

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE Dr. TAHAR MOULAY SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité : **PHYSIQUE**

Option : **Physique des matériaux**

Par

Ouis Maamar

Sur le thème

Etude des collisions atomiques dans le tantale (Ta) par
l'approximation des collisions binaires (BCA)

Soutenu le **18 /06/2014** devant le jury composé de

Mr. ELIAS Abdelkader	Professeur	(Université de Saïda)	Président
Mr. DJAAFRI Abdelkader	Maître Assistant A	(Université de Saïda)	Rapporteur
Mr. BOUDALI Abdelkader	Maître de Conférences A	(Université de Saïda)	Examineur
Mr. MESKINE Mohamed	Maître Assistant A	(Université de Saïda)	Examineur

Année Universitaire 2013 - 2014

Dédicace

Je dédie ce modeste travail aux êtres qui me sont les plus chers, et sans eux je n'aurai jamais réussi est qui sont :

- Les personnes qui m'ont apporté **leur soutien**.
- A mon **cher père** qui m'a soutenu pendant toute sa vie pour que j'arrive à ce jour là.
- A celle qui m'a transmis la vie, l'amour et le courage, à toi ma très **chère mère, ma fierté**.
- A mes grands pères et à mes grand-mères.
- A mon beau père Bachir.
- A ma belle mère Noria.
- Ma chère **Nadia**.
- Mon fils **Amir**.
- A mes oncles Djeloul, Moussa, Madjadji, Bachir.
- A mes frères, mes sœurs, mes beaux frères et mes belles sœurs.
- A mes professeurs.
- A mes amis, Amine, Abed el karim, B .mohamed, Nordinne, Messoud, Omar, mohamed, ainsi qu'à toute **ma famille** et à toutes **les personnes chères à mon cœur** et qui ont une place dans ma vie.

Ouis Maamar

Remerciements

Au Nom d'Allah le Clément le Miséricordieux qu'à travers son aide on a pu réaliser notre rêve d'enfance.

Nous tenons à remercier en premier lieu, Mr **A. DJAAFRI** notre encadreur, pour son aide, son soutien et surtout ses précieux conseils.

Nous souhaiterions, d'autre part que tous ceux qui ont contribué à l'élaboration de ce modeste travail, trouvent ici, l'expression de ma gratitude et de ma reconnaissance.

Que soient remerciés également tous les enseignants de la faculté des Sciences, du département de physique option physique de matériaux, particulièrement Mr **A. BOUDALI**, ainsi que les enseignants **A. ELIAS**, **M. MESKINE**, **A. SOUIDI**, **T. DJAAFRI**, **M. ZEMOULI**, **K. AMARA**, **S. KOUIDRI**, **F. KHALFAOUI**, **F. MEKKAOUI** et madame **N. BEKHALED**.

Nous tenons à remercier aussi tous les membres de l'**administration** pour leur soutien et leur disponibilité.

Enfin, nos remerciements aux responsables de la bibliothèque pour leur disponibilité, leur aide et leur affabilité.

Sommaire

Liste des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale	2
<i>CHAPITRE I : L'approximation des collisions binaires</i>	
I.1 Introduction	6
I.2 Description du processus de cascade	6
I.2.1 La cascade de déplacement	7
I.2.2 Le pic thermique	8
I.2.3 La création des défauts stables	8
I.3 Cinétique des collisions élastiques	9
I.3.1 Référentiel du laboratoire	9
I.3.2 Référentiel de centre de masse	10
I.3.3 Relations entre le système du laboratoire et du centre de masse	12
I.3.4 Transfert d'énergie	14
I.3.5 L'angle de diffusion et l'intégrale du temps	15
I.4 Les pertes d'énergie	18
I.4.1 Pertes d'énergie inélastiques	19
I.4.2 Pertes d'énergie élastiques	22
I.5 Energie seuil de déplacement	23
I.6 Nombre d'atomes déplacés et paires de Frenkel	23
I.6.1 Modèle de Kinchin-Pease	25
I.6.2 Modèle NRT	25
I.7 Limites de l'approximation des collisions binaires	26

CHAPITRE II : Modèle de simulation

II.1 Introduction	29
II.2 La structure du programme et modèle d'analyse	30
II.3 Description de la cible et conditions d'irradiation	33
II.4 Sélection des atomes cibles	34
II.5 Le potentiel d'interaction	36
II.5.1 Potentiel de Molière	37
II.5.2 Potentiel de Born - Mayer	37
II.5.3 Potentiel de Ziegler, Biersack et Littmark	38
II.5.4 Potentiel modifié de Lenz-Jensen	38
II.5.5 Potentiel de Morse	39
II.6 L'énergie inélastique perdue	39
II.7 Les vibrations thermiques	40
II.8 Les défauts ponctuels	40

CHAPITRE III : Résultats et discussion

III.1 Introduction	43
III.2 Ajustement du potentiel	44
III.3 Atomes en mouvement	47
III.4 Atomes déplacés	50
III.5 L'énergie cinétique	53
III.6 Paires de Frenkel	56
Conclusion générale	62
Bibliographie	65

Liste des figures

CHAPITRE I

Figure I.1	Une représentation schématique d'une cascade de collision dans l'approximation des collisions binaires.	7
Figure I.2	Schéma d'une collision binaire dans le système de référence du laboratoire.	10
Figure I.3	Relations entre les vitesses dans les référentiels du laboratoire et du centre de masse.	12
Figure I.4	Définition de l'angle de diffusion ϑ et des coordonnées $r(t)$ et $\varphi(t)$ dans le référentiel du centre de masse.	16
Figure I.5	Trajectoires du projectile et de la cible et les asymptotes de leurs trajectoires dans le référentiel de laboratoire .	18
Figure I.6	Schéma d'une séquence de remplacement.	24

CHAPITRE II

Figure II.1	Schéma de sélection des cibles. Les atomes en bleu sont des cibles possibles, ceux en marron sont des cibles rejetées.	34
Figure II.2	Schéma représentant les bases de la procédure de recherche des cibles.	35
Figure II.3	Schéma de collisions simultanées.	36

CHAPITRE III

Figure III.1	Ajustement des potentiels prédéfinis dans Marlowe au potentiel ADP.	46
Figure III.2	Nombre moyen d'atomes en mouvement dans la cascade en fonction du temps pour les températures du cristal 0, 300 et 1000 K.	49
Figure III.3	Nombre moyen d'atomes déplacés en fonction du temps pour les températures de cristal 0, 300 et 1000 K.	52
Figure III.4	L'énergie cinétique moyenne de la cascade en fonction du temps.	55
Figure III.5	Nombre moyen de paires de Frenkel en fonction de l'énergie cinétique du projectile.	58
Figure III.6	Nombre moyen de paires de Frenkel en fonction de la distance de séparation interstitiel-lacune.	61

Liste des tableaux

Tableau III.1	Le nombre moyen d'atomes en mouvement en fonction du temps pour les températures du cristal 0, 300 et 1000 K. L'énergie cinétique du projectile est $E_0 = 10 \text{ keV}$.	48
Tableau III.2	Le nombre moyen d'atomes déplacés en fonction du temps pour les températures du cristal 0, 300 et 1000 K. L'énergie cinétique du projectile est $E_0 = 10 \text{ keV}$.	51
Tableau III.3	L'énergie cinétique moyenne des atomes en mouvement dans la cascade en fonction du temps pour les températures du cristal 0, 300 et 1000 K. L'énergie cinétique du projectile est $E_0 = 10 \text{ keV}$.	54
Tableau III.4	Le nombre moyen de paires de Frenkel calculé par Marlowe et estimé par les modèles de Kinchin-Pease et NRT en fonction de l'énergie cinétique du projectile.	57
Tableau III.5	Le nombre moyen de paires de Frenkel corrélés, non corrélés et le nombre total en fonction de la distance de séparation de la paire interstitiel-lacune pour $E_0 = 10 \text{ keV}$.	60

Introduction Générale

Introduction générale

L'étude des dégâts d'irradiation dans les solides a pris un essor considérable lorsque se sont posés certains problèmes liés au développement des réacteurs nucléaires et aux composants électroniques présents sur les véhicules spatiaux soumis aux radiations de l'espace. On s'était alors aperçu que certaines propriétés physiques des corps solides pouvaient être modifiées sous l'effet de l'irradiation [1]. Comme dans toute recherche, les premiers travaux furent essentiellement descriptifs et fragmentaires. C'est dans les années 60 qu'apparaissent les premiers éléments théoriques permettant d'établir un lien entre les différents résultats concernant l'interaction atome-solide. On a pu ainsi, à l'aide d'un même formalisme, déterminer les profondeurs moyennes de pénétration des projectiles implantés [2], leur distribution spatiale et celle de l'énergie déposée, les taux de pulvérisation et de rétrodiffusion lors du bombardement de milieux amorphes [3].

