta t=5.10^{-16}$s.

Le calcul est mené jusqu'à 10^{-11}s temps au bout duquel, l'énergie étant entièrement relaxée, les deux systèmes (électrons et phonons) sont revenus à l'équilibre entre eux.

Ces critères de choix doivent finalement réaliser la condition suivante : l'expansion de l'énergie sur le gaz d'électrons doit se faire dans un cylindre de rayon plus faible que r_{max}, rayon du cylindre exploré dans le calcul ($r_{max}=N_r\Delta r$)[3].

$$r_{max}^2 \gg 4D_e t_{max}$$

6. Le super échauffement (superheating) :

Des expériences d'irradiation avec des lasers pulsés ont montré que le phénomène de super échauffement peut avoir lieu lors des dépôts très rapides d'énergie sur les atomes du réseau. C'est-à-dire que la durée du palier de transformation de phase solide-liquide diminue considérablement avec la vitesse du dépôt d'énergie jusqu'à ce que la fusion puisse avoir lieu sans palier. Tous les codes disponibles de notre modèle tiennent compte de l'existence de ce palier [3].

Dans notre étude, nous considérerons ce phénomène de super échauffement. Nous allons simplement introduire des hautes valeurs de la température de fusion et d'évaporation, de telle façon que nous soyons sûrs que le test de changement de phase n'aura pas lieu. En générale, on prend $T_{fusion} = T_{évaporation} =1000000$ K. Sachant que les températures atomiques atteintes sont de l'ordre de quelques milliers de Kelvin.

7. Données d'entrée (input data) dans le calcul numérique :

- Les valeurs de la conductivité thermique et la chaleur spécifique du réseau atomique des différents métaux étudiés ont été prises des résultats de mesure pour différentes valeurs de température. Pour $T > T_{fusion}$, la chaleur spécifique est considérée constante. Pour $T > T_{évaporation}$, la conductivité thermique est proportionnelle à la racine de la température[3].
- La température d'irradiation :

  Les calculs ont été réalisés à la température ambiante 300K.
- Les pas de calcul : Δx, Δr et Δt

Plusieurs tests ont été effectués afin de choisir les pas des calculs numériques (x, r, t). Nous avons choisi les valeurs suivantes :

Le pas radial : $\Delta r = 5$Å.

Le pas d'épaisseur : $\Delta x = 5$ ou 10Å.

Le pas de temps : $\Delta t = 2.10^{-18}$s. Ce pas n'est pas constant durant le calcul. Il augmente avec le temps.

- Volume exploré :

- La direction radiale : le nombre total de pas radial Nr a été pris entre 600 et 1000.

-La direction axiale : le nombre de pas dans cette direction dépend de l'épaisseur des différentes couche qui composent la multicouche étudiée ainsi que le pas choisi (5 ou 10 Å). Les multicouches étudiées se composent d'une bicouche (Métal 1/Métal 2) répétée 15 fois, ensuite déposée sur un substrat de silicium. On ne s'intéresse qu'à la partie centrale de la multicouche (non affectée par les conditions aux limites : le contact avec l'air à la surface et avec le substrat)[3].

- Dans cette étude, nous n'avons considéré que le dépôt sur les électrons (S_e), le dépôt sur les atomes étant négligeable ($S_n \approx 0$).

Références:

[1] C. Dufour Thèse de docteur université de Caen (1993).

[2] M. Toulemonde, C. Dufour, and E.paumier, pyys. Rev. B46, (1992) 14362.

[3] A. Chettah, Thèse de doctorat, Université 20 Août 1955 Skikda, 26/11/2006.

[4] F. Seitz, J. S. Kohler, Sol. St. Phys. 2,305, (1956).

[5] I. Bouchareb, Thèse de doctorat, Université 20 Août 1955 Skikda, 14/07/2022.

[6] K. Mahacene, Thèse de doctorat, Université Badji Mokhtar Annaba, 2022.

[7] I.A. Baranov, Y. V. Martynenko, Y. V. Gulyaev, Y.L. Kopylov, Inelastic sputtering of solidsbyions,Sov.Phys.Uspekhi.31(1988)1015–1034.
https://doi.org/10.1070/PU1988V031N11ABEH005646.

[8] M. Toulemonde, C. Dufour, A. Meftah, E. Paumier, Transient thermal processes in heavy ion irradiation of crystalline inorganic insulators, Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B. 166–167. (2000) 903–912. https://doi.org/10.1016/S0168-583X(99)00799-5.

[9] P. Sigmund, Appl. Phys. Lett. 25 (1974) 169 , and Appl. Phys. Lett. 27(1975)52.

[10] B. Gervais (1993) Communication privée.

[11] A. Mourchid, Thèse doctorat, Université Paris Sud. Centre Orsay, 1990.

[12] H.M. Milchberg, R.R. Feerman, S.C. Davey, R.M. More, Resistivity of a Simple Metal from Room Temperature to 106 K, Phys. Rev. Lett. 61(1988) 2364-2367.

[13] V.D.M.T. and E.P. C. Dufour, E. Lesellier de chezelles, Modifications induced by irradiation in glasses, Elsevier, 1992.

Chapitre Ⅴ :Résultats et discussion

1. Introduction :

L'utilisation des nanoparticules (NPs) en nanomédecine, qui a réussi à améliorer la spécificité des chimiothérapies modernes ces dernières années (Ranganathan et al. [1]; Danhier et al.[2]; Sun et al.[3]), des démonstrations prometteuses du potentiel radiosensibilisant des NPs au cours de la dernière décennie, tant in vitro qu'in vivo, signifient désormais que d'importants efforts de recherche se concentrent sur les NPs pour améliorer la localisation de la dose en radiothérapie (Hainfeld et al.[4]; Kwatra et al.[5]; Porcel et al.[6]; Liu et al.[7]; Polf [8]).

Les nanoparticules en or (NPsAu) en particulier sont devenus populaires car ils possèdent plusieurs étiquettes avant-gagnantes, notamment une bonne biocompatibilité, une synthèse simple dans une large gamme de tailles, une fonctionnalisation facile des surfaces par l'attachement des ligands nécessaires pour cibler les cellules cancéreuses et les organites en ceux-ci, ou une durée de vie améliorée dans la circulation sanguine (McMahon et al.[9]; Hainfeld et al.[4]; Kwatra et al.[5]; Malam et al.[10]; Barreto et al.[11]; Carter et al.[12]; Liu et al.[7]). De plus, les NPsAu présentent une grande section efficace avec le rayonnement des rayons X jusqu'à environ 1 MeV ainsi qu'avec le rayonnement ionique.

La contribution des NPsAu à l'augmentation de l'efficacité de la radiothérapie est mesurée par le facteur d'augmentation de dose (DEF)[13]. Le DEF des NPsAu est défini comme le rapport entre la dose de radiation absorbée par les cellules tumorales en présence d'NPsAu et la dose absorbée en l'absence d'NPsAu (Muddineti et al.[14]). Cela peut varier selon la concentration et les caractéristiques des AuNP ainsi que leur emplacement à l'intérieur de la cellule (Butterworth et al.[15]; Hossain [16]).

Parmi d'autres groupes étudiant les bienfaits des NPsAu en combinaison avec la radiothérapie aux rayons X, Zhang et al. ont utilisé des simulations de Monte Carlo pour montrer une possible localisation radiosensibilisation avec des NPsAu et ont constaté que le faisceau de rayonnement dépose une dose plus faible après avoir traversé la région contenant l'NPsAu, augmentant ainsi le ratio thérapeutique (Zhang et al.[17]).

Comme mentionné précédemment, la principale contribution à la destruction des cellules par la radiothérapie provient de la production de radicaux libres. C'est aussi la source de radiosensibilisation lors de l'utilisation des NP, car ils augmentent la production de radicaux (Porcel et al. [18]; Verkhovtsev et al.[19]).

Nous avons estimé que l'utilisation de nanoparticules d'or pourrait être bénéfique pour délivrer du matériel à haute teneur en Z aux tumeurs. Voici quelques-uns des avantages potentiels des nanoparticules d'or[20].

- L'or absorbe ~3 fois plus que l'iode à 20 et 100 keV.
- Le DEF pour l'or peut être de 1,2 à >5 selon l'énergie du faisceau et la quantité d'or délivrée.
- L'étendue de l'effet d'amélioration peut s'étendre sur plusieurs cellules, par exemple 100 mm, assouplissant ainsi l'exigence que l'or soit délivré à toutes les cellules tumorales. Les tumeurs sont connues pour être hétérogènes.
- L'or est relativement inerte et peut être biocompatible.
- Les nanoparticules éliminent le sang moins rapidement que les petites molécules, comme les milieux de contraste d'iode considérés comme extravasculaires et qui sortent rapidement du système vasculaire. Les nanoparticules peuvent rester dans le sang pendant des heures si elles sont conçues pour le faire, améliorant ainsi la transmission des tumeurs.
- On sait que les nanoparticules pénètrent l'endothélium angiogénique permutant, ce qui confère une certaine spécificité tumorale, ce qu'on appelle l'effet de perméabilité et de rétention accrues (EPR).
- Les nanoparticules ont une osmolalité faible.
- Un ciblage efficace des tumeurs avec des anticorps, peptides ou médicaments peut être possible avec des nanoparticules. Les sites cibles des cellules tumorales sont limités et un ou quelques atomes d'iode par anticorps ne fournissent pas assez de matière à haute teneur en Z ; inversement, un anticorps attaché à une nanoparticule d'or de 15 nm fournirait 70 000 atomes d'or.
- Les nanoparticules d'or peuvent être fabriquées sur une large gamme de tailles (1 à 1000 nm) et conçues pour une meilleure pénétration et délivrance des tumeurs.
- Les nanoparticules d'or possèdent un certain nombre de ligands de surface, permettant une conception flexible et une multifonctionnalité en incorporant des ligands mixtes pour des propriétés optimales.

- La biodistribution de l'or peut être imaginée avant la délivrance d'une dose thérapeutique et utilisée pour la planification du traitement et la prédiction quantifiée de l'augmentation de la dose.
- D'autres nanoparticules métalliques à haute teneur en Z, en plus de celles en or, peuvent être utilisées avec des caractéristiques similaires.

