

PREMIER MINISTRE

COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE

8.4

DOMMAGES SOUS IRRADIATION
ZONE DE DÉPLACEMENTS

par

Jean-Pierre GENTHON

DIRECTION DES PILES ATOMIQUES

Centre d'Études Nucléaires de Saclay

Rapport CEA - R - 3712

1969

Ka*

SERVICE CENTRAL DE DOCUMENTATION DU C.E.A

C.E.N - SACLAY B.P. n°2, 91-GIF-sur-YVETTE - France

CEA-R-3712 - GENTHON Jean-Pierre

DOMMAGES SOUS IRRADIATION
" ZONE DE DEPLACEMENTS "

Sommaire. - On sait qu'une particule chargée (ions, atomes primaires, etc...) en mouvement dans un solide se ralentit, avec éventuellement déplacement en cascade d'atomes du solide.

On étudie ici dans quelle proportion, en fonction de l'énergie de la particule chargée initiale, la cascade est constituée, ou non, de chocs indépendants. Lorsque la distance entre chocs est petite, ceux-ci ne sont plus indépendants ; la cascade, qui doit alors être considérée dans son ensemble, perturbe et définit dans le solide irradié, une zone qu'on a appelé zone de déplacements.

./.

CEA-R-3712 - GENTHON Jean-Pierre

IRRADIATION DAMAGE
" DISPLACEMENT ZONE "

Summary. - It is well known that a charged particle (ion, primary atom, etc...) moving in a solid slows down and can cause a cascade of displacements of the atoms in the solid.

A study is made here of the extent to which the cascade is made up, or not, of independent collisions, as a function of the energy of the initial charged particle. When the distance between the collisions is small, these latter are no longer independent ; the cascade, which then has to be considered as a whole, perturbs and locates, in the irradiated solid, a zone which has been named a "displacement zone".

./.

On montre que la proportion de zones de déplacements est d'autant plus grande que les atomes sont gros (nombre atomique Z grand), que la distance interatomique D est petite dans le corps considéré, et que l'énergie de l'ion en ralentissement est petite (tout en restant supérieure à quelques centaines d'eV).

Les proportions obtenues sont supérieures à celles qui correspondraient aux calculs de J.A. BRINKMAN [3].

On détermine d'autre part un potentiel interatomique, nécessaire à cette étude.

1969

137 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

It is shown that the proportion of displacement zones increases with increasing atom size (high atomic number Z), with decreasing atomic distance D in the substance considered, and with decreasing energy of the ion undergoing the slowing down process (although always remaining above a few hundred eV).

The proportions obtained are higher than those corresponding to the calculations of J.A. BRINKMAN [3].

An interatomic potential required for this work has also been determined.

1969

137 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

A partir de 1968, les rapports CEA sont classés selon les catégories qui figurent dans le plan de classification ci-dessous et peuvent être obtenus soit en collections complètes, soit en collections partielles d'après ces catégories.

Ceux de nos correspondants qui reçoivent systématiquement nos rapports à titre d'échange, et qui sont intéressés par cette diffusion sélective, sont priés de se reporter à la lettre circulaire CENS/DOC/67/4690 du 20 décembre 1967 que nous leur avons adressée, et qui précise les conditions de diffusion.

A cette occasion nous rappelons que les rapports CEA sont également vendus au numéro par la Direction de la Documentation Française, 31, quai Voltaire, Paris 7^e.

PLAN DE CLASSIFICATION

- | | |
|-----------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------|
| 1. APPLICATIONS INDUSTRIELLES DES ISOTOPES ET DES RAYONNEMENTS | 8. PHYSIQUE |
| | 8. 1 Accélérateurs |
| | 8. 2 Electricité, électronique, détection des rayonnements |
| | 8. 3 Physique des plasmas |
| | 8. 4 Physique des états condensés de la matière |
| | 8. 5 Physique corpusculaire à haute énergie |
| | 8. 6 Physique nucléaire |
| | 8. 7 Electronique quantique, lasers |
| 2. BIOLOGIE ET MEDECINE | 9. PHYSIQUE THEORIQUE ET MATHEMATIQUES |
| 2. 1 Biologie générale | |
| 2. 2 Indicateurs nucléaires en biologie | |
| 2. 3 Médecine du travail | |
| 2. 4 Radiobiologie et Radioagronomie | |
| 2. 5 Utilisation des techniques nucléaires en médecine | |
| 3. CHIMIE | 10. PROTECTION ET CONTROLE DES RAYONNEMENTS. TRAITEMENT DES EFFLUENTS |
| 3. 1 Chimie générale | 10. 1 Protection sanitaire |
| 3. 2 Chimie analytique | 10. 2 Contrôle des rayonnements |
| 3. 3 Procédés de séparation | 10. 3 Traitement des effluents |
| 3. 4 Radiochimie | |
| 4. ETUDES DU DOMAINE DE L'ESPACE | 11. SEPARATION DES ISOTOPES |
| 5. GEOPHYSIQUE, GEOLOGIE, MINERALOGIE ET METEOROLOGIE | 12. TECHNIQUES |
| 6. METAUX, CERAMIQUES ET AUTRES MATERIAUX | 12. 1 Mécanique des fluides - Techniques du vide |
| 6. 1 Fabrication, propriétés et structure des matériaux | 12. 2 Techniques des températures extrêmes |
| 6. 2 Effets des rayonnements sur les matériaux | 12. 3 Mécanique et outillage |
| 6. 3 Corrosion | |
| 7. NEUTRONIQUE, PHYSIQUE ET TECHNOLOGIE DES REACTEURS | 13. UTILISATION ET DEVELOPPEMENT DE L'ENERGIE ATOMIQUE |
| 7. 1 Neutronique et physique des réacteurs | 13. 1 Centres d'études nucléaires, laboratoires et usines |
| 7. 2 Refroidissement, protection, contrôle et sécurité | 13. 2 Divers (documentation, administration, législation, etc...) |
| 7. 3 Matériaux de structure et éléments classiques des réacteurs | 14. ETUDES ECONOMIQUES ET PROGRAMMES |

- Rapport CEA-R-3712 -

Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay
Direction des Piles Atomiques
Département des Piles Expérimentales
Section de Physique et d'Expérimentation

DOMMAGES SOUS IRRADIATION
ZONE DE DEPLACEMENTS

par

Jean-Pierre GENTHON

- Janvier 1969 -

Les rapports du COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE sont, à partir du n° 2200, en vente à la Documentation Française, Secrétariat Général du Gouvernement, Direction de la Documentation, 31, quai Voltaire, PARIS VII^e.

The C.E.A. reports starting with n° 2200 are available at the Documentation Française, Secrétariat Général du Gouvernement, Direction de la Documentation, 31, quai Voltaire, PARIS VII^e.

REMERCIEMENTS

Ce travail a fait l'objet d'une thèse doctorat de spécialité physique des solides, soutenue le 5 Juillet 1967 à la Faculté d'ORSAY de l'Université de Paris.

Je voudrais remercier très vivement ici :

M. J. HOROWITZ, Directeur des Piles Atomiques, Professeur à la Faculté des Sciences de Paris et M. C. CHAUVEZ, Chef du Département des Piles Expérimentales, à l'accord bienveillant de qui je dois d'avoir pu poursuivre ce travail dans le cadre de mes activités à la Section de Physique et d'Expérimentation du C. E. A.

M. A. GUINIER, Professeur à la Faculté des Sciences d'Orsay, qui m'a fait l'honneur de me conseiller et de présider le Jury de cette thèse.

M. J. FRIEDEL, Professeur à la Faculté des Sciences d'Orsay, qui a accepté de s'intéresser à mes activités, m'a formé, guidé, conseillé dans mon travail, et a dirigé cette thèse.

M. Y. QUERE, Chef de la Section de Metallurgie du Plutonium au C. E. A., qui m'a guidé, appuyé et longuement conseillé, tout au long de cette thèse dont il m'avait proposé le sujet.

J. R. BEELER, Professeur à la "North Carolina State University" pour la liberté de reproduire ses résultats (figures 3, 4 et 5)

Tous mes amis de la Section de Physique et d'Expérimentation.

DOMMAGES SOUS IRRADIATION
"ZONE DE DEPLACEMENTS"

TABLE DES MATIERES

	<u>Pages</u>
Résumé	
Table des Matières	I
Notations employées	V
I INTRODUCTION	1
1 - La Zone de Déplacements ZD - Définition	1
2 - Zone de déplacements et pointe déplacement de J. A. BRINKMAN	4
3 - Description et caractéristiques de la zone de déplacements	6
4 - Les particules susceptibles d'induire une ZD	14
5 - Conditions d'apparition de la ZD - probabilité de la ZD	15
II LE RALENTISSEMENT D'UNE PARTICULE CHARGÉE	17
1 - Généralités	17
2 - Potentiels employés	20
3 - Section efficace et libre parcours moyen	23
4 - Restrictions : canalisation et focalisation	25
III CONDITIONS DE CREATION DE ZD	29
libre parcours inférieur à la distance interatomique	
Critère de BRINKMAN	

IV	CONDITION DE CREATION DE ZD	34
	Interférence de deux chocs successifs, critère proposé	
1 -	Critères	34
2 -	Energie de référence	40
3 -	Conditions d'application suivant Z et Z'	44
4 -	Probabilités de ZD	46
V	ASPECTS EXPERIMENTAUX - DISCUSSION	60
1 -	Le volume de la ZD	60
2 -	Le nombre de déplacements stables	66
3 -	Zones de SEEGER et durcissement des métaux	72
VI	CONCLUSION	74
ANNEXE I	Potentiel d'interaction	79
ANNEXE II	Sections efficaces	101
ANNEXE III	Valeurs caractéristiques	112
REFERENCES		117

LISTE DES FIGURES

	<u>Pages</u>
Figure 1 - Déplacements induits par une particule chargée	4
Figure 2 - Z.D. schématique, d'après J.A. BRINKMAN	5
Figure 3 - Cascade de ralentissement d'un primaire de 5 KeV	7
Figure 4 - Z.D. créé par un primaire de 5 KeV	9
Figure 5 - Z.D., état final avant recuit thermique	10
Figure 6 - Choc de deux particules	17
Figure 7 - Chocs d'une particule dans un solide	19
Figure 8 - Potentiel retenu	20
Figure 9 - Section efficace	24
Figure 10 - Probabilité de ZD, d'après J.A. BRINKMAN	30
Figure 11 - Chocs successifs et volumes perturbés	35
Figure 12 - P(ZD), hypothèse $\lambda' = \lambda$, pour $Z' > Z$	46
Figure 13 -	48
Figure 14	49
Figure 15 - $P_Z(\eta)$, schématique	53
Figure 16 - $P_Z(\eta)$ quantitatif	55
Figure 16 bis - $P_Z(\eta)$, valeur asymptotique	56
Figure 17 - $\mathcal{G}(P_Z)$	58
Figure 18 - $a = \lambda_0 / \lambda$ en fonction de η	59
Figure 19 - Variation relative du nombre de paires créées	71
Figure 20	74
Figure A1 - Annexe I - $\xi(Z)$	88
Figure A2 - Annexe I - Potentiels interatomiques ; Z = 6	95
Figure A3 - Annexe I - Potentiels interatomiques ; Z = 12	96
Figure A4 - Annexe I - Potentiels interatomiques ; Z = 29	97
Figure A5 - Annexe I - Potentiels interatomiques ; Z = 47	98
Figure A6 - Annexe I - Potentiels interatomiques ; Z = 79	99

Figure A7 - Annexe I - Potentiels interatomiques ; Z = 92	100
Figure A8 - Annexe II - Fonction f (u)	107
Figure A9 - Annexe II - Section efficace réduite s (u)	109
Tableau 1 - Energie de focalisation E_f	26
Tableau 2 - Energies seuil de BRINKMAN	31
Tableau 3 - Critères de ZD	39
Tableau 4	40
Tableau 5 - Energies seuil de ZD	43
Tableau 6 - Energies seuil de ZD ; fragments de fission	43
Tableau 7	52
Tableau 8 - Volume de la pointe de fission et valeur de E_a	62
Tableau 9 - Exemple ; ZD sous neutrons de pile	76
Tableau A1 - Annexe I - Rigidités et potentiels	89
Tableau A2 - Annexe I - Valeurs de ν calculées	92
Tableau A3 - Annexe III - Valeurs caractéristiques	116

Notations employées

0 - ZD	Abréviation pour "zone de déplacements" (paragraphe I-1)
1 - V	V (r) Potentiel interatomique pour la distance interatomique r
$V_{T.F.}$	Potentiel de THOMAS-FERMI (voir page 20 et 82)
$V_{B.M.}$	Potentiel de BORN-MAYER (voir page 20 et 84)
r_i	Distance limite en deça et au delà de laquelle le potentiel adopté ici est respectivement de la forme $V_{T.F.}$ et de la forme $V_{B.M.}$ $r_i \sim a_0$
a_0	Rayon de Bohr $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$
μ	Unité de longueur dans le potentiel $V_{T.F.}$ (page 20 et 82) $\mu = 0,8853 (Z^{2/3} + Z'^{2/3})^{-1/2} a_0$
ν	Unité de longueur dans le potentiel $V_{B.M.}$ (page 21 et 90) $\nu \simeq 0,209 \text{ \AA}$
2 - m	Masse de l'ion objectif, au repos (atome du solide irradié)
m'	Masse de l'ion incident
Z	nombre atomique de l'ion objectif (atome du solide irradié)
Z'	nombre atomique de l'ion incident.
D	Distance interatomique dans le solide irradié
D'	Moyenne de D et de la distance interatomique dans un solide formé d'un empilement compact d'atomes identiques à l'atome incident
N	Nombre d'atomes par cm^3 dans le solide irradié
Ω	Volume atomique $\Omega = 1/N$
3 - ρ	Paramètre d'impact (page 17)
ρ_M	Limite supérieure des valeurs ρ considérées (page 17)
σ	Section efficace de choc interatomique
s	Expression réduite de σ (page 23)

λ'	Libre parcours <u>réel</u> constaté entre 2 chocs successifs de l'ion incident
l	l. p. m., libre parcours <u>moyen</u> de l'ion incident
λ	Expression réduite de l : $\lambda = l/D$
λ'	Expression réduite de λ' : $\lambda' = l'/D$
λ_B	Valeur limite de λ' suivant BRINKMAN : $\lambda_B = 1$
λ_0	Valeur limite de λ' suivant les critères adoptés ici ; $\lambda_0 \sim 3$
E	Energie de particule incidente
η	Expression réduite de E : $\eta = E/E_0$
T	Energie transmise
T_m	Limite inférieure des valeurs T considérées
T_M	Limite supérieure des valeurs T possibles
E_d	Energie de déplacement définitif d'un atome dans un solide de $0^\circ K$
E_c	Energie de création de ZD, par atome choqué dans la ZD
E_a	Energie de création de ZD, par atome (choqué ou non) dans la ZD On a ici $E_a \sim 1,5 \text{ eV}$
E'_a	Energie de création de ZD, par distance interatomique D sur un diamètre de la ZD. E'_a/E_a est fonction de facteurs géométriques On a pris ici $E'_a = 0,7 E_a \sim 1 \text{ eV}$
E_f	Energie limite de focalisation, prise comme limite inférieure d'énergie de création de ZD, pour des primaires
E'_f	Limite inférieure de création de ZD, pour une particule chargée incidente quelconque (page 27)

E_0	Energie supérieure de ZD suivant les critères adoptés ici (recouvrement, ou recombinaison) et pour le cas particulier $\lambda' = \lambda$ (page 40) E_0 est l'énergie unité adoptée pour la définition d'énergie réduite η , lorsque λ' suit sa répartition en probabilité réelle.
E_B	Energie supérieure de ZD suivant le critère de BRINKMAN ($\lambda = 1$)
E_{B1}	Energie supérieure de ZD suivant le critère de BRINKMAN, et avec le potentiel de BRINKMAN.
E_p	Energie de primaires dans une irradiation en neutrons de pile (Tableau 8)
u	Expression réduite de $(ET_m)^{1/2}$ $u = \frac{\mu}{2ZZ'e^2} \sqrt{\frac{m}{m'}} \sqrt{ET_m}$
u_0	u ci-dessus pour $E = E_0$
u_f	u_0 avec $T_m = E_f$
u_d	u_0 avec $T_m = E_d$
u_M	u_0 avec $T_m = T_M$
5 - $P_Z(\eta)$	Probabilité de création de ZD, par un ion en ralentissement, d'énergie η
$\mathcal{S}(\eta)$	Proportion moyenne de l'énergie η de l'ion incident, qui sera absorbée par le solide en création de ZD, dans l'approximation à une seule ZD. $\mathcal{S}(\eta) = \frac{1}{\eta} \int_0^\eta P_Z(\eta') d\eta'$
$\mathcal{S}_T(\eta)$	Proportion moyenne totale de l'énergie η de l'ion incident absorbée en ZD compte tenu des créations indirectes annexes et d'éventuels morcellements.

DOMMAGES SOUS IRRADIATION ZONE DE DEPLACEMENTS

I - INTRODUCTION

Après avoir donné une définition de la zone de déplacements et exposé brièvement ses caractéristiques, la présente étude se propose d'en définir les conditions d'apparition.

1° - La zone de déplacements - définition.

On sait que, dans un solide soumis à irradiation de particules matérielles, ces dernières peuvent déplacer des atomes dits primaires, et que chaque atome primaire peut éventuellement déplacer à son tour, au cours de son ralentissement, une cascade d'atomes secondaires, tertiaires ... etc ... (voir (5) par exemple).

On verra d'autre part plus loin que les sections efficaces d'interaction entre particules chargées électriquement sont grandes pour des énergies cinétiques raisonnables. Une particule chargée, en mouvement dans un solide et ralentie par interaction essentiellement électrostatique avec les atomes du solide, pourra en conséquence être caractérisée par une valeur petite de libre parcours moyen entre chocs avec ces atomes. On verra que ce libre parcours moyen, l. p. m., peut être de l'ordre de la distance interatomique, pour les chocs actifs, c'est-à-dire des chocs induisant des déplacements d'atomes du solide.

Considérons alors une particule matérielle chargée, en mouvement dans le solide, cette particule pouvant être soit une particule incidente ⁽¹⁾ si elle est effectivement chargée, soit un des atomes mis en mouvement dans le réseau par le ralentissement des particules incidentes, chargées, ou non chargées.

(1) Note : sauf spécification contraire (paragraphe IV-3), la particule incidente est toujours ici de masse inférieure ou égale à la masse des atomes du solide.

Au mouvement de cette particule est associé un l. p. m., qui décroît en même temps que décroît son énergie au cours du ralentissement.

Deux cas sont à considérer, dans ce ralentissement, suivant qu'est grande ou petite la distance entre chocs actifs, c'est-à-dire entre chocs déplaçant un atome (ou plusieurs atomes en cascade).

Si cette distance est grande, c'est-à-dire grande devant la distance interatomique, les chocs sont indépendants et peuvent être considérés séparément.

Si au contraire cette distance est petite, c'est-à-dire comparable à la distance interatomique, chaque choc se produit dans un solide perturbé quasi simultanément par les chocs voisins ; il y a donc interférence ; et les déplacements, qui ne sont pas indépendants, doivent être considérés dans leur ensemble. De plus, il faut remarquer que cette condition de distance petite est une condition qui, une fois remplie, a toute chance de se confirmer, tant pour le reste du ralentissement de la particule initiale en mouvement, que pour les atomes qu'elle déplace. En effet les énergies par atome en mouvement décroissent au fur et à mesure que l'énergie initiale se répartit entre un plus grand nombre d'atomes, et les l. p. m., qui varient comme les énergies, décroissent aussi. Ce qui est une certitude au niveau des parcours moyen l. p. m., est un événement probable au niveau des parcours réels ; et un parcours petit à toute chance d'être suivi d'un parcours encore plus petit.

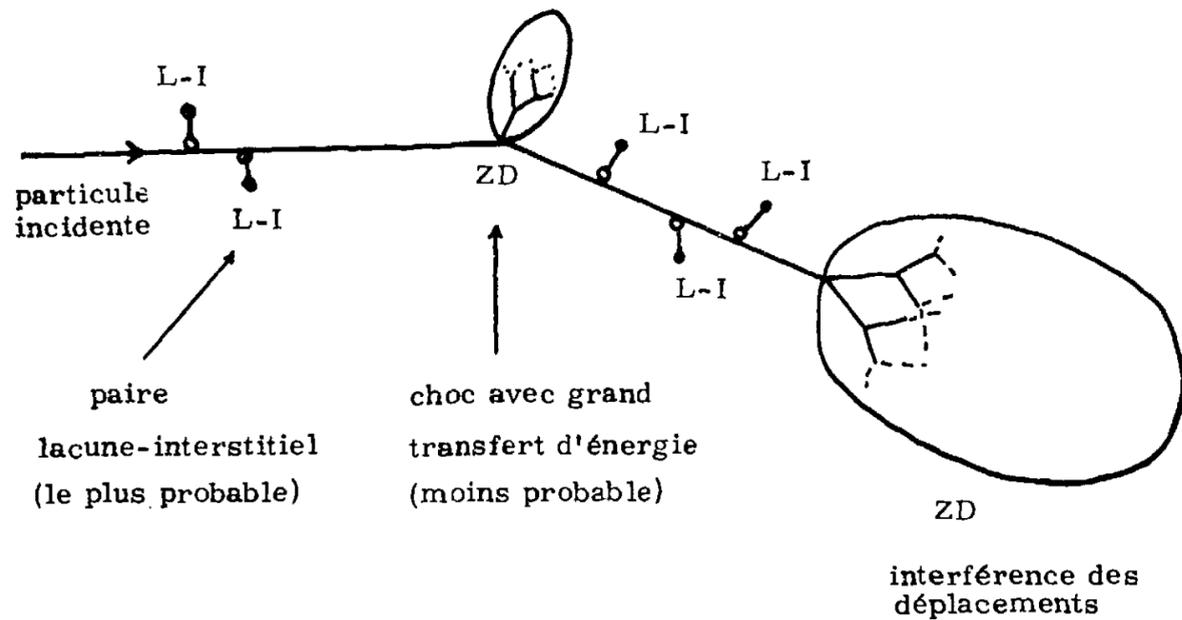
A partir donc du moment où, au cours du ralentissement d'une particule, la distance entre chocs sera devenue suffisamment petite, les déplacements induits, directement ou non, par cette particule, interfèrent et doivent être considérés dans leur ensemble. Cet ensemble intéresse et perturbe, dans le solide, une zone qu'on appellera : "zone de déplacements" ZD.

La zone de déplacements -ZD - est donc le volume défini par l'enveloppe, dans le solide, de tous les déplacements produits par le ralentissement d'une particule, dès lors que ces déplacements interfèrent entre eux et donc ne sont pas indépendants, ceci en dehors de tout recuit thermique.

(On définira plus loin, la pseudo ZD (paragraphe I-3-d))

Une particule chargée en ralentissement (figure 1) déplace donc d'abord des atomes indépendants, si son énergie est suffisamment grande ; puis, après un certain ralentissement, pour des énergies encore notables que nous préciserons, elle induit une zone de déplacements ZD. Dans la première partie de son ralentissement, les atomes indépendants qu'elle déplace ne reçoivent chacun, dans la majeure partie des cas, qu'une énergie faible (loi des transferts d'énergie dans les interactions électrostatiques), trop faible pour provoquer de nouveaux chocs et de nouveaux déplacements d'atomes, et chaque déplacement se traduit par une paire "lacune-interstitiel" isolée ; dans une proportion moindre, les atomes déplacés sont assez énergiques pour induire de nouveaux déplacements et créer, chacun, une ZD, ou même en principe commencer par provoquer de nouveaux déplacements indépendants.

La figure 1 ci-dessous illustre cette description.



Déplacements induits par une particule chargée en mouvement dans un solide.

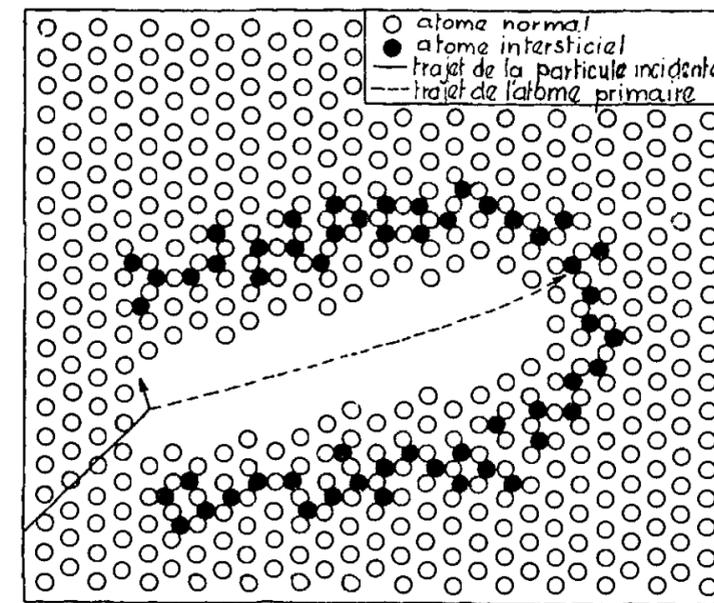
FIGURE 1

2° - Zone de déplacements et pointe de déplacement de J. A. BRINKMAN

La pointe de déplacement de J. A. BRINKMAN est la réaction de recristallisation qu'on peut prévoir, sous certaines conditions, dans la zone de déplacements.

J. A. BRINKMAN (1), (2) et (3) a, dès 1954, considéré les l. p. m. d'atomes primaires dans un solide et a remarqué que, pour des énergies encore grandes (quelques dizaines de KeV), le l. p. m. pouvait être égal à la distance interatomique.

Les sites initiaux de la cascade d'atomes déplacés par un primaire sont alors tous jointifs, si l'on fait, avec J. A. B., l'hypothèse de l'égalité du l. p. m. et du parcours réel (nous remettons en cause, plus loin, cette hypothèse). Il y a, en moyenne, expulsion des atomes du réseau en dehors de la zone centrale définie par le trajet du primaire et on aboutit ici à une grande multilacune centrale entourée d'un réseau à très forte densité d'interstitiels. La figure 2 ci-dessous représente la zone de déplacements, ainsi définie très symboliquement.



Représentation schématique de la zone de déplacements, d'après J. A. BRINKMAN (3)

FIGURE 2

Cette situation simplifiée à l'extrême (et sur laquelle nous reviendrons) est en fait très instable et ne représente qu'un état transitoire où la couronne d'interstitiels exerce une pression énorme sur la multilacune centrale ; il y a effondrement, et si l'énergie libérée par le primaire dans la ZD est suffisante, il y a "fusion" locale et recristallisation totale. Ce processus est la pointe de déplacement de J. A. BRINKMAN qui estime à 400 eV environ

l'énergie minimale de primaire nécessaire à sa réalisation.

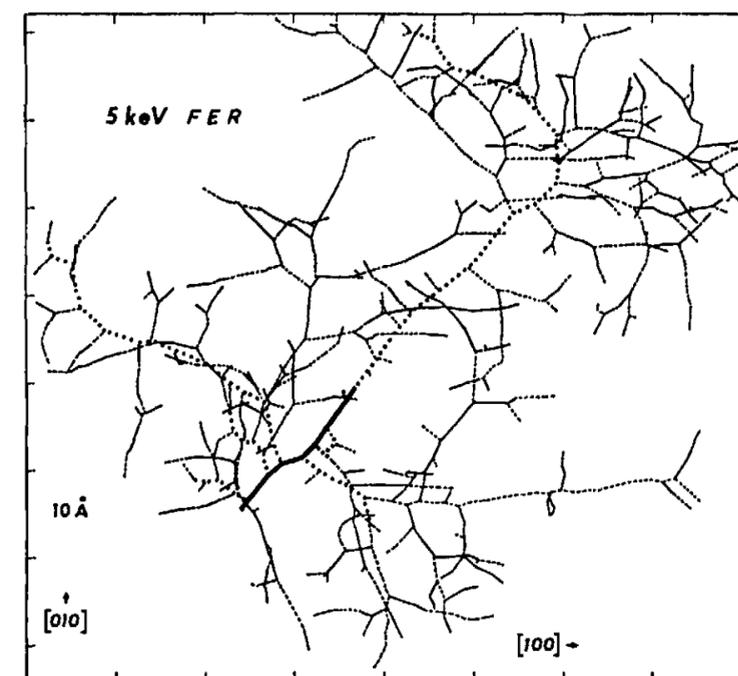
SEEGER (4) complète cette description en tenant compte de la focalisation qui permet à une partie des interstitiels de s'éloigner suffisamment pour ne plus retomber dans la multilacune centrale ; la recristallisation ne peut plus être parfaite et il reste une zone lacunaire, dite aussi zone de SEEGER.

3° - Description et caractéristiques de la zone de déplacement

Les raisonnements ci-dessus ne peuvent donner que des indications qualitatives. Des caractéristiques plus précises peuvent être obtenues, en particulier à partir des travaux plus récents de J. R. BEELER (6) qui emploie une méthode de simulation en calculateur électronique et peut donc tenir compte plus exactement de la structure cristalline. (J. R. BEELER a étudié la nature de ce qui est appelé ici la Zone de Déplacements, dans le Fer α , le Cuivre et le Tungstène, pour des atomes primaires de 0,5 à 20 KeV).

a - cascade de déplacements corrélés

La figure 3, ci-dessous donne un exemple de la cascade d'atomes déplacés par un primaire de 5 KeV dans un cristal de Fer α . La cascade est représentée projetée sur un plan (001). Le primaire est éjecté, avec une énergie de 5 KeV, d'un site situé à l'extrémité inférieure de la ligne continue épaisse, qui représente sa trajectoire. Chaque changement de tracé (trait plein, pointillée, tireté, etc...) représente un nouvel atome en mouvement



Cascade de ralentissement d'un primaire de 5 KeV dans un cristal Fe α (d'après J. R. BEELER (6)).

FIGURE 3

On voit que la cascade est faite de déplacements enchevêtrés et qui sont donc à considérer dans leur ensemble. Le volume enveloppe de ces déplacements est la zone de déplacements

b - Collisions de recombinaison

Une proportion importante de ces collisions est faite de collisions de recombinaison, où un interstitiel issu d'un choc tombe dans la lacune issue d'un autre choc voisin. Ces recombinaisons ont lieu lorsque la distance lacune-interstitiel est inférieure à la distance de recombinaison qui atteint 3 distances interatomiques pour le Cu (7) et le Fe α (8) à 0 °K.

Le nombre de déplacements définitifs, retrouvés à la fin de la cascade de ralentissement, mais avant tout recuit thermique, est donc plus faible, 2 à 3 fois plus faible, que le nombre qui serait obtenu dans une cascade de déplacements indépendants. On peut rendre compte de cette réduction de nombre de déplacements en considérant que l'énergie E'_d nécessaire à la création d'un déplacement définitif est de l'ordre de 2 à 3 fois plus grande que l'énergie E_d qui suffit à créer un interstitiel dans un modèle ne tenant pas

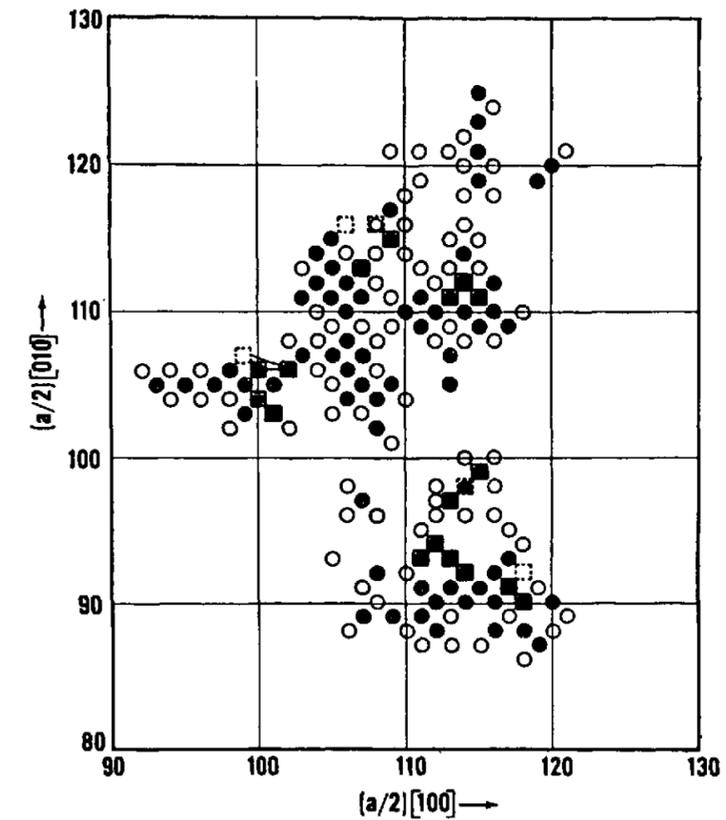
compte de la zone de déplacement ; de plus E'_d croît légèrement avec l'énergie de primaire, et peut doubler et même quintupler lorsque la température croît, ceci par croissance des volumes de recombinaison, en dehors de tout phénomène de recuit aléatoire.

Ce processus de collisions de recombinaison est à mettre en parallèle avec l'hypothèse simplifiée d'un effondrement global d'une couronne d'interstitiels sur une grosse multilacune centrale, telle qu'on l'a vu au paragraphe 2 précédent, suivant J. A. BRINKMAN. On voit que, en fait cet "effondrement" est une succession de recombinaisons qui suit la progression de la cascade dans la ZD, et que la multilacune centrale de la figure 2 représente une somme de lacunes apparues successivement, puis disparues au cours de la cascade, sans jamais exister toutes simultanément (ces lacunes sont supposées, dans le cas de la figure 2, jointives, les parcours étant pris égaux aux distances interatomiques).

La figure 4 ci-dessous schématise l'histoire et l'état final d'une ZD, avant recuit thermique ; les cercles noirs représentent les atomes ayant reçu au moins deux fois l'énergie de sublimation, et les cercles blancs les atomes ayant reçu une énergie inférieure à cette valeur. Il convient ici de préciser que, dans les calculs de BEELER un atome (ou une particule chargée) en mouvement ne peut choquer qu'un seul atome du réseau, le plus proche (approximation du choc à 2 corps), ou deux atomes du réseau, lorsqu'il est équidistant de ces deux atomes ; de plus un atome ne peut céder de l'énergie que s'il est lui-même en mouvement, c'est-à-dire s'il possède au moins 2 fois l'énergie de sublimation E_S .