L'objectif principal de notre étude est de simuler, par utilisation du code Marlowe l'irradiation du tantale et d'étudier la formation des défauts suite à cette irradiation. Ce code utilise l'approximation des collisions binaires (BCA) pour développer la cascade à l'intérieur du matériau. La BCA permet de calculer rapidement le développement des cascades sur machine et conduit à une accumulation de statistiques énormes pour l'étude des effets d'irradiation des solides.

Notre intérêt pour le tantale, qui est un métal de transition, vient des enjeux technologiques et économiques très importants liés aux propriétés intéressantes de ce métal et ses alliages. En effet, il possède une combinaison exceptionnelle de propriétés : il a un point de fusion de presque 3000°C [4], présente une excellente résistance à la corrosion, sa mise en forme est aisée et il conserve de très bonnes propriétés mécaniques à haute température.

De plus, la fine couche d'oxyde qui se forme naturellement à la surface du tantale a d'excellentes propriétés diélectriques.

Ainsi, le tantale et ses alliages sont-ils des matériaux de choix pour des applications variées dans des secteurs tels que l'électronique (condensateurs, les écrans à cristaux liquides, les filtres d'ondes acoustiques de surface, les puces d'accès aléatoire dynamique...), l'industrie chimique et pharmaceutique, l'armement (blindages, perforateurs...), la fonderie (éléments d'addition dans les superalliages), la fabrication de fours. Le secteur automobile consomme aussi de plus en plus de tantale. Ceci s'explique par la présence de plus en plus courante d'électronique comme les GPS, les systèmes anticollisions et autre gadgets. Ces types de produits ne sont qu'à leurs débuts, on peut donc prévoir une importante augmentation de la consommation de tantale dans ce secteur pour les quinze prochaines années. Les alliages à base de tantale sont utilisés pour augmenter la résistance à la corrosion et améliorer les propriétés mécaniques du tantale à haute température [5].

*L*es premiers travaux portant sur l'irradiation du tantale ont été publiés dans les années 70 et avaient pour but la détermination de l'énergie de déplacement dans ce matériau [6,7]. Après, des efforts considérables ont été fournis pour développer un potentiel d'interaction atomique semi-empirique pour le tantale.

*C*es travaux incluent la méthode de l'atome entouré (Embedded Atom Method (EAM)) [8-16], Finnis-Sinclair (FS) [17-20], la méthode modifiée de l'atome entouré (Modified Embedded Atom Method (MEAM)) [21], le potentiel à dépendance angulaire (Angular Dependent Potential (ADP)) [22,23] et des potentiels basés sur la théorie du modèle généralisé des pseudo-potentiels (Model Generalized Pseudopotential Theory (MGPT)) [24-27].

*E*n 2004, Pierre-Mattieu Anglade a étudié le comportement mécanique du tantale sous pression par la dynamique moléculaire [28]. Broeders et Konobeyev ont publié leurs travaux sur la section efficace de déplacement dans le tantale suite à son irradiation avec des neutrons et des protons à des énergies allant jusqu'à 1 GeV [29,30]. Peu après, des études touchant certains aspects de développement de la cascade et la formation des défauts dans le tantale par irradiation interne ont vu le jour [31].

Mais ces études utilisaient des potentiels d'interaction atomique prédéfinis dans le programme de simulation Marlowe et ne faisaient aucune paramétrisation de la BCA par la dynamique moléculaire (MD). Très récemment, les résultats des effets du potentiel d'interaction atomique et de la température sur les séquences de remplacement dans le tantale ont été publiés [32].

Nous proposons dans notre travail, une étude approfondie des dégâts dans le tantale par irradiation externe. Nous utilisons pour l'interaction $Ta - Ta$ le potentiel interatomique de Born-Mayer ajusté au potentiel semi-empirique ADP[22, 23,33] et nous faisons une paramétrisation adéquate des grandeurs énergétiques de la BCA par certains résultats de la dynamique moléculaire.

Le premier chapitre de ce manuscrit sera l'occasion pour présenter une description du modèle de l'approximation des collisions binaires. Cette première partie nous permettra de placer les bases théoriques et de cadrer plus précisément le domaine de notre étude.

Le deuxième chapitre est dédié à la description du programme Marlowe utilisé pour calculer différentes grandeurs à relation avec le développement des cascades et les dégâts causés suite à l'irradiation du cristal.

Dans le troisième chapitre, sont décrits et discutés les principaux résultats que nous avons obtenus tels que l'évolution temporelle de la dissipation de l'énergie de la cascade, le nombre d'atomes en mouvement, le nombre d'atomes déplacés et le nombre de paires de Frenkel suite à l'irradiation du métal. Nous présentons aussi les résultats des effets des vibrations thermiques sur différentes quantités liées au développement de la cascade.

Chapitre I

L'approximation des Collisions

Binaires

I.1- Introduction :

Un ion pénétrant dans la matière interagit principalement avec le milieu par une série de collisions. Il existe différents modèles permettant de simuler le déplacement des atomes dans la cible irradiée. Deux grandes catégories de modélisation sont à différencier : la première utilise la méthode de dynamique moléculaire, la seconde travaille dans l'approximation des collisions binaires.

La méthode de dynamique moléculaire est plus précise mais son grand défaut est d'être coûteuse en temps de calcul.

La méthode utilisant l'approximation des collisions binaires est plus simple à mettre en œuvre et plus rapide en temps de calcul, ce qui est un facteur de choix important.

Le modèle de l'approximation des collisions binaires est une méthode utilisée en physique dans l'irradiation par ion pour estimer par simulation la profondeur de pénétration et la production des défauts par des ions énergétiques dans le solide. Dans cette méthode, on suppose que l'ion se meut dans le matériau en effectuant des collisions binaires indépendantes avec les atomes du milieu. Les trajectoires des particules avant et après collisions sont remplacées par leurs asymptotes et les mouvements sont uniformes. Les collisions atomiques sont considérées comme étant élastiques et la perte d'énergie provient de l'excitation électronique [34-40].

La collision atomique élastique est décrite de façon satisfaisante par la mécanique classique. Les lois de conservation de l'énergie et du quantité de mouvement sont appliquées pour calculer les différentes grandeurs physiques de la collision.

I.2- Description du processus de cascade :

Le processus qui permet la création de défauts stables depuis le passage de la particule, peut être décomposé en trois étapes :

1.2.1- La cascade de déplacements :

Considérons un solide irradié par un ensemble de particules. Celles-ci ont une certaine probabilité de déplacer des atomes de la cible en leur fournissant une énergie suffisante pour qu'ils ne réintègrent pas leur site initial. Nous appellerons "primaires" de tels atomes. Ils sont désignés également par l'acronyme PKA qui signifie en anglais « Primary Knock on Atoms ». Ceux-ci sont susceptibles d'interagir avec d'autres atomes de la cible ("secondaires"), en créant de nouveaux déplacements, et ainsi de suite (voir figure 1.1). On a ainsi création d'une cascade d'interactions, qui se traduit par la formation d'un ensemble d'atomes déplacés dans des zones cristallines réduites. Il est communément admis qu'un atome ayant subi une collision, est déplacé définitivement de son site cristallin s'il reçoit une quantité d'énergie supérieure à une énergie E_d appelée énergie seuil de déplacement. Si les PKAs créés ont de faibles énergies, les cascades ne peuvent pas se développer et seuls quelques défauts isolés sont produits. Pour des particules lourdes ou énergétiques, le désordre dans le réseau atomique peut être important. Des amas d'atomes déplacés peuvent être produits [41,42].

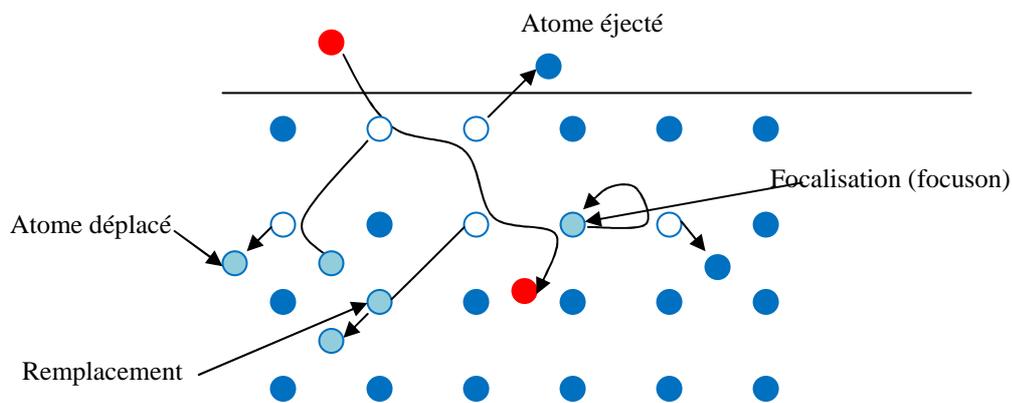


Figure I.1- Une représentation schématique d'une cascade de collision dans l'approximation des collisions binaires.

Lors de développement d'une cascade, plusieurs évènements peuvent avoir lieu. Ainsi un évènement de focalisation se produit lorsque le projectile éjecte un atome de son site et retourne au site dont il est issu pour s'immobiliser. Si le projectile remplace la cible l'évènement est dit remplacement.