2. La multicouche Au 10 nm / Si 10 nm / Si :

Cette multicouche se compose de deux matériaux différents : l'or, est insensible aux rayonnements ionisants à faible constante de couplage électron-phonon $g_{Au} = 3 \times 10^{10}\ W.cm^{-3}.K^{-1}$, Ce dernier a été déterminée par des expériences lasers femtosecondes. L'autre matériau est le silicium, dont la constante de couplage (e - ph) est plus grande que celle de Au, $g_{Si} = 1.8 \times 10^{12}\ W.cm^{-3}.K^{-1}$. Cette valeur a été dérivée de la conductivité électrique du matériau irradié considéré.

3. Les paramètres thermodynamique de l'or :

Matériaux : Or	Propriété
Chaleur latente de fusion :	63.7 J/g
Chaleur latente de vaporisation :	1698 J/g
Température de fusion :	1336 K
Température de vaporisation :	3243 K
Potentiel d'ionisation moyen :	10 Ev
Masse molaire moyenne :	197.98 g/mol
Masse spécifique moyenne du solide :	19.3 g/cm^3
Masse spécifique moyenne du liquide :	19.2 g/cm^3

Tableau Ⅴ .1 : Les propriétés thermodynamique de l'or.

4. Les paramètres impliqués dans le code de calcul :

4.1. La chaleur spécifique en fonction de la température :

Les températures (T)	Chaleur spécifique (Cs)(J/g/K)
293	0.126
373	0.13
773	0.142
1173	0.151
1336	0.15
1336.05	0.15

Tableau Ⅴ.2: La chaleur spécifique en fonction de la température.

4.2. La conductivité thermique en fonction de la température :

Les températures (T)	Conductivité thermique (Ks)(W/cm/K)
293	2.93
373	2.93
773	1.2
1173	0.7
1336	1.05
1336.05	0.02

Tableau Ⅴ.3: La conductivité thermique en fonction de la température.

5. Résultats de la simulation :

5.1. Variations des températures électroniques et atomiques en fonction du temps :

Le modèle de la pointe thermique permet d'obtenir, après simulation, la variation de la température atteinte au cours du temps par les électrons et les atomes du réseau, en fonction de la distance radiale par rapport à l'axe de l'ion incident. Cette approche permet de mettre en évidence la différence entre le comportement du métal massif, insensible aux rayonnements ionisants, et celui du système en multicouche en contact avec le silicium.

Le code 2D et 3D de la pointe thermique nous permet de tracer l'évolution de la température électronique et atomique des matériaux Au et Si, tant à l'état massif et à l'interface du système Au/Si.

a. Variation de la température électronique de Au massif, Si massif, Au et Si à l'interface du Au 10nm / Si 10nm / Si en fonction du temps :

– ***Au massif :***

La figure (Ⅴ.1) montre l'évolution temporelle de la température électronique dans l'Au massif pour différentes valeurs de r. Au début de l'irradiation, on observe une élévation extrêmement brutale et très localisée de la température électronique, typiquement supérieure à 100000 K au temps t = 0. Ceci résulte du dépôt quasi instantané de l'énergie de l'ion incident dans le sous-système électronique (interaction électron–ion). Cette montée presque impulsive traduit la capacité des électrons, dans un métal massif, à absorber rapidement l'énergie déposée et à constituer le premier réservoir énergétique après le passage de l'ion. Immédiatement après le pic initial, la température électronique décroît rapidement sur une échelle temporelle de l'ordre des picosecondes ($\approx 10^{-12}$ s) : ce refroidissement rapide s'explique par le transfert d'énergie du sous-système électronique vers le réseau atomique via le couplage électron-phonon. En conséquence, l'énergie concentrée initialement dans les degrés de liberté électroniques est redistribuée vers les modes vibratoires du réseau, entraînant un échauffement du réseau et un retour progressif de la température électronique vers l'équilibre. L'amplitude de l'élévation et la dynamique de relaxation dépendent fortement de la distance r à la trace ionique, les régions proches subissant les pics de température les plus élevés et des relaxations plus marquées. Ces observations confirment le comportement typique d'un métal massif : réponse thermique dominée par une élévation électronique locale et ultra-rapide suivie d'une relaxation contrôlée par le couplage électron-phonon.

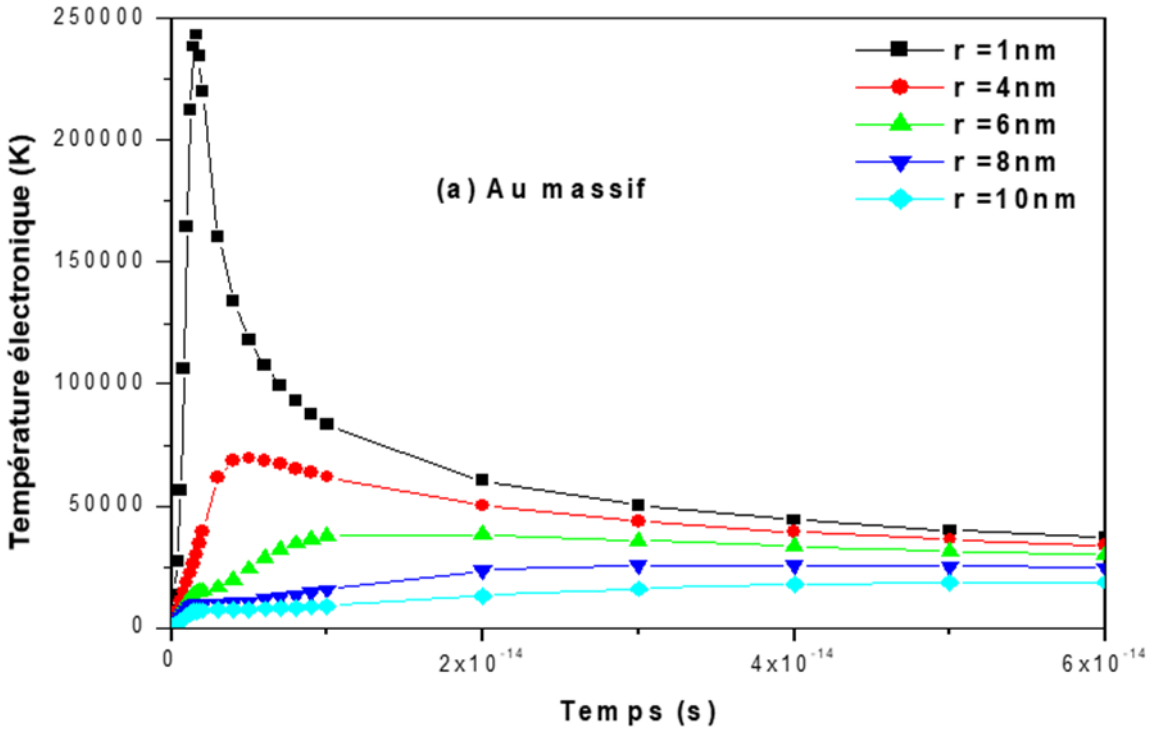


Figure Ⅴ.1 : Variation de la température électronique en fonction du temps. (a) Au massif

– ***Si massif :***

La figure (Ⅴ.2) représentant l'évolution de la température électronique dans le Si massif en fonction du temps, montre comme pour l'Au massif, une augmentation rapide durant les premiers instants de l'irradiation ; cependant l'évolution temporelle présent des caractéristiques propres liées à la nature du silicium. La structure électronique du Si et ses propriétés thermiques modifient la manière dont l'énergie déposée par l'ion est absorbée et redistribuée : bien qu'un pic initial apparaisse, son amplitude maximale est inférieure à celle observée pour l'or, en raison d'un pouvoir d'arrêt électronique plus faible dans le silicium. La phase de relaxation qui suit ce pic traduit le transfert progressif de l'énergie vers le réseau atomique par le couplage électron-phonon ; selon les conditions de simulation, cette relaxation peut être plus lente ou plus étalée que dans un métal massif, reflétant des temps caractéristiques et des mécanismes de dissipation différents. Ainsi, la réponse thermique du Si massif confirme que la nature du matériau via sa densité d'états électronique, son pouvoir d'arrêt et ses constantes thermiques joue un rôle déterminant dans la dynamique du dépôt d'énergie, ce qui souligne l'intérêt d'une comparaison systématique entre matériaux massif pour comprendre l'influence de leurs propriétés intrinsèques sur l'évolution de la température électronique sous irradiation.