Un certain nombre d'atomes à énergie faible devant E_S , un certain nombre de cercles blancs seraient donc à rajouter sur la figure 4. Ces atomes supplémentaires sont à définir de toute façon sur une base arbitraire, d'énergie minimale par exemple, et ne feraient guère que remplir un peu mieux la ZD, qui est relativement peu dense en atomes choqués suivant le calcul de BEELER, comme le montre la figure 4 ; ces atomes supplémentaires sont en effet adjacents à ceux déjà retenus.

Les carrés de la figure 4 représentent les lacunes définitives à 0 °K ; les interstitiels stables à 0 °K sont représentés sur la figure 5 qui reproduit par ailleurs les lacunes stables de la figure 4 et représente donc l'état final de la zone de déplacement.



Zone de déplacements créée par un primaire de 5 KeV dans le Fe α (Projection sur un plan (001) d'une coupe d'épaisseur égale à 2 fois la distance interatomique a et englobant le centre de la ZD), d'après J.R. BEELER (6)

FIGURE 4

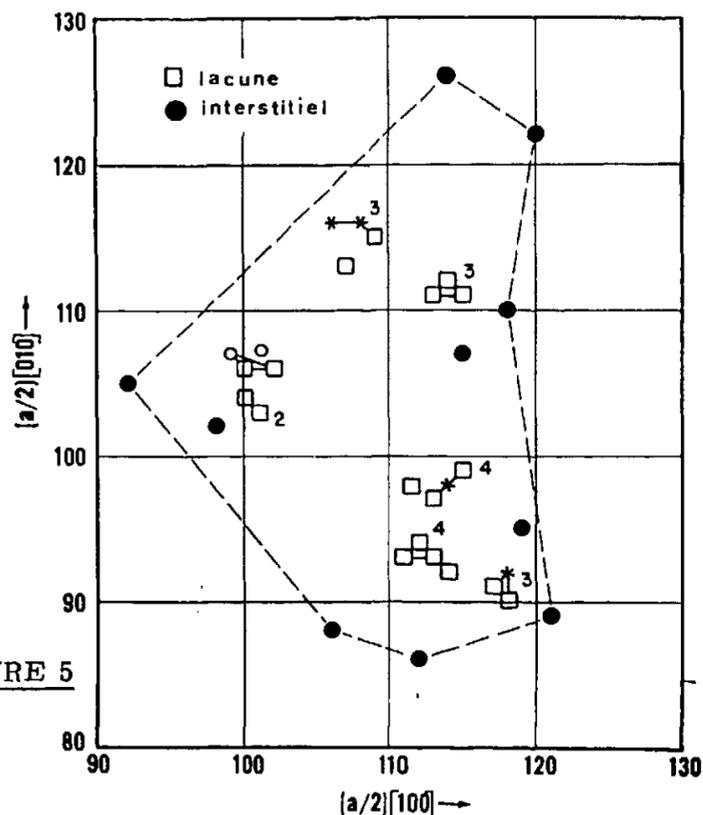


FIGURE 5

Zone de déplacements, état final avant recuit thermique (mêmes données que figure 4), d'après J. R. BEELER (6)

On voit que le mouvement des interstitiels, fortement favorisé d'ailleurs par les effets de focalisation, a conduit un certain nombre de ces interstitiels en périphérie, ils demeurent les seuls visibles sur la figure 5 ; tous les autres, s'étant déplacés dans la zone des sites lacunaires, se sont recombines. Et il reste donc quelques sites vides, entourés d'une couronne d'autant d'interstitiels (la figure 5, qui est une coupe par le centre de la ZD, montre en conséquence plus de lacunes que d'interstitiels).

On retrouve qualitativement les prévisions de BRINKMAN et de SEEGER : une zone lacunaire, entourée d'une couronne d'interstitiels.

Ces résultats sont confirmés expérimentalement et indirectement par M. J. ATTARDO et J. M. GALLIGAN (22) par observation, au microscope à émission d'ions, de Platine irradié en pile ; après évaporation ionique de couches monoatomiques, les auteurs observent une configuration de lacunes très comparable à celle calculée par J. R. BEELER (la simulation de recuit étant comprise ici dans le calcul (6))

Le pointillé de la figure 5 est un tracé possible de la ZD, suivant la définition qui en a été donnée plus haut (enveloppe des déplacements)

c - Effets de structure cristalline - canalisation - focalisation

Un atome primaire ne peut subir la canalisation (5) qu'après un certain nombre de chocs, puisqu'il se trouve à l'origine sur un site de blocage. Les primaires donc, après un certain ralentissement ainsi que les particules chargées incidentes sont, en principe, susceptibles de canalisation. Mais nous excluons ici le cas particulier du monocristal et d'un faisceau incident soigneusement aligné ; avec un polycristal donc ou avec une source plus ou moins isotrope (cas des primaires en particulier), seule une faible proportion des ralentissements se fera par canalisation, et, pour l'aspect qui nous intéressera ici, (probabilité de ZD), la canalisation pourra être négligée, ou prise en compte par un facteur correctif approché. BEELER calcule à 3 % au maximum la proportion de primaires subissant canalisation et affectant en conséquence la possibilité de ZD.

Quant à la focalisation (5), celle-ci intervient à relativement faible énergie, pour des l. p. m. petits (6/10 de la distance interatomique environ - paragraphe II-4). Au cours de son ralentissement, une particule incidente est par contre susceptible de commencer une ZD pour des énergies et des l. p. m. encore élevés (l. p. m. supérieur, ou comparable, à la distance interatomique).

Une particule incidente à énergie assez élevée sera donc responsable, à un moment donné de son ralentissement, de la naissance d'une ZD, avant que toute focalisation ne puisse intervenir ; et c'est seulement à la fin de la cascade qui constituera cette ZD que pourront intervenir des déplacements focalisés ; la focalisation a sans aucun doute une incidence sur le volume de la ZD, qui est augmenté, par augmentation du trajet des derniers interstitiels déplacés et focalisés ; mais la focalisation n'a eu aucune incidence sur le moment où, au cours du ralentissement, commence la ZD, c'est-à-dire la relation entre énergie et probabilité de ZD.

Si par contre la particule incidente a une énergie initiale déjà assez faible et permettant la focalisation, celle-ci provoque immédiatement l'éloignement des interstitiels et diminue leurs possibilités d'interférences

avec les lacunes qui restent regroupées. On a bien un schéma analogue à celui de la ZD (zone lacunaire centrale, entourée d'interstitiels) mais peu d'interférences et ce n'est pas, suivant notre définition, une ZD. Il est même possible que ce schéma se réduise à une seule paire lacune-interstitiel, où le mouvement focalisé de l'interstitiel a dissipé toute l'énergie cédée par la particule incidente.

Il existe donc, du fait de la focalisation, une limite inférieure en énergie de particule incidente au dessous de laquelle ce n'est plus exactement une ZD qui est créée, telle qu'on l'a définie plus haut. Un tel ralentissement de particules chargées, à faible énergie, est traité en particulier en (7) et (9). Il s'agit en principe d'une gamme d'énergie à laquelle nous nous intéresserons peu.

En règle générale la structure est donc sans effet direct sur le phénomène qui nous intéressera plus loin (probabilité de ZD). La canalisation à une incidence petite, la focalisation n'intervient pas, si l'on exclut le cas des petites énergies. Par contre la structure détermine la forme de la ZD, comme le montre la figure 3 où l'on voit que les déplacements se font préférentiellement suivant des directions principales ; elle détermine aussi le volume de la ZD, qu'elle accroît (focalisation), ce qui sera, indirectement, important ici, comme on le précise ci-dessous.

d - Volume de la ZD

Considérons d'abord les atomes choqués, qu'ils soient déplacés, ou non, ce sont par exemple les atomes représentés par des cercles noirs (atomes déplacés, définitivement ou non) et des cercles blancs (atomes non déplacés) sur la figure 4.

D'après les calculs de J. R. BEELER, l'énergie E de la particule origine de la ZD se répartit entre ces atomes choqués à raison de $E_c = 2 \text{ à } 3 \text{ ev}$ par atomes. Le nombre de ces atomes est donc de E/E_c . Ces atomes choqués ne sont pas tous adjacents (voir figure 4), mais séparés par des portions de cristal non touchées, ou bien par des atomes choqués supplémentaires dont ne rend pas compte le calcul de BEELER (voir paragraphe b ci-dessus). La zone de déplacements englobe donc au total un nombre supérieur d'atomes, qu'ils soient ou non choqués. On peut estimer (figure 4) que ce nombre est de

$$1,5 \text{ à } 2 \frac{E}{E_c}$$

Le volume de la ZD sera donc de :

$$\text{volume ZD} = \frac{E}{E_a} \Omega$$

où Ω est le volume atomique

$$\text{et } E_a = E_c / 1,5 \text{ à } 2 \quad E_a \sim 1 \text{ à } 2 \text{ ev}$$

Cette valeur de E_a , déduite des calculs de BEELER est conforme à une estimation antérieure de BRINKMAN.

E_a sera un paramètre très important par la suite : il détermine la taille de la ZD, le volume qu'elle occupe dans le cristal et donc la possibilité, pour deux ZD, d'interférer et de n'en former qu'une seule. Nous reviendrons plus loin sur E_a et le volume de la ZD et nous rechercherons, les déterminations possibles de ces paramètres à partir des résultats expérimentaux (paragraphe V-1)

La valeur de E_a , qui semble petite, est en fait assez compatible avec les valeurs classiques de E_d . On a, par exemple :

- énergie par atome dans la ZD = E_a 1,5 ev
- énergie par atome choqué dans la ZD = E_c
- l'atome choqué est ici celui retenu par BEELER
- (cercles noirs et blancs de la figure 4) 3 ev
- énergie par atome déplacé = E_{cd}
- On peut voir, figure 4, que les atomes déplacés (cercles noirs) représentent environ 40 % des atomes choqués, $E_{cd} = \frac{E_c}{0,4}$ 8 ev

Cette dernière valeur de 8^{ev} est d'autre part voisine de $2 E_S$, E_S étant l'énergie de sublimation. S'il faut bien environ $2 E_S$ pour déplacer un atome (ce qui est bien l'hypothèse adoptée par BEELER) il faut quelque $5 E_S = 20 \text{ ev} \sim E_d$ pour que ce déplacement soit stable à 0 °K, c'est-à-dire pour que l'interstitiel soit amené en dehors du volume de la zone de recombinaison de la lacune qu'il libère.

Enfin, on a vu, que, à l'intérieur de la ZD, les effets d'interférence entre chocs portent à 2 Ed, 3 Ed, et même plus, l'énergie nécessaire à un déplacement définitif ; cette énergie vaut quelque 30 fois E_a ; la teneur en atomes définitivement déplacés dans la ZD est de l'ordre de $\frac{1}{30} \sim 3\%$; c'est la teneur à saturation, permise par le volume de recombinaison (30 sites à 0 °K dans le Fer α).

On a d'autre part admis suivant les calculs de BEELER une valeur E_a sensiblement constante. Cette hypothèse est acceptable lorsque la ZD est grande, grande devant la distance de focalisation qui intervient alors pour augmenter la ZD d'un facteur de multiplication constant (une proportion constante, du nombre des atomes déplacés, est focalisée dans un mouvement centrifuge, en dehors de la zone centrale des lacunes libérées). Cette hypothèse devient fautive lorsque la ZD est comparable en dimensions aux distances de focalisation et que la focalisation détermine au premier chef la taille de la ZD. Ceci se produit pour une énergie de particule initiale de l'ordre de l'énergie limite de focalisation, et on a vu qu'en dessous de ces énergies, il n'y a plus ZD parce qu'il n'y a plus, ou peu, d'interférences entre déplacements, à cause justement de la focalisation.

On appellera pseudo - ZD, le volume des déplacements induits dans le solide, lorsque ces déplacements sont, pour la plus grande part, focalisés ; la densité de déplacements est alors faible, les interférences sont réduites et le volume est relativement grand. Mais on a, qualitativement la structure de la ZD : zone lacunaire entourée d'interstitiels ; à la limite, la paire lacune-interstitiel est une pseudo- ZD.

4° - Les particules susceptibles d'induire une ZD

Le neutron n'est pas susceptible de créer directement une zone de déplacements. C'est une particule neutre qui, en conséquence, a un l. p. m. grand (de l'ordre de plusieurs centimètres) ; les chocs qu'il induit n'interfèrent pas.

L'atome primaire mis en mouvement par le neutron, et plus généralement les particules chargées lourdes (protons, ions, fragments de fission) sont susceptibles de créer une ZD.

Un atome mis en mouvement, en dehors d'une ZD, par les particules lourdes ou par le primaire d'origine neutronique, est en principe susceptible de créer une ZD. Il faut encore qu'il ait assez d'énergie, ce qui, on l'a vu plus haut au paragraphe 1, est peu probable.

L'électron, enfin, n'est pas susceptible de créer une ZD : sa masse faible ne lui permet pas de céder une énergie suffisante par choc. Les chocs actifs sont peu probables (le l. p. m. associé est de quelques millimètres) et il y a exclusivement création de quelques paires "lacune-interstitiel" indépendantes, voire de petites pseudo-ZD, telle qu'elles sont définies au paragraphe 3-d précédente.

5 - Conditions d'apparition de la ZD - probabilité de la ZD

Nous commencerons par chercher des potentiels d'interaction qui permettront de calculer la section efficace de choc et le l. p. m. de la particule incidente, en fonction de son énergie.

La section efficace de choc donnera la répartition en probabilité des énergies cédées dans le choc, et la valeur du libre parcours moyen donnera la répartition en probabilité des libres parcours réels entre chocs.

Suivant différentes hypothèses, il sera possible d'en déduire la probabilité d'apparition de la ZD, en fonction de l'énergie de la particule incidente, c'est-à-dire de son l. p. m. Soit l le l. p. m. et D la distance interatomique ; on appellera λ le l. p. m. réduit $\lambda = l/D$.

Selon le critère de BRINKMAN (3), qu'on envisagera d'abord, la probabilité de ZD passe de 0 à 1 lorsque, au cours du ralentissement de la particule incidente, le l. p. m. devient égal à la distance interatomique : $\lambda = 1$. On suppose ici que les parcours réels sont égaux aux l. p. m, les chocs retenus étant ceux pour lesquels l'énergie cédée est au moins égale à Ed.

Suivant un critère moins restrictif, on dira qu'il y a ZD à partir du moment où deux chocs successifs interfèrent. Considérant les probabilités d'énergies transmises et de parcours réels, on pourra étudier les répartitions en probabilité des volumes perturbés par chaque choc, et de la distance entre chocs. La probabilité de ZD sera ici la probabilité de recouvrement des 2 volumes perturbés par 2 chocs successifs.

Enfin, on peut aussi admettre qu'il y a interférence entre 2 chocs successifs lorsque la distance entre ces 2 chocs est inférieure ou égale à la distance de recombinaison d'une paire lacune-interstitiel. En pratique on verra que ce dernier critère est équivalent numériquement au précédent (recouvrement des volumes perturbés). Ils conduisent tous deux à une valeur grande de probabilité de ZD lorsque $\lambda < 3$

Nous estimerons d'autre part une limite inférieure en énergie de particule incidente, au-dessous de laquelle il n'y a plus de ZD. On admettra que cette limite est représentée par l'énergie limite de focalisation E_f .

Au-dessus de cette limite, on admettra que la structure périodique du solide n'a pas d'incidence sur les critères retenus, la canalisation intervenant par un facteur correctif. On considèrera donc que le cristal est un solide isotrope, c'est-à-dire que les atomes sont à la distance D les uns des autres et que la probabilité de trouver 2 atomes voisins sur une direction quelconque est indépendants de cette direction.

II - LE RALENTISSEMENT D'UNE PARTICULE CHARGÉE (Potentiels-sections efficaces-parcours)

1° - Généralités

La collision de 2 particules M et M' est entièrement déterminée par

- les masses m et m' et les énergies cinétiques initiales de ces deux particules. Ici, M est au repos (masse m, énergie cinétique nulle) et la particule incidente M', de masse m', a l'énergie cinétique E.
- le paramètre d'impact ρ ; ρ est la distance d'approche minimale de m et m' en l'absence supposée de toute interaction.
- le potentiel d'interaction V (r) dont dérive la force F qui s'exerce entre les deux particules distantes de r. Il suffit de connaître V (r) pour $r > \rho$, dans le cas présent d'un potentiel répulsif où l'on a toujours effectivement $r > \rho$

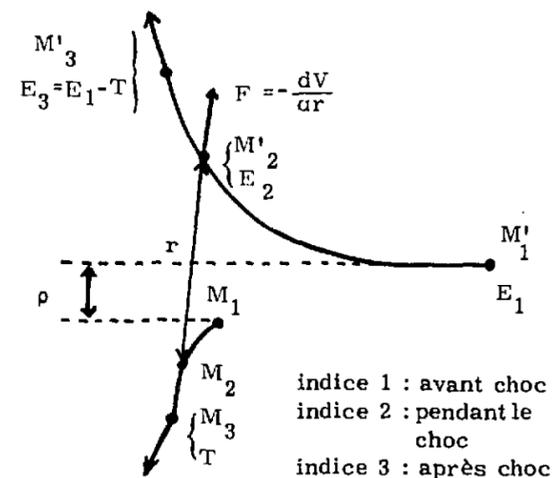


FIGURE 6

Toutes choses étant égales d'ailleurs, la valeur de ρ définit donc la valeur de l'énergie transmise T ; T est fonction décroissante de ρ , et si l'on pose une limite inférieure T_m aux valeurs à considérer des énergies transmises T, il correspond à cette limite une valeur maximale de ρ , soit ρ_M cette valeur maximale, au-delà de laquelle on considère qu'il n'y a pas choc.

La section efficace présentée alors par la particule objectif à la particule incidente est

$$\sigma(E, T_m) = \pi \rho_M^2$$

C'est la section efficace relative à tous les chocs possibles, c'est à dire transférant une énergie T comprise entre T_m et la valeur maximale possible de T, soit T_M cette valeur dont on sait qu'elle est donnée par

$$T_M = 4 \frac{m m'}{(m + m')^2} E ; \text{ en particulier si } m = m', T_M = E.$$

La probabilité d'un choc à transfert d'énergie T est proportionnelle à la probabilité de trouver $\rho(T)$

$$\frac{d\sigma(E, T)}{dT} dT = 2 \pi \rho d\rho$$

de plus $\frac{d\sigma}{dT}(E, T) = 0$ pour $T > T_M$, ou $T < T_m$, par définition du choc.

L'interaction d'une particule incidente avec les atomes M d'un solide sera considérée comme décrite par la somme des collisions M, M' de M' avec chacun des atomes M du solide.

Soit l , le libre parcours moyen entre chocs ; dans un solide sans structure à N atomes par cm^3 , l s'écrit :

$$l = \frac{1}{N\sigma} = \text{libre parcours } \underline{\text{moyen}} : \text{l. p. m.}$$

il est important de noter que ce l. p. m est, par définition une valeur moyenne des libres parcours.

Soit l' le libre parcours réel, l' peut prendre toutes valeurs et, en moyenne, est égal à l ; la valeur l' de la distance réelle constatée entre 2 chocs suit une répartition de probabilité p définie à partir du l. p. m l :

$$l' = \text{libre parcours } \underline{\text{réel}}$$

$$p(l') dl' = e^{-l'/l} \frac{dl'}{l} = \text{probabilité de trouver un l. p. réel compris entre } l' \text{ et } l' + dl'$$

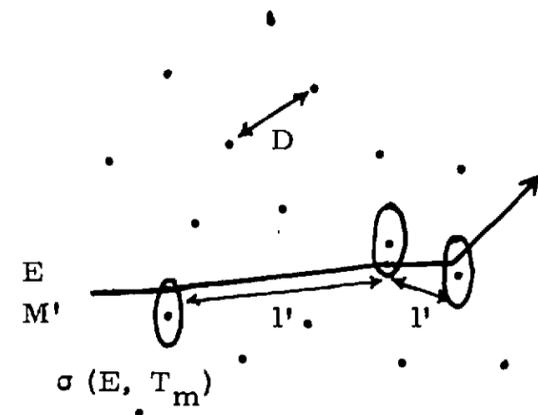


FIGURE 7

Si l'on considère un cristal compact isotrope, c'est à dire où les atomes sont à une distance D les uns des autres, mais où la probabilité de trouver un voisin à la distance D est considérée comme isotrope, on a $N = \sqrt{2} D^{-3}$ (loi des empilements compacts) et :

$$l = \frac{D^3}{\sqrt{2} \sigma}$$

On définit

le l. p. moyen réduit λ , et le l. p. réel réduit λ' :

$$\lambda = \frac{l}{D} = \frac{D^2}{\sqrt{2} \sigma} = \text{l. p. m. réduit} \quad (1)$$

$$\lambda' = \frac{l'}{D} = \text{l. p. réel réduit} \quad (2)$$

$$p(\lambda') d\lambda' = e^{-\lambda'/\lambda} \frac{d\lambda'}{\lambda}$$

L'approximation du cristal isotrope est une approximation valable tant que les effets de structure peuvent être négligés

On a vu plus haut que c'est bien le cas ici, si l'on ne considère pas la proportion, faible, de trajets canalisés et où le domaine des énergies envisagées est limité, en valeur inférieure, à l'énergie maximale de focalisation E_f .

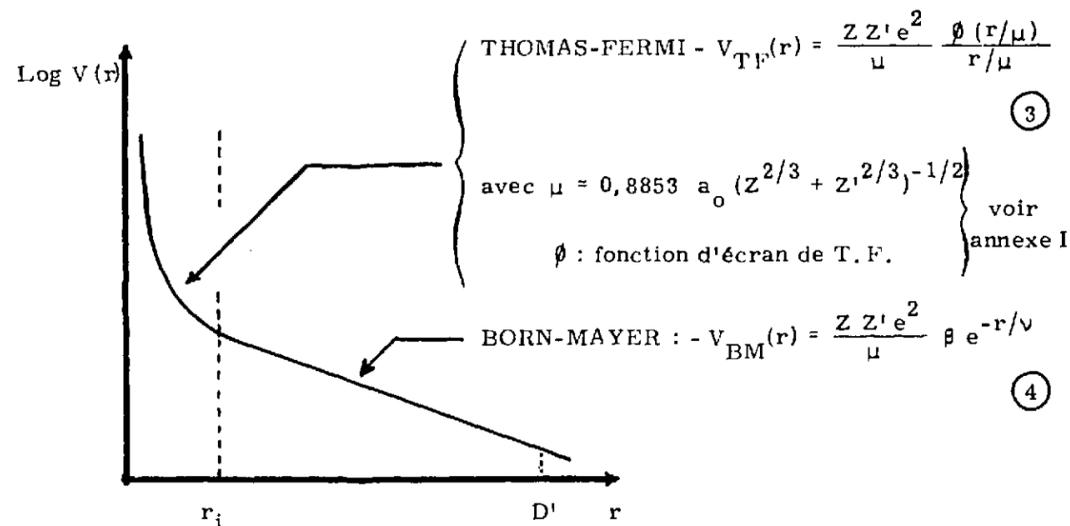
Note : Il sera commode, par la suite, d'associer aux énergies caractéristiques considérées E, la valeur correspondante du l. p. m réduit λ ; on admettra par convention que cette valeur de λ correspond à des chocs actifs dans le modèle du seuil de déplacement E_d ; c'est à dire que l'énergie minimale transférée est $T_m = E_d$ et qu'il s'agit donc de $\lambda(E, E_d)$.

2° - Potentiels employés

Le potentiel interatomique $V(r)$ utilisé est déterminé et justifié en annexe I, dans le cas de 2 atomes identiques (ralentissement d'un primaire). Son extension au cas général de 2 atomes différents est immédiat (définition de D' , figure 8 ci-dessous)

En résumé, $V(r)$ est, aux courtes distances, un potentiel de THOMAS-FERMI qui se prolonge par un potentiel de BORN-MAYER aux grandes distances ; ce potentiel rend compte de la rigidité K.

Les 3 conditions, d'égalité de potentiel et de dérivées de potentiel en r_i , et de rigidité en D' , déterminent les 3 paramètres β , ν et r_i (figure 8 ci-dessous) et définissent donc entièrement $V(r)$



avec a_0 : Rayon de Bohr = 0,529 Å

Z', Z : nombre atomique, respectivement de la particule incidente M' et des atomes M objectifs formant le solide irradié (respectivement masse m' et m)

D : distance interatomique dans le solide irradié (cas d'un primaire)

D' : moyenne de la distance interatomique D dans le solide irradié et de la distance interatomique dans le solide formé d'un empilement compact d'atomes identiques à l'atome incident.

FIGURE 8

ν est donné, soit par la rigidité K (équation (A7) - Annexe I) dans le cas de 2 atomes identiques, soit, plus généralement et plus simplement par la relation trouvée empiriquement :

$$\nu = 0,164 (D')^{0,25} \pm 2\% \quad \nu \text{ et } D' \text{ en } \text{Å} \quad (4a)$$

où ν est donc fonction exclusivement de la distance D' . On a même encore plus simplement $\nu = 0,209 \text{ Å} \pm 5\%$, mais l'erreur de 5% est quelque peu excessive pour la suite de nos calculs, et on n'a pas retenu ici cette valeur, constante, de ν .

On trouve d'autre part qu'on peut poser :

$$\beta = \xi \left(\frac{\mu}{\nu} \right)^{2,4} \quad (4b)$$

où $\xi \sim 1$ (voir $\xi(Z)$, figure A1)

Enfin r_i varie suivant les corps, croît avec Z , mais dans des proportions faibles (voir figures A2 à A7)

Il nous suffira par la suite de renseignements qualitatifs sur r_i , et l'on voit que cette grandeur reste, à 20% près, voisine du a_0 de Bohr ($a_0 = 0,529 \text{ Å}$)

Il faut noter que les potentiels ainsi définis sont très voisins des potentiels de HUNTINGTON (12), de VINEYARD (7) pour le Cuivre, et de ERGINSOY (8) pour le Fer.

Ils sont par contre différents du potentiel de BRINKMAN (3) qui s'écrit

$$V_{BR}(r) = A \frac{e^{-r/\nu_{BR}}}{1 - e^{-Ar}} \quad (5)$$

Ce dernier potentiel tend bien, aux grandes distances, vers un potentiel de BORN-MAYER, et, tend donc bien vers la forme retenue ici, si l'on fait $\nu_{BR} = \nu$, ν ayant la valeur qu'on lui donne ici, et si l'on adopte pour A la valeur, cohérente avec la rigidité, définie par (4) et (4b) :

$$A = \frac{Z Z' e^2}{\mu} \xi \left(\frac{\mu}{\nu} \right)^{2,4}$$

(voir figures A2 à A7, Annexe, ou V_{BR} est noté BR (ν) dans la présente hypothèse).

Mais, à plus courtes distance, la forme de V_{BR} lui donne des valeurs systématiquement supérieures au potentiel retenu ici, et même, dans un grand domaine de distances, supérieures au potentiel de T. F. (voir toujours BR (ν), figures A2 à A7).

De plus, BRINKMAN pose $\nu_{BR} = C a_0 Z^{-1/3}$; c'est à dire qu'au lieu d'être sensiblement constant autour de la valeur $\nu \sim 0,209 \text{ \AA}$, ν_{BR} varie en $Z^{-1/3}$; enfin, BRINKMAN adopte une valeur $A^{(eV)} = 2,58 \cdot 10^{-5} Z^{11/2}$ qui correspond sensiblement à la rigidité pour $Z > 15$, mais plus du tout pour les valeurs de Z plus petite. Il correspond à ces valeurs de ν_{BR} et de A le potentiel de BRINKMAN proprement dit, noté BR (C), (figures A2 à A7, annexe I), très différent du potentiel retenu ici.

On détaille en annexe la justification de la valeur constante de ν . Plus précisément, on a vu que ν varie, peu, avec D et est indépendant de Z; D est le résultat de la forme des potentiels à grande distance; il est donc particulièrement adapté à leur description empirique, quels que soient les paramètres origine de ces potentiels; il nous apparaît donc raisonnable qu'à grande distance et au voisinage de la distance interatomique D dans le solide, l'unité de longueur ν à employer dans l'expression du potentiel soit fonction de D exclusivement et indépendamment de Z, alors qu'à plus petite distance, c'est surtout le nombre Z qui interviendra pour définir l'unité de longueur μ dont on sait qu'elle est en $Z^{-1/3}$. (μ = rayon de Thomas-Fermi).

On verra plus loin qu'en pratique, pour la plupart des cas qui nous intéresseront, il suffira de la connaissance des potentiels dans un domaine de valeurs de r inférieures ou légèrement supérieures à r_i ; le potentiel de Thomas-Fermi, correct en valeur absolue et en dérivée en r_i , se trouvera acceptable au-dessus de r_i jusqu'à quelque $0,8 \text{ \AA}$, c'est à dire pour la plupart des cas qui nous intéresseront; l'étude de potentiel faite ici et détaillée en annexe I peut n'être considérée alors que comme recherche de limite supérieure en distance, d'application du potentiel $V_{T.F.}$.

3° - Sections efficaces et libres parcours moyens :

Le calcul des sections efficaces obtenues à partir du potentiel précédent est détaillé en Annexe II.

On emploie les unités réduites suivantes, inspirées de LINDHARD (11)

$$u' = \frac{u}{2 Z Z' e^2} \sqrt{\frac{m}{m'}} \sqrt{E T} \quad \text{énergie réduite}$$

$$u = \frac{\mu}{2 Z Z' e^2} \sqrt{\frac{m}{m'}} \sqrt{E T_m} \quad \text{valeur de } u' \text{ pour } T = T_m \quad (6)$$

où l'on rappelle :
 E : énergie incidente
 T : énergie transmise dans le choc
 T_m : valeur minimale considérée de T
 Z, Z', m et m' défini au paragraphe 2, figure 8

$$u = 0,8853 a_0 (Z^{2/3} + Z'^{2/3})^{-1/2}$$

$$s(u) = \frac{\sigma(u)}{\pi \mu^2} \quad \text{section efficace réduite} \quad (7)$$

$s(u)$ est la section relative à tous les transferts T supérieurs à T_m , c'est à dire toutes valeurs de T telles que $T_m \leq T \leq T_M$. (T_M est le transfert maximal possible).

$$s(u) \simeq \left(\frac{\rho(u)}{\mu} \right)^2 \quad \text{en admettant } \rho(T_M) \ll \rho(T_m)$$

ce qui est vrai : $\rho(T_M) \sim 0$, aux imperfections de potentiel près.

(les notations $\rho(u)$ et ρ_M sont équivalentes puisque u correspond à $T = T_m$)

La section $s(u)$ suit la loi représentée ci-dessous (figure 9) :
 (μ, ν, ξ , etc... sont définis au paragraphe 2).

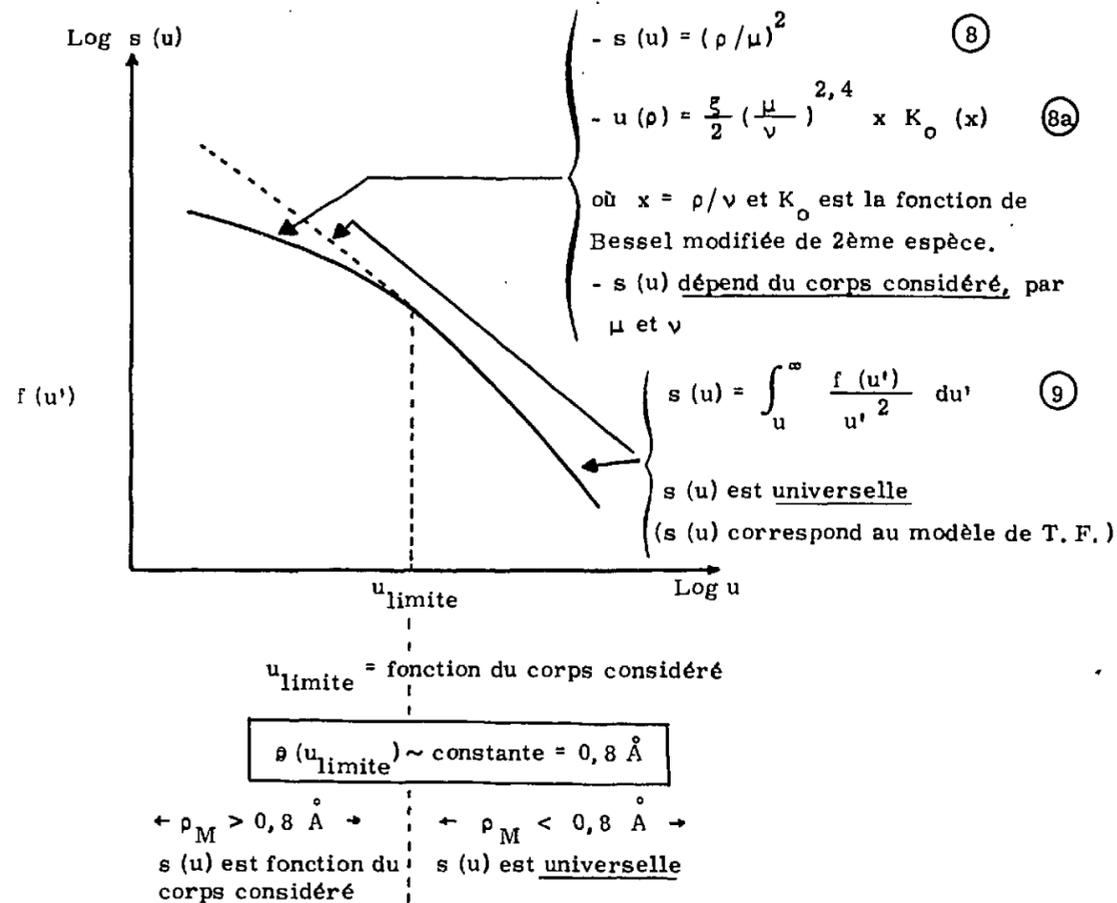


FIGURE 9

La fonction $s(u)$ est tracée quantitativement et pour plusieurs valeurs de Z en figure A9 de l'annexe II, où l'on peut voir en particulier comment varie u_{limite} avec les corps considérés, (cas d'un primaire, c'est à dire $Z = Z'$)

Pour $\rho \leq 0,8 \text{ \AA}$ la section $s(u)$ est universelle ; tracée figure A9 de l'annexe II, elle est calculée suivant (9) à partir de la fonction $f(u)$ que LINDHARD (11) a calculée sur la base de potentiels de Thomas-Fermi et qui est universelle ; la figure A8 de l'annexe I reproduit la fonction $f(u)$.