Pour des matériaux à structure cristalline un phénomène de canalisation est observé. La structure cristalline joue un effet directionnel important lorsque la pénétration du projectile se fait suivant des axes cristallographiques à faibles indices. Dans ce cas, la probabilité de collision projectile-cible diminue par rapport à une pénétration suivant des axes à grands indices ou dans un matériau amorphe. La perte d'énergie dans ces conditions est plus faible et la distance de pénétration du projectile dans la cible est relativement grande.

1.2.2- Le pic thermique :

Au cours de passage du PKA dans le matériau, il peut céder son énergie à la totalité des atomes d'un petit élément de volume. Localement la densité d'énergie déposée peut être très importante et une augmentation de la température autour de la trace se produit. On parle, alors, de pic de chaleur « thermal spike ». La température de fusion du matériau peut être atteinte, ce qui entraîne la création de poches amorphes. Rapidement, entre 10^{-15} s et 10^{-12} s, ces dernières vont recristalliser [41,42].

1.2.3- La création de défauts stables :

Dans les instants qui suivent la dissipation de l'énergie décrite par le "pic thermique" et la création de poches amorphes, le réseau atomique se réarrange pour minimiser son énergie potentielle et ainsi atténuer le désordre cristallin. Les lacunes et les interstitiels produits vont par effet thermique diffuser dans le réseau atomique jusqu'à rencontrer une autre entité qui la stabilise.

Les défauts qui se formeront au final dépendront de la topologie du désordre créé à l'issue de la phase de cascade et des processus de guérison. Au final, on peut trouver des zones de plus fortes densités de défauts stables. On parle d'amas de défauts (cluster) [41,42].

I.3- Cinétique des collisions élastiques :

Dans une collision élastique entre deux particules, le mouvement de celles-ci peut être représenté soit en coordonnées du laboratoire, ce qui simplifie la compréhension, soit dans le référentiel du centre de masse, ce qui simplifie souvent les calculs.

I.3.1- Référentiel du laboratoire :

Considérons que l'atome cible de masse m_2 est au repos. Le projectile a une masse m_1 , une vitesse initiale \vec{v}_0 et une énergie initiale E_0 . Il est supposé qu'une perte d'énergie inélastique Q peut avoir lieu menant à une excitation des électrons ou une ionisation de l'atome cible ou du projectile ou tous les deux en même temps. La loi de conservation de l'énergie totale du système dans le référentiel du laboratoire donne [43,44]

$$E_0 = E_1 + E_2 + Q \quad (1.1)$$

$$\frac{1}{2} m_1 v_0^2 = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 + Q \quad (1.2)$$

E_1 , \vec{v}_1 et E_2 , \vec{v}_2 sont, respectivement, les énergies et les vitesses du projectile et de l'atome cible après la collision. La conservation de la quantité de mouvement du système donne [43]

$$m_1 \vec{v}_0 = m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2$$

Par projection sur les axes Ox et Oy on obtient

$$m_1 v_0 = m_1 v_1 \cos\theta_1 + m_2 v_2 \cos\theta_2 \quad (1.3)$$

$$0 = m_1 v_1 \sin\theta_1 - m_2 v_2 \sin\theta_2 \quad (1.4)$$

ou θ_1 est l'angle de diffusion du projectile et θ_2 est l'angle de diffusion de l'atome cible par rapport à la direction d'incidence initiale comme il est montré à la figure 1.2.

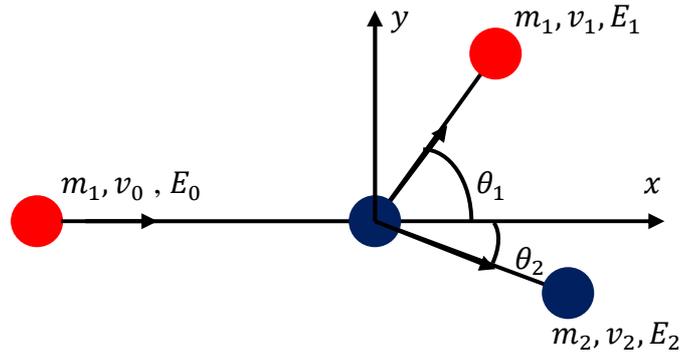


Figure I.2-Schéma d'une collision binaire dans le système de référence du laboratoire.

À partir des relations de conservation de l'énergie totale et du quantité de mouvement on peut déterminer les angles θ_i [43]. Par un calcul direct on trouve

$$\cos\theta_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_1}{E_0}} (1 + A) + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_0}{E_1}} \left[1 - A \left(1 - \frac{Q}{E_0} \right) \right] \quad (1.5)$$

$$\cos\theta_2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_2}{E_0}} \frac{1 + A}{\sqrt{A}} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_0}{E_2}} \frac{1}{\sqrt{A}} \frac{Q}{E_0} \quad (1.6)$$

avec $A = m_2/m_1$.

1.3.2- Référentiel de centre de masse :

Dans le référentiel de centre de masse, les deux atomes sont en mouvement. Seul le centre de masse est immobile.

Ce référentiel se déplace à la vitesse \vec{v} par rapport au référentiel du laboratoire. Les lois de conservation de l'énergie totale et du quantité de mouvement dans le référentiel du centre de masse s'écrivent [43,44]

$$E_{1c} + E_{2c} = E'_{1c} + E'_{2c} + Q \quad (1.7)$$

$$\frac{1}{2} m_1 v_{1c}^2 + \frac{1}{2} m_2 v_{2c}^2 = \frac{1}{2} m_1 v'_{1c}{}^2 + \frac{1}{2} m_2 v'_{2c}{}^2 + Q \quad (1.8)$$

$$m_1 \vec{v}_{1c} + m_2 \vec{v}_{2c} = m_1 \vec{v}'_{1c} + m_2 \vec{v}'_{2c} = 0 \quad (1.9)$$

où \vec{v}_{1c} et \vec{v}_{2c} sont les vitesses du projectile et de la cible avant la collision et \vec{v}'_{1c} et \vec{v}'_{2c} sont les vitesses du projectile et de l'atome cible après la collision. La loi de composition des vitesses donne

$$\begin{cases} \vec{v}_{1c} = \vec{v}_0 - \vec{v} \\ \vec{v}_{2c} = -\vec{v} \end{cases} \quad (1.10)$$

De (1.9) et (1.10) nous pouvons écrire [43]

$$\vec{v} = \frac{1}{1+A} \vec{v}_0 \quad (1.11)$$

$$v_{1c} = \frac{A}{1+A} v_0 \quad (1.12)$$

$$\vec{v}_{2c} = -\frac{1}{1+A} \vec{v}_0 \quad (1.13)$$

L'énergie totale dans le système de centre de masse (ou l'énergie relative) s'écrit à partir des relations (1.8), (1.12) et (1.13)

$$E_r = E_{1c} + E_{2c} = \frac{A}{1+A} E_0 \quad (1.14)$$

I.3.3- Relations entre le système du laboratoire et de centre de masse :

L'angle de diffusion dans le système de laboratoire est déterminé à partir de l'angle de diffusion dans le système de centre de masse. Donc, il est nécessaire de connaître les relations de transformation entre les deux systèmes. De la figure 1.3 il vient [43] :

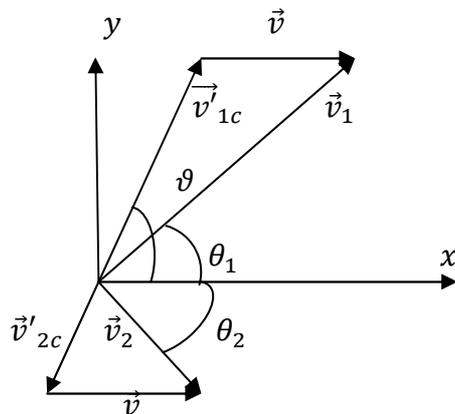


Figure I.3- Relations entre les vitesses dans les référentiels du laboratoire et du centre de masse.

$$\vec{v}_1 = \vec{v}'_{1c} + \vec{v}$$

Par projection sur les axes Ox et Oy on trouve :

$$v'_{1c} \sin\vartheta = v_1 \sin\theta_1 \quad (1.15)$$

$$v'_{1c} \cos\vartheta + v = v_1 \cos\theta_1 \quad (1.16)$$

Ceci donne

$$\tan\theta_1 = \frac{\sin\vartheta}{\cos\vartheta + v/v'_{1c}} \quad (1.17)$$

À partir des relations (1.8), (1.9) et (1.11) nous obtenons

$$\left(\frac{v'_{1c}}{v_{1c}}\right)^2 = 1 - \frac{1+A}{A} \frac{Q}{E_0} = 1 - \frac{Q}{E_r} = f^2 \quad (1.18)$$

où $f = \sqrt{1 - \frac{Q}{E_r}}$.