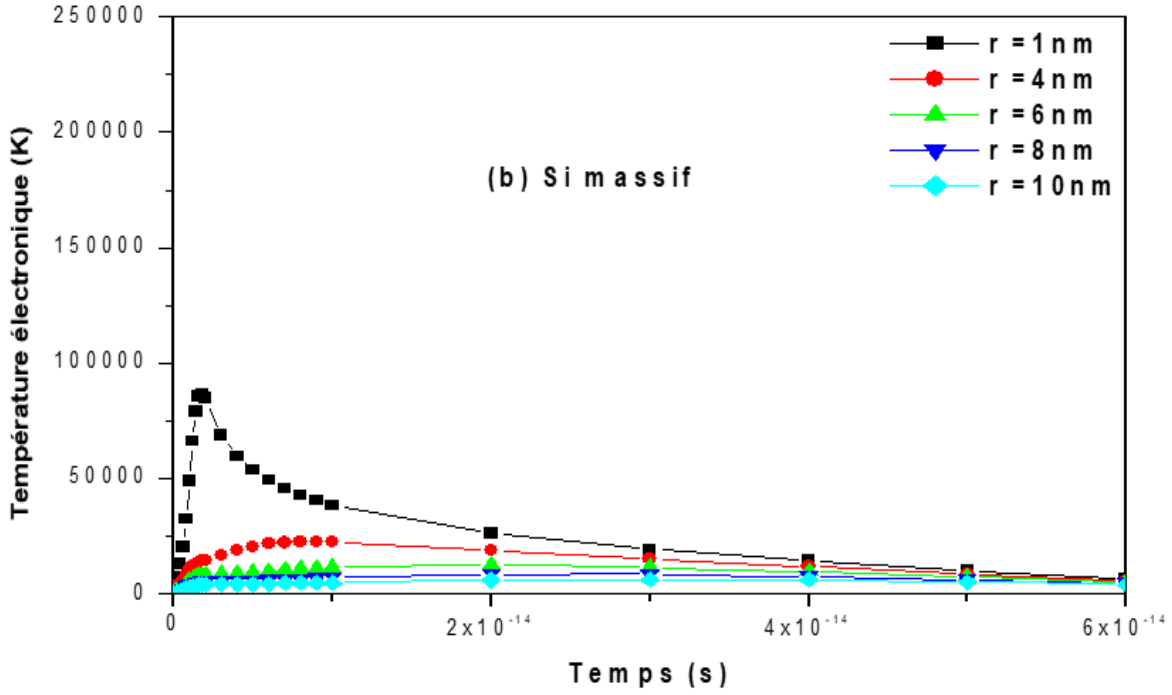


Figure Ⅴ.2 : Variation de la température électronique en fonction du temps. (b) Si massif

– ***Au et Si à l'interface de système Au /Si :***

La figure (Ⅴ.3) représente la variation de la température électronique en fonction du temps(c) et (d) sont respectivement Au et Si à l'interface du Au10 nm/Si10 nm/Si pour une irradiation avec des ions Pb d'énergie 3 MeV/uma de pouvoir d'arrêt électronique 78 et 22 KeV/nm respectivement. À l'interface Au/Si, un gradient de température électronique induit un transfert d'énergie du sous-système électronique de l'or vers celui du silicium. Côté Au (figure V.3c), le pic de température électronique est légèrement inférieur à celui de l'Au massif : l'interface agit comme un puits thermique pour les électrons, car une partie de l'énergie électronique est drainée vers le Si par diffusion électronique inter-matériaux. Coté Si (figure V.3d), le pic de température électronique est supérieur à celui du Si massif, conséquence de l'injection d'électrons chauds depuis l'Au vers le Si qui élève localement la T_e du silicium. Ce transfert d'énergie se poursuit jusqu'à un état d'équilibre thermique.

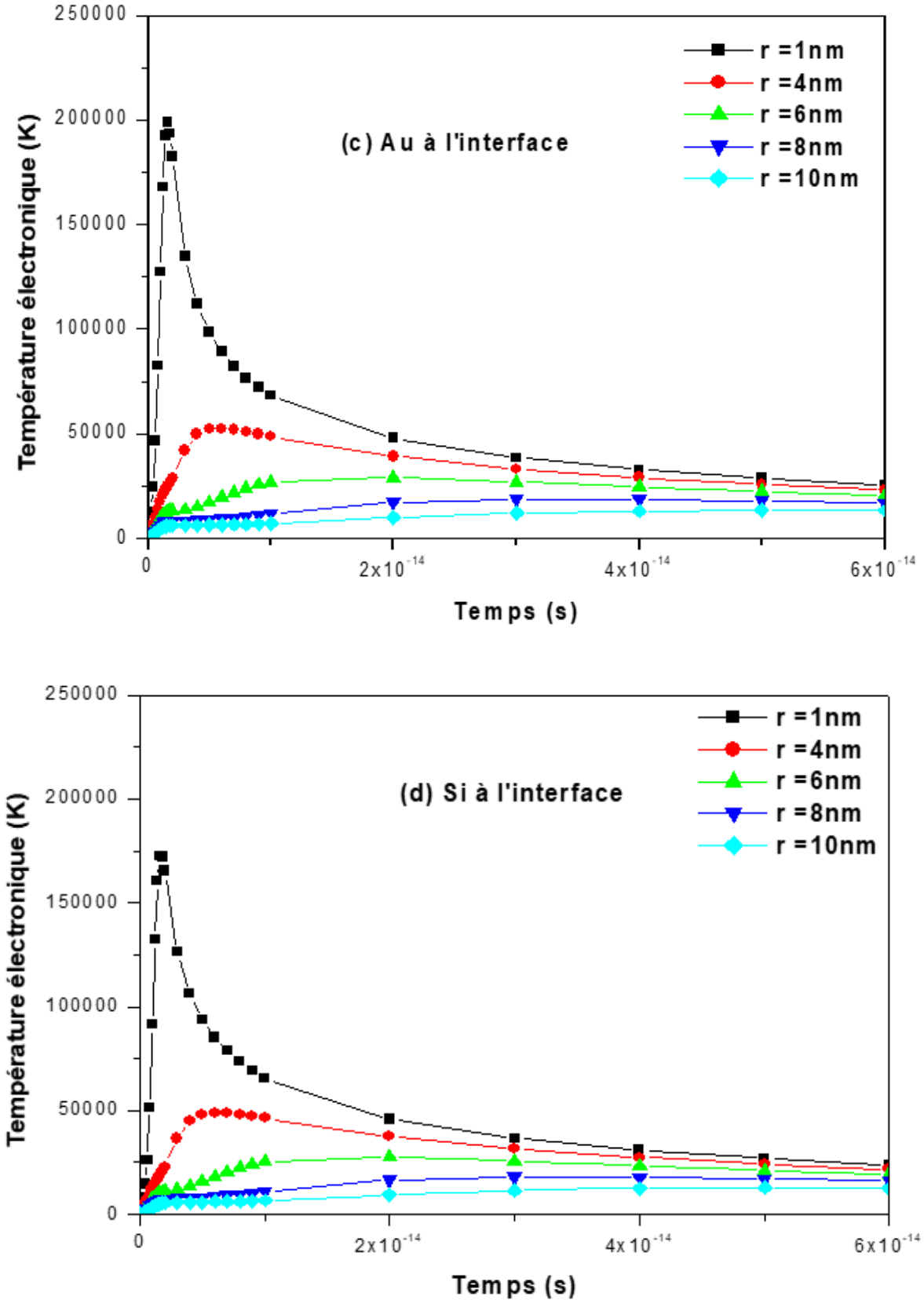


Figure Ⅴ.3 : Variation de la température électronique en fonction du temps(c) et (d) sont respectivement Au et Si à l'interface du Au10 nm/Si10 nm/Si pour une irradiation avec des ions Pb.

b. État d'équilibre thermique entre le système électronique du Au et celui de Si à l'interface de Au / Si :

► ***Définition d'état d'équilibre thermique :***

Dans un modèle de pointe thermique appliquée aux multicouches, " état d'équilibre thermique " signifie que, après le dépôt d'énergie de l'ion énergétique dans le sous-système électronique créant un déséquilibre initial entre les températures électronique Te et du réseau T_a les deux sous système finissent par s'égaliser avec le temps (typiquement à l'échelle de la picosecondes) via le couplage électron-phonon. Dès lors, les températures coïncider (ou devenir très proches), de sorte que le système se comporte comme un milieu homogène à température unique pour la suite de l'évaluation.

► La figure (Ⅴ.4) " Au et Si massif, r = 1nm " et la figure (V.5) " Au/Si à l'interface, r = 1nm " permettent d'apprécier l'effet conjugué de la distance radiale et de la présence de l'interface sur la dynamique thermique électronique. À r = 1nm, très proche de l'axe de l'ion incident, la densité d'énergie déposée est maximale et l'échauffement est fortement localisé. Pour les matériaux massif (figure V.4), les courbes sont nettement distinctes : l'or présente une température électronique élevée tandis que le silicium montre une T_e beaucoup plus faible, puisqu'il n'existe pas d'interaction électronique directe entre deux masses séparées et aucun échange inter-matériaux n'a lieu, il n'y a donc pas d'équilibre commun. En revanche, lorsqu'une interface Au/Si est présente (figure V.5), on observe un rapprochement marqué des deux courbe : la T_e de l'Au diminue près de l'interface tandis que la T_e du Si augmente, conséquence d'un transfert d'énergie électronique depuis l'or vers le silicium (injection d'électrons chauds et diffusion électronique inter-matériaux). Après quelques picosecondes, les températures électroniques des deux couches tendent vers des valeurs proches, indiquant l'établissement d'un équilibre thermique local du sous-système électronique bicouche. Ainsi, la comparaison montre que l'interface transforme une distribution radiale fortement localisée (cas des massifs) en un état où l'énergie peut être partagée entre les électrons des deux matériaux, modifiant l'amplitude et la durée de la relaxation thermique à r = 1nm.

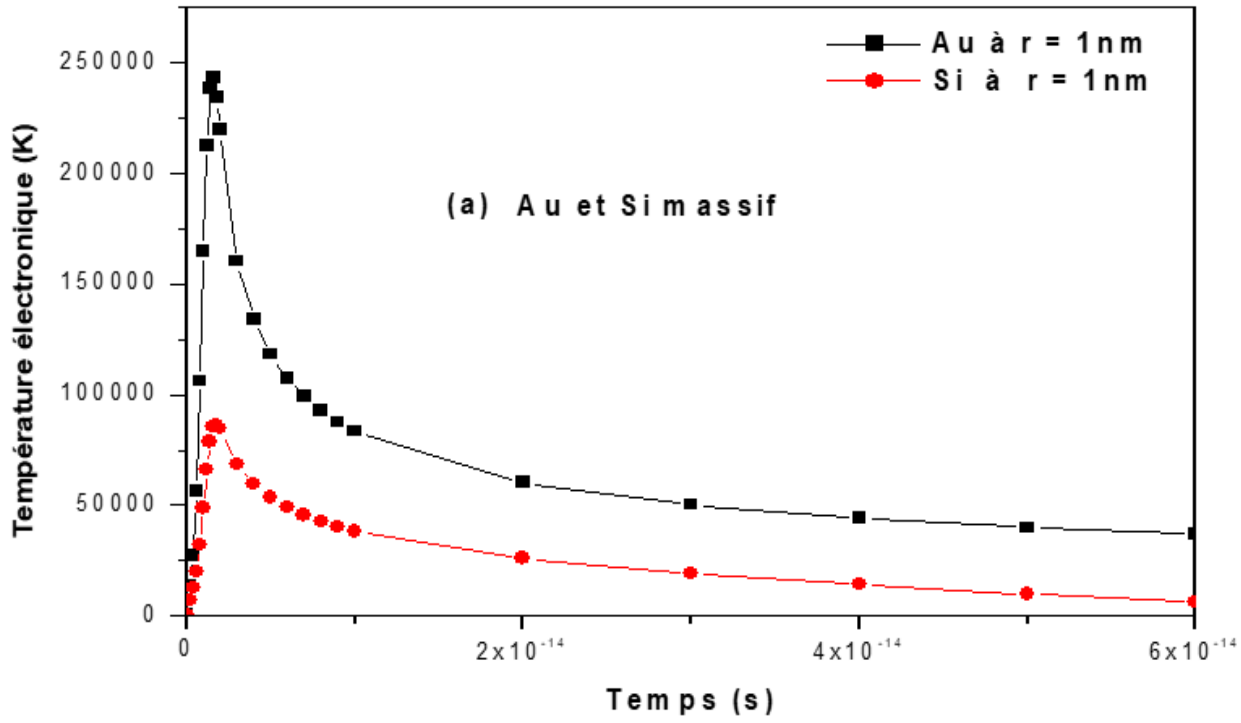


Figure V.4 : Variation de la température électronique en fonction du temps pour un rayon r = 1nm. (a) Au et Si massif