La plupart des cas qui nous intéresseront par la suite impliqueront $\rho \leq 0,8 \text{ \AA}$ et seront donc gouvernés par cette section universelle.

Si de plus, $u < 0,1$, ce qui sera aussi vérifié dans la plupart des cas envisagés, on a (voir figure A9. Annexe II).

$$s(u) = S(u) u^{-3/4} \text{ avec } S(u) \sim 1 \quad (9a)$$

Les conditions $\rho < 0,8 \text{ \AA}$ et $u < 0,1$, vérifiées dans la plupart des cas qui nous intéresseront, conduisent donc à :

$$\sigma(E, T_m) \text{ proportionnel à } Z^{13/12} (E T_m)^{-3/8}$$

soit, en première approximation :

$$\sigma(E, T_m) \propto Z (E T_m)^{-1/3} \quad (10)$$

(le potentiel de coulomb conduirait à $\sigma \propto Z^4 (E T_m)^{-1}$)

et avec la même approximation, le libre parcours réduit λ (relation (1)) varie suivant :

$$\lambda(E, T_m) \propto D^2 Z^{-1} (E T_m)^{1/3} \quad (10a)$$

4° - Restrictions : canalisation et focalisation

Canalisation et focalisation (5) ralentissent la particule incidente sans déplacement apparent d'atome, soit qu'il n'y ait effectivement pas de déplacements induits (canalisation), soit que tous les chocs soient des collisions de remplacement, où il y a substitution d'atome, c'est à dire, quant aux résultats, apparemment pas de déplacement (focalisation).

Dans ces deux cas la notion de l.p.m. est à reconsidérer, et il n'y a plus possibilités de ZD. (voir paragraphe I.3.c). En ce qui nous concernera ici- création de ZD - on tiendra compte de ces deux phénomènes comme suit :

a) La canalisation est susceptible d'accroître les l.p.m. suffisamment pour interdire la ZD. Une certaine proportion $p_r(E)$ des particules incidentes ne subit pas une telle canalisation, et l'on ne considèrera que cette proportion $p_r(E)$ des particules incidentes ; c'est à dire que les

probabilités de ZD se trouveront affectées du facteur $p_r(E)$.

On a déjà vu que, d'après BEELER (6), $p_r(E) \sim 1$ pour des primaires. (paragraphe I.3.c)

b) Focalisation ; limite supérieure de ZD

La focalisation limite, en valeur inférieure, l'énergie d'une particule susceptible d'induire une ZD : grande énergie dissipée pour un seul déplacement apparent, grand l.p.m.

On a adopté, comme estimation de l'énergie limite inférieure de ZD, les valeurs indicatives d'énergie de focalisation E_f obtenues selon M.W. THOMPSON (9), pour des atomes primaires :

$$E_f = 2 V (D/2) \quad \text{énergie limite de focalisation} \quad (11)$$

Et de plus, on a pris ici l'hypothèse moyenne $D^3 = \sqrt{2}/N$ (empilements compacts).

L'énergie E_f est alors calculée sur la base du potentiel défini plus haut ; comme on a toujours $D/2 > r_1$, c'est la forme de l'équation (4) qui convient et qui devient, compte tenu de (4a) et (4b) :

$$E_f = 2 V \left(\frac{D}{2} \right) = 2 \xi \left(\frac{\mu}{v} \right)^{2,4} \frac{Z^2 e^2}{\mu} e^{-D/2v} \quad (11a)$$

qui se transforme en :

$$E_f^{eV} \simeq 300 Z^{1,5} e^{-D/2v} \quad (12)$$

avec $\frac{D}{2v} = 3,05 D^{0,75}$ (D en Å)

Soit en valeur numérique (avec $D^3 = \sqrt{2}/N$) :

Eléments	G	Al	Ti	Fe	Cu	Ag	Au	U
Z	6	13	22	26	29	47	79	92
E_f^{eV}	14	17	35	85	100	110	250	220

Tableau I

- Pour des primaires, on admet donc qu'il n'y a plus possibilité de ZD pour des énergies incidentes inférieures aux valeurs E_f ci-dessus. Ces valeurs sont faibles pour des Z' faibles, mais ne sont plus à négliger pour des Z grands. Ces valeurs de E_f sont compatibles, en moyenne, avec celles de (9)

On peut remarquer que :

$$E_f^{eV} \sim 1 \text{ à } 4 Z \quad (12a)$$

- Pour des particules chargées incidentes, plus généralement, on admettra comme valeur limite la valeur d'énergie incidente E'_f susceptible de créer des primaires à l'énergie E_f

$$E'_f = \frac{(m + m')^2}{4 m m'} E_f \quad (13)$$

m et m', étant respectivement la masse de l'atomes du réseau M et la masse de la particule incidente M'.

Nota : Libres parcours moyens associés :

Les différentes limites d'énergie que nous verrons par la suite sont associées à des valeurs de l.p.m réduits, λ , qui varient entre 1 et 3. Il est intéressant de voir ici à quelles valeurs de λ correspond E_f .

Les chocs, considérés dans notre définition de λ , sont ceux qui transmettent au moins une énergie minimale T_m (paragraphe II.1) (à la différence, en particulier, de (9), où il s'agit de chocs de sphères dures).

Considérons la relation (8a) qui peut s'écrire, pour $x \gg 0,25$ (voir relation (16)) :

$$E T_m = \frac{\pi}{2} \frac{m'}{m} x v^2(x) \text{ avec } x = \frac{\rho}{v} \quad (14)$$

d'où ρ , et donc λ , pour des valeurs de E et T données.

Soit le cas d'atomes primaires, à l'énergie limite $E = E_f$, on trouve

$$\frac{e^{D/v} (2\rho/D - 1)}{\rho/D} = \frac{\pi}{8} \frac{D}{v} \frac{E_f}{T_m} \quad (14a)$$

La solution en ρ/D de (14a) varie peu avec $\frac{E_f}{T_m}$; D/v étant à peu près constant, voisin de la valeur $D/v = 13$, on adopte une solution en ρ/D grossièrement constante. Reportée dans la relation $\lambda = \frac{1}{2\pi(\rho/D)^2}$ (voir équation (1)), cette solution conduit à la valeur cherchée λ_f de λ .

$$\lambda_f \sim 0,6$$

(λ_f correspond par convention à $T_m = E_d = 25^{eV}$ (paragraphe II.1, note); c'est une valeur moyenne pour $Z > 22$, l'équation (8a), et l'équation (14a), supposant de petites déviations, c'est à dire $E_f > T_m$)

III - CONDITIONS DE CREATION DE ZONE DE DEPLACEMENTS

LIBRE PARCOURS MOYEN INFERIEUR A LA DISTANCE INTERATOMIQUE
CRITERE DE BRINKMAN. ($\lambda \leq 1$)

L'énergie et le l. p. m. décroissant au cours du ralentissement, il y a une énergie de particule incidente à partir et au-dessous de laquelle tous les chocs induits (primaires et a fortiori secondaires, tertiaires) intéressent obligatoirement des sites voisins.

C'est l'énergie E_B à partir et au dessous de laquelle le l. p. m. l devient inférieur à la distance interatomique D :

$$E_B = E(\lambda_B)$$

$$\lambda_B = 1$$

λ étant le l. p. m. réduit $\lambda = \frac{1}{D}$

Cet ensemble de déplacements, qui sont adjacents, interfèrent évidemment, et il y a Zone de Déplacements.

Cette condition, $\lambda = \lambda_B = 1$, est le critère d'apparition de ZD
d'après J. A. BRINKMAN (1), (2) et (3). On a déjà vu brièvement plus haut en introduction, le mécanisme schématique de BRINKMAN (paragraphe I-2, et figure 2).

On a d'autre part : $\lambda = D^2/\sqrt{2}\sigma(u)$ (relation (1)), d'où

$$\lambda^{-1} D^2/\sqrt{2} = \sigma(u) = \pi \rho^2(u) \quad (15)$$

où on rappelle que u est une valeur réduite de $(ET_m)^{1/2}$

$$u = \frac{\mu}{2ZZ'e^2} \sqrt{\frac{m}{m'}} \sqrt{ET_m} \quad (\text{relation } (6))$$

et où $\rho(u)$ est le paramètre d'impact maximum, qui correspond au transfert d'énergie minimum T_m

La corrélation entre l'énergie réduite u , et la section $\sigma(u)$ est donnée figure 9. La relation (15) conduit immédiatement, avec $\lambda = 1$, à :

$$\rho(u) = 0,475 D \quad (15a)$$

soit $\rho(u) \sim 1,4 \text{ \AA}$

d'où le choix, figure 9, de la relation (8a) :

$$u(\rho) = \frac{\xi}{2} \left(\frac{\mu}{\nu}\right)^2 \cdot \frac{\rho}{\nu} K_0\left(\frac{\rho}{\nu}\right) \quad (\text{relation } (8a))$$

Il est encore nécessaire, dans cette dernière relation, de fixer la valeur de T_m définissant u . On admet, avec J.A. BRINKMAN, $T_m = E_d$, E_d étant l'énergie minimal de déplacement, nécessaire à déplacer un atome du réseau en dehors du volume de recombinaison de la lacune qu'il libère

L'énergie E_B , seuil de ZD ⁽¹⁾ d'après le critère BRINKMAN, est alors définie, à partir de (8a), (6) et (15a) :

$$E_B T_m = \epsilon^2 x^2 K_0^2(x) = \epsilon^2 \frac{\pi}{2} x e^{-2x} \left(1 - \frac{1}{4x}\right) + \dots$$

où $x = \rho/\nu$

$$T_m = E_d$$

$$\rho = 0,475 D$$

$$\epsilon = \frac{e^2}{\mu} \left(\frac{\mu}{\nu}\right)^{2,4} \xi Z Z' \sqrt{\frac{m'}{m}} \quad (16)$$

μ, ν, ξ , etc voir figure 9, et la suite

probabilité de ZD

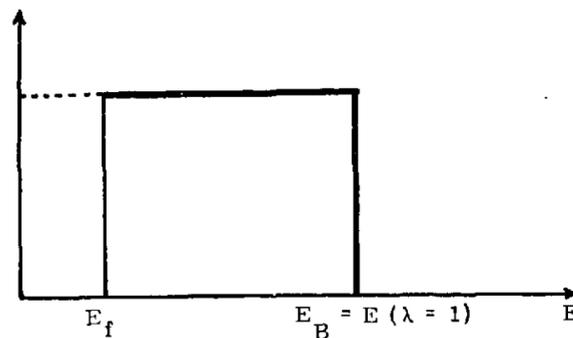


FIGURE 10

(1) Nota : il faut que la particule incidente ait un nombre atomique Z' inférieur ou égale au nombre atomique Z du solide, ce qui est le cas général. Ce point est vu au paragraphe IV-3.

Numériquement, avec $E_d = 25 \text{ ev}$, on obtient, pour des primaires :

$$E_B^{ev} = 0,59 \xi^2 \frac{Z^{3,0666}}{\nu^{4,8}} \frac{\rho}{\nu} e^{-2\rho/\nu} \quad (17)$$

$$\rho = 0,475 D \quad D \text{ et } \nu \text{ en } \text{\AA}$$

d'où :

Z	DA	E_f^{ev}	E_B^{ev}	$E_{B_1}^{ev}$
6	2,32	14	26 *	
13	2,86	17,5	48 *	
22	2,94	35	188	
29	2,56	100	1150 (1430)	4 000
47	2,89	111	2800 (2040)	4 500
79	2,88	235	10900 (9460)	80 000
92	3,09	322	7400	79 000

Z : nombre atomique du nuclide considéré

D : distance interatomique dans le réseau supposé compact $D^3 = \sqrt{2}/N$

E_f : seuil inférieur de possibilité de ZD $\lambda \sim 0,6$ (paragraphe II-4)

E_B : seuil supérieur de possibilité de ZD ; critère de BRINKMAN $\lambda = 1$

E_{B_1} : même seuil, mais calculé sur la base du potentiel de BRINKMAN (3), (voir paragraphe II-2)

TABLEAU 2

* Nota : (8a) et donc (17), supposent de petites déviations ; il faut donc $E_B \gg T_m = 25 \text{ ev}$; pour $Z < 22$ les valeurs E_B trouvées sont très grossières, mais il nous suffit de savoir qu'elles sont faibles.

Les valeurs de ν employées dans ce calcul de E_B sont celles données par (4a), sauf dans les cas : $Z = 29, 47$ et 79 , où il est possible (voir annexe I) d'utiliser directement la rigidité (relation (A7)); l'emploi de (4a) dans ces derniers cas conduirait aux valeurs de ν mises entre parenthèses dans le tableau 2.

Le potentiel de HUNTINGTON donne pour Cu ($Z = 29$)

$E_B \sim 1\ 000$ eV, (cité en (3)) ce qui est très proche de la valeur calculée ici.

Par contre, nos résultats sont très différents de ceux de J. A. BRINKMAN (3), ce qui est dû exclusivement à l'emploi d'autres constantes de potentiel, toutes les autres hypothèses et données numériques du calcul, la valeur de la rigidité en particulier, étant identiques. Le potentiel de J. A. BRINKMAN (relation (5)), est très voisin, pour les valeurs des ν considérées, du potentiel de BORN-MAYER, $V_{B.M.} = Ae^{-r/\nu}$ où, comme on l'a vu, J. A. BRINKMAN postule une valeur de ν en $Z^{-1/3}$ et en déduit, à l'aide de la rigidité, la valeur de A . La relation (8a) modifiée selon ces constantes, ou mieux de façon plus visible, la relation (14) avec ce potentiel, conduit bien aux E calculés par J. A. BRINKMAN (E_{B1} , tableau 3). On a vu que nous avons préféré ici définir ν par continuité avec un potentiel de T. F., les valeurs ν trouvées étant, par ailleurs, beaucoup plus conformes à l'ensemble de la bibliographie.

Pour les petites valeurs de Z , E_B n'est pas significativement différent de E_f ; en règle générale, les valeurs de E_B trouvées ici sont petites dans l'échelle des énergies E_p qu'on peut rencontrer dans un bombardement par neutrons de pile par exemple (E_p : tableau 9). Mais on peut penser que les conditions posées sont trop restrictives :

- il n'est pas nécessaire que les chocs soient strictement adjacents pour qu'ils interfèrent et qu'il y ait ZD

- pour un l.p.m. donné λ (E, T_m), la valeur de T_m , prise égale à E_d , est la valeur minimale d'énergie transférée; des transferts d'énergie plus grands sont possibles, qui intéresseront plus d'un site atomique dans le solide; et même pour $\lambda > 1$, il y aura alors une certaine probabilité de ZD.

- enfin, on n'a considéré ici que les l.p. moyens λ ; en fait les l.p. réels, λ' ont une certaine répartition en probabilité autour de λ ;

ils peuvent être plus grands, ou plus petits, défavorisant ou favorisant respectivement la ZD.

Ces points seront vus au chapitre suivant.

IV - CONDITION DE CREATION DE ZONE DE DEPLACEMENT
 INTERFERENCE DE DEUX CHOCS SUCCESSIFS , critère proposé
 (équivalent à $\lambda \leq 3$).

1° - Critères

On considérera qu'il y a ZD dès lors que deux chocs successifs de la particule incidente interfèrent. Il y a deux façons, totalement indépendantes, de qualifier l'interférence de deux chocs :

soit que le volume perturbé dans le solide par un choc recouvre en partie le volume perturbé par le choc suivant

soit que deux chocs successifs se fassent à moins d'une distance de recombinaisons .

On verra que ces deux critères, indépendants conduisent aux mêmes valeurs numériques.

En moyenne, une fois remplie, la condition d'interférence de deux chocs successifs doit se maintenir pour les chocs suivants puisque les l.p. moyens diminuent, en même temps que l'énergie, au cours du ralentissement. La ZD amorcée dès cette condition remplie interesse donc tout le reste du ralentissement de la particule. En fait et en toute rigueur, il peut se rencontrer un l.p. réel suffisamment grand pour interrompre l'interférence et morceler la ZD.

Nous considérons ici uniquement les conditions d'apparition de la première ZD au cours du ralentissement d'une particule incidente, que cette ZD soit unique (cas général) ou non.

a - Critère du recouvrement des volumes perturbés
 (critère de recouvrement)

Un choc, transférant à un atome du solide une énergie T, peut provoquer une cascade de déplacements à partir de cet atome à énergie T ; le choc perturbe donc un certain volume du solide et induit une petite ZD à condition que :

d'une part T soit assez petit ; on recherche ici les énergies incidentes susceptibles d'induire une ZD; pour de telles énergies, on verra que l'énergie transmise T sera toujours assez petite pour induire une ZD, si le nombre

atomique Z' de la particule incidente est inférieur ou égal au nombre atomique Z du solide (paragraphe IV-3); ceci est évident pour $Z = Z'$.

On admettra par la suite, sauf mention contraire $Z' \leq Z$, ce qui est le cas général.

d'autre part T soit supérieur à l'énergie limite inférieure de ZD, E_f (paragraphe II-4)

Soit E_a l'énergie de création, par atome, de la ZD ; on a vu (paragraphe I-3-d) que E_a est sensiblement constant et indépendant du volume de la ZD.

Le volume perturbé (la ZD créée) par le choc transférant l'énergie T est alors égal à $\frac{T}{E_a} \Omega$, Ω étant le volume atomique ; soit, avec comme unité Ω , le volume réduit v :

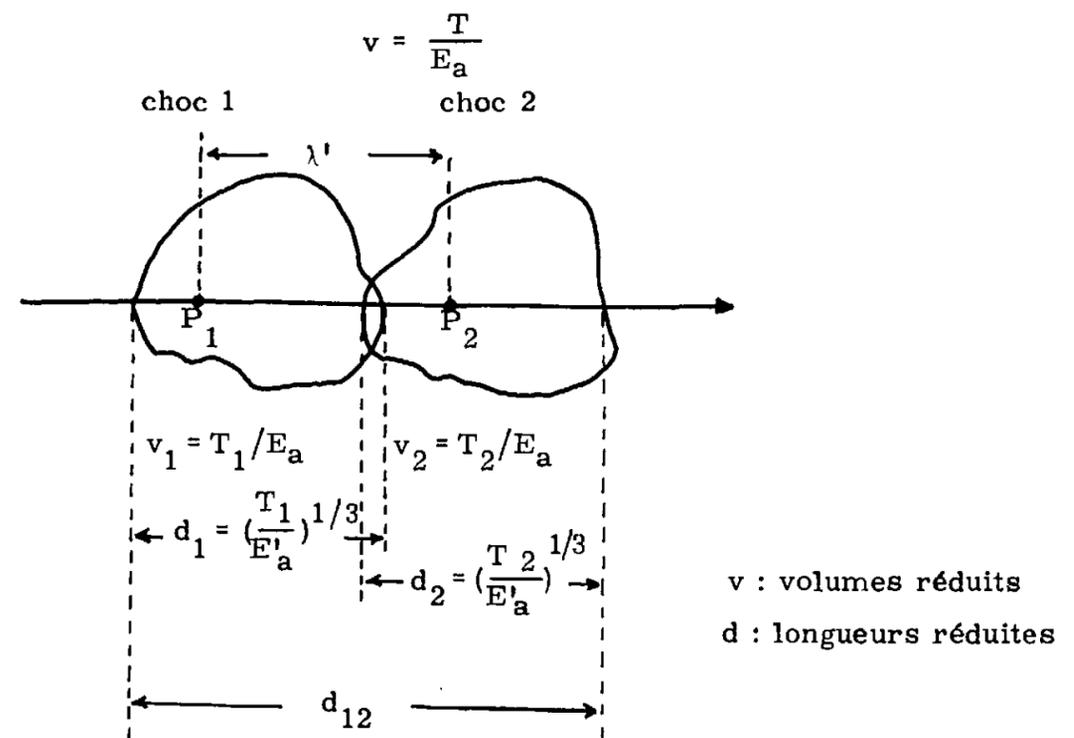


FIGURE 11

Ce volume occupe le long du trajet de la particule incidente une longueur proportionnelle à $v^{1/3}$; soit, avec comme unité la distance interatomique, la longueur réduite d :

$$d = \left(\frac{T}{E'_a} \right)^{1/3}$$

où E'_a est proportionnel à E_a , E'_a/E_a dépendant de la géométrie du volume v .

A deux chocs successifs 1 et 2 (figure 11) correspondent les énergies cédées T_1 et T_2 , les volumes v_1 et v_2 , les longueurs d_1 et d_2 couvertes par chaque choc et la longueur totale d_{12} couverte par l'ensemble des 2 chocs. La distance réduite, entre les deux points d'impact P_1 et P_2 , est λ' , libre parcours réel.

La condition de recouvrement des volumes perturbés par deux chocs successifs s'écrit :

$$d_1 + d_2 \geq d_{12} \quad \text{critère de ZD} \quad (18)$$

(recouvrement des vol. perturbés)

Si l'on considère des chocs à transfert d'énergie minimale T_m , les longueurs d_1 et d_2 sont au moins égales, chacune à : $(T_m/E'_a)^{1/3}$, et, pour le cas limite où les 2 volumes v_1 et v_2 sont juste adjacents, on a évidemment $d_{12} = 2 \lambda'$; (18) donne alors :

$$\lambda' = \left(\frac{T_m}{E'_a} \right)^{1/3} \quad \text{libre parcours limite de ZD} \quad (18a)$$

(recouvrement des vol. perturbés)

Enfin, provisoirement, on remplace la valeur λ' qui suit une certaine répartition de probabilité (voir paragraphe II-1) par sa valeur moyenne, le l. p. m. réduit λ , qui est une fonction de T_m et de l'énergie incidente, E ;

on obtient :

$$\lambda(E_0; T_m) = \left(\frac{T_m}{E'_a} \right)^{1/3} \quad (19)$$

où E_0 est la valeur de E solution de (19)

E_0 , solution de (19) est l'énergie limite supérieure de ZD dans l'approximation $\lambda' = \lambda$

On a vu, paragraphe II-3, que λ varie sensiblement comme $T_m^{1/3}$, sous certaines conditions d'énergies ($u < 0,1$) et de paramètres d'impact ($\rho < 0,8 \text{ \AA}$) qui, on le verra plus loin, sont vérifiées ici.

$$\lambda(E, T_m) \approx D^2 Z^{-1} (ET_m)^{1/3} \quad \text{(relation (10a))}$$

La limite E_0 , solution de (19) est donc sensiblement indépendante de T_m . En d'autres termes, dans le domaine considéré d'énergie et de paramètre d'impact, la distance moyenne entre chocs λ varie comme la distance d couverte par le volume perturbé, lorsqu'on fait varier l'énergie transférée dans le choc ; pour $E = E_0$ on a toujours $\lambda = d$, quelque soit T_m . Ceci est une propriété du potentiel utilisé, qui, dans ce domaine, est un potentiel de Thomas-Fermi.

Il est donc inutile de connaître précisément T_m , et c'est heureux, car le choix de cette énergie minimale transférée est difficile. L'énergie de focalisation est variable suivant les directions dans le cristal, et on n'en a calculé ici qu'une moyenne très indicative.

E_0 ne varie sensiblement pas avec T_m , mais si l'on veut connaître la valeur λ_0 associée à E_0 , il faut utiliser $T_m = E_d$, ce qui est, par convention (paragraphe II-1) le choix de T_m associant l'échelle des l. p. m. λ à l'échelle des énergies E .

Si de plus, on admet que chacun des volumes v est sphérique, on a $E'_a = 0,7 E_a$, soit $E'_a \sim 1 \text{ eV}$ avec $E_a \sim 1,5 \text{ eV}$ (paragraphe I-3-d), d'où

$$\lambda_0 = \left(\frac{E_d}{E'_a} \right)^{1/3} = 2,9 \quad \text{avec } E_d = 25 \text{ eV} \quad (19a)$$

b - critère de distance entre chocs inférieure à la distance de recombinaison (critère de recombinaison)

On sait qu'un interstitiel n'est pas stable s'il se trouve à moins d'une "distance de recombinaison" d'une lacune ; cette distance varie suivant les directions dans le cristal ; en moyenne, elle vaut environ 3 distances interatomiques (5), (6), (7) et (8).

On dira que 2 chocs successifs interfèrent si la distance entre les points d'impact P_1 et P_2 de ces deux chocs (figure 11) est inférieure à la distance de recombinaison.

$$\lambda' \leq \text{distance de recombinaison} \sim 3 \quad \text{critère de ZD} \quad (20)$$

Ce critère est qualitatif et quelque peu arbitraire la distance entre 2 chocs 1 et 2 est la distance entre la première lacune de la cascade 1 et la première lacune de la cascade 2, ce n'est que très indicativement la distance entre d'une part le ou les interstitiels d'une des cascades et d'autre part la ou les lacunes de l'autre cascade.

Si comme pour le critère précédent on remplace λ' par sa valeur moyenne λ , on obtient :

$$\lambda_0 \sim 3 \quad \text{limite de ZD} \quad (20a)$$

(critère de recombinaison)

La convention adoptée (paragraphe II-1), $T_m = E_d$, caractérisant les chocs retenus dans la définition de λ , peut convenir ici où l'on considère des chocs déplaçant au moins un atome ($T \geq E_d$). Le l.p.m. λ_0 de la formule (19a) et celui de la formule (20a) correspondent donc bien à la même définition de chocs, et sont donc comparables. Il est alors remarquable que le critère précédent du recouvrement des volumes perturbés (19a) et le présent critère de recombinaison (20a), totalement indépendants, conduisent aux mêmes résultats numériques.

En fait, aux énergies T_m , les probabilités de focalisation sont grandes et rendent le présent critère de recombinaison très hasardeux.

c - Discussion

On a vu (paragraphe III) le critère de BRINKMAN auquel correspond la valeur limite $\lambda_B = 1$. C'est un critère de chocs adjacents, très restrictif quand aux possibilités de ZD. Le critère du recouvrement des vol. perturbés est affranchi de cette restriction, et on voit qu'il conduit à une limite $\lambda_0 \sim 3$ supérieure à λ_B ; λ_0 est aussi la valeur limite de λ qu'on obtiendrait avec un critère de recombinaison. Ce dernier critère est assez hasardeux en particulier, il demande ainsi que le critère de J. A. BRINKMAN ($\lambda_B = 1$), le choix d'une énergie minimale transférée T_m dans les chocs considérés ; et ce choix est difficile : énergie de déplacement à une distance interatomique (environ 2 énergies de sublimation), énergie de déplacement stable (E_d), énergie de focalisation (E_f) etc... ?

Le critère du recouvrement des volumes perturbés est quasi indépendant d'un tel choix ; il demande par contre la connaissance de E_a , énergie atomique de création de ZD. Les choix, raisonnables et indépendants, d'une part d'une valeur $E_a = 1,5 \text{ eV}$ (voir paragraphe I-3-d et paragraphe V-1) et d'autre part, pour le critère de recombinaison, d'une valeur $T_m = E_d$, conduisent aux mêmes énergies limite E_0 et aux mêmes parcours limite $\lambda_0 \sim 3$ pour ces deux critères de recouvrement et de recombinaison. Ceci vient affermir ces critères et l'on retiendra le critère du recouvrement des volumes perturbés, très justifié dans son principe ; on saura d'autre part que le critère de recombinaison conduirait aux mêmes résultats.

Le tableau ci-dessous résume ces considérations :

TABLEAU 3

limites maximales		critères
λ	E	
$\lambda_B (=1)$	E_B	critère de J. A. BRINKMAN - trop restrictif E_B fonction de T_m
$\lambda_0 (\sim 3)$	$E_0 (>E_B)$	critère de recombinaison - indicatif et discutabile E_0 fonction de T_m mêmes résultats que pour le critère de recouvrement (suivant valeurs "raisonnables" de T_m et E_a)
		<u>critère de recouvrement</u> - critère retenu E_0 indépendant de T_m , fonction de E_a

Le schéma ci-dessous rappelle quelles sont en conséquence les conditions de ZD, dans l'hypothèse simplificatrice faite jusqu'ici $\lambda' = \lambda$, et en rappelant que l'énergie transmise dans un choc peut-être supérieure au minimum choisi, c'est-à-dire qu'il y a une probabilité non nulle de ZD pour $E > E_0$

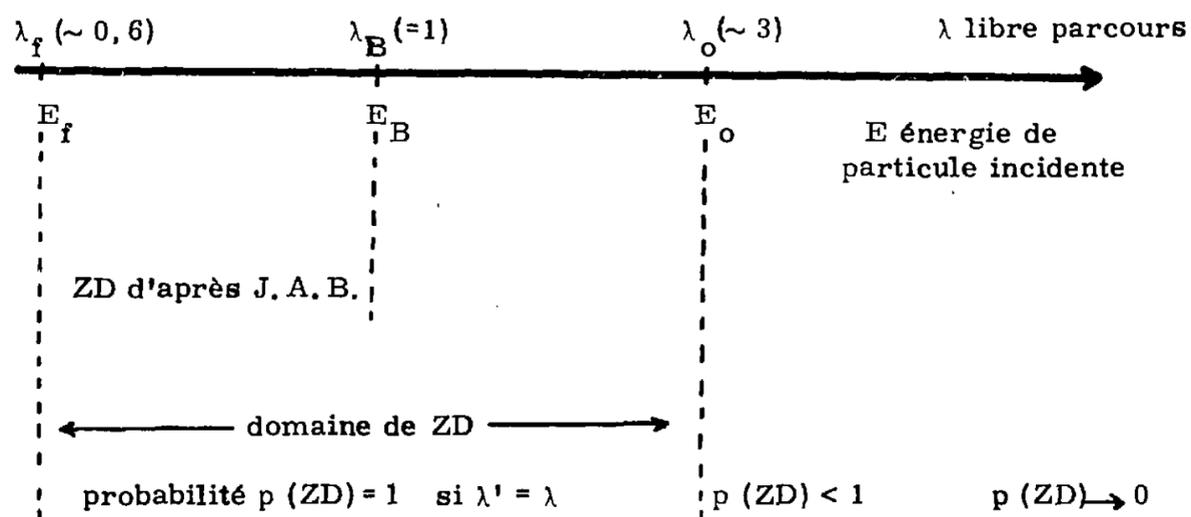


TABLEAU 4

- E_0 : tableau 5
- E_B : tableau 2
- E_f : tableau 1

2 - Energie de référence E_0 , énergie maximale de ZD dans l'hypothèse des libres parcours moyens ($\lambda' = \lambda$) et des transferts minimaux d'énergie ($T = T_m$).

a - On vient de voir que E_0 est la solution de (19) soit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda(E_0, T_m) = \left(\frac{T_m}{E'_a} \right)^{1/3} \quad (\text{relation } (19)) \\ \text{avec} \\ \lambda = \frac{D^2}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sigma} \quad (\text{relation } (1)) \end{array} \right.$$

σ étant défini en fonction de E et T_m par (7) et (9)

en effet $\lambda = 3$ conduit (relation (15)) à $\rho = 0,3 D \sim 0,75 \text{ \AA}$, ce qui est le domaine (figure 9) de la définition (9) de s , valeur réduite de σ , suivant (7) :

$$s = \sigma / (\pi \mu^2) \quad (\text{relation } (7))$$

La figure A9 (annexe II) donne quantitativement, la fonction $s(u)$ calculée suivant (9).