À partir des équations (1.11), (1.12) et (1.18) nous aboutissons à

$$\frac{v}{v'_{1c}} = (f A)^{-1} \quad (1.19)$$

L'équation (1.17) devient

$$\tan\theta_1 = \frac{A f \sin\vartheta}{1 + A f \cos\vartheta} \quad (1.20)$$

De la même manière, nous obtenons pour l'angle θ_2

$$\tan\theta_2 = \frac{\sin\vartheta}{1 - f \cos\vartheta} \quad (1.21)$$

Finalement, nous pouvons écrire de (1.20), (1.21) et la relation trigonométrique générale

$$\cos\theta = 1/\sqrt{1 + \tan^2(\theta)}$$

$$\cos\theta_1 = \frac{1 + A f \cos\vartheta}{\sqrt{1 + 2 A f \cos\vartheta + A^2 f^2}} \quad (1.22)$$

$$\cos\theta_2 = \frac{1 - f \cos\vartheta}{\sqrt{2 - 2 f \cos\vartheta - (1 - f^2) \cos^2\vartheta}} \quad (1.23)$$

1.3.4- Transfert d'énergie :

Les énergies du projectile et de l'atome cible après le choc peuvent être calculées à partir des relations (1.5) et (1.6) [43,44]

$$\frac{E_1}{E_0} = \frac{1}{(1+A)^2} \left(\cos\theta_1 \pm \sqrt{A^2 f^2 - \sin^2\theta_1} \right)^2 = \left(\frac{v_1}{v_0} \right)^2 \quad (1.24)$$

$$\frac{E_2}{E_0} = \frac{A}{(1+A)^2} \left(\cos\theta_2 \pm \sqrt{f^2 - \sin^2\theta_2} \right)^2 = A \left(\frac{v_2}{v_0} \right)^2 \quad (1.25)$$

Si nous utilisons l'angle de diffusion dans le système de centre de masse au lieu des angles de diffusion dans le laboratoire nous aurons pour (1.24) et (1.25)

$$\frac{E_1}{E_0} = \frac{1}{(1+A)^2} \left((1+Af)^2 - 4Af \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right) \quad (1.26)$$

$$\frac{E_2}{E_0} = \frac{A}{(1+A)^2} \left((1-f)^2 + 4f \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right) \quad (1.27)$$

L'utilisation de (1.14) dans (1.27) donne l'expression suivante pour l'énergie transférée à la cible

$$E_2 = T = \frac{E_r}{(1+A)} \left((1-f)^2 + 4f \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right) \quad (1.28)$$

L'énergie cinétique (1.28) prend sa valeur maximale lorsque l'énergie transférée aux électrons est nulle ($Q = 0$, ce qui revient à poser $f = 1$) et $\sin^2(\vartheta/2)$ est égal à l'unité. Donc

$$T_m = \frac{4}{1+A} E_r = \frac{4A}{(1+A)^2} E_0 \quad (1.29)$$

1.3.5- L'angle de diffusion et l'intégrale du temps :

L'ingrédient principal des simulations est la description des forces d'interaction entre les atomes. La justesse du modèle d'interaction entre les atomes influence bien évidemment la qualité du résultat et sa complexité détermine le temps de calcul nécessaire à l'obtention du résultat. Le potentiel d'interaction interatomique est une fonction des positions des atomes. Cette fonction est invariante vis-à-vis des translations et des rotations d'ensemble et elle est généralement construite à partir des positions relatives des atomes entre eux plutôt qu'à partir de leur position absolue. Les forces sur les atomes sont ensuite obtenues en calculant le gradient du potentiel .

Pour deux corps (projectile-cible), le potentiel d'interaction atomique dépendant de la distance r entre les atomes ($r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$), Suite à cette supposition et à la conservation du moment cinétique le mouvement des atomes s'effectue dans un plan. L'énergie totale dans le système de centre de masse est [43,44]

$$E_c = \frac{1}{2}m_1v_{1c}^2 + \frac{1}{2}m_2v_{2c}^2 \quad (1.30)$$

avec les formules (1.12) et (1.13), la relation (1.30) peut être réécrite sous la forme

$$E_c = \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} v_0^2 = E_r \quad (1.31)$$

Le problème de deux corps en interaction ($V(r) = V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$) est équivalent au mouvement d'une particule de masse $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ (appelée masse réduite) dans un champ de force centrale. Comme il est montré à la figure 1.4, en coordonnées polaires, nous pouvons écrire pour cette particule

$$\frac{\mu}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + V(r) = E_r \quad (1.32)$$

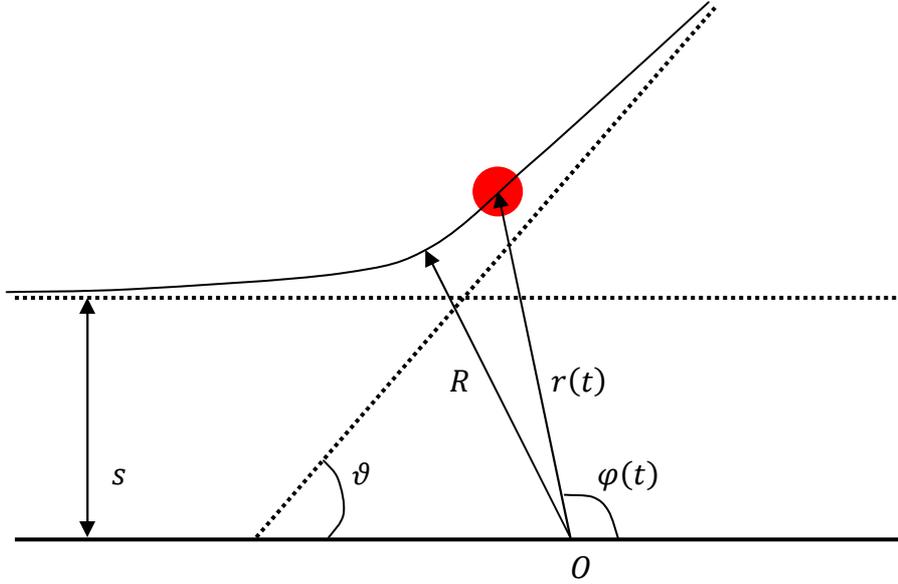


Figure I.4- Définition de l'angle de diffusion ϑ et des coordonnées $r(t)$ et $\varphi(t)$ dans le référentiel de centre de masse.

La conservation du moment cinétique donne [43]

$$r^2 \dot{\varphi} = -v_0 s \quad (1.33)$$

où s est le paramètre d'impact qui est la distance perpendiculaire entre la trajectoire initiale du projectile et la position initiale de la cible. La substitution de (1.33) dans (1.32) permet la détermination de la dépendance temporelle de r

$$\dot{r} = \pm \sqrt{\frac{2}{\mu} [E_r - V(r)] - \frac{v_0^2 s^2}{r^2}} = \pm v_0 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{s^2}{r^2}} \quad (1.34)$$

\dot{r} change de signe au point où $\dot{r} = 0$. Le plus ou moins fait la distinction entre les deux phases de la collision (l'approche et la séparation). La distance minimale d'approche, R , entre les deux atomes en collision est donnée par

$$g(R) = 0 \quad (1.35)$$

$$g(r) = \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{s^2}{r^2}} \quad (1.36)$$

La dépendance de φ de r peut être évaluée de (1.33) et (1.34)

$$\frac{d\varphi}{dr} = \frac{\dot{\varphi}}{\dot{r}} = \pm \frac{s}{g(r) r^2} \quad (1.37)$$

d'où

$$\int_{\pi}^{\vartheta} d\varphi = 2 s \int_{\infty}^R \frac{dr}{r^2 g(r)}$$

Ce qui donne pour l'angle de diffusion

$$\vartheta = \pi - 2 s \int_R^{\infty} [r^2 g(r)]^{-1} dr \quad (1.38)$$

L'intégrale du temps est selon [34,43,45] donné par

$$\tau = \sqrt{R^2 - s^2} - \int_R^{\infty} dr \left[\frac{1}{g(r)} - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{s^2}{r^2}}} \right] \quad (1.39)$$

Les intégrales dans les relations (1.38) et (1.39) sont évaluées numériquement par l'une des formules de quadrature connues comme celle de Gauss-Legendre par exemple [46].