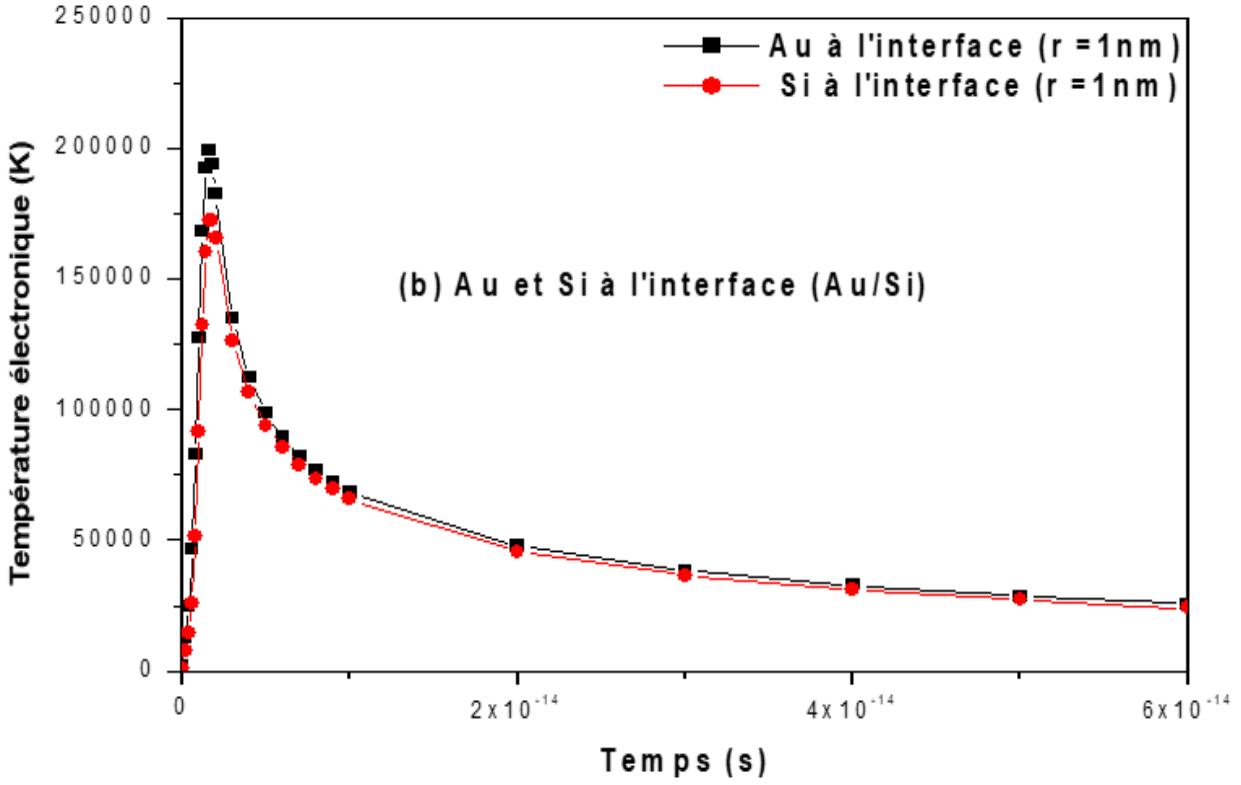


Figure Ⅴ.5 : Variation de la température électronique en fonction du temps pour un rayon r = 1nm. b) Au et Si à l'interface du système Au/Si.

c. Variation de la température atomique de Au massif, Si massif, Au et Si à l'interface du Au 10nm / Si 10nm / Si en fonction du temps :

– ***Au massif :***

La figure (Ⅴ.6) représente la variation de la température du réseau en fonction du temps. (a) Au massif. Après le dépôt initial d'énergie dans le sous-système électronique et l'établissement d'un pic de température électronique, l'énergie est progressivement transférée aux atomes du réseau par interaction électron-phonon. Ce transfert explique le retard observé entre l'évolution de la température électronique et celle du réseau atomique : la T_e décroît d'abord tandis que la température du réseau augmente plus lentement, conformément au modèle de la pointe thermique où les électrons absorbent d'abord l'énergie avant de la restituer au réseau. La montée de la température du réseau atteint un pic modéré (de l'ordre de quelques centaines de Kelvins selon les conditions de simulation) puis décroît lors de la relaxation vers l'équilibre thermique. On observe que la température maximale de l'or massif est inférieure à la température de fusion (T_f = 1336 K) par conséquent, le Au ne fond pas à l'état massif simulé.

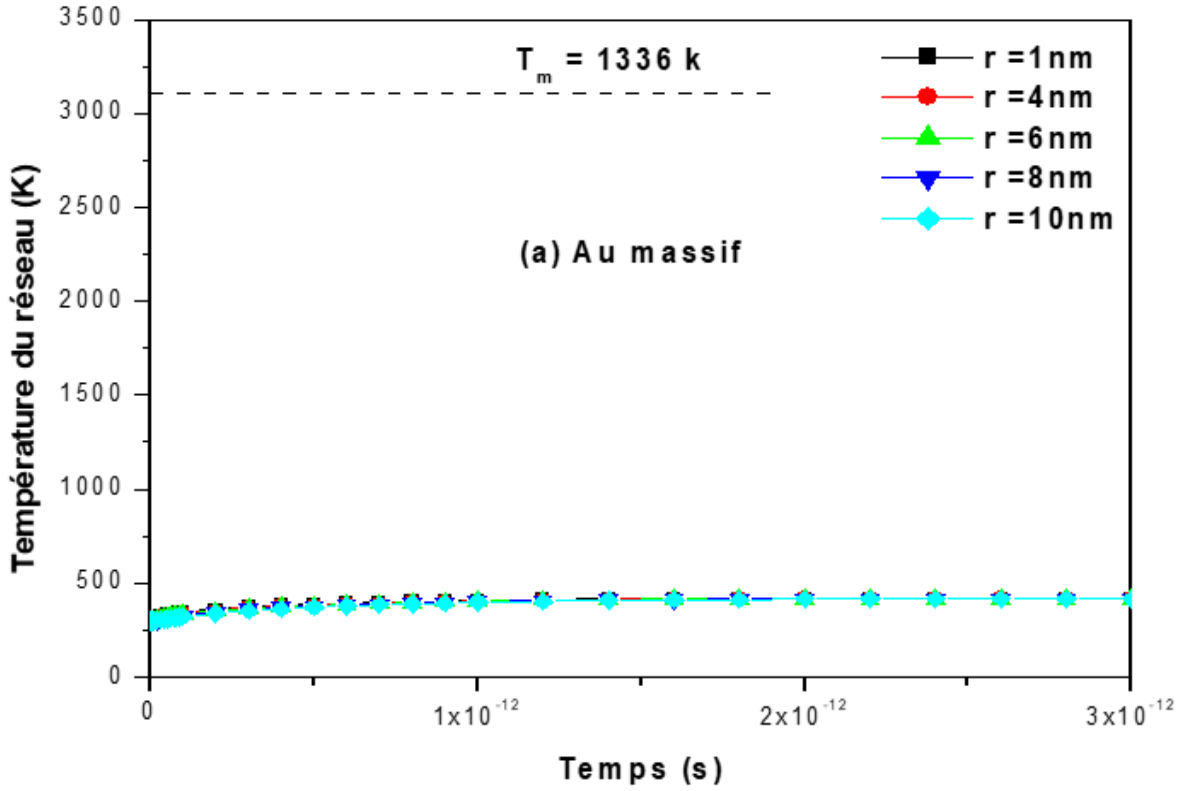


Figure Ⅴ .6 : Variation de la température du réseau en fonction du temps. (a) Au massif

– ***Si massif :***

La figure (Ⅴ.7) représente la variation de la température du réseau en fonction du temps. (b) Si massif, l'évolution thermique diffère sensiblement de celle observée dans l'Au massif. On observe d'abord une montée très rapide de la température, un maximum atteint aux temps de l'ordre de 10^{-13} s, puis une décroissance liée au transfert d'énergie vers le réseau atomique. La température du réseau suit ce pic mais avec une dynamique propre au silicium : l'augmentation du réseau peut être plus lente ou, au contraire, plus prononcée selon les propriétés thermiques du matériau et l'efficacité du transfert électron-atomique. Cette sensibilité se traduit par un pic de température atomique qui peut dépasser celui de l'Au pour une irradiation comparable, en partie parce que les électrons du Si dissipent moins efficacement l'énergie et qu'une fraction plus importante est directement transférée aux atomes (collisions nucléaires élastique). Enfin, la relaxation thermique du réseau est généralement plus lente dans le Si en raison de sa conductivité thermique relativement faible. Ainsi, la courbe du Si massif illustre la réponse caractéristique du matériau aux excitations thermique induites par irradiation et met en évidence le rôle déterminant du couplage électron-phonon et des mécanismes de collision dans l'amplitude et la durée du chauffage du réseau.