L'introduction de (1) et (7) dans (19) conduit à :

$$s^{-1}(u_0) = \sqrt{2} \pi \left(\frac{\mu}{D} \right)^2 \left(\frac{T_m}{E'_a} \right)^{1/3} \quad (21)$$

où l'on rappelle

$$u_0 = \frac{\mu}{2 Z Z' e^2} \sqrt{\frac{m}{m'}} \sqrt{E_0 T_m} \quad (\text{relation } (6))$$

$$\mu = 0,8853 a_0 (Z^{2/3} + Z'^{2/3})^{-1/2} \quad (\text{voir relation } (3))$$

On trouve $s(u_0) \geq 6$ dès lors que $Z \geq 6$, $Z' \geq 1$ et $\frac{T_m}{E'_a} < 200$, ce qu'on peut considérer comme le cas général

On alors $u_0 < 7 \cdot 10^{-2}$ et la forme (9a) de (9) peut être employée

$$s(u) = S(u) u^{-3/4} \quad (\text{relation } (9a))$$

où $S(u)$ est donné figure A9 (annexe) - $S(u) \sim 1$

La relation (21) devient alors :

$$u_0 = \left[\sqrt{2} \pi S(u_0) \right]^{4/3} \left(\frac{\mu}{D} \right)^{8/3} \left(\frac{T_m}{E'_a} \right)^{4/9} \quad (22)$$

En valeur numérique, après réduction, (22) s'écrit :

$$E_o = 142 S(u_o) \left(\frac{E'_a}{T_m}\right)^{1/9} \frac{(Z Z')^2}{(Z^{2/3} + Z'^{2/3})^{5/3}} \frac{m'}{m} \left(\frac{a_o}{D}\right)^{16/3} \frac{E_R}{E'_a} E_R \quad (22a)$$

b - Soit de façon plus explicite

$$E_o^{eV} = 14C \frac{E_R}{E'_a} \frac{Z_o^3}{D^5} \frac{m'}{m} \quad (23)$$

où

$$C = 3 \left(\frac{S(u_o)}{D}\right)^{1/3} \left(\frac{E'_a}{T_m} \frac{1}{Z_o}\right)^{1/9} \sim 1 \quad (C \text{ peut varier de } 0,5 \text{ à } 2 \text{ pour } u_o < 4.10^{-2})$$

$$E_R = 27,2 \text{ eV} \quad D \text{ en } \text{Å}$$

$$Z_o = (Z Z')^{9/13} \left(\frac{Z^{2/3} + Z'^{2/3}}{2}\right)^{-15/26}$$

= Z si Z = Z' (primaire)

S(u) donné figure A9 (Annexe II) - S(u) ~ 1 pour u_o < 4.10⁻²

$$u_o = 0,442 \left(\frac{m}{m'}\right)^{1/2} \frac{(E_o T_m)^{1/2}}{E_R} \frac{1}{Z Z' (Z^{2/3} + Z'^{2/3})^{1/2}}$$

$$= 0,06 Z^{-7/3} (E_o^{eV})^{1/2} \text{ pour } Z = Z' \text{ (primaires)}$$

et avec T_m = 25^{eV}

(N.B.: il faut $Z' \leq Z$). Le cas contraire, rare, est abordé au paragraphe IV-3 ci-dessous)

c - cas de primaires Z = Z'

Pour des primaires, on obtient les valeurs E_o du tableau 5 ci-dessous (avec E'_a = 1^{eV} et, par simplification, $\frac{T_m}{E'_a} = 25$)

Elément Z	T̄	critère			E _f
		recouvrement λ _o ~ 3	BRINKMAN λ = 1		
			présent potentiel	potentiel de BRINKMAN	
		E _o	E _B	E _{B1}	
G 6	0,16	1,2	0,026		0,014
Al 13	0,45	5,2	0,048		0,017
Ti 22	1,0	22	0,188		0,035
Fe 26	1,8	75	1,2		0,085
Cu 29	2,1	95	1,15	4,0	0,100
Ag 47	3,9	219	2,80	4,5	0,111
Au 79	9,2	980	10,9	80	0,250
U 92	10	920	7,40	79	0,220

(Energies en KeV)

TABLEAU 5

T̄ est l'énergie moyenne transmise dans le choc à énergie incidente voisine de E_o (voir annexe III)

d - cas Z' ≠ Z (Z' ≤ Z)

Pour des fragments de fission de U₂₃₅ dans l'Uranium naturel, on trouve les valeurs E_o ci-dessous :

	Z'	m'	E _{fission}	E _o
F.F. léger	39	96	95 MeV	130 KeV
F.F. lourd	55	137	67 MeV	320 KeV

TABLEAU 6

Ces seuils E_0 sont inférieurs au seuil E_0 de l'Uranium (920 KeV tableau 5). Un F. F. à 320 KeV par exemple ne peut créer des primaires d'Uranium qu'à énergie $T < 320$ KeV, c'est-à-dire une énergie T inférieure à l'énergie de ZD de l'Uranium (920 KeV) ; cette énergie T induit bien une petite ZD, il y a bien volumes perturbés, et le critère de recouvrement des volumes perturbés (paragraphe IV-1-a) s'applique.

3° - Conditions d'applications suivant Z et Z' (condition d'énergie T transférée).

a - Condition d'application : $Z' \leq Z$

On a vu aux (paragraphe IV-1-a et IV-2-d) que l'énergie E_0 de la particule incidente doit transmettre au plus une énergie T inférieure à l'énergie seuil E_0 des atomes du solide. T induit bien alors une ZD qui peut recouvrir la ZD du choc suivant, et le critère de recouvrement s'applique.

Il faut donc :

$$T < E_0 \text{ (atomes du solide)}$$

$$\text{sachant que } T < T_{\max} \\ E_0 \text{ (atomes du solide)} = 14 C \frac{E_R}{E'_a} \frac{Z^3}{D^5} \quad (\text{relation } \textcircled{23}) \\ T_{\max} = \alpha E_0 \text{ (particule incidente)}$$

$$= \alpha 14 C \frac{E_R}{E'_a} \frac{Z^3}{D^5} \frac{m'}{m} \quad (\text{relation } \textcircled{23})$$

On sait que :

$$\alpha = 4 \frac{m m'}{(m+m')^2} \quad \text{si } m' \leq m \\ = 2 \frac{m'}{m+m'} \quad \text{si } m' \geq m$$

Il faut donc, avec $x = \frac{Z}{Z'} \sim \frac{m}{m'}$

$$x^{12/13} \left(\frac{1+x}{2}\right) \left(\frac{1+x}{2}\right) \left(\frac{1+x^{2/3}}{2}\right)^{45/26} > 1 \text{ si } Z' \leq Z$$

ou bien

$$x^{12/13} x \left(\frac{1+x}{2}\right) \left(\frac{1+x^{2/3}}{2}\right)^{45/26} > 1 \text{ si } Z' \geq Z$$

il faut donc : $x \geq 1$

La condition d'application du critère de recouvrement, et donc de la définition $\textcircled{23}$ de E_0 est donc :

$$Z \geq Z' \quad \textcircled{24}$$

b - cas contraire $Z' > Z$:

Dans le cas contraire $Z' > Z$ les atomes primaires déplacés avec une énergie T par la particule incidente peuvent donc ne pas répondre aux conditions de la ZD. La particule incidente, à énergie inférieure ou égale à la valeur E_0 de $\textcircled{22b}$, n'est susceptible d'induire une ZD que dans la proportion où elle déplace des primaires à énergie T permettant elle même la ZD. Le complément à cette proportion correspond à des chocs à distance $\lambda \lesssim 3$ mais ne créant pas localement de volume perturbé. Il y a uniquement expulsion d'atomes relativement à grande énergie qui iront, à plus de 3 distances interatomiques, créer chacun une ZD isolée.

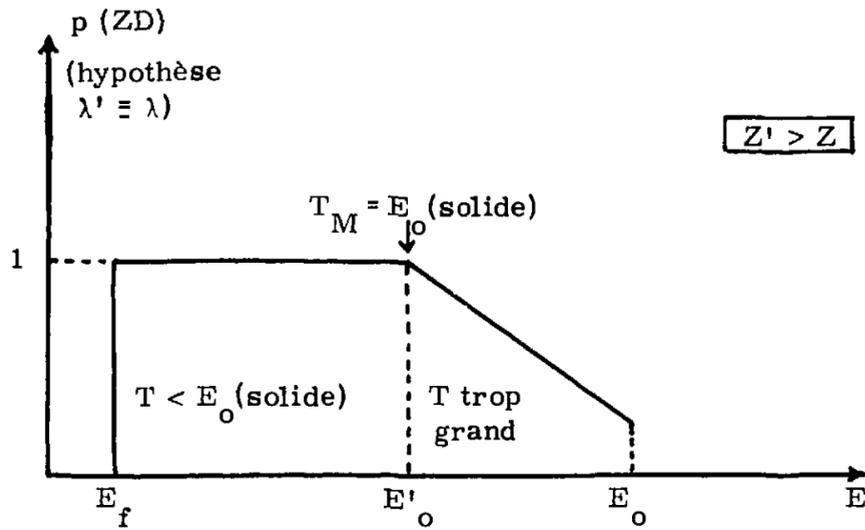
C'est seulement pour l'énergie

$$E'_0 = 14 C \frac{E_R}{E'_a} \frac{Z^3}{D^5} \frac{m+m'}{2m'} \quad \textcircled{25}$$

que la particule incidente déplacera des primaires à une énergie leur permettant d'induire la ZD. (on rappelle que pour $m' > m$, l'énergie maximale T_M cédée par une particule à l'énergie E'_0 s'écrit :

$$T_M = 2 \frac{m'}{m+m'} E'_0$$

Le seuil de ZD se décompose alors comme le montre la figure 12 ci-dessous :



E_o : équation (23)

E'_o : équation (25)

N.B. : dans le domaine (E'_o, E_o) , en plus de l'éventuelle ZD créée directement ($p(ZD) < 1$), il y a toujours d'autres ZD, mais indirectes : chaque atome déplacé à l'énergie T, trop grande initialement, crée une ZD après un ralentissement convenable.

FIGURE 12

4° - Probabilités de ZD

a - Hypothèses et établissement de la probabilité $P_Z(E)$

On a vu (paragraphe IV-1, a) le critère de ZD adopté (critère de recouvrement des volumes perturbés), il s'exprime :

$$d_1 + d_2 \geq d_{12} \quad (\text{relation } (18))$$

d_1 , d_2 et d_{12} étant définis figure 11 comme respectivement la longueur perturbée par le premier choc considéré, la longueur perturbée par le choc suivant, et la longueur totale perturbée par l'ensemble des deux chocs. Et on a vu $d_1 = \left(\frac{T_1}{E'_a}\right)^{1/3}$, $d_2 = \left(\frac{T_2}{E'_a}\right)^{1/3}$, T_1 et T_2 étant respectivement les énergies cédées au premier choc et au choc suivant.

Les chocs n'étant considérés que s'ils transmettent au moins une énergie minimale donnée T_m , on a vu qu'il y a une valeur minimale de d_1 , et de d_2 , égale à $\left(\frac{T_m}{E'_a}\right)^{1/3}$. Se plaçant dans ce cas limite, et admettant que la distance entre chocs λ' est égale à sa valeur moyenne, le l.p.m. λ , on a défini une énergie de référence E_o (paragraphe IV-2).

Mais on sait que, d'une part, des transferts d'énergie T supérieure à T_m sont possibles, et que d'autre part, des distances entre chocs plus grandes, ou plus petites, que λ , sont possibles.

Les parcours réels λ' , et les énergies T_1 et T_2 cédées dans les chocs 1 et 2, suivent des répartitions de probabilités qu'on appellera respectivement $r(\lambda')$, $r_1(T)$ et $r_2(T)$

On a :

$$r(\lambda') d\lambda' = \frac{d\lambda'}{\lambda(E)} e^{-\lambda'/\lambda(E)} \quad (\text{relation } (2))$$

$$r_1(T_1) dT_1 = \frac{d\sigma(E, T_1)}{\int_{T_m}^{T_M} d\sigma(E, T_1)} \quad \text{pour } T_1 \geq T_m$$

$$= 0 \quad \text{pour } T_1 < T_m$$

$$r_2(T_2) dT_2 = \frac{d\sigma(E-T_1, T_2)}{\int_{T_m}^{T_M} d\sigma(E-T_1, T_2)} \sim \frac{d\sigma(E, T_2)}{\int_{T_m}^{T_M} d\sigma(E, T_2)} \quad \text{pour } T_2 \geq T_m$$

$$= 0 \quad \text{pour } T_2 < T_m$$

A chaque valeur de λ' , de probabilité $r(\lambda')$, est associée une certaine probabilité $p_Z(\lambda', E)$ d'avoir un couple de valeurs T_1, T_2 assez grandes pour satisfaire à la relation (18) rappelée ci-dessus.

Si $P_Z(E)$ est la probabilité de création d'une ZD, par un ion à l'énergie E, et suivant le critère de recouvrement adopté, on a :

$$P_Z(E) = \int_0^\infty d\lambda' r(\lambda', E) p_Z(\lambda', E) \quad (26)$$

$r(\lambda', E)$ est rappelé ci-dessus.

Pour déterminer p_z , il devient nécessaire de faire des hypothèses supplémentaires dans la description du choc : il faut situer les points d'impact P_1 et P_2 (figure 11) à l'intérieur des valeurs perturbées.

Nous considérerons 2 hypothèses qui encadrent très probablement la réalité (voir figure 3 un exemple situant le point d'impact initial, à l'intérieur d'une ZD)

a) - P_1 et P_2 sont à l'origine de d_1 et d_2 (figure 13) :

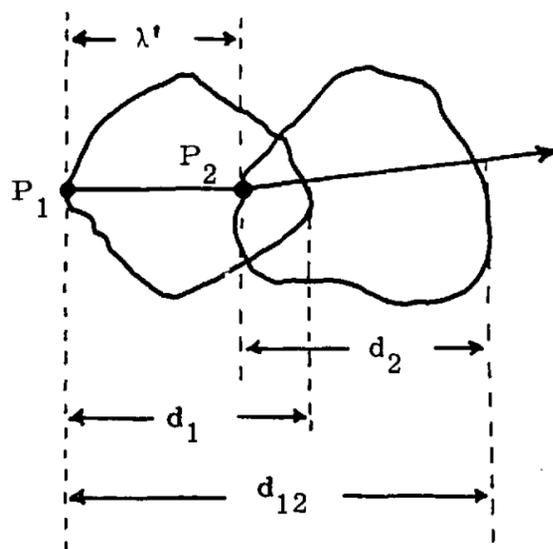


FIGURE 13

on a $d_{12} = \lambda' + d_2$; la condition (18) : $d_1 + d_2 \geq d_{12}$ devient donc :

$$\lambda' \leq d_1 = \left(\frac{T_1}{E'_a} \right)^{1/3} \quad (27)$$

$$T_1^{1/3} \geq \lambda' E'_a^{1/3} \quad (27a)$$

Ce qui d'autre part exprime directement, de façon évidente, la condition de recouvrement. On voit ici que ce schéma impose une condition simple : la première lacune du choc 2 doit être intérieure au volume perturbé 1 ; ceci entraîne recombinaison de cette lacune avec les interstitiels périphériques du choc 1 ; il y a bien interférence, donc ZD.

On sait que $T_1 \geq T_m$, et donc que $d_1 \geq \left(\frac{T_m}{E'_a} \right)^{1/3}$;
on a donc $p_z = 1$ si $\lambda' \leq \lambda'_m = (T_m/E'_a)^{1/3}$; d'autre part, pour $\lambda' > \lambda'_m$, p_z est la probabilité de réaliser la relation (27a) .

On a alors, avec, par définition $p_n = 1 - p_z$

$$\left. \begin{aligned} \lambda' \leq \lambda'_m &= \left(\frac{T_m}{E'_a} \right)^{1/3} & p_z &= 1 \\ \lambda' > \lambda'_m & & p_z &= 1 - p_n = 1 - \frac{\int_{T_m}^{T_\alpha} d\sigma(E, T)}{\int_{T_m}^{T_M} d\sigma(E, T)} \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

avec $T_\alpha^{1/3} = \lambda' E'_a^{1/3}$

et T_M : transfert maximal d'énergie (paragraphe II-1)

b) - P_1 et P_2 sont au point milieu de d_1 et d_2 (figure 14) .

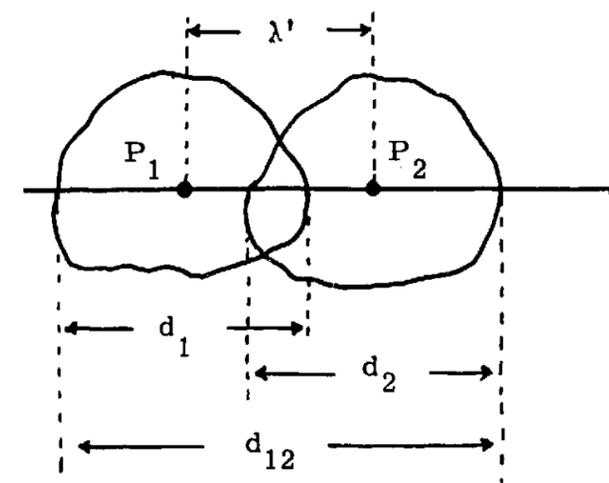


FIGURE 14

On a $d_{12} = \lambda' + \frac{d_1 + d_2}{2}$, et la condition (18) $d_1 + d_2 \geq d_{12}$

devient donc :

$$\lambda' \leq \frac{d_1 + d_2}{2} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{T_1}{E'_a} \right)^{1/3} + \left(\frac{T_2}{E'_a} \right)^{1/3} \right] \quad (29)$$

$$T_1^{1/3} + T_2^{1/3} \geq 2 \lambda' E'_a^{1/3} \quad (29a)$$

le cas présent est moins clair que le cas α ci-dessus : il faut d'une part supposer une trajectoire sensiblement rectiligne de l'ion incident ; d'autre part ce sont ici les portions à distance maximales des points d'impact P_1 et P_2 qui se recouvrent ; ce sont des zones à forte densité d'interstitiels non susceptibles, en particulier, de recombinaison par interférences réciproques.

Mais on verra que les hypothèses α et β conduisent sensiblement aux mêmes résultats numériques.

De même qu'en α , d_1 ainsi que d_2 , sont limités en valeur inférieure à $(T_m/E'_a)^{1/3}$, ce qui conduit de même à $p_z = 1$ pour $\lambda' \leq \lambda'_m = (T_m/E'_a)^{1/3}$.

D'autre part, p_z est la probabilité de réaliser (29a) ;

$p_n = 1 - p_z$ est la probabilité de ne pas réaliser (29a) ;

T_2 étant limité à T_m en valeur inférieure, on a évidemment $p_n = 0$ si $T_1 > T_\beta$ avec $T_\beta^{1/3} = 2 \lambda' E'_a^{1/3} - T_m^{1/3}$; enfin d'autre part, le choc 1 ayant eu lieu avec un transfert donné T_1 , on a aussi, évidemment, $p_n = 0$ si $T_2 > \theta$ avec $\theta^{1/3} = 2 \lambda' E'_a^{1/3} - T_1^{1/3}$

Soit donc :

$$\left. \begin{aligned} \lambda' \leq \lambda'_m &= \left(\frac{T_m}{E'_a} \right)^{1/3} & p_z &= 1 \\ \lambda' > \lambda'_m & p_z = 1 - p_n = 1 - \frac{\int_{T_m}^{T_\beta} dT_1 \left\{ \frac{d\sigma(E,T)}{dT} \int_{T_m}^{\theta(T_1)} \frac{d\sigma(E,T)}{dT} dT_2 \right\}}{\left[\int_{T_m}^{T_m} \frac{d\sigma}{dT}(E,T) dT \right]^2} \end{aligned} \right\} (30)$$

avec $T_\beta^{1/3} = 2 \lambda' E'_a^{1/3} - T_m^{1/3}$

et $\theta(T_1)^{1/3} = 2 \lambda' E'_a^{1/3} - T_1^{1/3}$ (θ varie de T_m à T_β quand T_1 varie de T_β à T_m)

Après d'une part intégration par partie de (26), et d'autre part part compte tenu de $p_z = 1$, $p_n = 0$ pour $\lambda' \leq \lambda'_m$, on a :

$$P_Z(E) = 1 - \int_{\lambda'_m}^{\infty} e^{-\lambda'/\lambda(E)} \frac{dp_n}{d\lambda'} d\lambda' \quad (31)$$

avec $\frac{dp_n}{d\lambda'}$:

$$\frac{dp_n}{d\lambda'} = 3 E'_a \lambda'^2 \frac{\frac{d\sigma}{dT}(E, T_\alpha)}{\sigma(E, T_m)} \text{ suivant (28), hypothèse } \alpha$$

ou bien

$$\frac{dp_n}{d\lambda'} = 6 E'_a^{1/3} \frac{\int_{T_m}^{T_\beta} dT \frac{d\sigma}{dT}(E, T) \frac{d\sigma}{dT}(E, \theta)^{2/3}}{\sigma^2(E, T_m)} \text{ suivant (30), hypothèse } \beta$$

T_α , T_β et θ sont défini relation (28) et (30)

$$\text{et } \sigma(E, T_m) \equiv \int_{T_m}^{T_m} \frac{d\sigma}{dT}(E, T) dT$$

b - formules réduites de calcul

Toutes réductions faites, et en employant les grandeurs réduites définies au paragraphe II-3, on a :

$$\text{avec } q^2 = \eta = \frac{E}{E_0}$$

$$\text{et } a(q) = \frac{\lambda_m}{\lambda(E)} \equiv \frac{\lambda(E_0)}{\lambda(E)} = \frac{1}{q} \frac{\int_1^\infty y^{-5/2} f(y^{3/2} u_0 q) dy}{\int_1^\infty y^{-5/2} f(y^{3/2} u_0) dy}$$

dans l'hypothèse α (figure 13)

$$P_Z(\eta) = 1 - \frac{\int_1^\infty y^{-5/2} f(y^{3/2} u_0 q) e^{-a(q)y} dy}{\int_1^\infty y^{-5/2} f(y^{3/2} u_0 q) dy}$$

et dans l'hypothèse β (figure 14)

$$P_Z\left(\frac{E}{E_0}\right) = 1 - 4 \frac{\int_1^\infty dt \left\{ \frac{e^{-a(q)t}}{t^4} \int_0^{1-\frac{1}{t}} dx \frac{f((1+x)^{3/2} t^{3/2} u_0 q) f((1-x)^{3/2} t^{3/2} u_0 q)}{(1+x)^{5/2} (1-x)^{5/2}} \right\}}{\left[\int_1^\infty y^{-5/2} f(y^{3/2} u_0 q) dy \right]^2}$$

et on rappelle

$f(x)$: donné figure A8 (annexe II)

E_0 : énergie de référence (Tableau 5)

u : $\frac{\mu}{2ZZ'e^2} \sqrt{\frac{m}{m'}} \sqrt{E T_m}$ (relation (6))

u_0 : $\sqrt{E_0 T_m}$

c - discussion et résultats numériques :

a) Le paramètre u_0 (expression réduite de $(E_0 T_m)^{1/2}$) dépend de la définition des chocs considérés et donc du choix de T_m .

On a déjà postulé $T_m = E_f$, à propos du critère de recouvrement (paragraphe IV-1-a). Le paramètre u_0 devient alors u_f , qui varie dans l'intervalle $(2,5 \cdot 10^{-2} ; 0,4 \cdot 10^{-2})$ (voir tableau A3, annexe III). Le choix $T_m = E_d$ conduirait à $u_0 = u_d$ et étendrait l'intervalle de variation à $(4 \cdot 10^{-2}, 10^{-3})$, ce qui reste un intervalle limité.

b) P_Z est calculé numériquement en calculateur électronique.

Les hypothèses α et β conduisent chacune aux mêmes valeurs de P_Z , à la précision du calcul près. On obtient en effet :

u_0	10^{-3}		10^{-2}				10^{-1}	
η	1	10^3	1	10	10^2	10^3	1	10^3
$P_Z \left\{ \begin{array}{l} \alpha \\ \beta \end{array} \right.$	0,84	0,14	0,82	0,50	0,19	0,047	0,79	0,009
	0,87	0,14	0,84	0,52	0,19	0,045	0,80	0,009

TABLEAU 7

Il est très satisfaisant que les deux hypothèses α et β , qui enveloppent sans doute la réalité, conduisent aux mêmes résultats

γ) La figure 16 donne les résultats obtenus, P_Z étant alors calculé suivant l'hypothèse α qui permet des temps de calcul plus courts que l'hypothèse β :

- $P_Z(\eta) \rightarrow 1$ pour $\eta < 0,1$, mais il ne faut pas oublier que P_Z redevient nul pour $\eta < \eta_f$ (qui correspond à E_f). Le tableau A3, (annexe III) donne η_f qui varie sensiblement de 10^{-2} à $2 \cdot 10^{-3}$ quand le nombre atomique Z du corps considéré varie de 6 à 92.

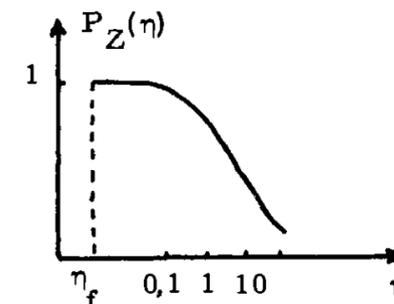


FIGURE 15

Le domaine $\eta < 1$, ($E < E_0$) est celui où la section efficace universelle employée ici n'est plus valable, et ceci d'autant moins que η est plus petit (paragraphe IV-2-a et figure 9). Mais c'est justement un domaine où $P_Z \sim 1$; et le calcul, qui porte en fait sur $1 - P_Z$ (voir (31)), peut comporter une erreur relative grande, sans pourtant avoir d'incidence notable sur $P_Z(E)$

- $P_Z(\eta) \rightarrow 0$ pour η grand, mais le produit $\eta P_Z(\eta)$ reste fini.

Sa valeur asymptotique est donnée figure 16 bis. Mais il ne faut pas oublier ici que η n'est pas l'énergie de la ZD, lorsque avec la probabilité $P_Z(\eta)$, il y a ZD. En effet, pour de grandes énergies, il y a ionisation, essentiellement ionisation, et l'énergie donnée au réseau (ici à la ZD) est petite (voir paragraphe V-2-b- β). De plus le recouvrement de 2 chocs successifs n'implique pas automatiquement le recouvrement des chocs suivants, particulièrement à η grand. Il y a alors morcellement en plusieurs ZD successives.

Les figures 16 et 16 bis envisagent une variation complète de u_0

entre 0 et l'infini. On a vu que c'est en fait la zone voisine de $u_0 = 10^{-2}$ qui nous intéresse. On voit que pour une énergie $\eta = 10, (E = 10 E_0)$, on a une chance sur deux de réaliser une ZD ; cette probabilité devient :

$P_Z = 0,82$ pour $\eta = 1$, et $P_Z \sim 1$ pour $\eta < 0,1$.

d - Remarques :

- Nombre de ZD

Il y a en principe une ZD créée directement par une particule incidente à un niveau donné de son ralentissement, niveau réparti en probabilité suivant $P_Z(\eta)$. Mais indirectement, c'est à dire à partir des primaires déplacés hors ZD, il peut y avoir création d'autres ZD. De plus, pendant le ralentissement de la particule incidente, le recouvrement de 2 chocs successifs est de plus en plus probable ; il est donc probable, mais non certain qu'après recouvrement de deux chocs successifs, le recouvrement se prolonge entre chocs suivants. Il peut y avoir morcellement de la ZD.

Il y a donc en fait une ou plusieurs ZD par particule incidente.

- Energie de ZD

L'énergie créant des ZD pendant le ralentissement d'une particule incidente à l'énergie η s'écrit :

$$\int_{\eta_f}^{\eta} P_Z(\eta') d\eta'$$

Là aussi, il s'agit d'un schéma simplifié, qui ne tient pas compte de l'énergie supplémentaire des ZD créés indirectement par primaires déplacés, ni de l'énergie perdue par morcellement éventuel de la ZD principale.

- On définit $\mathcal{P}(\eta) \simeq \frac{1}{\eta} \int_{\eta_f \sim 0}^{\eta} P_Z(\eta') d\eta'$. C'est, dans un schéma

simplifié à une seule ZD, sans ZD indirecte et sans morcellement, la proportion de l'énergie incidente η qui, en moyenne, sera absorbée par le solide dans la création d'une ZD.

$\mathcal{P}(\eta)$ est évidemment supérieur à $P_Z(\eta)$. \mathcal{P} est donné figure 17 en fonction de P_Z

$\mathcal{P}(\eta)$ est une approximation du rendement $\mathcal{P}_T(\eta)$, rendement réel