Les abscisses x_1 et x_2 des points d'intersection des asymptotes (voir figure 1.5) sont d'après [34,43] données par

$$x_1 = \frac{[(1 + f) \tau + (f A - 1) s \tan \frac{\vartheta}{2}]}{f (1 + A)} \quad (1.40)$$

$$x_2 = s \tan \frac{\vartheta}{2} - x_1 \quad (1.41)$$

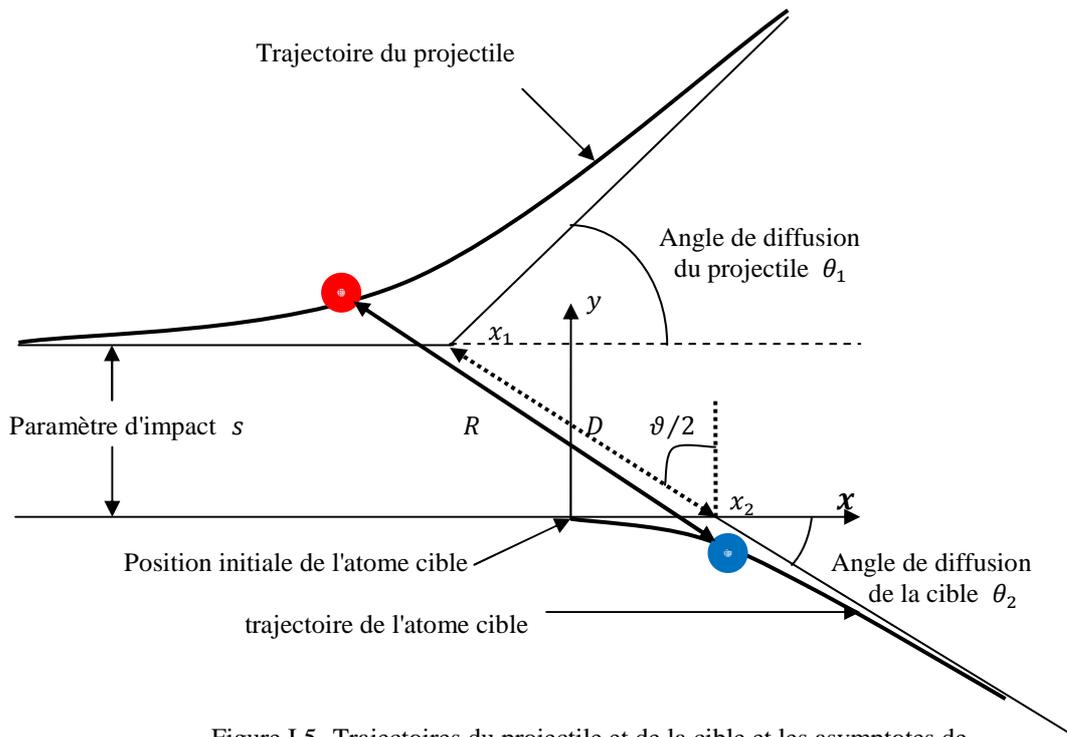


Figure I.5- Trajectoires du projectile et de la cible et les asymptotes de leurs trajectoires dans le référentiel du laboratoire.

I.4- Les pertes d'énergie :

Une particule chargée pénétrant dans un solide va perdre son énergie par différents types d'interactions avec le milieu cible pour s'arrêter finalement à une certaine profondeur ou rebondir à la surface (phénomène de rétrodiffusion), ou encore transmise si elle a assez d'énergie. Deux processus décrivent cette perte d'énergie. En fonction du domaine d'énergie utilisé et de la masse atomique du projectile, l'un des deux processus devient dominant par rapport à l'autre. Le premier processus est la collision nucléaire traduisant le choc élastique direct des projectiles avec les atomes du matériau. Quand au deuxième, il est dit collision électronique. Il décrit l'interaction inélastique des projectiles avec le cortège électronique des atomes cibles. Ces deux pertes d'énergies, bien que corrélées, sont considérées comme indépendantes avec une bonne approximation [44,47-49].

La superposition des deux processus donne le pouvoir d'arrêt total qui est proportionnel à la perte énergétique de l'ion rapportée à la distance parcourue. La perte d'énergie par unité de longueur est donnée par [44,49,50]

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{totale} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_i + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e \quad (1.42)$$

Le pouvoir d'arrêt total $S(E)$ a pour expression [49,51] :

$$S(E) = \frac{1}{N} \frac{dE}{dx} = S_e + S_i \quad (1.43)$$

où E est l'énergie cinétique du projectile, S_e est le pouvoir d'arrêt élastique, S_i est le pouvoir d'arrêt inélastique et N est la concentration atomique de la cible.

1.4.1- Pertes d'énergie inélastiques

Le pouvoir d'arrêt inélastique est complexe à déterminer car il comprend différents types de collisions mettant en jeu les électrons des atomes. Les pertes d'énergie inélastiques résultent de la quantité d'énergie cédée aux électrons des atomes qui composent le matériau.

Le modèle de calcul de $S_i(E)$ dépend de la vitesse du projectile (et donc de son énergie E) et de Z_1 le numéro atomique du projectile. On peut séparer le pouvoir d'arrêt selon deux régimes de vitesse, entre ces deux régimes, le pouvoir d'arrêt atteint son maximum pour la vitesse de projectile égale à $v = Z_1^{2/3} V_B$ où V_B représente la vitesse de Bohr ($V_B = e^2/\hbar$) [50].

Dans le régime de basse vitesse ($v \ll Z_1^{2/3} V_B$), deux modèles principaux peuvent être utilisés pour les collisions électroniques : le modèle LSS (J. Lindhard, M. Scharff et H. E. Schiott) [52] et le modèle de Firsov [53].

Dans le modèle LSS, l'ion incident cède une partie de ses électrons qui se couplent alors à ceux des atomes cibles [50]. Ce réarrangement induit un transfert d'énergie au nuage électronique, en produisant des vibrations thermiques au sein de celui-ci. Le pouvoir d'arrêt électronique est souvent décrit par ce modèle exprimé comme suit [49-52] :

$$S_i = \frac{8 \pi e^2 a_B}{4 \pi \varepsilon_0} \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \frac{v}{V_B} D' = k \sqrt{E} \quad (1.44)$$

D' désigne la densité électronique de la cible, a_B le rayon de Bohr ($a_B = 0.529 \text{ \AA}$), ε_0 est la constante diélectrique du vide, e la charge de l'électron, Z_2 le numéro atomique de l'atome cible et k une constante définie par (1.44) et qui est tabulée théoriquement par Lindhard et al [54]. Ce résultat indique que le pouvoir d'arrêt électronique a un caractère non local puisqu'il est indépendant de la position du projectile par rapport à la cible. En conséquence, il est indépendant du paramètre d'impact [49].

Le modèle de Firsov, modélise le projectile et l'atome-cible comme une quasi molécule, dans laquelle les états électroniques deviennent des orbitales moléculaires dont l'énergie dépend de la distance entre les noyaux [49-51]. L'interaction entre les deux corps donne lieu à des échanges électroniques qui produisent une décélération de la vitesse du projectile. Le pouvoir d'arrêt inélastique obtenu par Firsov est donné par [49-51]

$$S_i = 5.15 \cdot 10^{-15} (Z_1 + Z_2) \frac{v}{V_B} \quad (\text{eV} \cdot \text{cm}^2) \quad (1.45)$$

Dans le régime de haute vitesse ($v \gg Z_1^{2/3} V_B$), l'ion incident est totalement épluché de ses électrons. La modélisation du pouvoir d'arrêt peut, en général, nécessiter l'utilisation de la mécanique quantique. Toutefois pour les ions lourds, le traitement classique s'avère donner des résultats satisfaisants. La formule de Bohr classique donne S_i [49]

$$S_i = \frac{4 \pi e^4}{(4 \pi \varepsilon_0)^2} \frac{Z_1^2 Z_2}{m_e v^2} \ln \left(\frac{4 \pi \varepsilon_0}{Z_1 e^2} \frac{m_e v^3}{\omega} \right) \quad (1.46)$$

où m_e est la masse de l'électron et ω une pulsation donnée par $\omega \approx v/s_{max}$ avec s_{max} le paramètre d'impact maximal.

Le traitement quantique du pouvoir d'arrêt mène à la formule de Bethe [49,50,55] :

$$S_i = \frac{4 \pi e^4}{(4 \pi \varepsilon_0)^2} \frac{Z_1^2 Z_2}{m_e v^2} \ln \left(\frac{2 m_e v^2}{I} \right) \quad (1.47)$$

où I est le potentiel moyen d'ionisation ($I = 10 eV \cdot Z_2$). Il est à noter que la différence entre le résultat classique et quantique ne réside que dans la partie logarithmique.

Le régime intermédiaire ($v \approx Z_1^{2/3} V_B$) est complexe. Des phénomènes de capture d'électrons entre l'ion incident et les atomes interviennent. Une approximation du pouvoir d'arrêt peut être obtenue à partir de la relation [49,50]

$$\frac{1}{S_i} = \frac{1}{S_i(\text{haute vitesse})} + \frac{1}{S_i(\text{basse vitesse})} \quad (1.48)$$

1.4.2- Pertes d'énergie élastiques :

Les pertes d'énergie élastiques $(dE/dx)_e$ correspondent à la quantité d'énergie cédée aux atomes par répulsion coulombienne. Au cours de la collision nucléaire, le projectile pénétrant la cible perd une partie de son énergie cinétique de façon élastique. Le projectile frappe successivement les atomes de la cible en leur conférant à chaque fois de l'énergie. Deux modèles sont utilisés conjointement pour représenter ce phénomène : la mécanique des chocs (théorie des collisions élastiques) et la diffusion d'une particule chargée dans un potentiel. Si T_{max} désigne l'énergie maximale transférée, alors le pouvoir d'arrêt nucléaire est défini comme suit [44,50,51]

$$S_e(E) = \frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dX} \right) = \int_0^{T_{max}} T d\sigma \quad (1.49)$$

où T est l'énergie transférée à l'atome cible donnée par (1.28) et qui est susceptible de déplacer ce dernier et de créer une lacune, $d\sigma$ est la section efficace différentielle qui a pour expression $d\sigma = 2 \pi s ds$ où s est le paramètre d'impact.