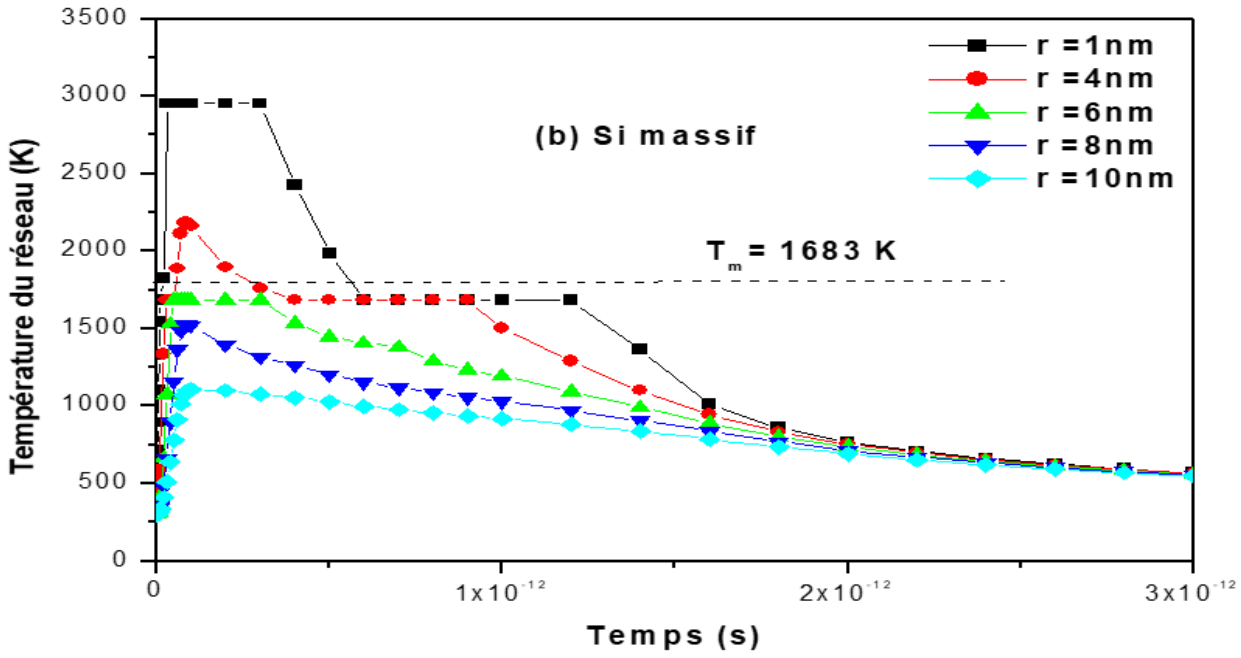
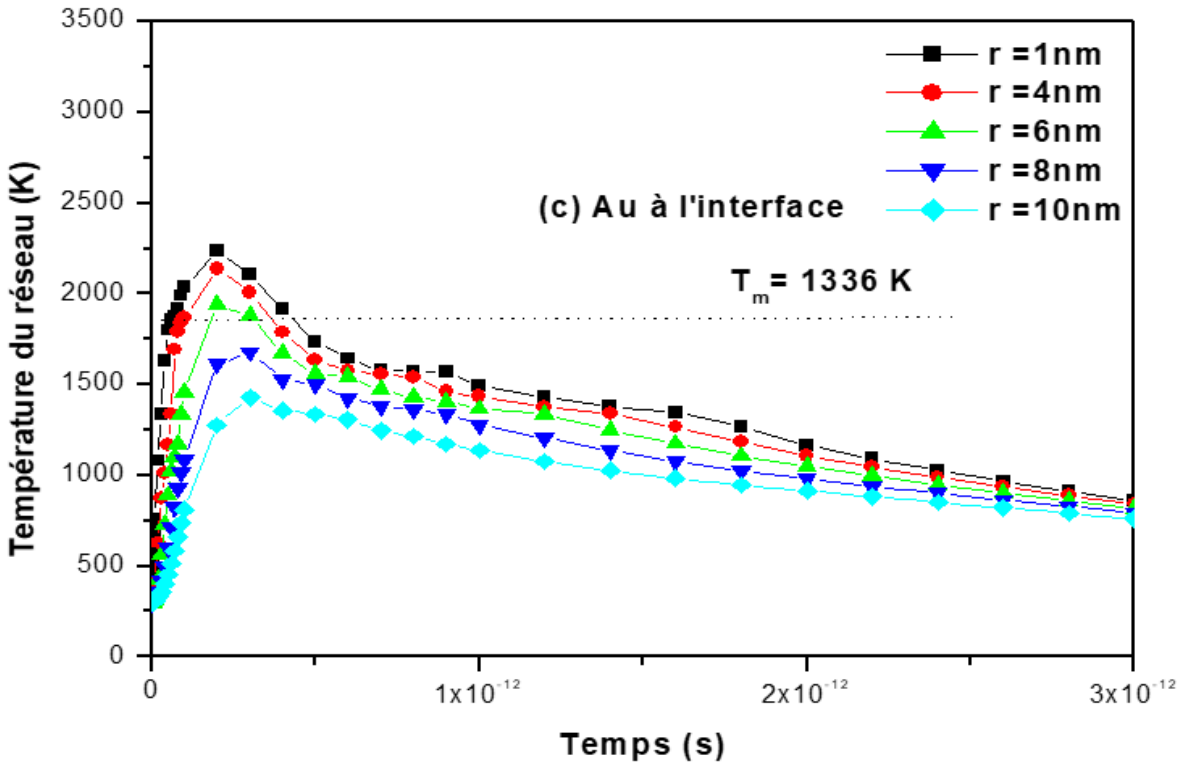


Figure Ⅴ .7 : Variation de la température du réseau en fonction du temps. (b) Si massif

– ***Au et Si à l'interface de système Au / Si :***

La figure (Ⅴ.8) représente la variation de la température du réseau en fonction du temps. (c) et (d) sont Au et Si à l'interface du Au10 nm/Si10 nm/Si irradié avec des ions Pb. On voit que, à l'interface Au/Si, l'évolution thermique du réseau atomique est plus complexe que dans les systèmes massifs : le dépôt d'énergie élève la température dans les deux couches mais de façon inégale. Côté Au (la figure Ⅴ.8c), la température du réseau est légèrement plus élevée que dans l'Au massif, l'or recevant en plus des phonons émis par le Si chauffé ; Le côté Si (la figure Ⅴ.8d), la température du réseau est légèrement inférieure à celle du Si massif, car une partie de l'énergie est transférée vers l'Au via le couplage interfacial. Ce transfert photonique inter-réseaux fait de l'interface un véritable «pointe thermique »qui favorise du dépôt d'énergie et la qualité du contact interfacial, cette redistribution peut être suffisante pour élever localement la température de l'Au jusqu'à sa température de fusion, entraînant éventuellement une fusion au voisinage de l'interface. Ainsi, la présence de la multicouche modifie significativement la répartition spatiale et la dynamique temporelle de la chaleur par rapport aux matériaux isolés.



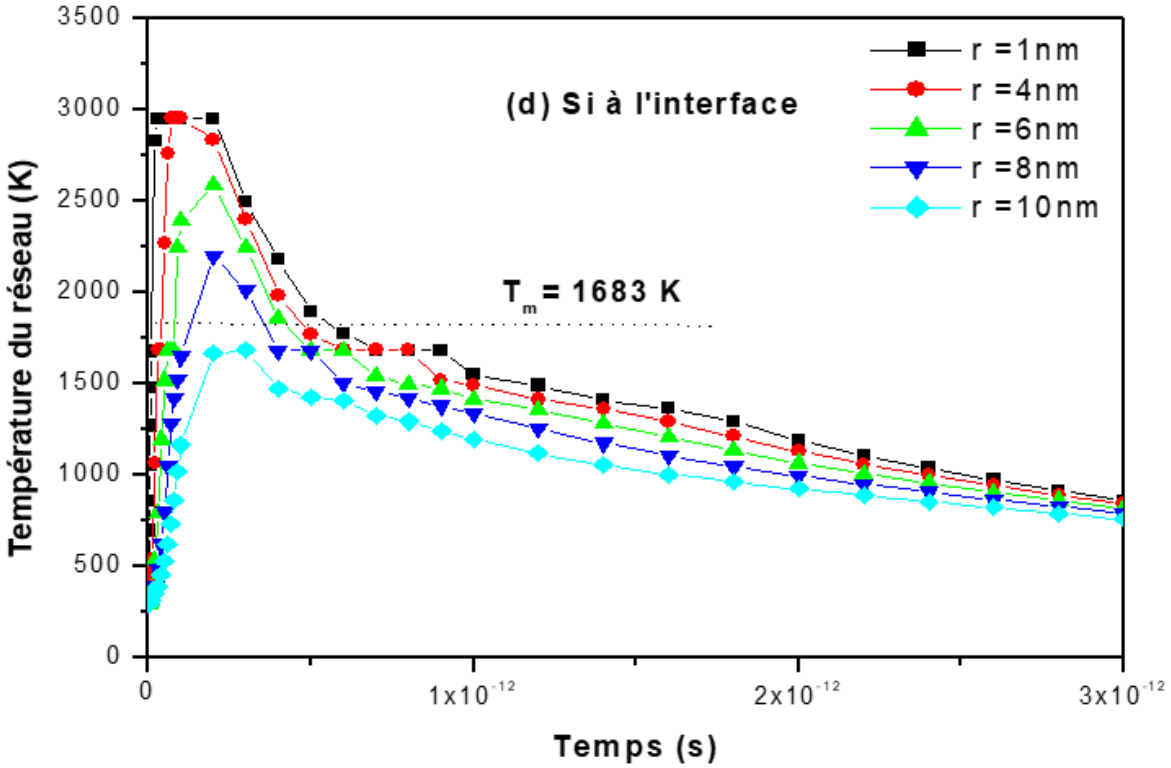


Figure Ⅴ .8 : Variation de la température du réseau en fonction du temps. (c) et (d) sont Au et Si à l'interface du Au10 nm/Si10 nm/Si irradié avec des ions Pb.