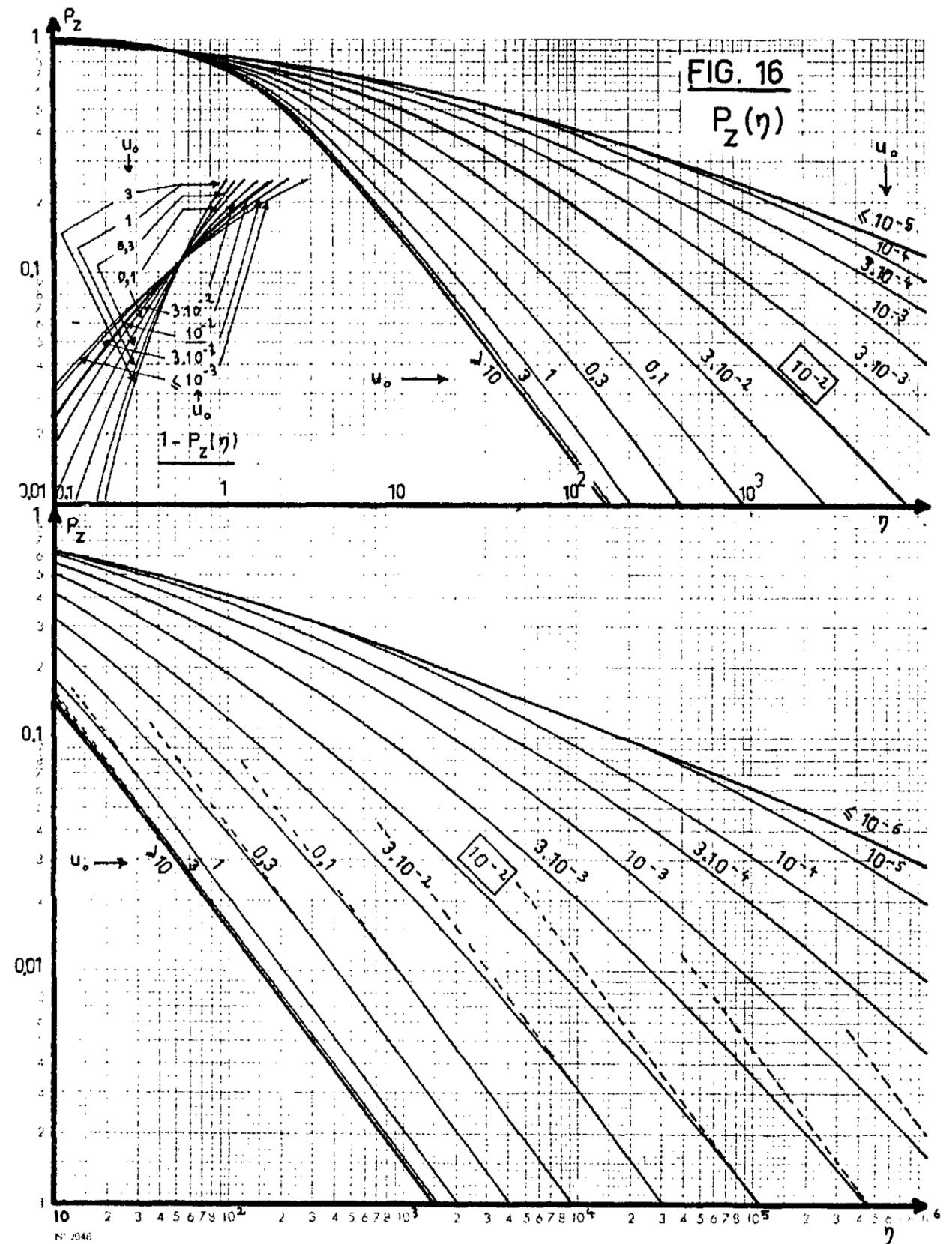


figure 16

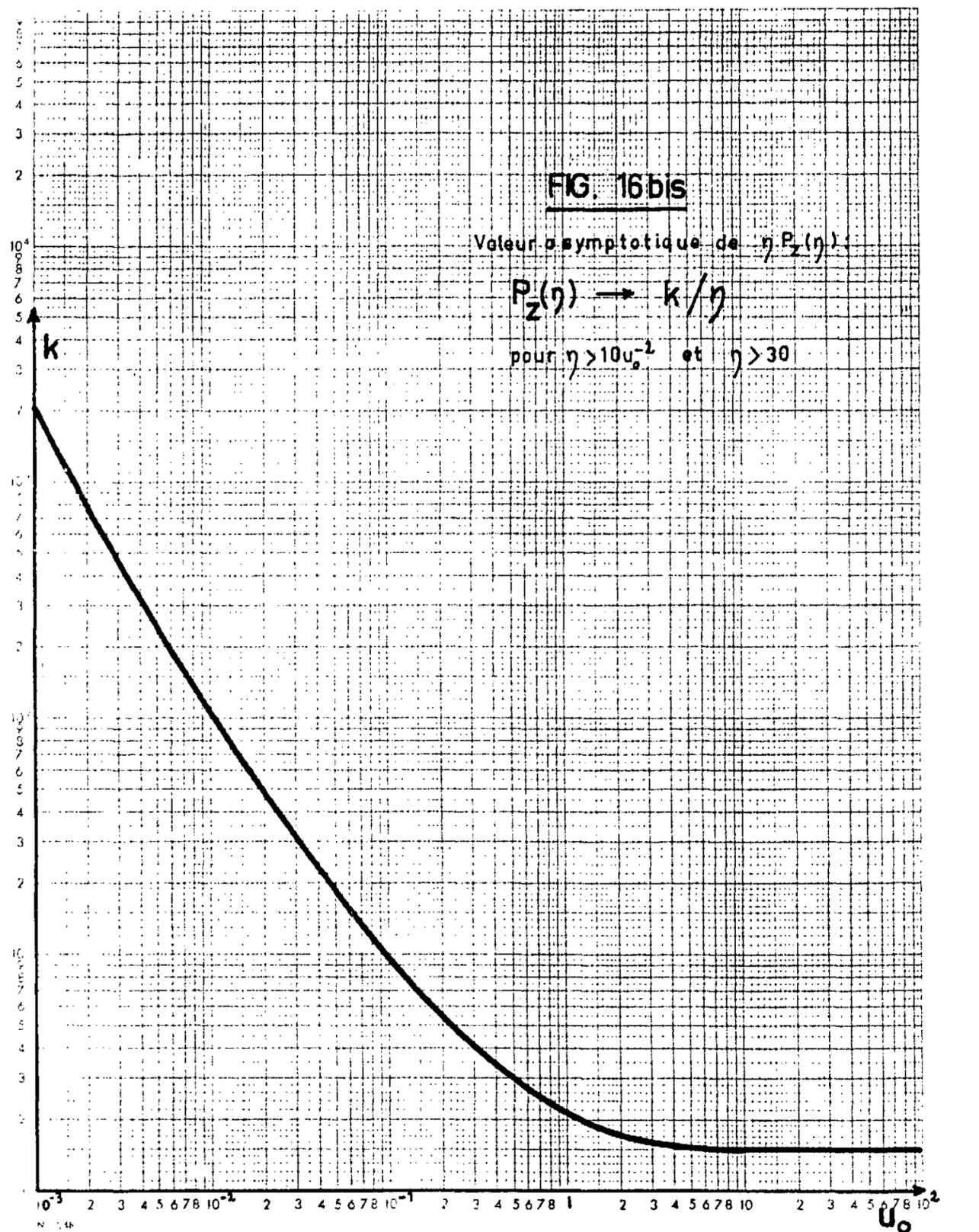


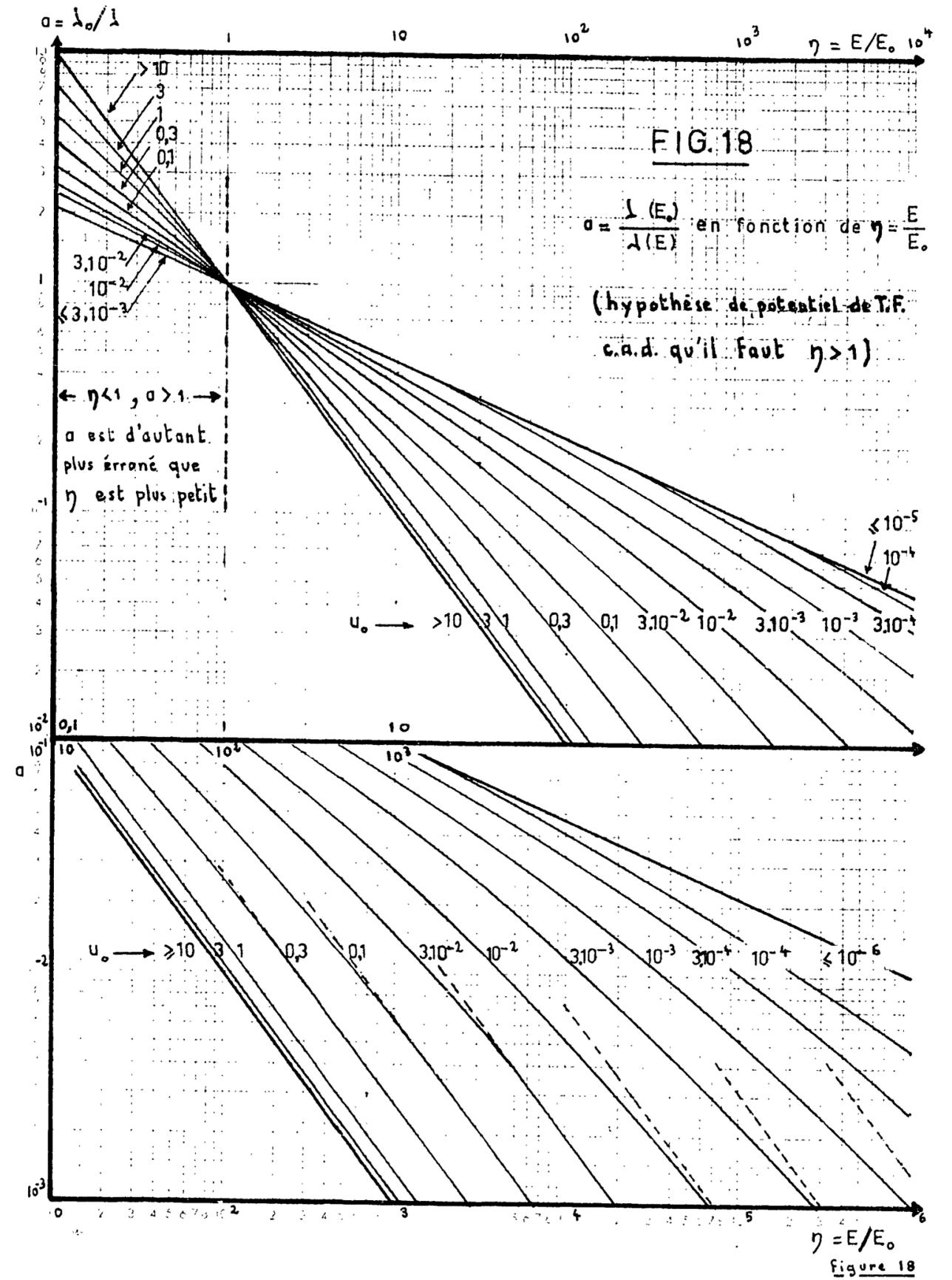
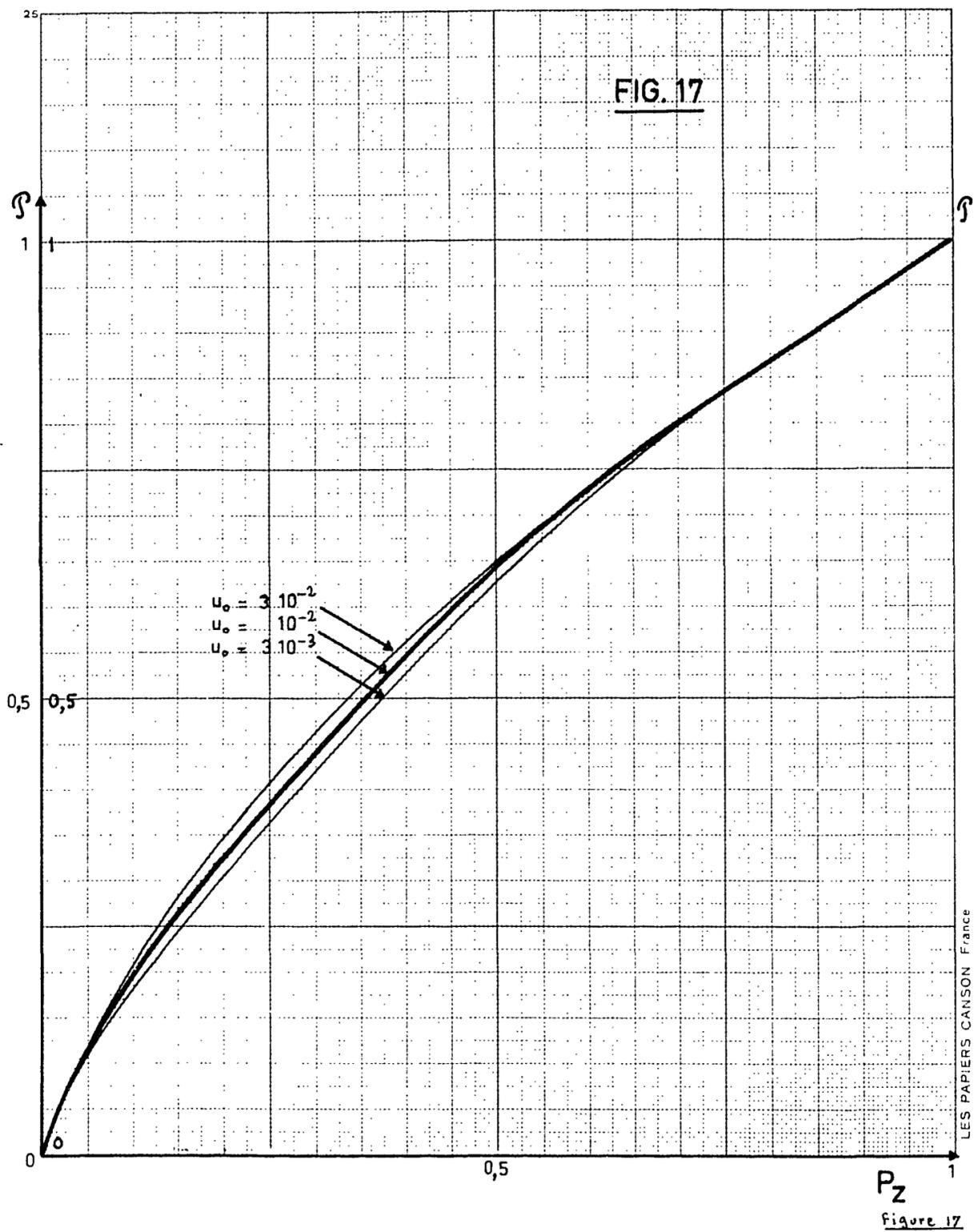
figure 16 bis

total en énergie de ZD, compte tenu des phénomènes secondaires

e - à toutes fins utiles, la figure 18 donne

$$a(\eta) = \frac{\lambda(E_0)}{\lambda(E)}$$

On rappelle que le calcul est fait sur la base du potentiel universel de Thomas-Fermi ; les résultats ne sont donc valables que dans le domaine de validité de ce potentiel ; ils sont erronés pour $\eta < 1$, c'est à dire $a > 1$, et ce, d'autant plus que η est plus inférieur à l'unité.



V - ASPECTS EXPERIMENTAUX - DISCUSSION

1° - Le volume de la zone de déplacements

Le volume de la ZD varie comme E_a^{-1} , par définition même de E_a (paragraphe I. 3. d) ; de même l'énergie de référence de ZD, E_o , varie sensiblement comme E_a^{-1} (paragraphe IV. 2). L'énergie E_a est donc une quantité particulièrement importante dans la description du phénomène de ZD, et de sa probabilité.

On a pris ici, suivant les estimations de BRINKMAN (1) et les calculs de BEELER (6), $E_a = 1 \text{ à } 2^{eV}$ (voir paragraphe I. 3. d) ; plus précisément, on a pris $0,7 E_a = E'_a = 1^{eV}$, (paragraphe IV. 1. a). Dans quelle mesure l'expérience permet-elle de juger de cette valeur ?

a) - Observation directe des défauts créés :

On a déjà cité en introduction les expériences de M. J. ATTARDO et J. M. GALLIGAN (22), qui permettent d'observer le résultat final de la zone de déplacements. L'observation se fait sur platine irradié, au microscope à émission d'ions et avec évaporation ionique de couches monoatomiques. On estime voir ainsi les défauts qui apparaissent bien ici sous forme de zones lacunaires. La température d'irradiation n'est malheureusement pas précisée, mais il s'agit probablement de la température ambiante, puisque, conformément aux résultats de BEELER, après simulation de recuit, on n'observe pas de monolacune ou de bilacune.

La plus grande longueur des zones ainsi observées a été mesurée. Nous admettons que le diamètre initial des zones de déplacement est d'environ deux fois cette longueur, ce facteur 2 étant estimé par comparaison des résultats de BEELER (6), avant et après simulation de recuit à température T définie par $-153 < T < 250 \text{ }^\circ\text{C}$.

Les longueurs mesurées se répartissent entre 10 \AA et 40 \AA , soit des diamètres de zone de déplacements de 20 \AA à 80 \AA , soit enfin respectivement des volumes de $3 \cdot 10^2$ à $2 \cdot 10^4$ atomes.

Sur la base de $E_a = 1,5^{eV}$, on a donc des énergies de primaires comprises entre 450^{eV} et 30.000^{eV} , c'est à dire en moyenne des énergies de neutrons variant de 45^{keV} à 3^{MeV} .

Cette gamme d'énergie est la plus vraisemblable dans l'emplacement d'irradiation utilisé en pile au graphite où le spectre énergétique de neutrons varie en $1/E_n$ pour les énergies E_n de neutrons inférieures à environ 1 MeV, puis décroît beaucoup plus vite à plus haute énergie (23). Une valeur de 3^{MeV} est donc une limite supérieure équivalente très raisonnable dans ce cas. La limite inférieure de 45^{keV} n'est pas une limite de répartition de neutrons, mais plutôt une limite de leur efficacité quant au phénomène considéré.

Cette confirmation expérimentale de la valeur $E_a \sim 1,5^{eV}$ est en fait très hasardeuse : nous avons été amenés à introduire un facteur 2 dans le diamètre des zones, facteur très incertain qui pourrait aussi bien être plus grand que plus petit, et qui intervient à la puissance 3 dans la détermination de E_a .

b) Le volume de la pointe de fission

Lors de la fission d'un noyau d'Uranium, sur les 162 MeV libérés en énergie cinétique, 153 MeV sont cédés en ionisation, et 9 MeV seulement sont cédés au réseau Uranium (11).

On calcule que parmi les atomes primaires mis en mouvement, une proportion très faible atteint une énergie supérieure à 100^{keV} ; a fortiori leur énergie est elle inférieure à l'énergie $E_o = 920^{keV}$ dans l'Uranium.

La quasi totalité des 9 MeV cédés au réseau Uranium provoquera donc ZD.

(Suivant BRINKMAN (3), il y aurait 70^{MeV} cédés au réseau, dont 19 MeV en ZD ; nous avons vu que nous ne retenons pas les potentiels de BRINKMAN, et nous ne retenons donc pas ces derniers résultats, qui en découlent).

Si le ralentissement a lieu dans un autre corps que l'Uranium, on calculera l'énergie de ZD sachant qu'elle est sensiblement proportionnelle au nombre de masse du corps considéré, pour ce domaine d'énergie, grande, de particules en ralentissement (11).

Le volume de la pointe de fission a fait l'objet de mesures. Pour chaque type de mesure, ce volume se définit en fait comme le volumed'action de la ZD sur le paramètre physique considéré ; le volume de la pointe de fission n'est donc qu'une approximation du volume de la ZD, approximation qui dépend du type de mesure faite.

Les effets de saturation, en particulier, peuvent s'interpréter à partir du volume d'une pointe de fission : c'est ici le volume dans lequel chaque fission recuit tous les défauts antérieurs. Y. QUERE et F. NAKACHE (24) trouvent ainsi dans un Uranium métal, un volume de 10^7 atomes.

S'il y a amorphisation, d'autre part, le volume de la pointe de fission se définit comme le volume rendu amorphe, dans le cristal, par une fission. J. BLOCH (25) étudie ainsi l'amorphisation d'un alliage $U_6 Fe$, ce qui conduit à un volume de $2 \cdot 10^7$ atomes. LESUEUR (26) trouve un volume d'amorphisation de $1,3 \cdot 10^6$ atomes par fission pour un ralentissement se produisant dans un alliage Pd-Si.

Soit en récapitulation :

Paramètre physique	Volumed'action de la fission	énergie par fission	E_a
saturation (résistivité Uranium métal)	10^7 atomes	9 MeV	$0,9^{eV}$
amorphisation ($U_6 Fe$)	$2 \cdot 10^7$ atomes	~ 8 MeV	$0,4^{eV}$
amorphisation (Pd-Si)	$1,3 \cdot 10^6$ atomes	$\sim 4,5$ MeV	$3,5^{eV}$

Tableau 8

On voit que E_a est assez mal déterminée. Les mesures d'amorphisation donnent des résultats ($0,4^{eV}$ et $3,5^{eV}$) qui encadrent la valeur $E_a = 1,5^{eV}$ que nous avons employée dans nos calculs, tout en laissant une grande marge d'incertitude, d'un facteur 2 à 3.

Quant à la guérison d'un défaut simple (mesures de résistivité et saturation), elle demande une énergie plus faible que celle nécessaire à un déplacement dans la ZD. Le volume de recuit dû à la fission est donc une

estimation par excès du volume de la ZD ; la valeur correspondante, $E_a = 0,9^{eV}$ est donc une estimation par défaut de E_a . Ce résultat est cohérent avec la valeur adoptée ($E_a = 1,5^{eV}$) mais demeure, de même que les mesures d'amorphisation, impuissant à la préciser.

c) Transformation ordre-désordre sous neutrons rapides

L. R. ARONIN (27) a étudié la variation d'ordre par irradiation, sous neutrons, d'alliage Nickel-Manganèse. Il a utilisé par ailleurs les résultats de S. SIEGEL (28) relatifs à des irradiations de Cu_3-Au .

Par interprétation de mesures physiques (résistivité électrique et induction magnétique), il détermine, en fonction de l'irradiation, la variation de S, le paramètre d'ordre à grande distance de BRAGG et WILLIAMS.

On montre que ce paramètre est une fonction $S = S_0 e^{-\int K dt}$ du nombre K d'atomes déplacés par unité du temps t. On peut donc ainsi mesurer le nombre K d'atomes déplacés par unité de temps, qui s'exprime d'autre part :

$$K = \frac{1}{E_{cd}} \int_{E_{min}}^{\infty} dE_n \varphi(E_n) w(E_n) \quad (32)$$

où :

$\varphi(E_n)$ est le flux de neutrons, par unité d'énergie, à l'énergie E_n
 $w(E_n)$ est l'énergie cédée au réseau, en moyenne, par le flux unité de neutron d'énergie E_n . ($w(E_n)$ tient compte en particulier des statistiques du choc neutronique, isotrope ou non, et de la proportion d'énergie cédée en ionisation dans le ralentissement des primaires) (29)

E_{cd} est l'énergie moyenne par atome déplacé (voir paragraphe I.3.d).

ARONIN, d'autre part, mesure le flux de neutrons thermiques ϕ_{th} , et, adoptant une valeur "moyenne" $\bar{\sigma}$ de la section efficace de choc neutronique $\sigma(E_n)$, il donne ses résultats sous la forme :

$$\frac{K}{\bar{\sigma} \phi_{th}} = 1,700 \quad (33)$$

Connaissant l'emplacement d'irradiation, qui est un emplacement d'élément combustible, vide, dans une pile à graphite, le spectre $\varphi(E)$ peut être défini (voir (29) et (23)); l'expression (32) de K est alors explicitée, suivant (29) :

$$K \sim \frac{0,55 \cdot 10^5}{E_{cd}} \sigma_r \phi_r \quad (34)$$

avec E_{cd} en eV

$$\phi_r = \int_{1 \text{ MeV}}^{\infty} \varphi(E) dE$$

$$\sigma_r = \int_{1 \text{ MeV}}^{\infty} \sigma(E) \varphi(E) dE / \phi_r$$

Le rapprochement de la mesure (33) et du calcul (34) conduit à :

$$E_{cd} = 32^{eV} / \alpha$$

avec

$$\alpha = \frac{\bar{\sigma} \phi_{th}}{\sigma_r \phi_r} \sim \frac{\phi_{th}}{\phi_r}$$

D'après des estimations d'ARONIN, on aurait $\alpha \sim 5$; notre connaissance actuelle des piles en graphite (30) et (31) nous conduirait à prendre plutôt $\alpha \sim 16$, soit :

$$E_{cd} \sim 6 \text{ à } 2^{eV} \quad \text{énergie par atome déplacé}$$

Il faut encore estimer dans le cas de la ZD la teneur de celle-ci en atomes déplacés. On a vu, au paragraphe I. 3. d, que les atomes choqués sont environ 2,5 fois plus nombreux que les atomes déplacés, d'après BEELER (6).

$$E_c \sim 2,5 \text{ à } 0,8^{eV} \quad \text{énergie par atome choqué}$$

On a vu de même, d'après BEELER, que la densité en atomes choqués est sensiblement 1/2 dans la ZD, soit :

$$E_a \sim 1,3 \text{ à } 0,4^{eV}$$

La vérification expérimentale de E_{cd} pourrait être considérée ici comme assez sûre, si le facteur α était bien connu. Non mesuré à l'époque de l'expérience (1953), ce facteur pourrait l'être très facilement aujourd'hui. Il serait même inutile de mesurer ϕ_{th} et la mesure de ϕ_r , possible aujourd'hui, permettrait de faire intervenir ce dernier flux directement dans (33), à la place de ϕ_{th} qui n'a pas de raison physique de figurer dans cette étude (si ce n'est qu'il a pris, mal, la place du ϕ_r non mesurable alors).

On sait assurément calculer ce facteur α aujourd'hui ; encore faudrait-il être sur des conditions exactes de l'expérience, le flux ϕ_{th} en particulier étant susceptible de variations importantes suivant les matériaux environnant, ou constituant, l'expérience.

Le passage de E_{cd} à E_a n'a, quant à lui, rien d'expérimental, puisqu'il découle directement des calculs de BEELER.

Les résultats de S. SIEGEL (28), relatif à un alliage Cu_3 -Au, conduisent à :

$$\frac{K}{\int_{0,05 \text{ MeV}}^{\infty} \sigma(E) \varphi(E) dE} = 6.000 \quad (35)$$

Une indétermination importante étant sûrement attachée au terme

$$\int_{0,05 \text{ MeV}}^{\infty} \sigma \varphi dE$$

On ne dispose d'aucun renseignement sur l'emplacement d'irradiation et le spectre de neutrons qui y règne ; mais deux cas, extrêmes en ce qui nous intéresse, sont le cas du spectre de la pile à eau légère, et le cas de l'irradiation précédente dans une pile au graphite.

Les calculs menés dans ces deux cas conduisent à :

$$E_{cd} \sim 2 \text{ à } 3^{eV}$$

Ce résultat est compatible avec le précédent, mais soumis à une incertitude grande : on voit mal comment, à l'époque de l'expérience, on a pu connaître, avec quelque précision, le flux $\phi (0,05 \text{ MeV}) = \int_{0,05 \text{ MeV}}^{\infty} \phi(E) dE$

A cette valeur de E_{cd} correspond, avec les mêmes hypothèses que précédemment (utilisation des résultats de BEELEER):

$$E_a \sim 0,5 \text{ eV}$$

d) Conclusions

Ni l'observation "directe", ni l'utilisation des mesures de pointe de fission ne permettent la détermination de E_a et du volume de la ZD ; les résultats obtenus sont trop indéterminés pour confirmer la valeur $E_a = 1,5 \text{ eV}$ adoptée dans les calculs précédents.

L'étude de la transformation ordre-désordre sous neutrons-rapides ne conduit pas ici à des renseignements plus précis. Mais il serait probablement possible de refaire l'expérience aujourd'hui avec beaucoup plus de certitude (mesure correcte des flux neutroniques $\phi(E)$).

Les valeurs de E_a obtenues s'échelonnent entre $3,5 \text{ eV}$ et $0,4 \text{ eV}$; si les indéterminations de mesure en sont pour une part la cause, il est très probable que, d'autre part, il n'y a pas une valeur unique de E_a ; suivant la structure plus ou moins périodique du corps, en particulier, la focalisation intervient plus ou moins, le volume de la ZD est plus ou moins grand ; en conséquence on trouvera une valeur de E_a nettement plus grande dans un corps non structurée, que dans un cristal.

La valeur $E_a = 1,5 \text{ eV}$ adoptée dans les calculs précédents n'est pas infirmée par ces résultats ; c'est peut être une valeur un peu grande, et susceptible, suivant les cas d'être notablement diminuée pour des corps bien structurés (jusqu'à $E_a \sim 0,4 \text{ eV}$?).

2° - Le nombre de déplacements stables

a) Valeurs absolues des nombres de déplacements stables

On sait (32) que les calculs de variation de résistivité électrique, sur la base de défauts ponctuels indépendants, aboutissent à des résultats plus de dix fois supérieurs à ceux de l'expérience.

Les interférences dans la zone de déplacements permettent de rendre compte sensiblement de cet écart (6) : à 0 °K, les volumes de recombinaison, qui sont de l'ordre de 30 volumes atomiques, conduisent à des interférences dans plus de la moitié des cas, et le nombre de déplacements stables est divisé par 2,5 environ. De plus, lorsque la température croît on constate une croissance des volumes de recombinaison jusqu'à 100 volumes atomiques et même plus.

On atteint ainsi facilement une réduction d'un facteur 10 du nombre de déplacements stables créés.

Les calculs de volumes de recombinaison évoqués ici sont essentiellement ceux de J. BEELEER, qui prévoit des études plus quantitatives dans l'avenir en ce qui concerne l'effet de température.

Il y aurait là une vérification expérimentale qualitative du phénomène de ZD.

En fait, en dehors de toute ZD, le phénomène de focalisation peut rendre compte aussi de cette réduction : une valeur $E_f = 500 \text{ eV}$, assez plausible, rapprochée de $2 E_d = 50 \text{ eV}$, rend tout à fait compte d'une diminution d'un facteur 10 du nombre de déplacements stables, qu'on peut prendre égal à E/E_f au lieu de $E/2 E_d$ (compte non tenu d'ionisation ou de ZD, et E étant l'énergie de primaire).

b) Variation du nombre de déplacements stables, en fonction de l'énergie de primaire E :

Le fait de considérer E_f au lieu de E_d , diminue le nombre de déplacements stables d'un facteur constant et indépendant de E (à la condition $E \gg E_f$ et $E \gg E_d$)

Au contraire, la ZD intervient d'autant plus que l'énergie E est plus petite. La diminution correspondante du nombre de déplacements stables est donc d'autant plus grande que E est petit (dans le domaine $E > E_f$). C'est là un effet non susceptible d'être, comme précédemment (paragraphe ci-dessus) expliqué par un phénomène de focalisation.

De façon plus complète, les rendements en déplacements stables sont la résultante de deux effets qui tendent à se compenser ; l'un, correspondant à la ZD, croît avec l'énergie E, comme on vient de le voir ;

l'autre, correspondant au ralentissement par ionisation, est fonction décroissante de l'énergie.

a) Effet de ZD

Soit $\mathcal{P}_T(E)$ le rendement global énergétique, relatif au ralentissement complet d'une particule initialement à l'énergie E, et définissant la proportion de cette énergie qui, directement ou indirectement (à partir de secondaires, de tertiaires etc.), conduit à ZD (paragraphe IV.4. c)

- Pour la proportion $[1 - \mathcal{P}_T(E)]$ de l'énergie E, les déplacements sont indépendants et stables ; on a :

$$\frac{\text{nombre de déplacements}}{E} = K [1 - \mathcal{P}_T(E)]$$

avec K de l'ordre de E_f^{-1} ou $[2 E_d]^{-1}$, (modèle de création en cascade de paires lacune-interstitiel indépendantes), soit, comme ordre de grandeur $K \sim 10^{KeV-1}$

- Pour la proportion $\mathcal{P}_T(E)$ de l'énergie E, il y a réduction du nombre des déplacements stables par interférence dans les ZD ; K devient K_{ZD} , avec, à titre d'exemple, d'après BEELER (6), pour le Fer α ,

$$K_{ZD} / K = (1 - 0,0419 \text{ Log } \frac{E}{E'}) K_0 / K, \text{ avec } E' = 1 \text{ KeV}$$

$$K_0 / K = 0,5 \text{ à } 0^\circ K$$

$$K_0 / K \sim 0,1 \text{ pour fixer les idées, à T ambiante}$$

(N.B. l'effet de température est ici uniquement d'accroître les volumes de recombinaison ; il s'agit donc du nombre de défauts stables avant toute migration thermique aléatoire).

- Au total, on a donc :

$$\frac{\text{nombre de déplacements}}{E} = K [1 - \mathcal{P}_T(E) (1 - \frac{K_{ZD}}{K})]$$

ce qui est une fonction croissante de E.

Il n'est pas tenu compte ici du ralentissement par ionisation, qu'on envisage ci-dessous.

\beta) Effet de ralentissement ionisant

On sait qu'à haute énergie de particule incidente, les chocs ne sont plus élastiques et qu'il faut faire intervenir l'ionisation, dans une proportion $\mathcal{P}_i(E)$ de l'énergie E, $\mathcal{P}_i(E)$ étant fonction croissante de E.

L'interaction élastique avec les atomes n'a lieu alors que dans la proportion $[1 - \mathcal{P}_i(E)]$, proportion qui, à l'inverse de ce qu'on vient de voir plus haut (terme de ZD), décroît avec l'énergie E.

LINDHARD (11) a traité cette question de bipartition de l'énergie E en ralentissement électronique et en ralentissement atomique, sur la base de potentiels de THOMAS-FERMI.

Un ajustement par moindres carrés permet, en particulier, de représenter les courbes de LINDHARD, données pour des primaires en (11), par :

$$1 - \mathcal{P}_i(E) = \frac{\text{Log}(1 + \omega \epsilon)}{\omega \epsilon}$$

pour des primaires et pour $0,5 \leq \epsilon \leq 10$

$$\text{et avec } \epsilon \text{ énergie réduite, } \epsilon = E \frac{\mu}{2Z^2 e^2} = 0,313 Z^{-7/3} \left(\frac{E^{eV}}{27,2} \right)$$

$$\omega = k (3,31 + 15,0 k)$$

$$k = 0,133 Z^{2/3} M^{-1/2}$$

M nombre de masse

k est de l'ordre de 0,15 ; 0,157 pour le Fer

ω est de l'ordre de 1 ; 0,89 pour le Fer

(N.B. : les différents documents (11) ne sont pas exactement cohérents ;

l'ajustement est fait ici à partir de la publication AIEA ; cet ajustement serait à corriger en majorant de 4 % la grandeur $[1 - \mathcal{P}_i(E)]$, pour rendre compte au mieux des publications Mat. Fys. Medd.)

\gamma) Effet total résultant de l'effet de ZD et de l'effet d'ionisation

Si N_{L-I} est le nombre de déplacements stables, c'est à dire le nombre de paires lacune-interstitiel formées, on a évidemment :

$$N_{L-I} = EK \cdot [1 - \mathcal{P}_i(E)] \cdot [1 - \mathcal{P}_T(E) (1 - \frac{K_{ZD}}{K})]$$

\downarrow cascade simple de défauts indépendants. \downarrow effet d'ionisation \downarrow effet de ZD

La figure 19 montre, en exemple, comment varient dans le cas du Fer α les deux effets opposés, d'ionisation et de ZD, et leur produit (on a pris $\int_T \sim \Phi$). Il faut noter ici qu'il s'agit de défauts produits avant toute migration thermique aléatoire ; c'est un bilan net d'aptitude du primaire à déplacer des atomes, "stables" à la fin de la cascade : l'effet de température est uniquement ici d'accroître les volumes de recombinaison ; c'est à dire que ne sont pas décomptées comme paires L-I stables celles dont le sort, en température, n'est pas aléatoire, mais bien prédéterminé (annihilation) parce que la distance L-I est trop faible.

On voit que l'effet d'ionisation est très diminué à 0 °K et même inversé à la température ambiante.

Si l'on s'en tient aux irradiations en neutrons de pile, l'énergie E de primaire ne dépasse guère 2 à 3 10^5 eV.

Il n'y a alors pratiquement pas de décroissance de rendement WIGNER aux grandes énergies. En fait même, pour la plupart des irradiations, qui se font à une température non nulle, c'est une croissance de rendement qu'il faut envisager.

Cet effet de zone de déplacement est donc assez sensible ; une étude expérimentale à partir d'irradiations en neutrons de pile à répartitions spectrales énergétiques diverses (voir (29) par exemple) devrait pouvoir mettre en évidence un tel effet, confirmer ou infirmer ces conclusions, voire même permettre une détermination de E_a .

La mesure de variation de résistivité électrique, induite par irradiation, permet particulièrement bien cette étude ; les effets recherchés seront même majorés dans ce cas ; en effet, non seulement la ZD conduit à un nombre de déplacements diminué, mais aussi à des groupements de lacunes en multilacunes dont l'effet en résistivité est moins grand que celui du même nombre de lacunes, réparties en monolacunes. Des premiers résultats d'études en cours, sur le tungstène irradié en pile, vont tout à fait dans ce sens : l'effet des hautes énergies de neutron est très majoré, par rapport à ce que donnerait un modèle n'impliquant pas de ZD.

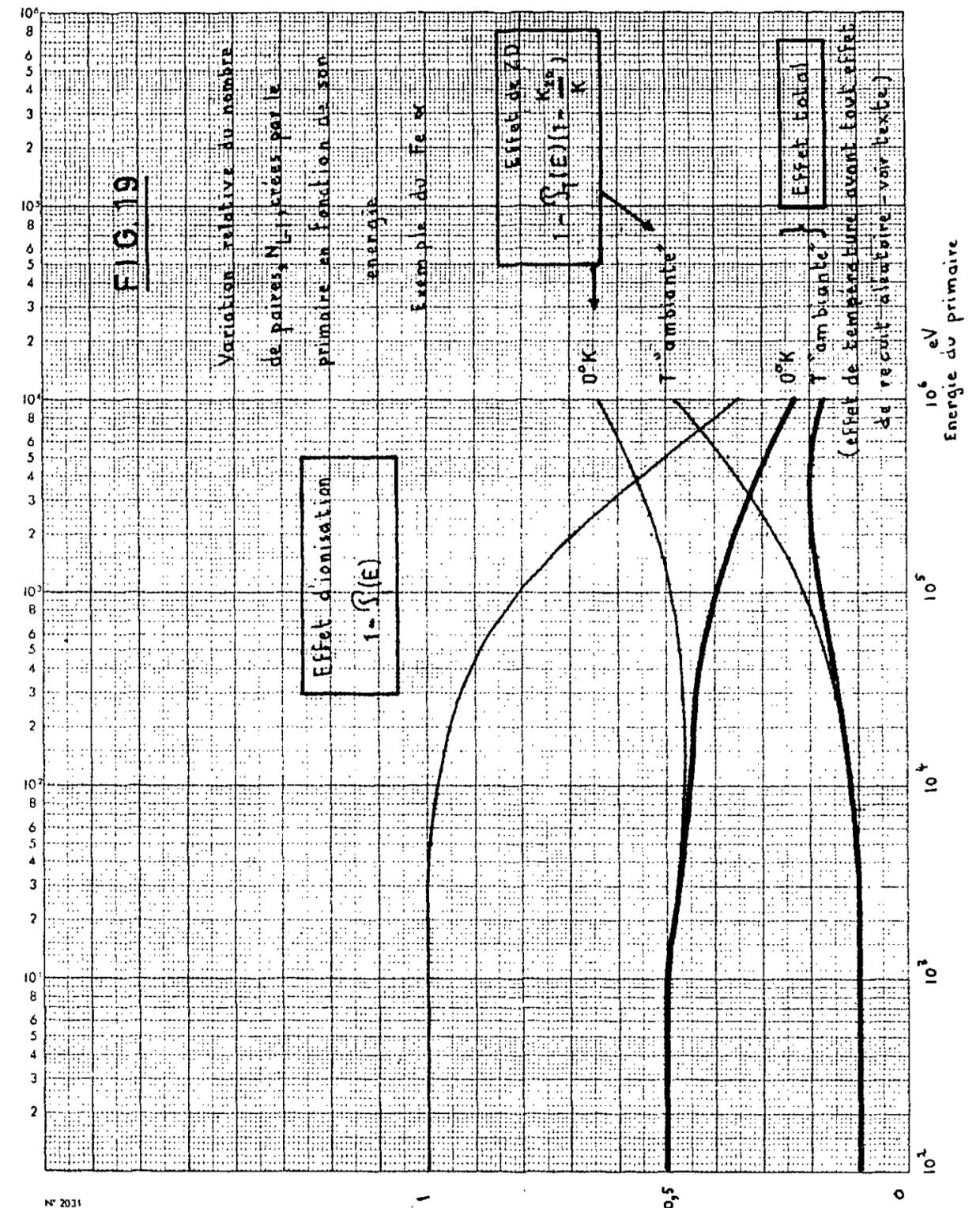


Figure 19

3° - Zones de SEEGER et durcissement des métaux (4)

On sait que la zone de SEEGER est la zone appauvrie qui est le produit final de la ZD, à température ambiante par exemple : les interstitiels ont disparu par migration thermique ; la zone lacunaire centrale demeure après regroupement des lacunes en multilacunes, et conduit à la zone appauvrie dite de SEEGER.