Pour le calcul de l'angle de déflexion dans (1.28) et en conséquence le pouvoir d'arrêt nucléaire, on utilise des potentiels coulombiens (en $1/r$) projectile-cible écrantés par la charge électronique suivant la méthode de Thomas-Fermi

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} \phi \left(\frac{r}{a_{12}} \right) \quad (1.50)$$

où r est la distance entre les deux atomes et a_{12} est le paramètre d'écrantage. La fonction ϕ est générée par les électrons de la cible et du projectile car ils font écran à la charge nucléaire. Parmi les variantes de potentiels utilisés sont le potentiel de Molière et le potentiel de Ziegler, Biersack et Littmark (ZBL).

Plusieurs auteurs ont calculé $d\sigma$ et le pouvoir d'arrêt S_e pour des matériaux différents. Par exemple Biersack propose l'expression [50,56]

$$S_e = 4\pi N Z_1 Z_2 e^2 a_{12}^2 \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\ln \varepsilon}{2\varepsilon (1 - \varepsilon^{1.49})} \quad (1.51)$$

avec $\varepsilon = a_{12}/s$ et le paramètre d'écrantage donné par

$$a_{12} = \frac{a_B}{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}} \quad (1.52)$$

1.5- Energie seuil de déplacement :

Le calcul BCA suppose qu'un déplacement atomique ne peut se produire que si l'énergie transférée au noyau cible est supérieure à un seuil E_d . Ce paramètre que l'on appelle l'énergie seuil de déplacement est très difficile à mesurer. Il représente l'énergie que l'on doit fournir à un atome du réseau cristallin pour produire un défaut stable. D'un point de vue numérique, certains auteurs [57] prétendent que E_d doit être égal à l'énergie de formation d'une lacune alors que d'autres auteurs comme Corbett et Bourgoïn [58] ont mis en évidence l'existence d'une relation entre E_d et l'inverse du paramètre de maille cristalline [41]. La dépendance forte de l'énergie seuil de déplacement des directions cristallographiques est aussi prouvée expérimentalement et par simulation [40,59]. Pour les besoins de calculs, il est fréquent de prendre pour E_d les valeurs moyennes tabulées par ASTM (American Society for Testing of Materials) [60].

1.6- Nombre d'atomes déplacés et paires de Frenkel :

Suite à l'irradiation d'un matériau, les atomes dans le solide peuvent être déplacés de leurs positions d'équilibre menant à la création de sites vacants et d'atomes interstitiels. La paire lacune-interstitiel est appelée paire de Frenkel (FP) [42]. Dans une cascade, les atomes de reculs ne finissent pas tous en atomes interstitiels.

Des séquences de collisions de remplacements (RCS) peuvent avoir lieu. Dans un remplacement, Le projectile transfère la totalité de son énergie à l'atome éjecté et s'immobilise à sa place. Cet effet de "domino", avec un atome interstitiel à l'extrémité, peut produire une paire de Frenkel [42] et participer à la création de dégât dans le matériau comme il est montré à la figure 1.6.

Basés sur le potentiel de sphères dures, Nelson et Thompson ont suggéré une détermination théorique de la longueur de telles séquences. Ils aboutissent à la conclusion que les séquences de collisions peuvent atteindre une longueur de plusieurs centaines d'Angström. Elles diminuent rapidement si la température du cristal augmente, tout en restant considérables (plusieurs dizaines d'Angström) [61].

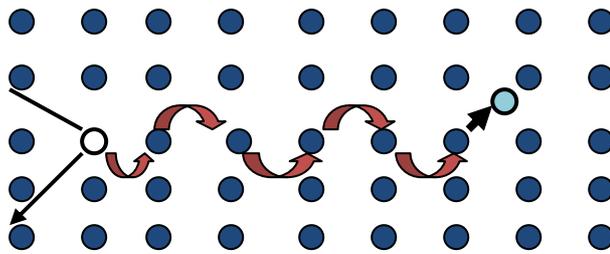


Figure I.6- Schéma d'une séquence de remplacement.

Traditionnellement l'évaluation du nombre d'atomes déplacés suite à une irradiation d'un matériau est faite dans le cadre de l'approximation des collisions binaires. L'inconvénient est que cette approximation est très simplifiée et qu'elle néglige tout phénomène de synergies entre atomes déplacés. De fait, les deux dernières phases du pic thermique et de relaxation sont négligées. Dans la dernière phase, il peut y avoir recombinaison entre site vacant et interstitiel réduisant ainsi le nombre de défauts. Le nombre d'atomes déplacés final est déduit uniquement de la cascade de déplacement initiale [41].

1.6.1- Modèle de Kinchin-Pease :

Plusieurs modèles ont été proposés pour évaluer le nombre d'atomes déplacés par un atome PKA d'énergie E . Le modèle le plus cité est le modèle de Kinchin-Pease. Dans ce modèle, les déplacements atomiques ne peuvent avoir lieu que si l'énergie cinétique du projectile est supérieure ou égale à E_d . Le nombre d'atomes déplacés (ou le nombre de paires de Frenkel) est donné par [62]

$$v(E) = \begin{cases} 0 & \text{si } E < E_d \\ 1 & \text{si } E_d < E < 2 E_d \\ \frac{E}{2 E_d} & \text{si } E > 2 E_d \end{cases} \quad (1.53)$$

Ce modèle simple ne représente qu'approximativement la réalité physique. À haute énergie la fonction linéaire, qui relie le nombre de déplacements à l'énergie du PKA est incorrect car la part d'ionisation augmente au détriment des chocs balistiques et de la création de défauts. Sur la base de la théorie développée par Lindhard portant sur les pertes d'énergie élastiques et inélastiques du PKA [63], Norgett, Robinson et Torrens (NRT) ont développé un deuxième modèle de déplacement [64,65].

1.6.2- Modèle NRT :

Selon le modèle NRT, le nombre de défauts générés par un PKA dans un matériau irradié est donné par [64-66]

$$v(E) = 0.8 \frac{E}{2 E_d} \quad (1.54)$$

Une version révisée de (1.54) est largement utilisée pour calculer le nombre de paires de Frenkel [29,66]

$$v(E) = \eta(E) \frac{0.8}{2 E_d} T_{dam}(E) \quad (1.55)$$

où η est le rendement de déplacement et T_{dam} est l'énergie de dégât qui est égale à

$$T_{dam}(E) = \frac{E}{1 + k (3.4008 \varepsilon^{1/6} + 0.40244 \varepsilon^{3/4} + \varepsilon)}$$

avec

$$k = \frac{32}{3 \pi} \left(\frac{m_e}{m_2} \right)^{1/2} \frac{(A_1 + A_2)^{3/2} Z_1^{2/3} Z_2^{1/2}}{A_1^{3/2} (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4}}$$

$$\varepsilon = \frac{A_2 E a}{(A_1 + A_2) (Z_1 Z_2 e^2)}$$

$$a = \left(\frac{9 \pi^2}{128} \right)^{1/3} \frac{a_B}{\sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}}$$

où m_e est la masse de l'électron, m_2 est la masse de l'atome cible et E est en keV.

1.7- Limites de l'approximation des collisions binaires :

Comme nous l'avons mentionné auparavant, l'une des suppositions sur lesquelles est fondée la BCA est l'approximation des trajectoires réelles des atomes par leurs asymptotes. Une mesure de la déviation par rapport à la trajectoire réelle est le rapport D/R où D est la distance montrée à la figure 1.5 [43]

$$D = \frac{s}{\cos(\vartheta/2)} \quad (1.56)$$

Des calculs du rapport D/R ont été faits pour des potentiels tels que le potentiel Coulombien et le potentiel de Molière [43]. Il s'en sort de ces études que la BCA devient inappropriée pour les énergies faibles de l'ordre de quelques eV car les interactions impliquant plusieurs corps à la fois deviennent importantes.

Lors de l'évaluation de différentes grandeurs physiques suite à l'interaction entre le projectile et la cible, la mécanique classique est utilisée.

Ce traitement reste toujours valable tant que la longueur d'onde de l'atome en mouvement est inférieure aux dimensions du réseau qui sont de l'ordre de 0.1 nm . Des études quantitatives poussées imposent une limite plus stricte sur l'applicabilité de la mécanique classique dans la BCA à savoir [43]

$$2 \frac{R(s)}{a_{12}} \frac{a_{12}}{a_B} \left(\frac{E_r}{C}\right)^{1/2} \left(\frac{\mu C}{m_e E_H}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \gg 1 \quad (1.57)$$

avec $C = Z_1 Z_2 e^2 / a_{12}$ et E_H est l'énergie d'ionisation de l'Hydrogène.