5.2. Variation de la température maximale du réseau T_{max} normalisée par la température de fusion T_f en fonction de l'épaisseur :

– ***Irradiation par des ions Pb :***

La figure (Ⅴ.9) représentant la variation de la température maximale du réseau normalisée par la température de fusion en fonction de l'épaisseur pour une irradiation par des ions Pb met en évidence l'influence déterminante de l'épaisseur de couche sur l'intensité de l'échauffement thermique. Lorsque l'épaisseur diminue, le confinement de l'énergie déposée par les ions augmente et la capacité du système à la dissiper diminue, ce qui se traduit par des valeurs plus élevées de T_{max} / T_f . Pour des épaisseurs très faibles (< 10nm), on observe T_{max} / T_f >1 pour l'Au et le Si, indiquant un risque de fusion locale. L'or présent cependant une tendance à fondre plus facilement que le silicium (valeur relative de T_{max} / T_f plus élevée) en raison de sa température de fusion plus basse ($T_{f,Au}$ = 1336 K vs $T_{f,Si}$ = 1683 K) et d'un couplage électronique plus fort qui favorise le dépôt d'énergie dans le sous-système électronique. Au-delà d'environ 10 nm, T_{max} / T_f chute rapidement pour le Si (indication d'une meilleure dissipation dans des films plus épais) et

diminue également pour l'Au mais dans une moindre mesure. Ainsi, l'épaisseur de la couche apparaît comme un paramètre critique pour la résistance du matériau à l'irradiation ionique et pour l'identification des configurations susceptibles d'atteindre la fusion locale sous ions Pb.

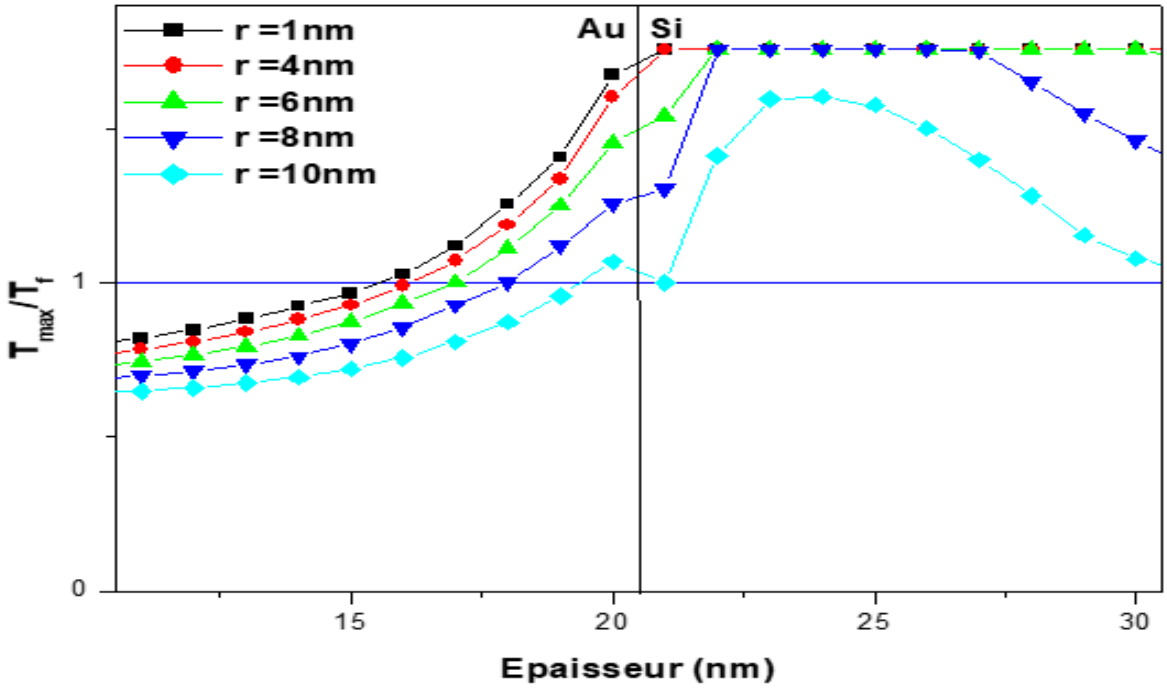


Figure Ⅴ.9 : Variation de la température maximale du réseau T_{max} (normalisée par la température de fusion T_f) en fonction de l'épaisseur pour une irradiation avec des ions Pb

– ***Irradiation par des ions Xe :***

Pour les ions Xe (figure Ⅴ.10), l'évolution de T_{max} / T_f en fonction de l'épaisseur suit le même principe général que pour d'autres projectiles, mais avec une intensité spécifique liée à la nature de l'ion incident. Les ions Xe, de masse moyenne-lourde, présentent un pouvoir d'arrêt électronique élevé et déposent donc une quantité d'énergie importante dans la cible, ceci se traduit par une élévation de la température maximale du réseau dont l'amplitude dépend fortement de l'épaisseur de la couche. Néanmoins, pour Xe les valeurs de T_{max} / T_f restent généralement plus faibles qu'avec des ions plus énergétiques(ou de masse différente) étudiés précédemment : seul un confinement très prononcé (films très minces, ≤ 5nm) conduit au dépassement du seuil de fusion local. L'or demeure globalement plus sensible que le silicium aux conditions de fusion locale, en raison de sa température de fusion plus basse et de sa réponse électronique. Ainsi, la

courbe pour Xe permet de comparer l'effet thermique des différents projectiles et d'identifier les configurations d'épaisseur les plus propices à un échauffement critique, en soulignant l'interaction entre masse de l'ion, pouvoir d'arrêt et réponse thermique du système multicouche.

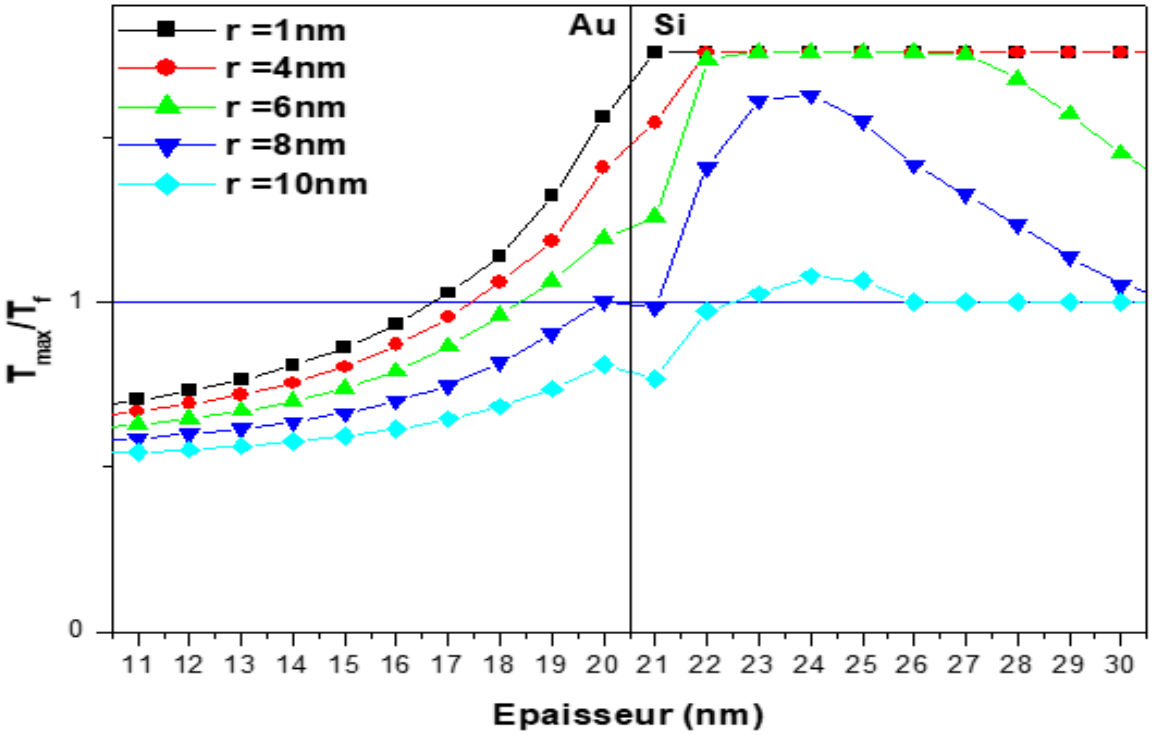


Figure V.10 : Variation de la température maximale du réseau T_{max} (normalisée par la température de fusion T_f) en fonction de l'épaisseur pour une irradiation avec des ions Xe.

– ***Irradiation par des ions Kr :***

La figure (V.11), relative à l'irradiation par des ions Kr, montre que la température maximale normalisée T_{max} / T_f dépend de l'épaisseur de la cible, comme pour les autres projectiles étudiés. Les ions Kr, bien que moins massif que Pb ou Xe, déposent une quantité d'énergie non négligeable dans le matériau; cependant, cette énergie reste insuffisante pour porter la température du réseau jusqu'à la fusion dans les conditions étudiées : $T_{max} /T_f < 1$ pour toutes les épaisseurs considérées, y compris les films ultra-minces. L'analyse comparative souligne donc que la nature et la masse de l'ion, ainsi que la géométrie de la couche, contrôlent la capacité du système à évacuer le dépôt d'énergie et déterminent le risque d'échauffement critique. Cette figure permet ainsi d'illustrer comment la taille du projectile et l'épaisseur de la couche modulent les dommages

thermiques induits par irradiation et confirment que, pour Kr dans nos conditions, la fusion locale n'est pas atteinte.