On sait, que, suivant le modèle de SEEGER, chaque zone appauvrie est un obstacle au glissement des lignes de dislocations dans les métaux et contribue donc à leur durcissement.

L'analyse du durcissement d'un métal irradié en neutrons de pile, l'accroissement de limite élastique en particulier devrait permettre de déterminer des caractéristiques de ZD.

En fait, dans le modèle de SEEGER, toutes les zones ont la même influence, quelle que soit leur taille, dès lorsqu'elles existent ; et, au cours de son ralentissement, tôt au tard, chaque primaire induira une ZD, et une seule si l'on néglige, à grande énergie de primaire, les grands transferts d'énergies qui sont peu probables, et qui pourraient conduire à des ZD supplémentaires indépendantes.

Dans ces conditions, le nombre de zones de SEEGER et les variations consécutives de propriétés physiques ne dépendent que du nombre de primaires, c'est à dire du nombre de chocs neutroniques. Les paramètres de probabilité de ZD, c'est à dire essentiellement E_o , et en conséquence E_a , n'ont dans ce modèle, aucune incidence. Par contre, il est forcément une limite inférieure en taille des zones appauvries à retenir. On peut donc voir là une méthode de mesure de taille minimale de ZD, en ce qui concerne les effets étudiés ici. Les primaires n'étant donc à considérer qu'au-dessus d'une certaine énergie, les neutrons ne sont alors à considérer qu'au-dessus d'une certaine énergie ; soit E_m cette énergie.

Etant donné la répartition spectrale $\varphi(E)$ des flux de neutrons de piles dites thermiques, l'intégrale $\int_{E_{min}}^{\infty} \varphi(E) dE$ est très sensible à E_{min} .

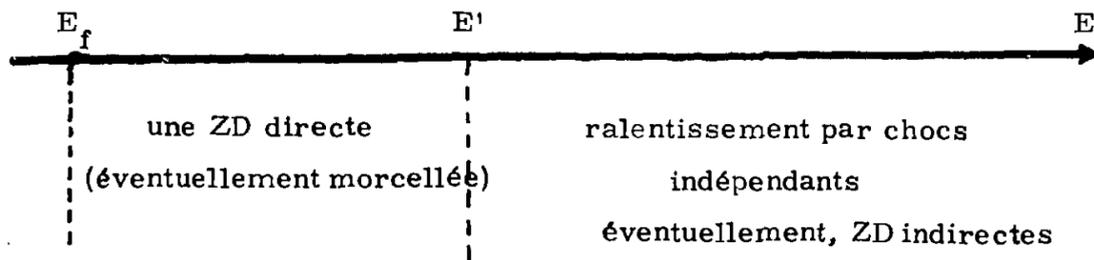
A une constante de multiplication près, E_{min} est l'énergie minimale équivalente de ZD en ce qui concerne les phénomènes de durcissement, cette énergie minimale équivalente est donc accessible à la détermination expérimentale. Mais, d'une part, c'est sûrement là une moyenne équivalente d'une fonction d'efficacité qui n'est pas une fonction saut, et d'autre part c'est un seuil spécifique de phénomène étudié (durcissement) et qui n'exclue pas la possibilité de ZD plus petites. Ce n'est pas E_f .

Notons que cette définition d'une énergie E_m implique une définition simplifiée (fonction saut) de l'importance des zones suivant leur taille. Il serait possible d'introduire dans l'emploi du modèle de SEEGER un spectre en volume des zones appauvries, plus raffiné ; et il serait alors compliqué, mais non exclu a priori, de considérer que la zone de plus ou moins grand volume est un obstacle plus ou moins grand au glissement des lignes de dislocation, contrairement au traitement classique qu'on vient de voir.

VI - CONCLUSION

a - On a vu qu'au cours du ralentissement d'un ion incident, il y a un moment où les zones perturbées par deux chocs successifs se recouvrent, recouvrement qu'on a pris comme caractéristique du début d'une ZD. Ce moment a la probabilité $P_Z(E')$ de se produire alors que l'ion est ralenti à l'énergie E' .

Il faut noter que la ZD, commencée, peut s'interrompre éventuellement (interruption du recouvrement en chaîne des chocs successifs, par transfert éventuel d'énergie T trop petite) ; elle est alors, morcellée, et une certaine partie d'énergie se trouve cédée au réseau pendant cette interruption, en dehors de toute ZD. Il faut noter que d'autre part, avant le début de toute ZD créée directement par l'ion en ralentissement (ou bien pendant une interruption d'une ZD morcellée), il peut y avoir création indirecte à partir d'atomes déplacés avec une énergie leur permettant éventuellement d'aller créer plus loin, chacun, une ZD indépendante. C'est par exemple le cas du fragment de fission en ralentissement depuis une énergie de plusieurs dizaines de MeV et induisant des ZD indirectes jusqu'à ce qu'il puisse, ralenti à quelques centaines de KeV, (paragraphe IV-2-d), créer une ZD directe.



E' réparti en probabilité suivant $P_Z(E')$

FIGURE 20

b - Energie de référence E_0

On a vu l'énergie E_0 (paragraphe IV-2) pour laquelle $P_Z(E' = E_0)$ vaut sensiblement 0,8, alors que $P_Z(E' < E_0/10) \sim 1$ et $P_Z(E' = 10 E_0) \sim 0,5$ (figure 16, paragraphe IV-4-c).

Le tableau 9 ci-dessous rappelle, entre autres, les diverses valeurs de E_0 .

E_0 varie à peu près (équation (23)) comme :

Z^3 . La ZD est donc un phénomène d'atomes gros ce qui est assez évident a priori (grandes sections efficaces)

D^{-5} . (D distance interatomique)

La ZD est donc un phénomène d'atomes proches, ce qui est évident aussi a priori (interférences facilitées)

E_a^{-1} . E_a , énergie par atome de création de ZD est connue à un facteur 2 à 3 près. C'est la cause essentielle d'incertitude sur E_0 mais E_0 ne dépend sensiblement pas de T_m , l'énergie minimale des chocs considérés (et il est donc indifférent, en ce qui concerne E_0 , d'adopter E_d , ou E_f etc..., comme valeur de T_m)

E_0 est toujours très supérieur à E_f , énergie minimale de ZD (tableau 5)

c - exemple; neutrons de pile

Le tableau 9 ci-dessous envisage, à titre d'exemple, la création de ZD à partir de neutrons de pile pris, pour fixer les idées, à énergie de 2 MeV ; il y correspond des ions primaires à énergie maximale $E_{p1} = (4/A)^{MeV}$, A étant le nombre de masse du corps irradié ; on sait d'autre part qu'un ion rapide se ralentit par ionisation, jusqu'à être ralenti à une énergie inférieure à E_I dans le modèle élémentaire et simple du seuil abrupt, pris ici pour fixer les idées plutôt que le modèle plus fidèle de (11). On admet alors des ions primaires à énergies E_p , E_p étant la plus petite des 2 valeurs E_{p1} et E_I ; on a pris $E_I = A^{KeV}$ (sauf pour le graphite où $E_I \sim 100^{KeV}$ est mieux adapté (29)) ; on a envisagé, pour l'Uranium, le cas d'un primaire expulsé par un neutron rapide et de plus le cas d'un primaire

expulsé par un fragment de fission.

Elément	Z	E_0 KeV	E_p KeV	η	$P_Z (\eta)$
C	6	1,2	100	83	0,16
Al	13	5,2	27	5,2	0,60
Ti	22	22	48	2,2	0,73
Fe	26	75	56	0,75	0,84
Cu	29	95	63	0,67	0,85
Ag	47	219	37	0,17	0,96
Au	79	980	20	0,02	~ 1
U	92	920	17	0,02	~ 1
			a) 240	0,26	0,93

TABLEAU 9

(a. primaire expulsé par un fragment de fission dans l'Uranium)

On sait que η est l'énergie réduite E_p/E_0 , il y correspond la probabilité de ZD, $P_Z (\eta)$, lue figure 16 (avec les valeurs $u_0 = u_f$ du tableau A3, annexe III)

On a vu que le phénomène de la zone de déplacement avait deux effets :

- α - Diminution du nombre de déplacements stables, et de plus répartition particulière de ces déplacements : zone lacunaire entourée d'interstitiels.
- β - nombre de déplacements stables croissant avec l'énergie E du primaire au fur et à mesure que cette énergie approche et dépasse le plafond équivalent E_0 , c'est à dire qu'il y a de moins en moins "zone de déplacements".

Le tableau 9 montre que, sous neutrons de pile, l'énergie E_p de primaire est toujours très inférieure à E_0 , pour des éléments de nombre atomique $Z \geq 50$; et les probabilité P_Z sont voisines de l'unité : il y a essentiellement création de ZD, pour toutes les énergies de primaire et seul l'effet α) ci-dessus de diminution du nombre de déplacements stables doit se faire sentir.

Pour $10 \lesssim Z \lesssim 50$ apparaît de plus l'effet β) de croissance du nombre de déplacements stables avec l'énergie de primaire. Cet effet est d'ailleurs compensé plus ou moins, voire inversé, par le phénomène d'ionisation qui, lui aussi, commence à apparaître pour ces valeurs de Z .

Enfin, pour $Z \lesssim 10$, le calcul fait ici est assez approché, l'emploi du potentiel de Thomas-Fermi est critiquable ; η est grand et le morcellement de la ZD directe devient probable ; enfin, en ce qui concerne le graphite, il n'est pas à empilement compact, contrairement à notre hypothèse générale de calcul ; néanmoins, dans le cas du graphite, l'expérience montre que de bons résultats sont obtenus en ne faisant aucunement appel à la ZD (29), ce qui est bien cohérent avec la valeur, petite, trouvée pour P_Z ici ($P_Z = 0,16$).

d - Comparaison avec les valeurs de BRINKMAN

On a vu qu'il n'y a pas, suivant l'énergie E de l'ion en ralentissement, une limite franche de la ZD, c'est à dire une valeur d'énergie au-dessus et au-dessous de laquelle on ait respectivement $P_Z = 0$ et $P_Z = 1$. Répartition en probabilité des énergies transmises à chaque choc et répartition en probabilité des distances entre choc, conduisent à une fonction $P_Z (E)$ variant continuellement de 0 à 1 quand E décroît de l'infini à $E_f \sim 0$.

On pourrait définir une limite équivalente

$$\bar{E} = \int E w P_Z d P_Z / \int w P_Z d P_Z$$

w étant la probabilité d'avoir un atome primaire à l'énergie E . Suivant le spectre des primaires w , \bar{E} peut prendre diverses valeurs. Qualitativement, on prendra ci-dessous $E \sim E_0$, de façon à permettre la comparaison avec la limite de Brinkman, E_{B1} (tableau 5)

L'énergie limite équivalente $\bar{E} \sim E_0$ est élevée et les résultats trouvés ici sont beaucoup plus grand que ceux de J. A. BRINKMAN (3) ; E_0 vaut quelque 10 à 50 fois E_{B_1} .

Cette différence tient à l'emploi d'un critère moins restrictif : on n'a pas retenu ici le critère de l'égalité entre le l. p. m. et la distance interatomique ($\lambda = 1$), critère qui est celui de J. A. BRINKMAN ; on a préféré le critère qui impose un transfert d'énergie suffisant pour que les perturbations de deux chocs successifs se recouvrent, et qui conduit d'ailleurs à $\lambda \sim 3$.

On n'a pas retenu non plus le potentiel de J. A. BRINKMAN, mais un potentiel de THOMAS-FERMI prolongé sans discontinuité par un potentiel de BORN-MAYER ajusté par la rigidité ; en fait, cette recherche du potentiel peut être interprétée comme seulement une recherche de limite supérieure en distance à l'intérieure de laquelle le potentiel de T. F. s'applique ; en effet, il apparait que nous n'avons finalement besoin de connaître les potentiels qu'à l'intérieur de cette limite. Cette différence dans les potentiels n'agit pas dans le sens de la différence constatée, entre les énergies plafond de J. A. BRINKMAN, et celles calculées ici, mais en sens inverse (paragraphe IV. 2). C'est bien le choix du critère de l'apparition de la zone de déplacements qui couvre l'écart constaté ainsi que l'écart inverse résultant de potentiels différents.

ANNEXE I

POTENTIELS D'INTERACTIONS (entre atomes identiques)

ANNEXE I - POTENTIELS D'INTERACTION ENTRE ATOMES IDENTIQUES

Nous allons procéder au choix d'un potentiel physiquement raisonnable, à savoir un potentiel de THOMAS-FERMI à courte distance, puis de BORN-MAYER à grande distance, avec conditions de continuité (égalité des potentiels et des dérivées) à la jonction des deux formes et condition de compatibilité avec la rigidité.

1° - Rigidité K

La rigidité K s'écrit :

$$K = -v \frac{dP}{dv} = \frac{1}{9} \left[r^2 \frac{\partial^2 W}{\partial r^2} \right]_{r=r_s} \quad \text{avec ici :}$$

v : volume ; P : pression ; r_s : rayon atomique

W : énergie de cohésion par unité de volume.

W est la somme (voir (13) et (14)) de l'énergie W_F correspondant aux électrons presque libres de la bande de conduction et de l'énergie W_0 correspondant au minimum de cette bande ; l'énergie W_0 peut elle-même se décomposer en énergie électrostatique W_E et énergie d'échange W_B . On peut donc écrire $K = K_F + K_E + K_B$.

- K_F correspond à la compressibilité d'un gaz d'électrons presque libres :

$$W_F = \frac{2}{5} E_F \frac{m}{m^*} N_{elec} = P_F v \quad P_F = \frac{W_F}{v}$$

Avec N_{elec} = nombre d'électrons de valence par unité de volume

$$K_F = -v \frac{dP_F}{dv}$$

$$K_F = \frac{2}{5} N_{elec} E_F \frac{m}{m^*} \quad \text{(A1)}$$

K_F ne fait pas intervenir le potentiel interatomique, et c'est la différence $K - K_F$ qui nous sera utile pour la détermination de ce potentiel.

- K_B, K_E

K_B correspond à la répulsion d'échange entre couches électroniques voisines, répulsion dont rend compte le potentiel semi-empirique de BORN-MAYER. Notre but étant ici de déterminer les paramètres de ce

potentiel à partir de la rigidité, il faut nous placer dans le cas où K_B est maximal. C'est en général le cas des empilements compacts où il y a effectivement voisinage étroit des couches électroniques d'atomes adjacents (13).

En empilement compact, W_B s'exprime :

$$W_B = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{BM}(r_{ij}) = \frac{12}{2} V_{BM}(D) \quad (\text{interaction limitée aux premiers voisins})$$

où $V_{BM}(r)$ est le potentiel de BORN-MAYER et D la distance interatomique.

D'où :

$$K_B = \frac{6}{9} N \left[r^2 \frac{\partial^2 V_{BM}}{\partial r^2} \right]_{r=D} \quad \text{avec} \quad D^3 = \frac{\sqrt{2}}{N} \quad (A2)$$

N : nombre d'atomes par unité de volume.

Disposant de K mesuré et de K_F calculé dans l'approximation des électrons presque libres, suivant (A1), on peut écrire :

$$K_B + K_E = K - K_F$$

Il faut, d'une part, K_F nettement différent de K , sinon, étant donné l'approximation impliquée dans (A1), la différence de $K - K_F$ n'a plus de sens.

Il faut, d'autre part, $K_E \ll K_B$, c'est à dire $K_B + K_E \sim K_B$.

Cette condition est remplie dans les empilements compacts et particulièrement dans le cuivre, l'argent et l'or (14), qui par ailleurs sont monovalents et remplissent donc la condition $K_F \ll K$. Pour les autres corps, $K_F \sim K$, soit parce que ce sont des multivalents, soit parce qu'on a $K_B \ll K$.

On calcule par exemple pour les monovalents :

$$K_F \text{ c.g.s.} \simeq 0,64 \cdot 10^{-12} N E_F^{eV} \quad (\text{on a pris pour simplifier, } \frac{m}{m^*} \sim 1)$$

On a :

	E_F^{eV}	K_F calculé	K mesuré
Cu	7,1	$0,38 \cdot 10^{12}$	$1,4 \cdot 10^{12}$
Ag	5,52	$0,21 \cdot 10^{12}$	$1,03 \cdot 10^{12}$
Au	5,56	$0,21 \cdot 10^{12}$	$1,76 \cdot 10^{12}$
Li	4,74	$0,14 \cdot 10^{12}$	$0,12 \cdot 10^{12}$
Na	3,16	$0,05 \cdot 10^{12}$	$0,064 \cdot 10^{12}$
K	2,5	$0,02 \cdot 10^{12}$	$0,028 \cdot 10^{12}$
Rb	2,06	$0,014 \cdot 10^{12}$	$0,019 \cdot 10^{12}$
Cs	1,79	$0,01 \cdot 10^{12}$	$0,014 \cdot 10^{12}$

(valeurs numériques de E_F et K prises en (15)).

Pour la série des alcalins, Li... Cs, qui sont pourtant monovalents, on a $K_F \sim K$; $K_B + K_E$, donc a fortiori K_B , sont très mal définis. Il en est qualitativement de même pour tous les multivalents, où la condition de rigidité ne pourra guère s'écrire que $0 < K_B < K$.

On dispose donc essentiellement des 3 éléments Cu, Ag, Au, qui ont l'avantage, à la fois, d'être monovalents et compacts. On les emploiera donc ici. On utilisera les valeurs numériques K et K_F de J.A. BRINKMAN (3).

En ce qui concerne les autres éléments, on verra qu'une valeur de K_B , même très mal connue, n'est pas totalement inutilisable : on verra en effet que l'erreur sur les paramètres cherchés est de 1/10 de l'erreur sur K_B .

2° - Potentiels

a) Potentiel de THOMAS-FERMI (16) : courtes distances

$$V'(r) = \frac{Ze}{r} \phi(r/\mu') = V'_{T.F.}$$

avec $\mu' = 0,8853 a_0 / Z^{1/3}$

a_0 : rayon de BOHR,

Z : nombre atomique de l'élément considéré.

$\phi(r/\mu')$ fonction d'écran.

On a utilisé l'ajustement analytique :

$$\phi(x) = (1 + a_1 x^{1/2} + a_2 x^{2/2} + \dots + a_6 x^{6/2})^{-1}$$

déterminé en (17) avec :

$$a_1 = 0,02747 ; \quad a_2 = 1,243 ; \quad a_3 = -0,1486 ;$$

$$a_4 = 0,2302 ; \quad a_5 = 0,007298 ; \quad a_6 = 0,006944.$$

Cet ajustement est exact à 0,3 % pour $x \leq 16$.

L'emploi de V_{TF} est une solution bonne à courte distance, et pour des éléments assez lourds ($Z > 10$).

Le potentiel d'interaction interatomique, entre deux atomes de nombre atomique Z , s'exprime alors :

$$V_{TF}(r) = \frac{Z^2 e^2}{r} \phi\left(\frac{r}{\mu}\right) \quad (A3a)$$

$$\text{avec } \mu = 0,8853 a_0 / Z_0^{1/3} = \frac{0,8853}{\sqrt{2}} a_0 / Z^{1/3}$$

$$\text{où } Z_0^{2/3} = Z^{2/3} + Z^{2/3}$$

Ce potentiel, par contre, est faux à grande distance ; à la distance interatomique $r = D$ par exemple, V_{TF} ne rend pas compte de la rigidité K_B .

Le calcul de K_B , qui prend la forme :

$$K_B = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{Z^2 e^2}{D^4} \left[x^3 \left(\frac{\phi(x)}{x} \right) \right]_{x = \frac{D}{\mu}}$$

conduit à des valeurs de K_B environ 20 fois trop grandes, soit, par exemple, pour le cuivre, $K_B \sim 23 \cdot 10^{12}$ c. g. s. contre $K_{\text{mesuré}} = 1,4 \cdot 10^{12}$.

Le potentiel V_{TF} ne décroît pas assez vite à grande distance.

Les potentiels de COULOMB (en r^{-1}) et de BOHR (en $r^{-1} e^{-r/a}$) peuvent être considérés comme des solutions asymptotiques de V_{TF} , à très courte distance. Moins généraux que V_{TF} ils n'ont pas à être envisagés spécialement ici.

b) Le potentiel de BORN-MAYER (18) : distances interatomiques
(pour les empilements compacts ; et distances plus petites pour les empilements non compacts).

Le potentiel de THOMAS-FERMI représente le potentiel électrostatique du noyau, vu à la distance r à travers le nuage des charges électroniques, se trouvant entre les distances 0 et r . Au-dessus d'une certaine distance, le potentiel de T. F. devient faux. A la distance interatomique, pour les empilements compacts, le terme prépondérant est le terme de répulsion d'échange entre couches électroniques voisines des deux atomes considérés. Le potentiel de BORN-MAYER représente cette répulsion ; il prend la forme :

$$V_{B.M.}(r) = A e^{-r/\nu} \quad (A3b)$$

Les constantes A et ν sont à déterminer à partir de données expérimentales (chaleur de vaporisation, rigidité, constantes élastiques, etc...).

Pour la série des alcalins, Li, Na, K, Rb et Cs, MOTT et JONES citent en une valeur $\nu = 0,345 \cdot 10^{-8}$ cm, indépendante du nombre atomique du corps en particulier.

Pour le cuivre, HUNGTINGTON (12) donne des valeurs de $\frac{D}{\nu}$ comprises entre 13 et 17 (calculées à partir des constantes élastiques), et pour des calculs de déplacements d'atomes, il choisit 13, qui correspond à une énergie minimale de déplacement calculée de $18,5 \text{ eV}$.

VINEYARD (7) envisage, toujours pour le cuivre, des valeurs de $\frac{D}{\nu}$ de 10,3 13 et 17, ($\frac{D}{\nu} = 13$ étant la valeur qui correspond le mieux ici aux constantes élastiques, sans que ce soit concluant). Les calculs de déplacements faits donnent, pour $\frac{D}{\nu} = 13$, une probabilité $P(E)$ de déplacement variant de 0 à 1 lorsque E varie de 24 à 85 eV , alors qu'on mesure une énergie minimale de déplacement de $25,0 \pm 1,0 \text{ eV}$ (19). La concordance dans les seuils est excellente ; les valeurs 10,3 et 17 de D/ν donnent respectivement un seul trop petit et trop grand.

Pour le cuivre, l'argent et l'or enfin, MANN et SEEGER (20) trouvent sensiblement la même valeur de D/ν , quelque soit l'élément considéré ; cette valeur varie entre 10,9 et 32 suivant les constantes expérimentales utilisées (constantes élastiques, variation des constantes élastiques avec la pression, rigidité et énergie de cohésion, relation pression-volume par onde de choc).

On peut conclure de cette compilation qu'une valeur D/ν voisine de 13 est la plus vraisemblable pour le cuivre au moins et probablement pour l'or et l'argent ; il semble logique en même temps de ne pas postuler à priori une variation de ν avec le nombre atomique Z , comme le laisserait supposer un rapprochement avec le μ du potentiel de BOHR $V_B = \frac{1}{\mu} e^{-r/\mu}$, et comme le fait BRINKMAN en (3). BRINKMAN pose $\nu = Ca_0 Z^{-1/3}$, et il choisit pour constante d'ajustement C , la valeur $C = 1,5$ (valable pour $Z \geq 29$) ; ceci conduit en particulier à $D/\nu = 9,9$ pour le cuivre.

Les constantes A et ν de $V_{BM} = Ae^{-r/\nu}$ sont déterminées ici à partir de la rigidité d'une part, et d'autre part par la condition imposée que, lorsque les distances diminuent, le potentiel de BM se trouve remplacé, sans discontinuité au point de remplacement, par le potentiel de TF.

Les valeurs de constantes ainsi obtenues sont cohérentes avec la compilation bibliographique vue plus haut (BRINKMAN excepté) (NOTA : ν n'aura pas la valeur $0,345 \text{ \AA}$ de la série des alcalins, qui ne sont pas à empilement compact ; ici, tous les corps sont considérés comme compacts).

Le calcul est exposé au paragraphe suivant, relatif au potentiel à toutes distances ainsi obtenu.

c) Potentiel proposé ; toutes distances < distance interatomique D

- Principe du calcul

Soit donc les potentiels de THOMAS-FERMI et de BORN-MAYER :

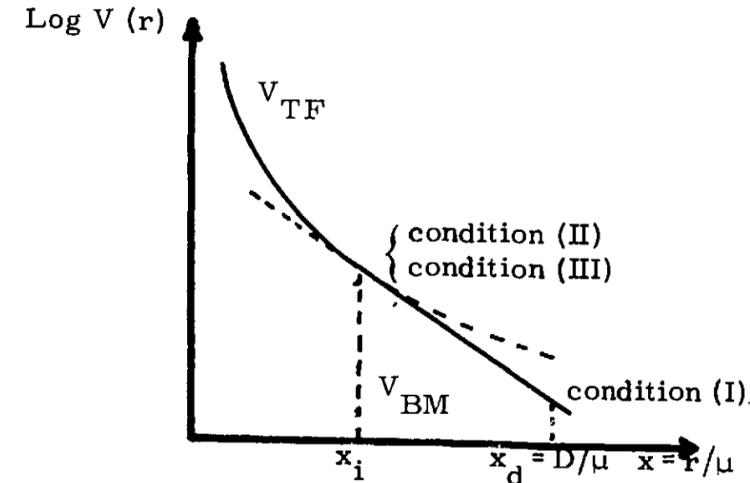
$$V_{TF}(r) = \frac{Z^2 e^2}{\mu} F(x) \quad \text{avec} \quad F(x) = \frac{\phi(x)}{x}$$

$\phi(x)$ fonction d'écran vue plus haut. (paragraphe 2-a)

$$x = r/\mu \quad \mu = a_0 \frac{0,8853}{\sqrt{2}} Z^{-1/3}$$

$$V_{BM}(r) = \frac{Z^2 e^2}{\mu} \beta e^{-r/\nu} \quad \text{où l'on a posé} \quad A = \frac{Z^2 e^2}{\mu} \beta$$

Le potentiel proposé est V_{BM} à grande distance, puis à partir d'une valeur x_i de x , il est remplacé, sans discontinuité, par V_{TF} .



Les 3 paramètres ν , β et x_i sont déterminés par les 3 conditions :

(I) rigidité : $\frac{6}{9} \text{ N} \left(r^2 \frac{\partial^2 V_{BM}}{\partial r^2} \right)_{r=D} = K_B = \frac{6}{9} \text{ N} \frac{Z^2 e^2}{\mu} \left(\frac{D}{\nu} \right)^2 \beta e^{-\frac{D}{\nu}}$

(II) égalité en x_i des deux formes de potentiel :

$$F(x_i) = \beta e^{-x_i \mu/\nu}$$

(III) égalité en x_i des dérivées des deux formes de potentiel :

$$\mathcal{A}(x_i) = - \frac{F'}{F} (x_i) = \frac{\nu}{\mu}$$

x_i est alors déterminé par :

$$\mathcal{A}^{-2}(x_i) F(x_i) e^{(x_i - \frac{D}{\mu}) / \mathcal{A}(x_i)} = K_B \frac{3}{2\sqrt{2}} \frac{D\mu^3}{Z^2 e^2}$$

d'où β et ν .

On trouve avec Cu, Ag, et Au, et en employant les mêmes valeurs de K , K_B et K_F , que BRINKMAN (3) :

Z	$K_{cgs} 10^{-12}$	$K_F 10^{-12}$	$K_B 10^{-12}$	$D \text{ \AA}$	$\nu \text{ \AA}$	D/ν	C
Cu	29	1,421	0,281	1,14	2,56	0,202	12,69
Ag	47	1,087	0,215	0,87	2,89	0,219	13,18
Au	79	1,803	0,179	1,62	2,88	0,215	13,40

Chez J.A. BRINKMAN, ν est défini par le choix d'une constante, C, qui conduit à $\nu = C a_0 Z^{-1/3}$. Le tableau ci-dessus donne les valeurs de C cohérentes avec les valeurs ν calculées ici. J.A. BRINKMAN indique bien que C varie de 1 à 1,5 et même plus pour les grands nombres atomiques, mais il choisit une valeur constante $C = 1,5$; c'est à dire qu'il fait varier ν avec Z. Ici, nous verrons finalement qu'il nous apparaît inutile de choisir C constant. Une valeur de ν constante en Z nous semblera plus acceptable, tout en représentant une simplification de formules.

On note que :

$\beta = F(x_i) x_i^{\mu/\nu} = F(x_i) e^{x_i / \mathcal{B}(x_i)}$ ne dépend que de x_i : on constate que cette expression est très sensiblement proportionnelle à $\mathcal{B}^{-2,4}(x_i)$

$$F(x_i) e^{x_i / \mathcal{B}(x_i)} = \xi \mathcal{K}^{-2,4}(x_i) = \beta$$

$$= \xi \left(\frac{D}{\nu}\right)^{2,4} \left(\frac{u}{D}\right)^{2,4} = \beta \quad (A4)$$

avec :

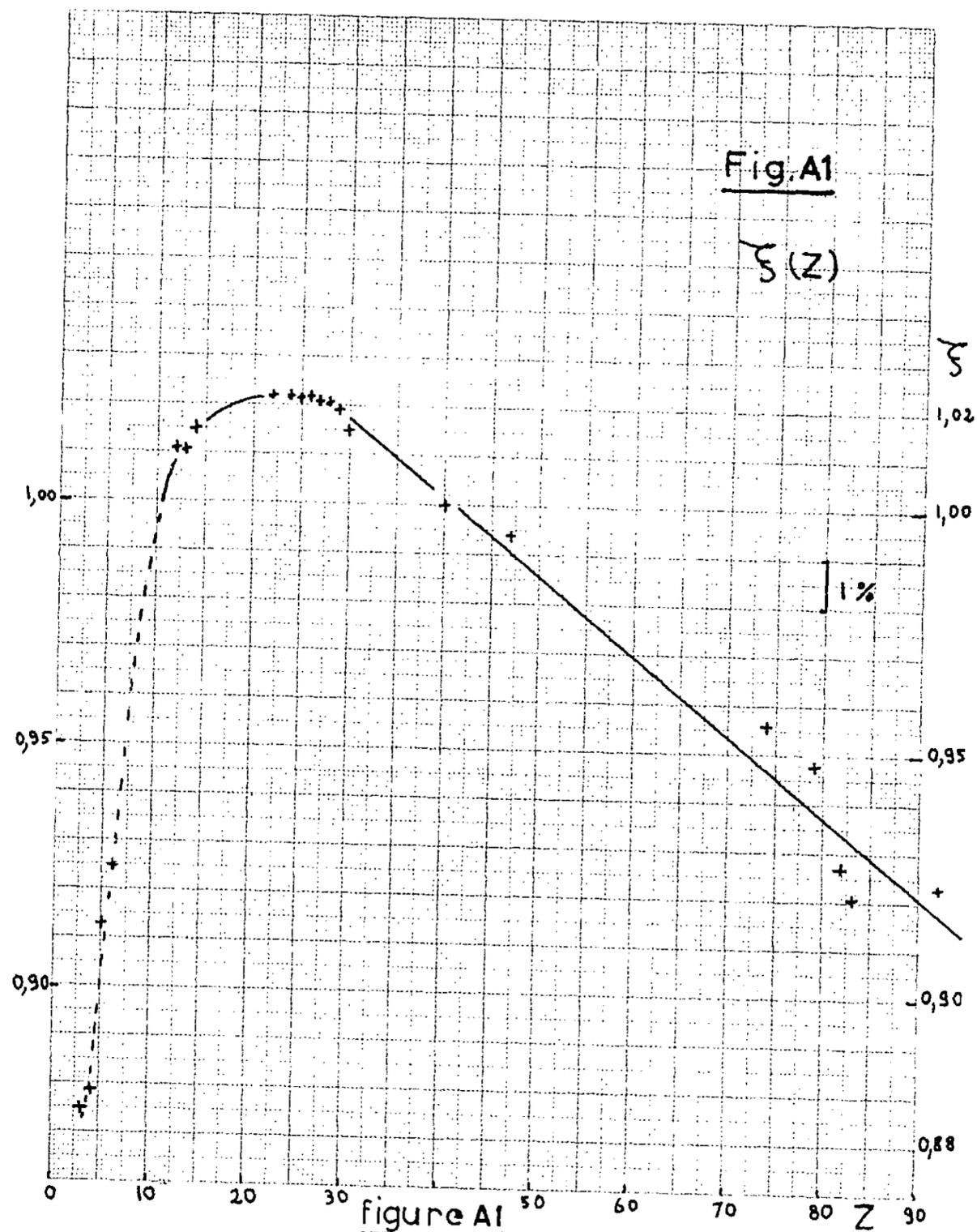
$\xi \sim 1$ sauf pour Z très petit ou très grand (voir figure A1 $\xi(Z)$).

D'où la relation $K_B(\nu)$:

$$K_B = \xi \frac{2}{3} N \frac{Z^2 e^2}{D^{2,4}} \left(\frac{D}{\nu}\right)^{4,4} e^{-D/\nu}$$

Un calcul d'erreur donne alors :

$\frac{\Delta D/\nu}{D/\nu} \sim \frac{\Delta \nu}{\nu} \sim \frac{1}{10} \frac{\Delta K}{K}$



10 à 40 % d'erreur sur K_B n'entraîneront que 1 à 4 % d'erreur sur ν ; et on vérifiera par la suite, que pour les applications envisagées, cette précision est très suffisante.

Une connaissance même très imprécise de K_B peut donc suffire à déterminer ν , dans le cadre des conditions (I), (II), et (III), imposées plus haut.