Chapitre II

Programme de simulation

II.1- Introduction :

Il existe plusieurs programmes permettant de modéliser le déplacement des atomes dans une cible irradiée. Ces programmes ont été créés spécialement pour simuler des implantations ioniques. Deux grandes catégories de modélisation sont à différencier : la première utilise la méthode de dynamique moléculaire, la seconde se base sur l'approximation des collisions binaires.

Comme nous l'avons mentionné auparavant, la méthode de dynamique moléculaire est plus précise mais son grand défaut est d'être coûteuse en temps de calcul. Nous pouvons citer, à titre d'exemple, comme code de la dynamique moléculaire le code CDCMD [67,68].

La méthode utilisant l'approximation des collisions binaires est plus simple à mettre en œuvre et plus rapide en temps de calcul ce qui permet une étude statistique fiable. Citons comme exemple de codes utilisant la BCA, le code TAMIX [68], TRIM [69] et Marlowe.

Dans ce chapitre, nous décrivons le programme Marlowe qui est utilisé dans notre travail pour mener à bien l'étude du développement des cascades dans le tantale. Le programme Marlowe est destiné à simuler le processus de collisions atomiques dans le solide suite à son bombardement par des particules. Il se base sur l'approximation des collisions binaires décrite dans le chapitre précédent. Il est destiné au calcul de la profondeur de pénétration, la distribution d'énergie des atomes éjectés, le nombre de séquences de remplacement et leur distribution en longueur et le nombre de paires de Frenkel et leur distribution en fonction de la distance de séparation interstitiel-lacune et d'autres détails concernant les cascades. Le programme est écrit en langage Fortran en format fixe du Fortran 77 et Fortran 90. Il est conçu pour s'exécuter sur les deux systèmes d'exploitation Windows et UNIX. Depuis sa première version éditée par M. T. Robinson dans les années 60, des améliorations sont portées sur le code de temps à autre. Plusieurs références expliquent les bases théoriques du code et son utilisation [34-38, 65,70-72].

II.2- La structure du programme et modèle d'analyse :

Marlowe est constitué de plus de 60 procédures organisées en trois phases. La première phase est destinée à la lecture des données et l'initialisation de plusieurs paramètres. La deuxième phase génère les cascades requises, analyse les cascades individuellement et commence l'analyse de l'ensemble des cascades. La dernière phase, achève l'analyse de l'ensemble des cascades et transcrit les résultats dans un fichier de sortie [70].

Lorsque Marlowe est lancé, la lecture des données se fait en premier lieu. Ces données qui sont groupées dans un fichier précisent, comme le montre l'exemple ici-bas, les paramètres du modèle de calcul et les informations relatives au projectile et à la cible.

```
Irradiation du Tantale : Ta ==> Ta
Utilisation : Potentiel de Born-MAYER, Vibrations Thermiques
&MODL SURFCE=1,RDNML=T,F,T,T,F,T,TIM=F,T,F,F,F,T,&END
&XTAL ALAT=3.3026,CENTRE=2,RZ=3*0.0,AXISA=1.0,0.0,0.0,AXISB=0.0,1.0,0.0,&END
&ATOM NTYPE=1,TYPE='Ta',W=180.9479,Z=73.0,EQUIT=5.0,EBND=90.0,3.0,8.09,LOCK=1,&END
&SURF SBND=3.0,SIDES=1.0,1.0,&END
&VPAR BPAR(1,1)=0.23312,&END
&TVIB TDEBYE=240.0,T=300.0,&END
&OUTP INFORM=6*T,&END
&PROJ MAXRUN=1000,EKIP=100.0,LEAP=20,&END
```

Les deux premières lignes chacune de longueur de 80 caractères sont des commentaires laissés à l'utilisateur pour identifier les tâches que doit exécuter le programme. Les 40 premiers caractères de la première ligne sont reportés dans chaque page du fichier de résultats. Les données qui sont au nombre de dizaines, sont groupées dans des listes telles que MODL, XTAL, ATOM. La plupart de ces paramètres sont déjà initialisés dans Marlowe.

La valeur de SURFCE indique au programme combien de surfaces la cible possède. Par exemple SURFCE=0 veut dire que la cible est de dimensions infinies et SURFCE=1 elle semi-infinie.

RDNML qui est un tableau à une dimension avec 6 éléments de type logique, indique au programme si les paramètres du potentiel d'interaction atomique, de la perte d'énergie inélastique, des vibrations thermiques sont donnés par l'utilisateur et s'il y a des impuretés, des interstitiels ou des sites vacants initialement dans la cible.

TIM qui est un tableau à une dimension avec 7 éléments de type logique, indique au programme certains détails du modèle de calcul par exemple si un atome stoppé peut devenir cible, si les séquences de collisions linéaires doivent être tronquées ou non et si les cascades sont gérées individuellement ou en groupes.

ALAT est un vecteur de 6 composantes dont les valeurs sont les dimensions et les angles de la maille. La valeur de CENTRE précise la structure du cristal (cfc,cc,..) et RZ donne les positions des atomes de la maille alors que AXISA et AXISB sont des vecteurs qui définissent la surface de la cible.

La valeur de NTYPE représente le nombre total de type d'atomes impliqués dans la simulation. Ces types sont indiqués dans la variable TYPE. W et Z donnent les masses et les charges des différents atomes. EQUIT est l'énergie de coupure, EBND ses valeurs représentent l'énergie de liaison de déplacement, de redéplacement et de remplacement. LOCK est un vecteur qui indique la distribution des différents types d'atomes sur les différents sites de la maille.

SBND est l'énergie de liaison d'un atome situé à la surface et SIDES donne les longueurs des cotés d'un parallélogramme qui définit la surface d'impact des projectiles.

BPAR donne le paramètre d'écrantage du potentiel d'interaction atomique utilisé.

TDEBYE est la température de Debye du cristal et T est la température du cristal.

Suivant les valeurs de INFORM, une sélection des résultats de simulation est faite et uniquement ces résultats sont transcrits dans un fichier de sortie.

MAXRUN indique le nombre de projectiles générés, EKIP est l'énergie cinétique du projectile et la valeur de LEAP indique si l'irradiation est interne ou externe.

Après lecture des données, le programme simule, pour chaque projectile, une cascade suite aux collisions binaires. La recherche d'un atome en mouvement, de ses partenaires possibles, la détermination des paramètres de collisions, de la configuration du système résultant de l'interaction constituent des étapes principales [70,73]. Il est supposé que le projectile et l'atome cible qui était immobile avant le choc, se déplacent le long des asymptotes de leurs trajectoires réelles. Après chaque collision, le programme cherche l'atome de la cascade le plus rapide, détermine la suite des collisions qu'il effectue jusqu'à ce que sa vitesse devienne inférieure à celle d'un autre, et ainsi de suite, jusqu'à l'arrêt complet de la cascade.

Dans Marlowe, un module du potentiel interatomique est destiné à l'évaluation de différents paramètres définissant la fonction de potentiel, l'énergie et la force d'interaction à une distance donnée. Le package du potentiel, recèle six fonctions décrivant le potentiel d'interaction atomique et les utilisateurs peuvent en définir leur propres fonctions. Les pertes d'énergie inélastiques (locales et non-locales) peuvent être incluses [70]. À nouveau, ce module peut être remplacé par un autre. L'interaction qui lie l'atome au cristal est modélisée par la prise en compte d'une énergie de liaison entre l'atome et son site d'une part et entre l'atome et le cristal comme un tout d'autre part.

L'amplitude des vibrations thermiques est déterminée sur base d'une distribution gaussienne dont la largeur est calculée à l'aide du modèle de Debye. Le programme permet de déterminer la fonction de distribution de paires de Frenkel (lacune-interstitielle), l'analyse des profondeurs de pénétration, des séquences de remplacement et de diverses quantités liées à l'éjection de particules. Ce module d'analyse des résultats est généralement modifié en fonction des informations que l'on désire recueillir [70,73].

II.3- Description de la cible et conditions d'irradiation :

Dans Marlowe, le cristal est décrit en donnant les positions d'un nombre restreint de sites atomiques repérés dans un référentiel cartésien dont l'origine est un des sites. Dans le cas d'un réseau cubique simple, centré ou à faces centrées, le programme génère automatiquement les positions des atomes à partir du site à l'origine. Le code crée une liste des atomes du réseau jusqu'à une distance spécifiée DMAX. Cette liste doit être telle que, par translation, l'ensemble du cristal puisse être généré. Il est ainsi possible de placer l'origine au site le plus proche d'un atome en mouvement qui pourra de la sorte entrer en collision avec une ou plusieurs cibles. DMAX est habituellement prise légèrement supérieure à la distance des deuxièmes proches voisins donnant le résultat désiré de 15 à 25 atomes voisins. Si DMAX est petit, le code peut se terminer avec une erreur signifiant l'absence de cibles appropriées pour la collision. Si DMAX est grand, le projectile peut avoir plusieurs cibles potentielles à la fois et le temps d'exécution du code augmente sensiblement [70,73].