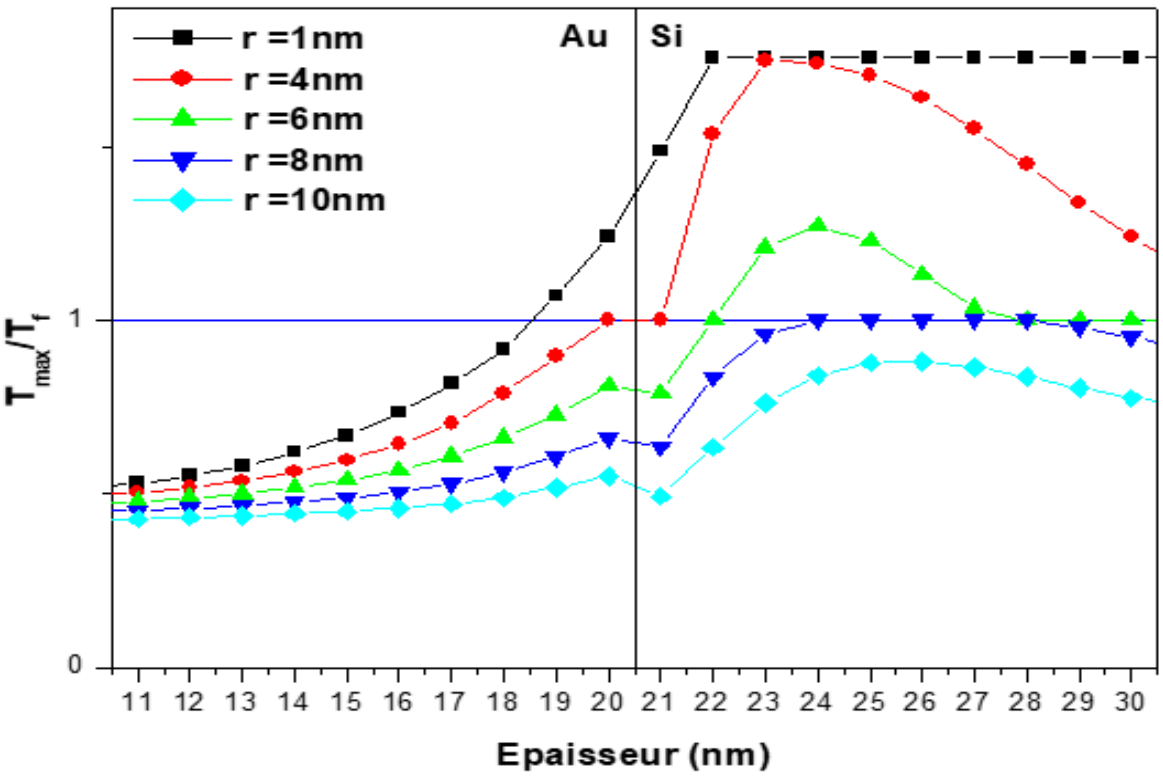


Figure Ⅴ.11 : Variation de la température maximale du réseau Tmax (normalisée par la température de fusion Tf) en fonction de l'épaisseur pour une irradiation avec des ions Kr.

– ***Irradiation par des ions Ar :***

La figure (Ⅴ.12) présente la variation de la température maximale normalisée par la température de fusion Tmax / Tf en fonction de l'épaisseur pour une irradiation par ions Ar. En tant que projectiles légers, les ions Ar déposent globalement moins d'énergie que les ions plus lourds (Kr, Xe, Pb), ce qui se traduit par des élévations de température du réseau nettement plus faibles. Pour les conditions étudiée, Tmax / Tf reste très faible (≤ 0.2) sur l'ensemble des épaisseurs : l'énergie déposée est principalement transférée par collisions nucléaires peu efficaces, et l'effet thermique sur le réseau est négligeable. Néanmoins, la courbe illustre que l'épaisseur demeure un paramètre influent elle module le confinement et la dissipation de l'énergie de sort que, dans des conditions particulières (épaisseurs extrêmes ou paramètres d'irradiation différents), la température maximale peut s'approcher davantage du seuil de fusion. Cette figure complète ainsi l'étude comparative en montrant que la nature de l'ion et la géométrie de la cible contrôlent

conjointement la stabilité thermique de la multicouche, Ar donnant ici l'effet thermique le plus faible parmi les ions étudiés.

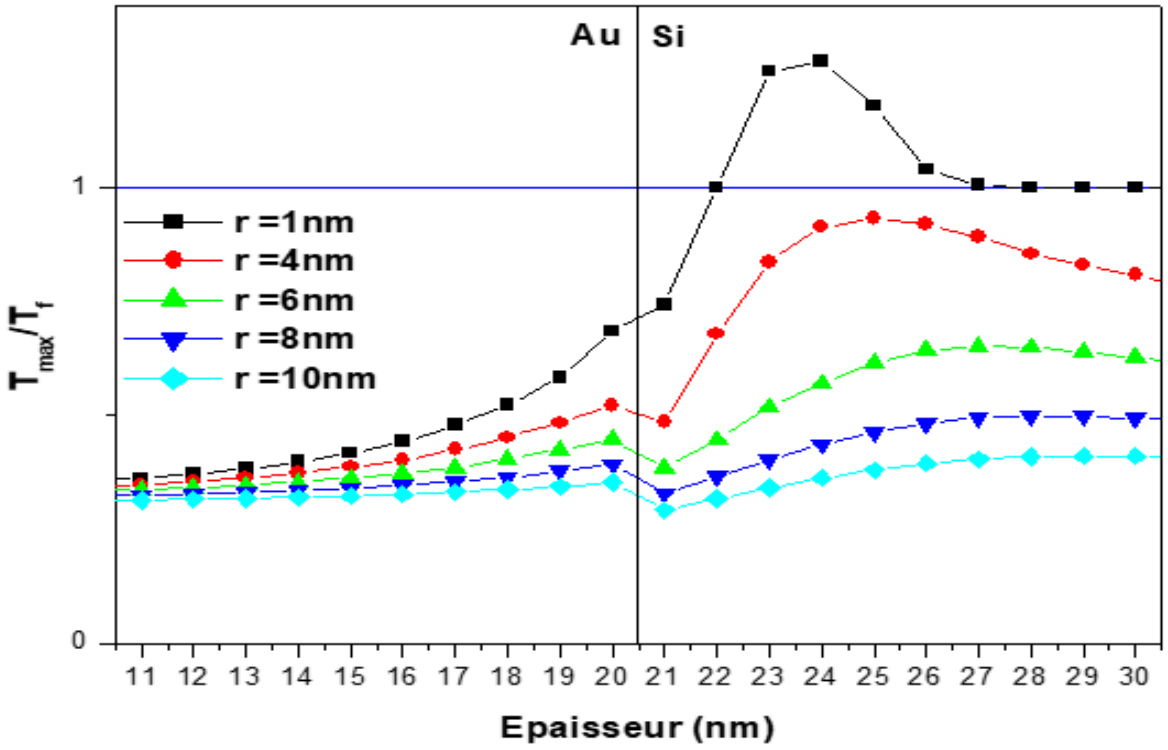


Figure Ⅴ.12 : Variation de la température maximale du réseau Tmax (normalisée par la température de fusion Tf) en fonction de l'épaisseur pour une irradiation avec des ions Ar.

On remarque que les quatre courbes (Ⅴ.9) jusqu'à (Ⅴ.12) présentent la même grandeur physique, à savoir la variation de la température maximale du réseau normalisée par la température de fusion Tmax /Tf en fonction de l'épaisseur de la couche. Dans tous les cas, on observe que l'épaisseur influence la réponse thermique du système, ce qui montre que la géométrie de la cible joue un rôle essentiel dans le comportement sous irradiation. On remarque aussi que les courbes traduisent toutes une sensibilité du système à l'échauffement induit par l'ion incident, ce qui confirme que le dépôt d'énergie conduit à une élévation thermique significative. De plus, l'objectif commun de ces quatre figures est de comparer la sensibilité thermique du système avec le type d'ion utilisé. Cependant, la principale différence les figures concerne l'amplitude de Tmax/Tf et la forme de son évolution selon l'épaisseur. Les ions lourds comme Pb et Xe produisent en générale un échauffement plus intense que les ions plus légers comme le Kr et Ar, car ils déposent davantage d'énergie dans le matériau. Cela conduit à des valeurs plus élevées de température maximale normalisée pour les projectiles les plus massifs. Une autre

différence réside dans l'épaisseur pour laquelle la réponse thermique est la plus marquée, ce qui signifie que chaque ion interagit différemment avec la structure multicouche.

Ces différences s'expliquent par plusieurs facteurs physiques. D'abord, la masse de l'ion et son pouvoir d'arrêt électrique déterminent la qualité d'énergie transférée à la cible. Ensuite, la répartition spatiale du dépôt d'énergie n'est pas la même selon le projectile, ce qui modifie la montée en température locale. Enfin, l'épaisseur de la couche influence la capacité du système à dissiper la chaleur : une couche mince concentre plus facilement l'énergie, tandis qu'une couche plus épaisse peut mieux répartir le dépôt thermique. Ainsi, plus l'ion est lourd et énergétiquement efficace, plus la température maximale atteinte est importante.

Références:

[1] Ranganathan R, Madanmohan S, Kesavan A, Baskar G, Krishnamoorthy YR, Santosham R, Ponraju D, Rayala SK, Venkatra man G. Nanomedicine: towards development of patient-friendly drug-delivery systems for oncological applica tions. Int J Nanomed. 2012;7:1043–60. doi:10.2147/IJN.S25182.

[2] Danhier F, Feron O, Préat V. To exploit the tumor microenvironment: passive and active tumor targeting of nanocarriers for anti-cancer drug delivery. J Controll Release. 2010;148(2):135–46. doi:10.1016/j.jconrel.2010.08.027.

[3] Sun T, Zhang YS, Pang B, Hyun DC, Yang M, Xia Y. Engineered nanoparticles for drug delivery in cancer therapy. Ange wandte Chemie. 2014;53(46):12320–64. doi:10.1002/anie.201403036.