- Calculs et résultats

A priori, on peut penser que tant le nombre atomique que la distance interatomique conditionnent le potentiel étudié. On essaie donc une forme :

$$D/\nu = b_1 D^{b_2} Z^{b_3}$$

Le tableau suivant compare, pour différents éléments pris comme exemple, la valeur de K mesuré, et les valeurs de K_B calculées avec différentes valeurs des paramètres b_1, b_2, b_3 :

Z	$K_{\text{cgs}} 10^{-12}$ (mesuré)	$10^{-12}(K - K_F)$ $\sim K_B 10^{-12}$	K_B calculé		
			hypothèse α	β	γ
3	0,12	~ 0	0,015	0,003	0,002
6 (graphite)	0,25 à 0,40	0,25 à 0,40	0,27	0,34	0,43
12	0,34	0,1 à 0	0,08	0,02	0,01
22	1,28		0,31	0,18	0,14
29	1,42	1,14	1,14	1,40	1,51
47	1,08	0,87	0,87	0,68	0,57
79	1,8	1,62	1,62	1,51	1,26
82	0,43		0,40	0,12	0,06
92	1,02	0,5 à 0,8 ?	1,15	0,76	0,53

TABLEAU A1

Tous les corps envisagés sont traités comme compacts, avec $D^3 = \frac{\sqrt{2}}{N}$, ce qui est une approximation, assez grande pour le graphite en particulier.

D'autre part, le potentiel de T-F est très approché pour $Z < 10$. Les cas $Z = 6$ et 3 du tableau précédent sont très indicatifs. On donne, lorsque c'est possible, la valeur $K_B = K_{\text{mesuré}} - K_F$ calculé qui est à comparer directement avec K_B calculé (pour l'élément G, $Z = 6$, on a pris $K_F = 0$, et par ailleurs K en (21))

Hypothèse α : On peut ne retenir que les 3 données $Z = 29, 47$ et 79 , qui sont seules relativement sûres ici, comme on l'a dit plus haut. Ces 3 données permettant une détermination "exacte" des paramètres b_1, b_2 et b_3 , on trouve :

$$D/\nu = 9,58 D^{0,179} Z^{0,033} \quad D \text{ en } \text{Å}$$

On voit que l'incidence obtenue de Z est très faible ($Z^{1/30}$ contre $Z^{1/3}$ qui apparaîtrait dans $D/\mu_{T.F.}$).

De plus, cette variation en Z conduit à des valeurs de K_B calculées trop grandes pour Z grand. Pour $Z = 92$, par exemple, K_B calculé = $1,15 \cdot 10^{12}$ ce qui est supérieur à la valeur expérimentale de K , et, même compte tenu d'approximation sur K , ne laisse pas de place à K_F .

Enfin, la solution suivante, qui ne fait plus intervenir Z , est au moins aussi bonne, et elle est plus simple :

Hypothèse β : On recherche systématiquement (moindres carrés) les valeurs b_1, b_2 et b_3 qui correspondent le mieux à l'ensemble des éléments $Z = 12, 29, 47, 79$ et 92 pris comme repères. On trouve que Z n'intervient plus ($b_3 = 0$), et seule demeure une variation en D :

$$\frac{D}{\nu} = 6,11 D^{0,75} \quad \nu = 0,164 D^{0,25} \quad (\nu \text{ et } D \text{ en } \text{Å}) \quad (A5)$$

la dispersion maximale sur K_B (écart entre la valeur calculée ici et $K - K_F$) est de l'ordre de 20 %. L'écart entre la valeur de ν calculée ici et la valeur de ν correspondant exactement à $K - K_F$ est donc de 2 % au maximum. L'erreur sur ν introduite par l'emploi de cette formule se chiffre

donc à environ 2 % au maximum,

Hypothèse γ : Enfin, on peut se demander s'il est bien nécessaire de conserver la variation en D obtenue ci-dessus ; on a alors une valeur moyenne de ν :

$$\nu = 0,209 \text{ \AA} \pm 5\% \quad (5\% \text{ écart maximal constaté})$$

la dispersion des K_B , par rapport aux valeurs $K - K_F$ devient alors trop grande, et on considèrera ce cas comme une simplification à n'employer qu'avec précautions.

- Conclusions - intercomparaison de potentiels

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{pour } r < r_i = \mu x_i ; V(r) = V_{\text{int.}}(r) = V_{\text{TF}}(r) \end{array} \right. \quad (A6)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} r > r_i = \mu x_i ; V(r) = V_{\text{ext.}}(r) = V_{\text{TF}}(r_i) e^{r_i/\nu} e^{-r/\nu} \end{array} \right. \quad (A6a)$$

ou bien, à partir de (A4), $V_{\text{ext.}}(r) = \frac{Z^2 e^2}{\mu} \xi \left(\frac{\mu}{\nu}\right)^{2,4} e^{-r/\nu} \quad (A6b)$

- μ est le μ de T.F. $\mu = \frac{0,8853}{\sqrt{2}} a_0 Z^{-1/3}$, $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$

- r_i est déterminé, connaissant ν , par $\frac{V_{\text{TF}}(r_i)}{V'_{\text{TF}}(r_i)} = -\nu$

- ν peut être calculé, connaissant K_B :

$$30,54 K_B \frac{10^{-12}}{\xi} \frac{1}{N 10^{-22}} \frac{(D 10^8)^{2,4}}{Z^{4,6/3}} = \left(\frac{D}{\nu}\right)^{4,4} e^{-D/\nu} \quad (A7)$$

($\xi \sim 1$, fig. A1)

En fait, K_B n'est pratiquement pas connu à mieux que 20 % et il peut suffire d'écrire

$$\nu = 0,1637 (D)^{0,25} \quad \nu \text{ et } D \text{ en } \text{\AA} \quad (\text{relation } (A5))$$

Les potentiels ainsi obtenus sont donnés à titre d'exemple pour les éléments suivants dans les figures A2 à A7.

Elément Z	ν en \AA	
	calculé par K_B (A7)	calculé par (A5)
Graphite 6		<u>0,202</u>
Mg 12		<u>0,219</u>
Cu 29	<u>0,202</u>	0,207
Ag 47	<u>0,219</u>	0,213
Au 79	<u>0,215</u>	0,213
U 92		<u>0,217</u>

TABLEAU A2

Le graphite est donné à titre indicatif (Z est petit et l'empilement n'est pas compact).

Les valeurs de ν employées sont celles soulignées dans le tableau. On a employé K_B pour Cu, Ag et Au parce que K_B est relativement bien connu ; le potentiel obtenu pour ces 3 éléments pour la valeur de ν obtenue par (A5) ne s'écarte pratiquement pas, dans le domaine représenté, de celui obtenu par ν de K_B ($\leq 6\%$ en $r = 1$, et 0% par définition en $r = r_i$).

On trouve d'autre part sur ces figures :

- Le potentiel de Coulomb et le potentiel de Bohr

$$\frac{Z^2 e^2}{r} \text{ et } \frac{Z^2 e^2}{r} e^{-r/\mu} \quad \text{avec } \mu = \frac{0,8853}{\sqrt{2}} a_0 Z^{-1/3}$$

- Le potentiel de BRINKMAN (3)

$$V_{\text{BR}}(r) = A \frac{e^{-r/\nu}}{1 - e^{-rA}} \quad (A6c)$$

qui semble séduisant parce qu'il tend vers un potentiel de Bohr pour r petit et de Born-Mayer pour r grand ; A est défini par la rigidité (1) et on montre les potentiels relatifs à deux cas :

$$\nu = C a_0 Z^{-1/3} \text{ avec } C = 1,5$$

valeur adoptée par BRINKMAN (1)
(potentiel noté BR (C)).

$$\nu = \text{valeur de } \nu \text{ dans le potentiel proposé ici}$$

(potentiel noté BR (ν)).

- Les potentiels de Thomas-Fermi et de Born-Mayer, dont la combinaison donne le potentiel proposé ici.

Le domaine qui nous intéresse est celui qui correspond à un libre parcours moyen l de l'ordre de D ; c'est plus précisément le domaine :

$$1 \lesssim \lambda \lesssim 3 \text{ où l'on a posé } \lambda = \frac{1}{D}$$

On a d'autre part :

$$\lambda = \frac{1}{DN\sigma} = \frac{1}{DN\pi\rho^2}$$

et, avec $N = \sqrt{2}/D^3$, (empilements compacts), on en déduit :

$$\rho = \lambda^{-1/2} \approx 0,475 D$$

d'où $\rho \sim \frac{D}{2}$ à $\frac{D}{4}$ c. à d. $\rho \sim 0,6 \text{ \AA}$ à $1,5 \text{ \AA}$

Le choc correspondant à la section $\sigma = \pi \rho^2$ est fonction du potentiel à toutes les valeurs $r \geq \rho$, mais principalement à la valeur $r = \rho$.

Dans ce domaine ($r = \rho < 1,5 \text{ \AA}$) on peut voir que :

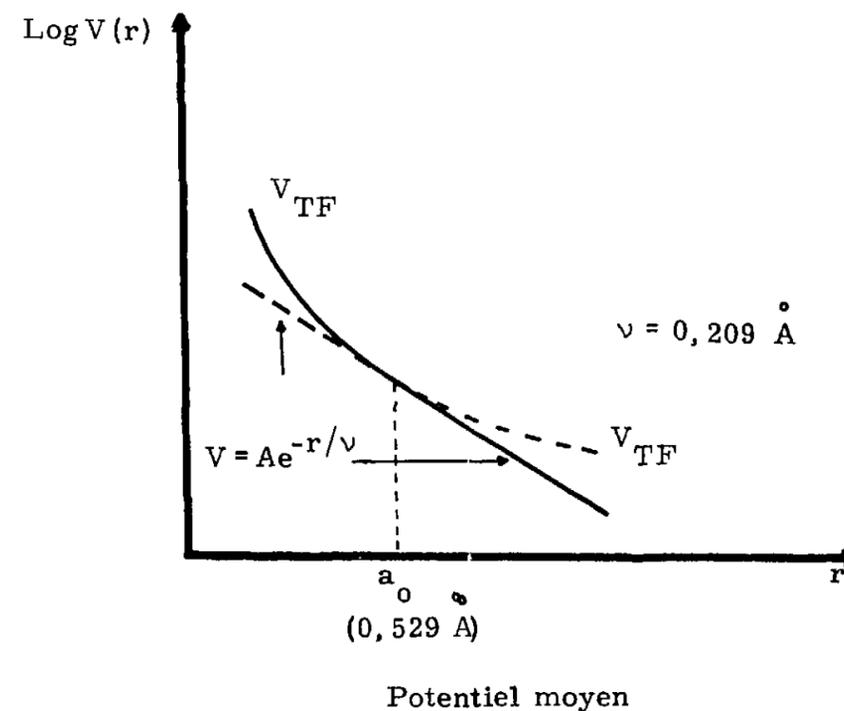
- BR (ν) est toujours supérieur au potentiel proposé ;

BR (C), le potentiel de BRINKMAN proprement dit, est toujours supérieur à BR (ν), et, dans la plupart des cas, supérieur au potentiel de THOMAS-FERMI.

(1) Nota : chez BRINKMAN (potentiel BR (C)), il est pris : $A \text{ (eV)} = 2,58 \cdot 10^{-5} Z^{11/2}$ loi empirique établie à partir de la rigidité, pour $Z \geq 29$. Cette valeur de A n'est plus cohérente avec la rigidité pour des nombres $Z \lesssim 15$

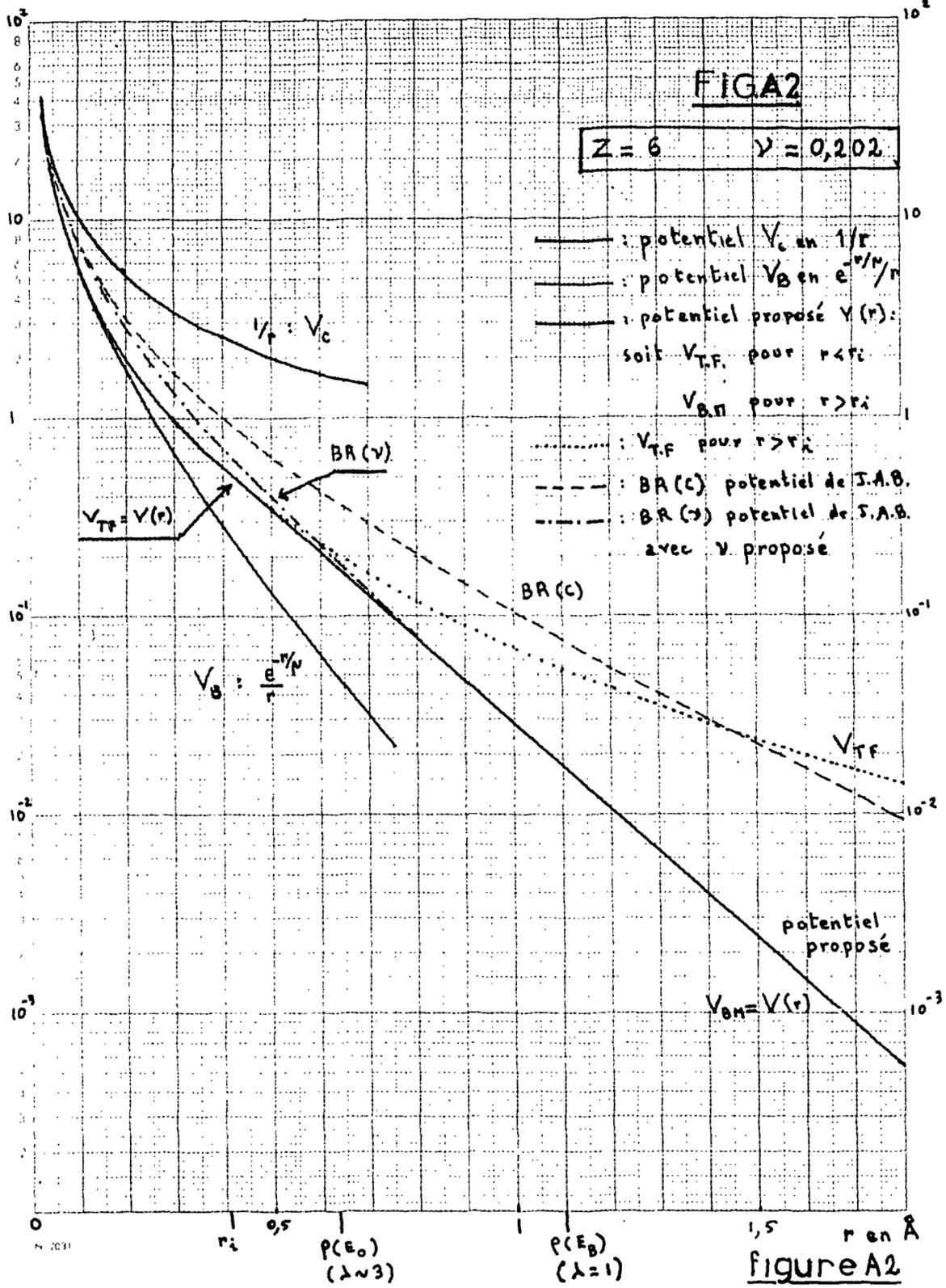
- Le potentiel proposé est le potentiel de TF jusqu'à r_i , et, un peu plus loin - puisqu'il y a continuité des dérivés - soit donc jusqu'à environ $0,7 \text{ \AA}$. Pour des valeurs de λ voisines de 3, le potentiel employé sera donc très peu différent d'un potentiel de THOMAS-FERMI.

Enfin, on peut noter que la distance r_i est sensiblement constante autour de $0,53 \text{ \AA}$. Compte tenu de la continuité des dérivés en r_i , on peut poser $r_i \sim a_0$ de BOHR = $0,529 \text{ \AA}$. Par ailleurs, on a vu $\nu \sim 0,209 \text{ \AA}$. Le potentiel proposé prend donc en moyenne, quelque soit le corps considéré, la forme :

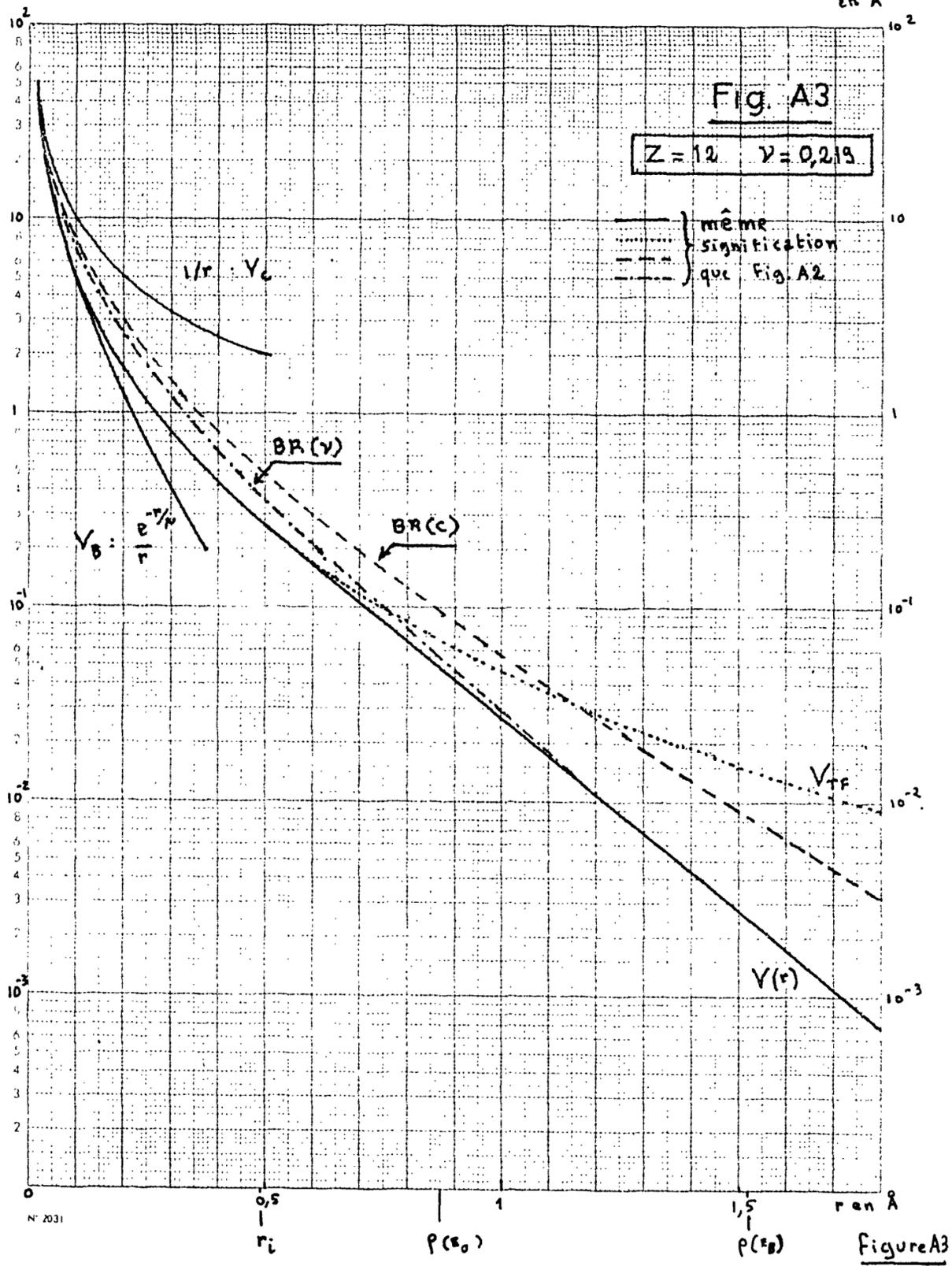


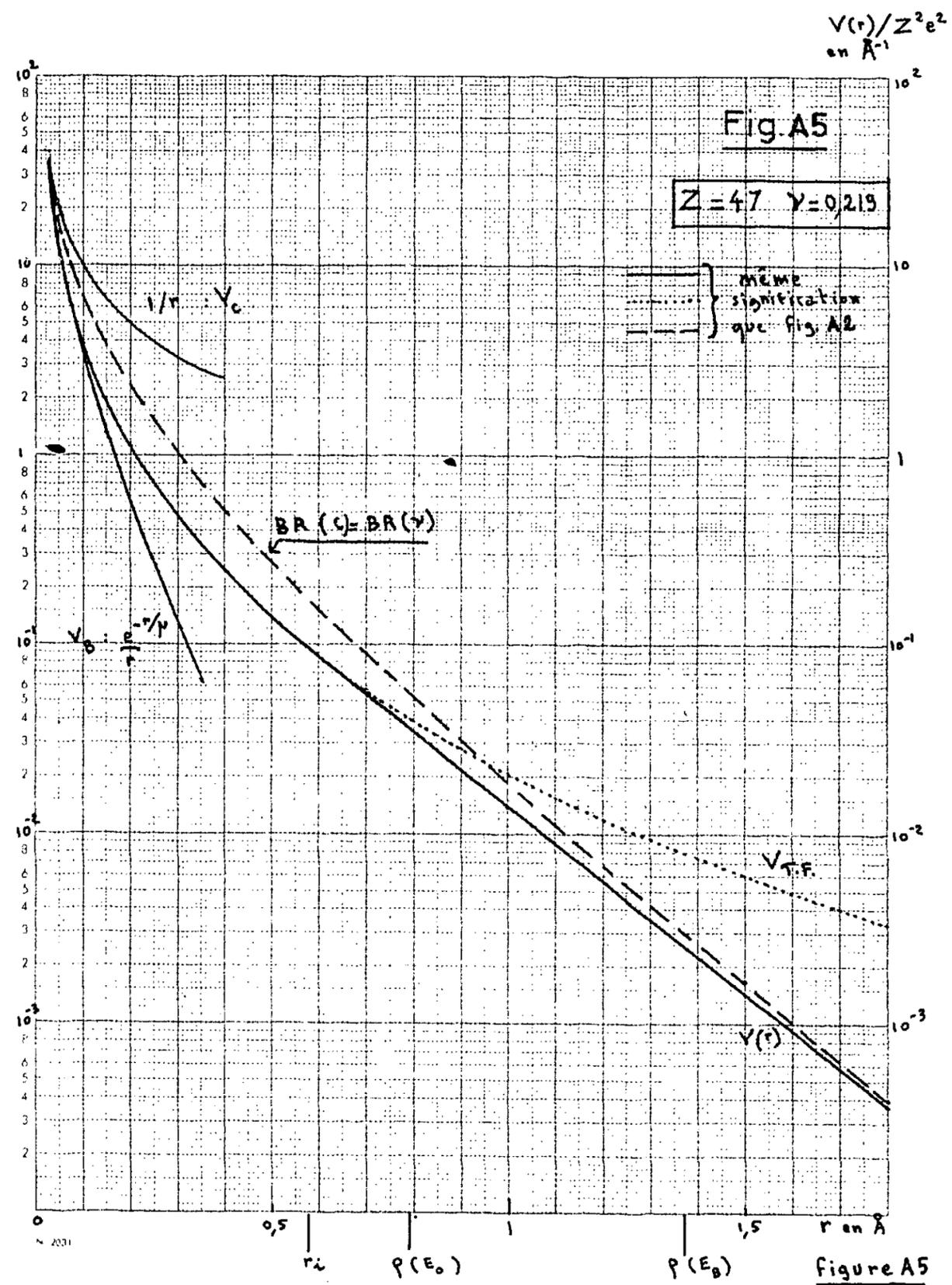
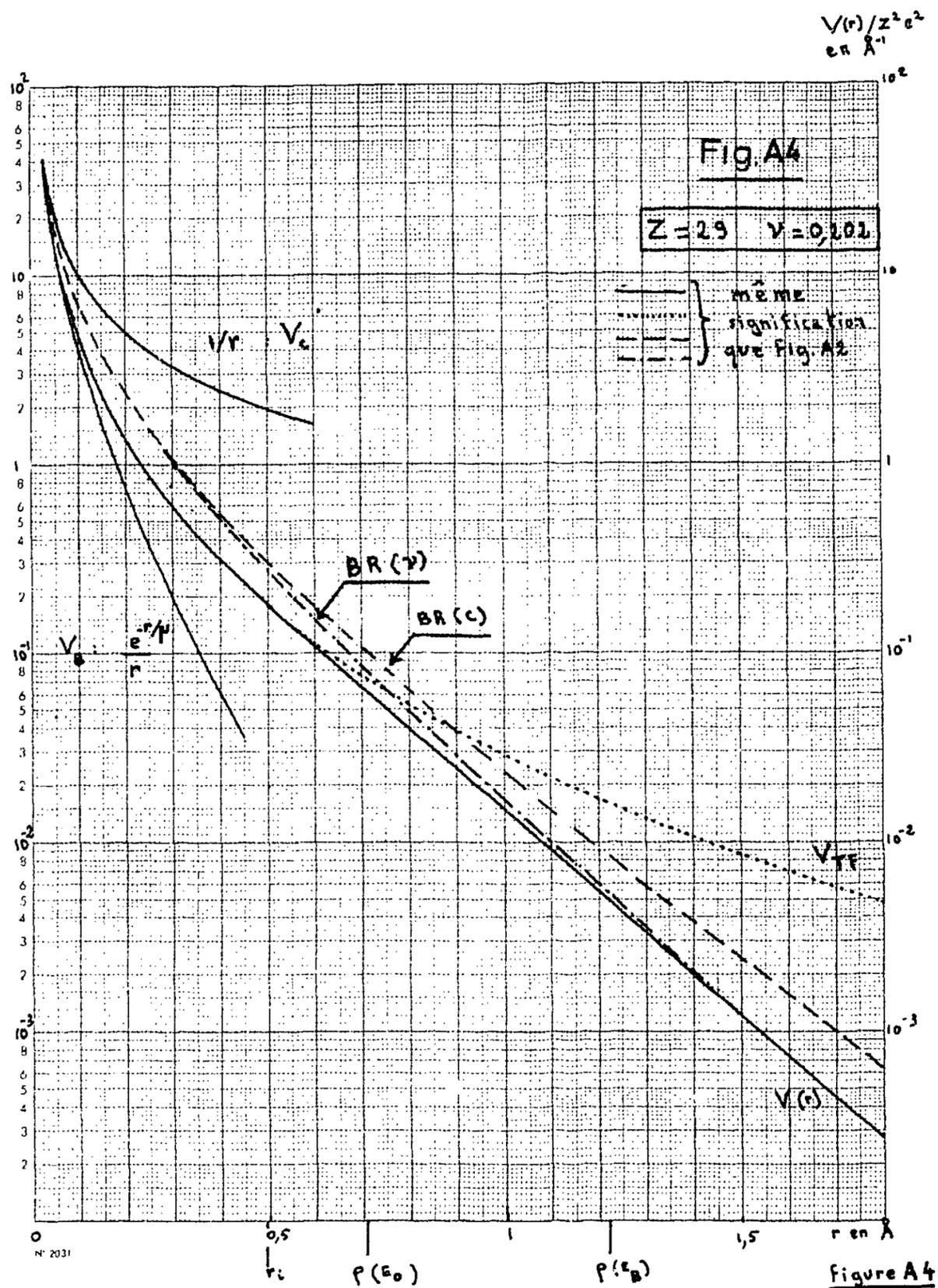
(le potentiel proposé ici varie suivant les corps, mais se situe toujours au voisinage de la moyenne ci-dessus)

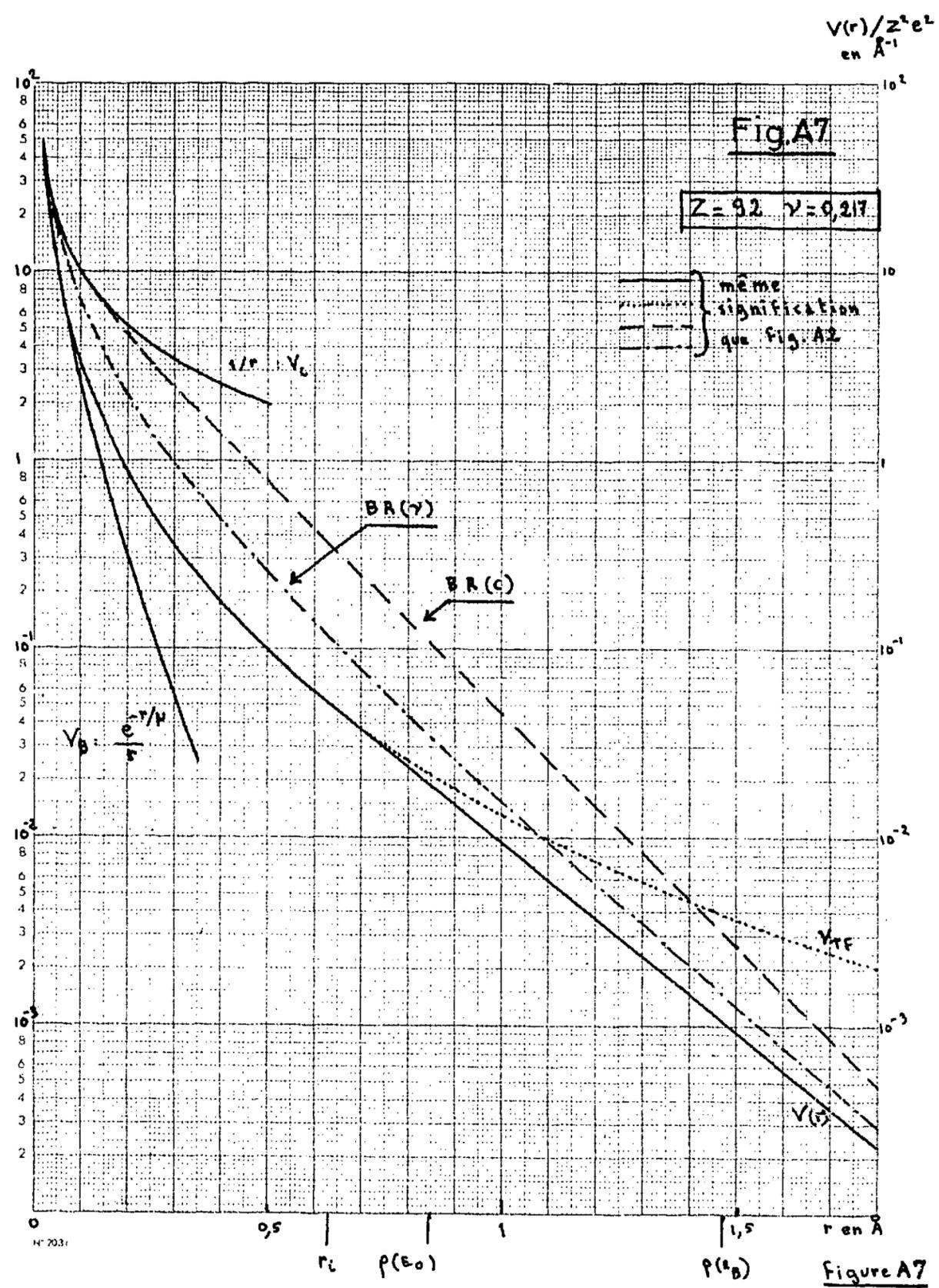
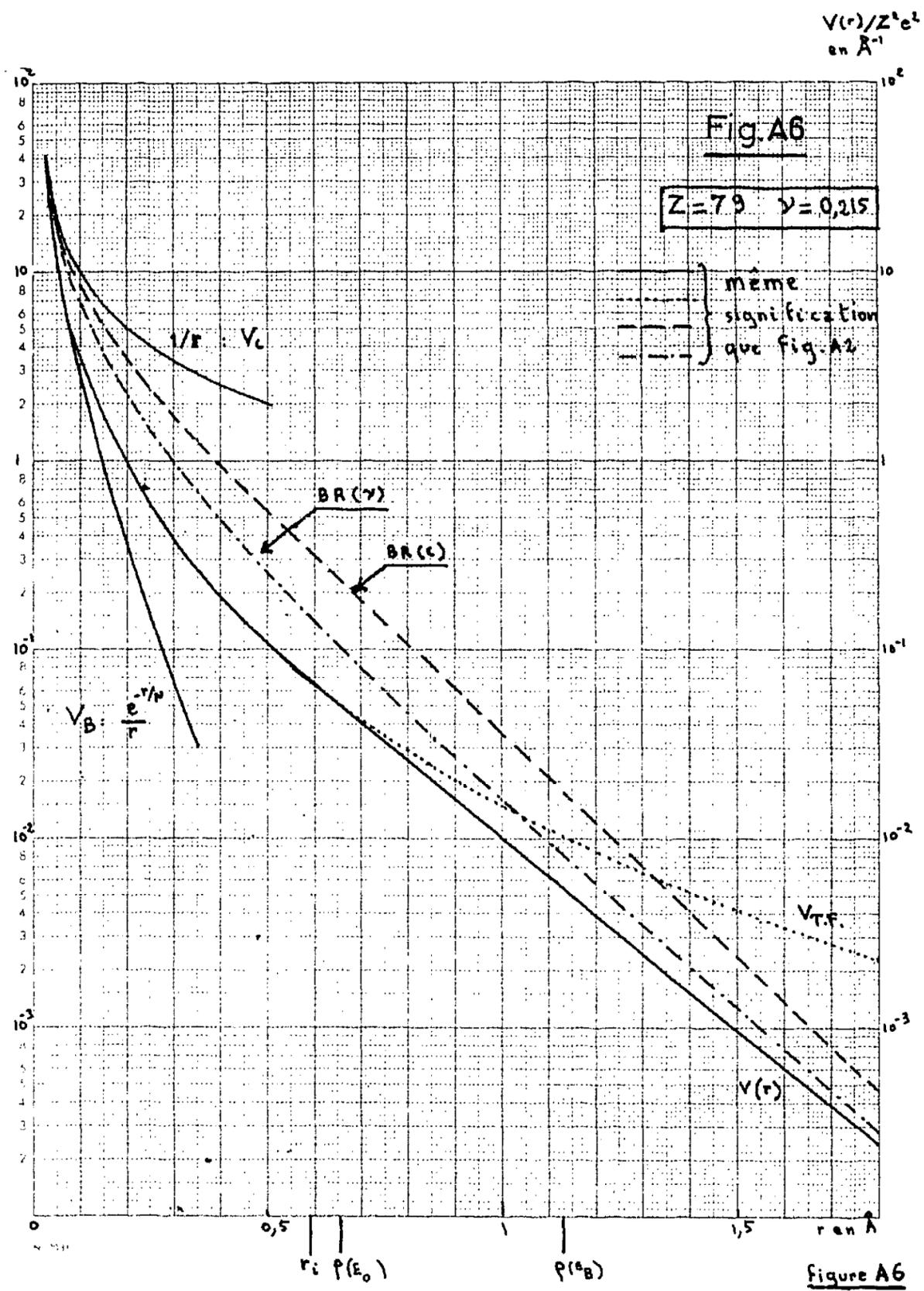
$V(r)/Z^2e^2$
en \AA^{-1}



$V(r)/Z^2e^2$
en \AA^{-1}







ANNEXE II
SECTIONS EFFICACES

ANNEXE II - SECTION EFFICACE

1° - Rappel des lois classiques (voir (10), par exemple)

Soit ρ le paramètre d'impact relatif au choc de 2 atomes M et M' de masse m et m' (ρ mesure la distance d'approche minimale de M et de M' en l'absence supposée de toute interaction).

L'énergie transmise T au cours de ce choc s'exprime :

a) dans le cas général :

$$T(\rho) = (1 - \cos \chi(\rho)) \frac{E}{2} \quad \text{avec} \quad \chi(\rho) = \pi - 2\varphi(\rho) \quad \text{(A8)}$$

et

$$\varphi(\rho) = \int_{r_{\text{mini}}}^{\infty} \frac{\rho \, dr / r^2}{\sqrt{1 - \rho^2 / r^2 - V(r) / E_{\text{rel}}}} \quad \text{(A9)}$$

où :

- E est l'énergie cinétique initiale de l'atome incident M
- T est l'énergie cinétique transmise à l'atome objectif initialement au repos M'.

- E_{rel} est l'énergie cinétique dans le système du centre de masse :

$$E_{\text{rel}} = \frac{1}{2} \frac{m m'}{m + m'} v_{\infty}^2 \quad \text{avec} \quad \vec{v}_{\infty} \text{ vitesse initiale de M}$$

- r_{mini} = distance réelle d'approche minimale (qui correspond au zéro du dénominateur de $\varphi(\rho)$).

Il apparaît évidemment de la formule de $\varphi(\rho)$ que $T(\rho)$ est connu si $V(r)$ est connu pour $r \geq r_{\text{mini}}$ et particulièrement pour $r \geq \rho$.

b) Dans le cas des faibles déviations :

$$T = \frac{P^2}{2 m'} \quad \text{avec} \quad \text{(A10)}$$

$$P = - \frac{2\rho}{v_{\infty}} \int_{\rho}^{\infty} \frac{dV(r)}{dr} \frac{dr}{\sqrt{r^2 - \rho^2}} \quad \text{(A10a)}$$

P étant ici la quantité de mouvement transmise.

Section efficace :

La probabilité du choc où l'énergie $T(\rho)$ est transmise s'écrit :

$$d\sigma = 2\pi \rho d\rho$$

La section efficace du choc où au moins T_m est transmise s'écrit :

$$\sigma = \int_{\rho_M}^{\rho_m} 2\pi r dr \sim \pi \rho_m^2 \quad (A11)$$

ρ_M est le paramètre d'impact relatif au transfert maximal d'énergie $T = T_M$; ($T_M = E$ si $m = m'$). Et ρ_m est le paramètre relatif au transfert minimal adopté, T_m .

2° - Applications :

a) LINDHARD (11) a calculé une section efficace universelle basée sur le potentiel de THOMAS-FERMI et à laquelle nous ferons en partie appel.

Le potentiel que nous avons adopté (relations (A6), (A6a), (A6b)) est un potentiel de TF pour les petites valeurs de r ($r < r_i$), puis de BM pour les grandes valeurs ($r > r_i$).

Nous construirons une section efficace qui fera appel :

d'une part au potentiel de BM pour $r > r_i$, c'est à dire pour les petites déviations où les relations (A10) et (A10a) s'appliqueront.

d'autre part, pour les grands transferts d'énergie, au potentiel de TF et à la section correspondante calculée par LINDHARD ; l'approximation ici sera d'autant meilleure que r_{mini} (relation (A9)) sera inférieur à r_i . On verra en fait que l'approximation est toujours très bonne, pour les cas qui nous intéressent.

Nous nous exprimerons en coordonnées réduites, qui permettront d'exprimer la section de LINDHARD :

- l'énergie transférée s'exprimera par :

$$u = \frac{\mu}{2Z Z' e^2} \sqrt{\frac{m'}{m}} \sqrt{ET_m} \quad (A12)$$

avec μ donné par (A3a).

- Et la section efficace à partir de :

$$s(u) = \frac{1}{\pi \mu^2} \int_0^{\rho_m(u)} 2\pi r dr \quad (A13)$$

$$\sigma(T) = \pi \mu^2 (s(u) - s(u \sqrt{\frac{E}{T}})) \sim \pi \mu^2 s(u) \quad (A13a)$$

b) Calcul des sections efficaces

- Emploi de V_{ext} (équations (A6a) et (A6b)) : potentiel de B.M. ($r > r_i$).

pour $\rho > r_i$, on a ici $V(r) = V(\rho) e^{\rho/v} e^{-r/v}$ et les relations (A10) et (A10a) permettent de calculer :

$$TE = \frac{m'}{m} \left(\frac{\rho}{v}\right)^2 V^2(\rho) e^{2\rho/v} K_0^2\left(\frac{\rho}{v}\right) \quad (A14)$$

sachant que $\int_a^\infty \frac{e^{-y} dy}{\sqrt{y^2 - a^2}} = K_0(a)$

d'où les relations en $s(u)$ (équation (A13)) et en u (relation (A12)) en tenant compte de la définition (A6b) de $V(\rho)$

$$s_e(u) = \left(\frac{v}{\mu}\right)^2 x^2 \quad (A15)$$

avec

$$u = \frac{E}{2} \left(\frac{\mu}{v}\right)^{2,4} x K_0(x) \quad (A15a)$$

où $x = \rho/v$

Cette relation $s(u)$ dépend du corps considéré, par v et surtout μ qui est fonction de Z .

- Emploi de V_{int} (équation (A6)), potentiel de T.F.; LINDHARD (11), à partir des relations (A8) (A9) et (A11), a calculé et donne la courbe de la fonction $f(u)$ telle que, par définition de $f(u)$.

$$s_i(u) = \int_u^\infty u'^{-2} f(u') du' \quad (A16)$$

La courbe $f(u)$ de LINDHARD est donnée figure A8. La relation $s(u)$ ainsi trouvée est universelle; la section efficace de choc élastique est ainsi exprimée par l'emploi des coordonnées réduites s et u , indépendamment du corps considéré.

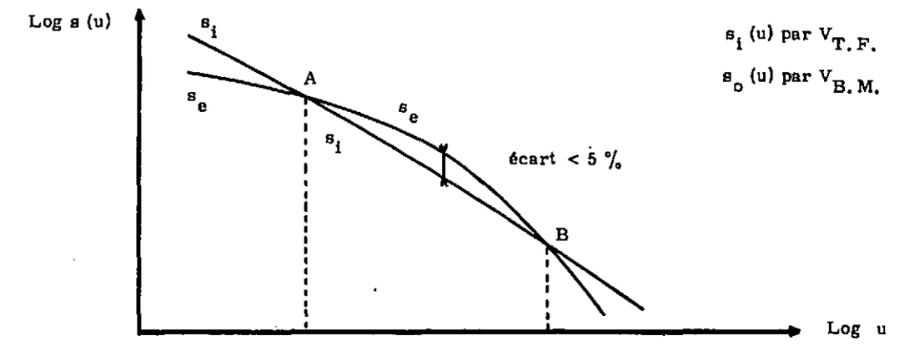
- Discussion - Conclusions

La fonction $s_i(u)$ établie à partir de $V_{T.F.}$ devient fautive lorsque r devient grand. On a vu que le potentiel employé est alors trop grand: $s_i(u)$ est une estimation par excès de la valeur réelle cherchée $s(u)$, et cet écart par excès est d'autant plus grand que le transfert d'énergie u est plus petit.

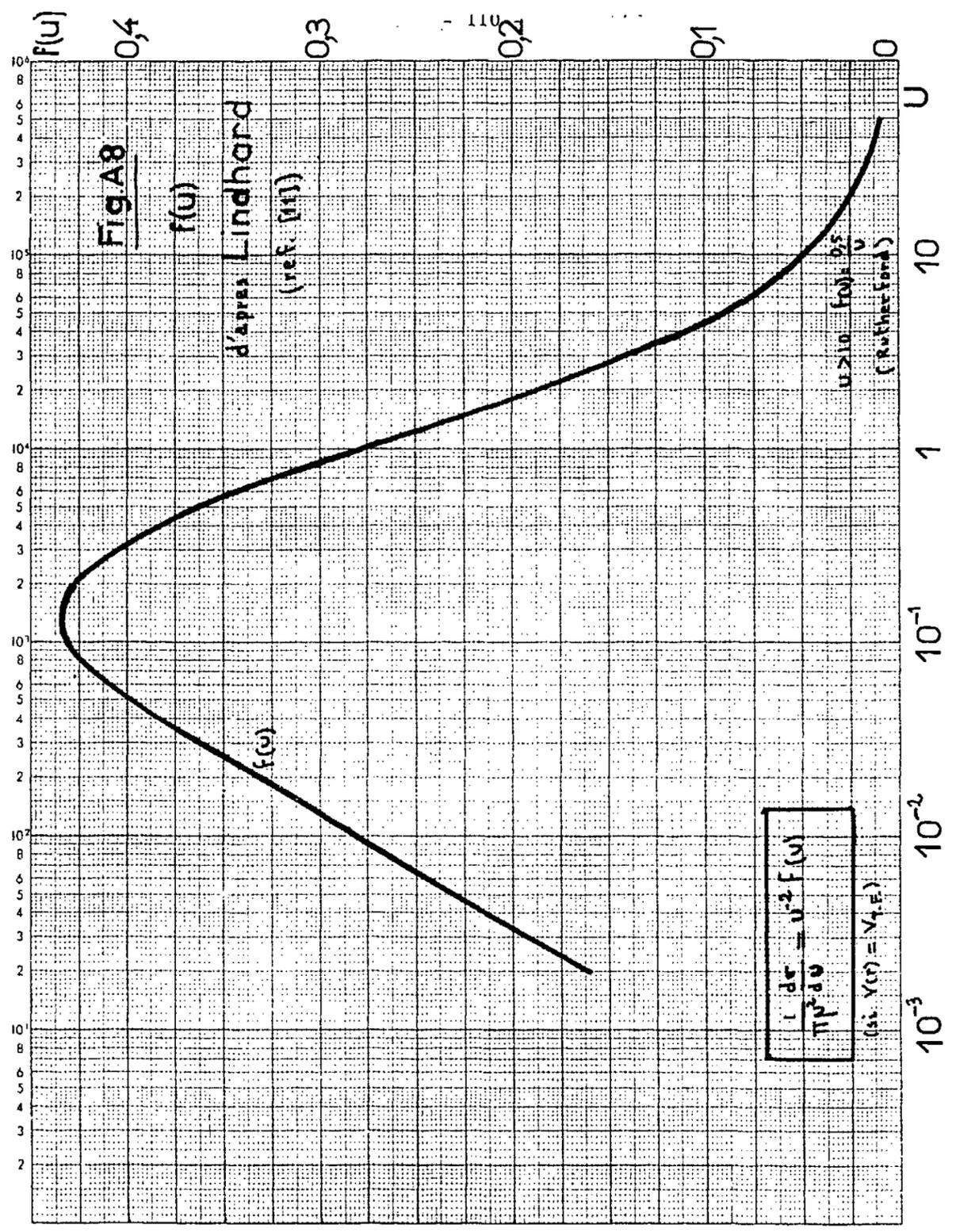
La fonction de $s_e(u)$ est établie dans l'approximation des petites déviations: elle suppose la trajectoire incidente non modifiée et majore donc les effets.

$s_e(u)$ est une estimation par excès de la valeur réelle cherchée; l'approximation est d'autant plus grande que le transfert d'énergie est grand; ceci tant que le transfert d'énergie considéré n'implique pas de valeur $r < r_i$: pour $r < r_i$, le potentiel employé (B.M.) est trop faible et $s_e(u)$ devient une approximation, grossière, par défaut.

Le schéma suivant représente les deux fonctions $s_i(u)$ et $s_e(u)$. Ces deux sections se recoupent en deux points A et B qui, suivant l'élément considéré, sont variables dans l'échelle des énergies réduites, u , mais pratiquement constants dans l'échelle des paramètres d'impact ρ ; A et B correspondent respectivement à $\rho \sim 1,5 r_i$ et $\rho \sim 0,8 r_i$



transfert d'énergie	: petit grand
paramètre d'impact	: $\rho > r_i$ $\rho < r_i$
seules interviennent dans le choc les distances	$r \geq \rho > r_i$	la description du choc (équation (A9)) fait essentiellement appel à : $r > et \sim r_{mini}$ avec $r_{mini} > et \sim \rho$ soit $r \sim$ ou $< r_i$
- $s_i(u)$ Potentiel $V_{T.F.}$ par excès par excès et d'autant meilleur que u est grand et r petit mais
- $s_e(u)$ Potentiel $V_{B.M.}$ correct par défaut $s_e(u) < s(u)$
approximation des petits angles	par excès d'autant que u	par excès $s_e(u) > s(u)$
	meilleur est petit	
 mais	
	$s_e(u) = s(u)$	
	\rightarrow a fortiori $s(u) = s_e(u)$	résultante par comparaison avec $s_i(u)$ sur le schéma : $s_e(u) < s(u)$
Conclusion
	$s(u) = s_e(u)$
	$V_{B.M.}$ et petits angles	$s(u) = s_i(u)$ T.F. \rightarrow



N° 7031

Figure A8

($r_i \sim a_0 = 0,529 \text{ \AA}$). De plus, entre A et B, $s_i(u) \sim s_e(u)$ (différence maximale inférieure à 5 %). Comme $s_i(u)$ et $s_e(u)$ sont deux approximations indépendantes de la valeur réelle $s(u)$, on peut supposer que, entre A et B, $s(u) \sim s_i(u) \sim s_e(u)$ à 5 % environ.

Mais on a vu que : $s_i(u)$ (potentiel $V_{T.F.}$) est une approximation d'autant meilleure que u est grand, donc bonne à mieux que 5 % pour $u > u(A \text{ à } B)$;

et que : $s_e(u)$ (potentiel de B. M. et petits angles,) est une approximation d'autant meilleure que u est petit, donc bonne à mieux que 5 % pour $u < u(A \text{ à } B)$.

Le schéma page 106 résume ces considérations.

La section recherchée est donc $s(u) = s_e(u)$ pour $u < u(A)$; au-delà, c'est la section universelle $s_i(u)$ établie à partir du potentiel $V_{T.F.}$.

On choisit, entre A et B, $s_i(u)$ de préférence parce que c'est la plus petite des deux valeurs s_e et s_i qui, toutes deux, surestiment, un peu, $s(u)$, et surtout parce que c'est une section universelle établie une fois pour toutes quelque soit l'élément considéré.

La figure (A9) représente la section ainsi obtenue pour différents corps.

On voit en application

- que l'on pourra supposer le potentiel égal à un potentiel $V_{T.F.}$ (A3a) quelque soit r pour autant que l'on ne considérera que des paramètres d'impact $\rho < 1,5 r_i \sim 0,8 \text{ \AA}$. Potentiel et section efficace ne sont plus fonction ici de la rigidité qu'il devient indifférent de bien ou mal connaître.

- que l'on pourra supposer le potentiel égal au potentiel de B. M. (A6b) pour autant que l'on ne considérera que des paramètres d'impacts $\rho \gtrsim 0,8 r_i \sim 0,4 \text{ \AA}$.

On verra que, dans la plupart des cas qui nous intéressent, on a $\rho \lesssim 0,8 \text{ \AA}$ et nous pourrons donc travailler dans l'hypothèse d'un potentiel de THOMAS-FERMI, et utiliser la section efficace universelle correspondante, $s(u) = s_i(u)$.

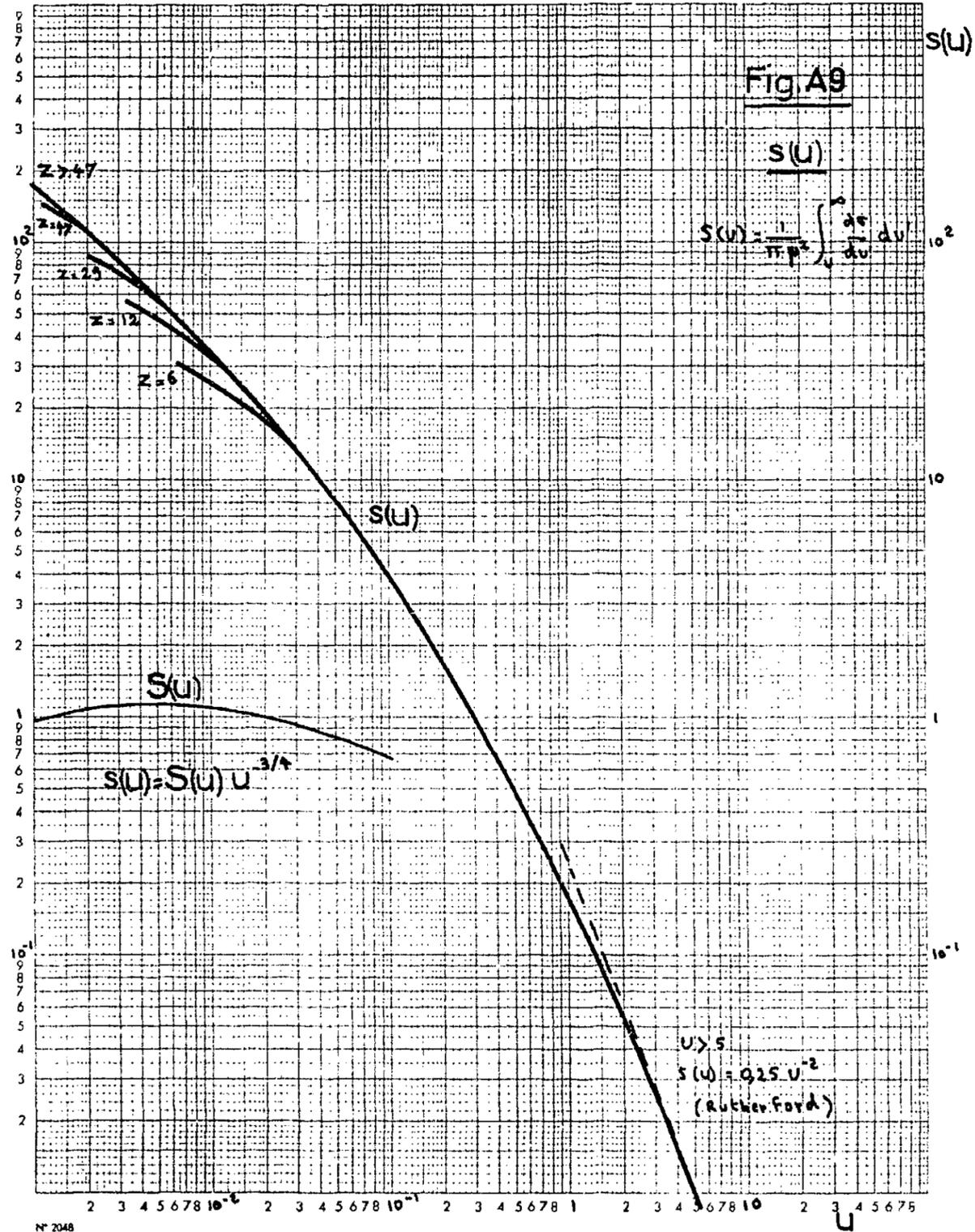


Figure A9

Il peut être commode d'exprimer cette section en fonction d'une puissance de u ,

$$\text{On a : } s_i(u) = S(u) u^{-3/4} \quad \text{pour } u < 0,1 \quad (\text{A16a})$$

$S(u)$ variant peu avec u , autour de l'unité, est représenté figure A9

Pour les grandes valeurs de u , on a :

$$s_i(u) \rightarrow 0,25 / u^2 \quad (\text{potentiel de Coulomb}) \quad (\text{A16b})$$

3° - Justification de l'emploi de la mécanique classique

Les énergies mises en jeu sont, par définition, supérieures à T_m et les quantités de mouvements sont donc supérieures à :

$$p = \sqrt{2 m_a T_m}$$

avec m_a = masse des atomes considérés dans le choc.

Les longueurs mises en jeu sont, par définition, supérieures à r_{mini} et on a $r_{\text{mini}} > \rho$, ρ étant le paramètre d'impact.

L'approximation de la mécanique classique sera valable si, dans les domaines qui nous intéressent, c'est à dire dans le domaine $E \sim E_0$, on a :

$$\text{soit } T_m \left(\frac{\rho}{a_0}\right)^2 \gg \frac{m_e}{2 m_a} \frac{e^2}{a_0} \quad (\text{A17})$$

a_0 étant le rayon de Bohr.

m_e la masse de l'électron

On sait, (paragraphe IV. 2. a) que pour $E = E_0$ et $T_m = E_d$, $\rho \sim 0,75 \text{ \AA}$, et on voit que la relation (A17) est très bien vérifiée ; on a bien, avec $T_m = E_d \sim \frac{e^2}{a_0}$:

$$\left(\frac{\rho}{a_0}\right)^2 \sim 2 \gg \frac{m_e}{2 m_a} \sim 10^{-4} Z^{-1}$$

Plus généralement, on sait (paragraphe II.3) :

$$\rho^2 = \frac{\sigma}{\pi} \alpha (ET)^{-1/3} \quad (\text{relation } \textcircled{10})$$

$$\text{soit } \left(\frac{\rho}{a_0}\right)^2 = 2 \left(\frac{ET_m}{E_0 E_d}\right)^{-1/3}$$

Ce qui, avec $\textcircled{A17}$ donne :

$$\left(\frac{T_m}{E_d}\right)^{2/3} \left(\frac{E}{E_0}\right)^{-1/3} \gg \frac{m_e}{4 m_a} \sim 10^{-4} Z^{-1}$$

en prenant $E_d = \frac{e^2}{a_0}$

Seules les valeurs très grandes de E, $E \gg E_0$ sont susceptibles d'interdire l'emploi de la mécanique classique. Elles sont en dehors du domaine qui nous intéresse ici.

ANNEXE III
VALEURS CARACTERISTIQUES

ANNEXE III - VALEURS CARACTERISTIQUES

1° - Valeurs caractéristiques de l'énergie réduite

a - A toutes fins utiles, on calcule ici les valeurs d'énergies $(ET_m)^{1/2}$ réduites, u , pour l'énergie incidente $E = E_0$, pour diverses énergies transmises, et pour des primaires ($m = m'$)

On a :

$$u = \frac{\mu}{2ZZ'e^2} \sqrt{ET_m} \quad (\text{relation } \textcircled{6})$$

$$u_0 = \frac{\mu}{2ZZ'e^2} \sqrt{E_0 T_m} \quad \text{avec } E_0 \text{ énergie de référence} \\ \text{paragraphe IV-2}$$

On calcule :

$$u_f = \frac{\mu}{2ZZ'e^2} \sqrt{E_0 E_f} \quad \text{avec } E_f \text{ paragraphe II-4}$$

$$u_d = \frac{\mu}{2ZZ'e^2} \sqrt{E_0 E_d} \quad \text{avec } E_d = 25 \text{ eV}$$

$$u_M = \frac{\mu}{2ZZ'e^2} \sqrt{E_0 T_M} \quad \text{en prenant ici } T_M = E_0$$

Le tableau A3 ci-dessous récapitule les valeurs u_f , u_d , u_M correspondant ainsi aux divers corps.

b - A toutes fins utiles, on calcule de même les valeurs d'énergie E réduite η avec $\eta = E/E_0$

pour $E = E_0$ on a $\eta = \eta_0 = 1$

pour $E = E_f$ on définit $\eta_f = \frac{E_f}{E_0}$ (E_f et E_0 : Tableau 5)

Le Tableau A3 donne η_f

2° - Energie moyenne transférée \bar{T} :

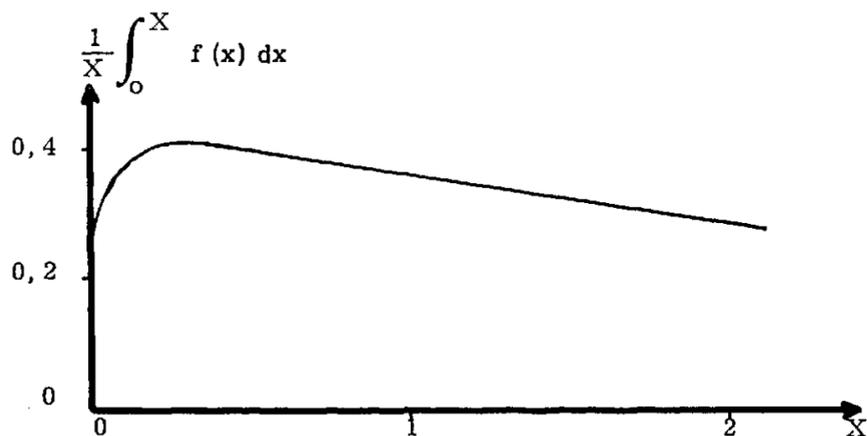
a - On a :

$$\bar{T} = \frac{1}{\sigma(E, T_m)} \int_{T_m}^{T_M} T d\sigma \sim \frac{1}{\sigma} \int_0^{T_M} T d\sigma$$

$$\bar{T} = \frac{2m}{m+m'} \frac{2ZZ'e^2}{\mu} \frac{1}{s(u)} \frac{1}{u_M} \int_0^{u_M} f(u') du' \quad \text{en utilisant}$$

les variables réduites du paragraphe II-3 ;

la fonction $\frac{1}{X} \int_0^X f(x) dx$, donnée par LINDHARD (11) est reproduit ci-dessous



Remarque : On voit que pour $0,1 < x < 0,7$ on a $\frac{1}{X} \int_0^X f(x) dx \sim cte$; on peut voir (tableau A3) que, pour les valeurs $E \sim E_0$, u_M est bien dans l'intervalle $(0,1 ; 0,7)$. Dans le cas de primaires, pour les valeurs qui nous intéressent (E voisin de E_0), on a donc $\int Td\tau \sim cte$; la densité de ralentissement est indépendante de E ; le ralentissement total par unité de longueur est une constante ; par contre, le nombre de chocs par unité de longueur est fonction de E et de T_m ; \bar{T} , fonction inverse de ce nombre de choc varie donc aussi avec E et T_m ;

b - Après transformations, on a :

$$\bar{T} = \frac{2m}{m+m'} \left(\frac{m}{m'}\right)^{3/8} \left\{ ZZ' \left[\frac{Z^{2/3} + Z'^{2/3}}{2} \right]^{1/2} \right\}^{1/4} 0,535 E_R^{1/4} (ET_m)^{3/8} \dots \dots \dots \left\{ \frac{\frac{1}{u_M} \int_0^{u_M} f(u') du'}{0,4 S(u)} \right\}$$

avec $E_R = 27,2 \text{ eV}$ et la relation $s(u) = S(u) u^{-3/4}$ (figure A9)

Pour des primaires, on a vu $\frac{2,5}{u_M} \int_0^{u_M} f(u') du' \sim 1$; d'autre part

$S(u) \sim 1$ si $T_m \simeq E_d$ ou E_f (voir tableau A3 les valeurs correspondants $u = u_d$ et $u = u_f$)

On trouve :

$$\bar{T} = 4 Z^{7/12} E^{3/8} \left(\frac{T_m}{25}\right)^{3/8} \quad \text{(A17)}$$

(toutes énergies en eV)

Les valeurs \bar{T} ainsi obtenues pour $T_m = 25 \text{ eV}$ et $E = E_0$ sont reportées tableau A3.

3° - Longueurs

On donne, tableau A3 :

D la distance interatomique, en structure supposée compacte, c'est à dire que D est calculé par $D^3 = \sqrt{2}/N$, N étant le nombre d'atomes par cm^3 .

v unité de longueur dans le potentiel à grande distance (paragraphe II-2)

u unité de longueur dans le potentiel à courte distance (paragraphe II-2)

Elément	Z	E_0 (KeV)	\bar{T} (KeV)	η_f (10^{-3})	u_f (10^{-3})	u_d (10^{-3})	u_M (10^{-1})	D Å	ν Å	μ Å
G	6	1,2	0,16	12	24	32	2,2	2,322	0,2020	0,1823
Al	13	5,2	0,45	3,3	8,8	11	1,6	2,862	0,2129	0,1409
Ti	22	22	1,0	1,6	7,7	6,5	1,9	2,939	0,2143	0,1182
Fe	26	75	1,8	1,1	15	7,9	4,3	2,551	0,2068	0,1118
Cu	29	95	2,1	1,1	14	7,1	4,4	2,560	0,2017	0,1078
Ag	47	219	3,9	0,50	7,4	3,5	3,3	2,890	0,2193	0,0917
Au	79	980	9,2	0,25	7,0	2,2	4,3	2,880	0,2149	0,07720
U	92	920	10	0,24	4,5	1,5	2,9	3,091	0,2170	0,07338

On remarque : $u_f \sim 10^{-2}$ (2,5 à 0,4 10^{-2})
 $u_M \sim 0,3$ (0,44 à 0,16)
 $\nu \sim 0,21$

TABLEAU A3
(cas de primaires $Z=Z'$)

Manuscrit reçu le 3 décembre 1968

REFERENCES

- (1) J. A. BRINKMAN
On the Nature of Radiation Damage in Metals.
Journal of Applied Physics, 1954, 25, 961.
- (2) J. A. BRINKMAN
Production of Atomic Displacements by
High Energy Particles.
American Journal of Physics, 1956, 24, 246.
- (3) J. A. BRINKMAN
Fission Damage in Metals.
Dans "Radiation Damage in Solids". Academic Press, 1962
- (4) A. K. SEEGER
On the theory of radiation damage.
and radiation hardening. P/989 CONF. GENEVE 1958
- (5) Y. QUERE
Défauts ponctuels dans les métaux
MASSON 1967
- (6) J. R. BEELER, Jr.
"Displacement spikes in Cubic Metals"
Physical Review, 1966, 150, 470
- (7) J. B. GIBSON, A. N. GOLAND, M. MILGRAM et G. H. VINEYARD
Dynamic of Radiation Damage.
Physical Review, 1960, 120, 1229

- (8) C. ERGINSOY, G.H. VINEYARD et A. ENGLERT
Dynamics of Radiation Damage in a Body-Centered Cubic Lattice
Physical Review, 1964, 133, A595,
- (9) M.W. THOMPSON
dans "The interaction of radiation with solids"
North-Holland Publishing Company, 1964
- (10) L. LANDAU et E. LIFCHITZ
Mécanique
Editions de la Paix, MOSCOU.
- (11) J. LINDHARD et autres
- Notes on Atomic Collisions
Mat. Fys. Medd. 33, n° 10 et 14 1963
36, n° 10 1968
- "Radiations Damage in Solids" p. 65 à 75 AIEA, VIENNE 1962
- (12) H.B. HUNTINGTON
- Mobility of Interstitial Atoms
in a Face-Centered Metal.
Physical Review, 1953, 91, 1092
- Creation of Displacements in Radiation Damage.
Physical Review, 1954, 93, 1414
- (13) H.B. HUNTINGTON
dans "Solid State Physics", Volume 7.
Academic Press, 1958.
- (14) K. FUCHS
Proceeding Royal Society of LONDON. 1935, A 151, 585
1935, A 153, 622
1936, A 157, 444

- (15) C. KITTEL
Introduction à la Physique de l'Etat solide.
DUNOD, 1958.
- (16) L.I. SCHIFF
Quantum Mechanics.
Mc GRAW HILL, 1955.
- (17) R. LATTER
Thomas-Fermi and Thomas-Fermi-
Dirac Potentiels.
Physical Review. 1955, 99, 510.
- (18) N.F. MOTT et H. JONES
The Theory of the Properties of metals and Alloys.
Dover Publications, NEW-YORK, 1936.
- (19) D.T. EGGEN et M.J. LAUBENSTEIN
"Displacement Energy for Radiation Damage in Copper".
Physical Review. 1955, 91, 238.
- (20) E. MANN et A. SEEGER
"Zur Halb Empirischen Bestimmung der
Born-Mayer Konstanten"
Journal Phys. Chem. Solids, 1960, 12, 314.
- (21) J. RAPPENEAU et G. JOUQUET
dans "Les Carbones".
MASSON, 1965.
- (22) M.J. ATTARDO & J.M. GALLIGAN
"Presence of depleted zones in Platinum"
Physical Review Letters. 1966, 17, 191.

- (23) J. P. GENTHON
"Formulation des répartitions spectrales
énergétiques de flux neutroniques en pile"
C.E.A. - R. 2403 1964
- (24) Y. QUERE & NAKACHE
"Evaluation du volume d'une pointe de
fission dans l'Uranium"
Journal des Matériaux Nucléaires, 1959, 1, 203
- (25) J. BLOCH
"Effet de l'irradiation par les neutrons sur les
alliages Uranium-Fer à faible teneur en Fer"
Journal des Matériaux Nucléaires, 1962, 6, 203
- (26) D. LESUEUR
Amorphisation sous irradiation d'un alliage $P_d - S_i$
C.R. Acad. Sc. Paris, t. 266, p. 1038-1041 - 1968
- (27) L. R. ARONIN
"Effect of fast neutrons irradiation on order-disorder
in Nickel-Manganese alloys"
MIT 1107 - 1953
- (28) S. SIEGEL
"Effect of neutron bombardement on order
in the alloy Cu_3Au "
Physical Review, 1949, 75, 1823.
- (29) - J. P. GENTHON
"Détermination de doses Wigner dans le graphite"
C.E.A. R 3226 - 1967
- P. CHABRY, J. P. GENTHON, P. LIEVRE
"Dommages d'irradiation sous neutrons de pile"
C. E. A. N 874 - 1968

- (30) J. BRISBOIS, P. LIEVRE, SIVAGNANAM
"Calcul du flux de fission équivalent pour les dommages sur le
graphite dans les piles à graphite"
C. E. A. N 587 - 1966
- (31) J. P. GENTHON et autres
AERE R 4500 p. 54 à 59 - 1964
- (32) A. C. DAMASK & G. J. DIENES
"Point Defects in Metals"
GORDON and BREACH Editeurs, LONDON, - 1963

FIN