[4] Hainfeld JF, Dilmanian FA, Slatkin DN, Smilowitz HM. Radiotherapy enhancement with gold nanoparticles. J Pharm Phar macol. 2008;60(8):977–85. doi:10.1211/jpp.60.8.0005.

[5] Kwatra D, Venugopal A, Anant S. Nanoparticles in radiation therapy : a summary of various approaches to enhance radio sensitization in cancer. Transl Cancer Res. 2013;2(4):330–42. doi:10.3978/j.issn.2218-676X.2013.08.06.

[6] Porcel E, Tillement O, Lux F, Mowat P, Usami N, Kobayashi K, Furusawa Y, Le Sech C, Li S, Lacombe S. Gadolinium-based nanoparticles to improve the hadrontherapy performances. Nanomed Nanotechnol Biol Med. 2014;10(8):1601–8. doi:10.1016/j.nano.2014.05.005.

[7] Liu C-J, Wang C-H, Chen S-T, Chen H-H, Leng W-H, Chien C-C, Wang C-L, Kempson IM, Hwu Y, Lai T-C, Hsiao M, Yang C-S, Chen Y-J, Margaritondo G. Enhancement of cell radiation sensitivity by pegylated gold nanoparticles. Phys Med Biol. 2010;55:931–45. doi:10.1088/0031-9155/55/4/002.

[8] Polf JC, Bronk LF, Driessen WHP, Arap W, Pasqualini R, Gillin M. Enhanced relative biological effectiveness of pro ton radiotherapy in tumor cells with internalized gold nanoparticles. Appl Phys Lett. 2011;98(19):193702. doi:10.1063/1.3589914.

[9] McMahon SJ, Hyland WB, Muir MF, Coulter JA, Jain S, Butterworth KT, Schettino G, Dickson GR, Hounsell AR, O'Sullivan JM, Prise KM, Hirst DG, Currell FJ. Nanodosimetric effects of gold nanoparticles in megavoltage radiation therapy. Radiother Oncol. 2011;100(3):412–6. doi:10.1016/j.radonc.2011.08.026.

[10] Malam Y, Loizidou M, Seifalian AM. Liposomes and nanoparticles: nanosized vehicles for drug delivery in cancer. Trend Pharmacol Sci. 2009;30(11):592–9. doi:10.1016/j.tips.2009.08.004.

[11] Barreto JA, O'Malley W, Kubeil M, Graham B, Stephan H, Spiccia L. Nanomaterials: applications in cancer imaging and therapy. Adv Mater. 2011;23(12):18–40. doi:10.1002/adma.201100140.

[12] Carter JD, Cheng NN, Qu Y, Suarez GD, Guo T. Nanoscale energy deposition by X-ray absorbing nanostructures. J Phys Chem B. 2007;111:11622–5. doi:10.1021/jp075253u.

[13] K. Haume, S. Rosa, S. Grellet, Małgorzata A. Śmiałek, Karl T. Butterworth, Andrey V. Solov'yov, Kevin M. Prise, J. Golding and Nigel J. Mason. Gold nanoparticles for cancer radiotherapy. Haume et al. Cancer Nano. 2016.

[14]Muddineti OS, Ghosh B, Biswas S. Current trends in using polymer coated gold nanoparticles for cancer therapy. Int J Pharm. 2015;484(1):252–67.

[15] Butterworth KT, McMahon SJ, Currell FJ, Prise KM. Physical basis and biological mechanisms of gold nanoparticle radio sensitization. Nanoscale. 2012;4(16):4830. doi:10.1039/c2nr31227a.

[16] Hossain M, Su M. Nanoparticle location and material-dependent dose enhancement in X-ray radiation therapy. J Phys Chem C. 2012;116(43):23047–52.

[17] Zhang SX, Gao J, Buchholz TA, Wang Z, Salehpour MR, Drezek RA, Yu TK. Quantifying tumor-selective radiation dose enhancements using gold nanoparticles: a monte carlo simulation study. Biomed Microdevices. 2009;11(4):925 33. doi:10.1007/s10544-009-9309-5.

[18] Porcel E, Liehn S, Remita H, Usami N, Kobayashi K, Furusawa Y, Le Sech C, Lacombe S. Platinum nanoparticles: a promising material for future cancer therapy? Nanotechnology. 2010;21:085103. doi:10.1088/0957-4484/21/8/085103.

[19] Verkhovtsev AV, Korol AV, Solov'yov AV. Electron production by sensitizing gold nanoparticles irradiated by fast ions. J Phys Chem C. 2015a;119(20):11000–13. doi:10.1021/jp511419n.

[20] James F. Hainfeld, F. Avraham Dilmanian, Daniel N. Slatkin and Henry M. Smilowitz. Radiotherapy enhancement with gold nanoparticles , journal of Pharmacy and Pharmacology. 20/03/2008.

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons présenté les principaux aspects liés à l'interaction des rayonnements ionisants avec la matière, ainsi que les mécanismes physiques qui interviennent lors de l'irradiation des matériaux par des ions lourds rapides.

Nous avons d'abord rappelé les bases théoriques nécessaires pour comprendre le dépôt d'énergie dans la matière, le pouvoir d'arrêt électronique, le transfert d'énergie entre les électrons et le réseau atomique, ainsi que le rôle essentiel du couplage électron-phonon dans l'évolution thermique du matériau. Ensuite, nous avons étudié le modèle de la pointe thermique, qui permet d'expliquer la formation des traces latentes et l'endommagement induit par le passage des ions dans le solide.

Les résultats présentés montrent que la réponse d'un matériau sous irradiation dépend de plusieurs paramètres physiques, notamment la nature de l'ion incident, sa perte d'énergie électrique, la conductivité thermique du matériau et la valeur de la constante de couplage électron-phonon. Ces paramètres contrôlent l'élévation locale de la température et peuvent conduire, dans certaines conditions, à la fusion ou à l'amorphisation du matériau irradié.

Par ailleurs, l'étude a mis en évidence l'intérêt des applications biomédicales, en particulier l'utilisation des nanoparticules d'or en radiothérapie. Grâce à leur propriétés physiques et à leur capacité à améliorer la dose déposée dans la tumeur, ces nanoparticules représentent une voie prometteuse pour renforcer l'efficacité du traitement tout en limitant l'impact sur les tissus sains.

En conclusion, ce travail nous a permis de mieux comprendre les mécanismes fondamentaux de l'endommagement des matériaux sous irradiation ionique et d'ouvrir des perspectives intéressantes pour de futures études théoriques et expérimentales sur d'autres matériaux et d'autres applications en physique médicale.

Résumé :

Dans ce travail, nous avons présenté une étude théorique du comportement de l'or à l'interface du système Au/Si sous rayonnements ionisants, en particulier sous l'effet des ions lourds rapides. L'analyse a été réalisée à l'aide du modèle de la pointe thermique pour comprendre le transfert de d'énergie entre les électrons et le réseau atomique. Nous avons aussi montré le rôle important du couplage électron-phonon dans la formation des défauts et des traces latentes. Par ailleurs, cette étude met en évidence les propriétés physiques de l'or qui rendent intéressant pour les applications en radiothérapie. Ainsi, ce travail contribue à une meilleure compréhension du système Au/Si irradié et ouvre des perspectives médicales prometteuses.

Mots-clefs : L'or, interface Au/Si, rayonnement ionisants, ions lourds rapides, modèle de la pointe thermique, couplage électron-phonon, radiothérapie.

Abstract:

In this work, we presented a theoretical study of the behavior of gold at the Au/Si interface under ionizing radiation, especially under fast heavy ions. The analysis was carried out using the thermal spike model to understand energy transfer between electrons and the atomic lattice creation. In addition, this study shows that gold has physical properties that make it promising for radiotherapy applications. Thus, this work contributes to a better understanding of the irradiated Au/Si system and opens promising medical perspectives.

Keywords: gold, Au/Si interface, ionizing radiation, fast heavy ions, thermal spike model, electron-phonon coupling, radiotherapy.

الملخص :

في هذا العمل قمنا بدراسة نظرية لسلوك الذهب عند واجهة النظام Au/Si تحت تأثير الاشعاعات المؤينة مع التركيز على الايونات الثقيلة و السريعة.واعتمدنا على نموذج الراس الحرارية لفهم انتقال الطاقة بين الالكترونات و الشبكة البلورية و تشكل الاضرار المجهرية. كما ابرزت الدراسة أهمية الارتباط بين الالكترون و الفونون في تحديد عتبة تشكل العيوب و الاثارات الحرارية داخل المادة. و من جهة أخرى تبين ان الذهب يمتلك خصائص فيزيائية مهمة تجعله مادة واعدة في تحسين فعالية العلاج الاشعاعي. و بذلك يساهم هذا العمل في فهم افضل لسلوك نظام Au/Si تحت الاشعاع و يفتح افاقا تطبيقية في المجال الطبي.

الكلمات المفتاحية : الذهب; الواجهة Au/Si الاشعاعات المؤينة ;الايونات الثقيلة السريعة; نموذج الراس الحرارية; الارتباط الكترون-فونون; العلاج الاشعاعي

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche

Université 20 août 1955-Skikda

Faculté des Sciences

Département de Physique

جامعة 20 أوت 1955 - سكيكدة

كلية العلوم

قسم الفيزياء

سكيكدة يوم: ..../ 0/2026

رقم: ...../ ك ف/2026

محضر تصحيح مذكرة الماستر

أنا الممضي أسفله الأستاذ(ة) المشرف(ة): قديد مورية .....

أشهد بأن الطالب (ة): بن يوسف رئيف هيثاء و مكبرو لينا .....

تخصص: فيزياء طبية .....

قد قام(ت) بجميع التصحيحات المتعلقة بمذكرة الماستر

تحت عنوان: Étude théorique du comportement de l'or à l'interface du Système Au/Si Soumis à des rayonnements ionisants et son utilisation en radiothérapie .....

امضاء الأستاذ(ة) المشرف(ة)

رئيس القسم

جامعة 20 أوت 1955 - س
قسم الفيزياء
الدكتور بوقجان مولود