Bien que Marlowe soit destiné au traitement de cibles cristallines, le programme peut être utilisé pour simuler les collisions atomiques dans des cibles amorphes. La simulation d'un milieu amorphe se fait par rotation aléatoire, des axes du système de référence après chaque collision. Le cristal peut être fini, semi-infini ou infini. La surface d'incidence est définie par un système d'axes dont deux lui appartiennent, le troisième lui étant normal et pointant vers l'intérieur du milieu. La cible peut contenir initialement des sites vacants, des atomes interstitiels ou des impuretés à des positions que l'utilisateur doit les préciser dans le fichier d'entrée [70,73].

L'irradiation peut être interne ou externe. Dans le cas d'une irradiation externe, les points d'impact des projectiles sont choisis dans un parallélogramme ou un triangle déterminé par deux axes du plan de la surface. Les dimensions de l'aire d'impact sont choisies par l'utilisateur [70,73].

II.4- Sélection des atomes cibles :

L'idée de base pour sélectionner un atome pour la collision est la suivante. Le programme prend le dernier atome heurté comme site de référence et dresse une liste des atomes voisins à la distance DMAX. Les atomes susceptibles pour être des cibles possibles sont les atomes qui se trouvent à l'intérieur d'un cylindre d'axe passant par le projectile et orienté dans la direction d'incidence et de rayon de section égal au paramètre d'impact (voir figure 2.1).

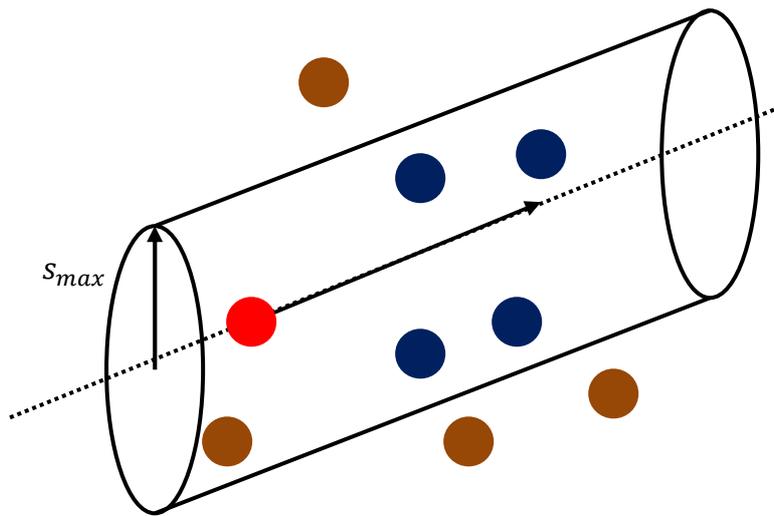


Figure II.1- Schéma de sélection des cibles. Les atomes en bleu sont des cibles possibles ceux en marron sont des cibles rejetées.

La procédure détaillée de recherche d'une cible pour la collision est illustrée sur la figure 2.2. Le projectile après collision avec l'atome se trouvant au site R prend une direction $\vec{\lambda}_0$. En utilisant la liste des sites voisins à R , le site T est généré et les quantités suivantes sont évaluées [70]

$$\xi = \vec{\lambda}_0 \cdot \Delta\vec{x} \quad (2.1)$$

$$-s^2 = \xi^2 - |\Delta\vec{x}|^2 \quad (2.2)$$

Si $\xi > \xi_{min} \geq 0$, le site T est dans la bonne direction pour être un partenaire de la collision. Si le paramètre d'impact $s > s_{max}$, alors T est considéré situé assez loin de la trajectoire du projectile

pour qu'il provoque une déflexion significative. Le paramètre d'impact maximum est choisi par l'utilisateur suffisamment petit pour minimiser le temps de calcul, mais suffisamment grand pour tenir compte de l'ensemble des processus de collisions susceptibles de contribuer de manière significative aux phénomènes étudiés [70].

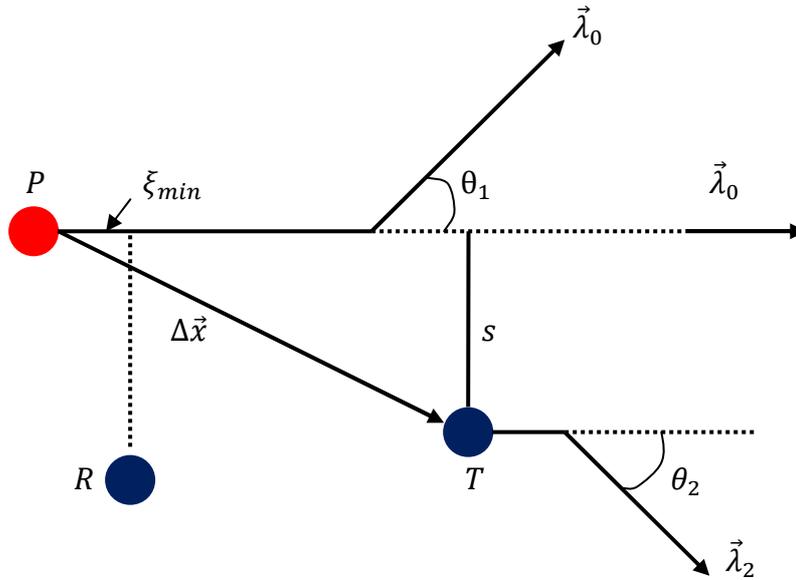


Figure II.2- Schéma représentant les bases de la procédure de recherche des cibles.

L'une des caractéristiques des collisions dans les matériaux cristallins, est que les trajectoires des atomes de reculs passent souvent à l'intérieur des anneaux d'atomes disposés symétriquement. Dans ce cas, l'interaction avec ses atomes est simultanée. La procédure utilisée par Marlowe pour traiter ces cas est schématisée sur la figure (2.3). Un premier site le long de la trajectoire du projectile est choisi. Désignons par T_1 ce site. Pour chaque cible potentielle, le programme évalue [70]

$$\Delta\xi_{1i} = \xi_i - \xi_1 \quad (2.3)$$

$$d_{1i}^2 = s_1^2 + (\Delta\xi_{1i})^2 \quad (2.4)$$

$$d_{i1}^2 = s_i^2 + (\Delta\xi_{i1})^2 \quad (2.5)$$

Si $\Delta\xi_{1i} < \xi_{min}$, $d_{1i} < s_{max}$ et $d_{i1} < s_{max}$, la deuxième collision est considérée comme étant simultanée avec la première. Chaque collision d'un ensemble de collisions simultanées est effectuée indépendamment des autres. La direction finale du projectile est obtenue en additionnant vectoriellement toutes les déflexions [70].

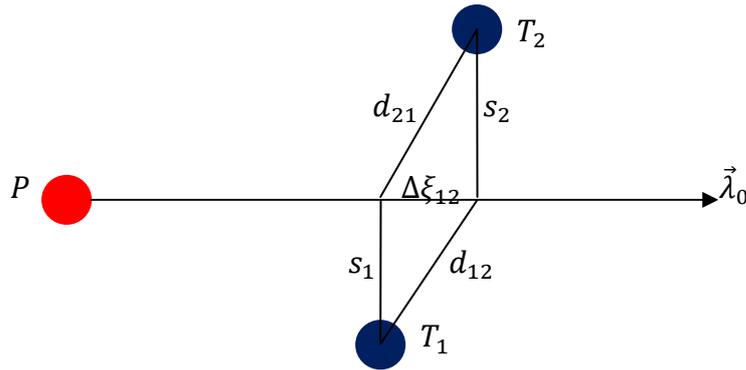


Figure II.3- Schéma de collisions simultanées.

II.5- Le potentiel d'interaction :

Lorsque le projectile pénètre dans le cristal, il est en interaction avec les atomes qui le constituent. Dans le modèle BCA l'interaction se passe entre le projectile et un seul atome (les autres atomes n'interviennent pas). La diffusion se fait par le potentiel interatomique de Coulomb écranté par une fonction décrivant la distribution des électrons dans l'entourage des deux noyaux. Six fonctions décrivant le potentiel d'interaction atomique sont donnés dans le package de Marlowe. Le programme fournit des valeurs numériques pour les paramètres de ces potentiels si elles ne sont pas données dans le fichier d'entrée.

II.5.1- Potentiel de Molière :

Le potentiel de Thomas-Fermi est un potentiel coulombien (en $1/r$) écranté par la charge

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} \phi\left(\frac{r}{a_{12}}\right) \quad (2.6)$$

La fonction d'écrantage ϕ doit satisfaire l'équation différentielle de Thomas-Fermi qui est

$$x^{1/2} \frac{\partial \phi}{\partial x^2} = \phi^{3/2}(x) \quad (2.7)$$

avec $x = r/a_{12}$. La difficulté de la recherche de la forme exacte de la fonction ϕ oblige à utiliser des approximations. L'une des approximations la plus utilisée est celle de Molière. Elle est donnée par [74,75]

$$\phi(r) = 0.35 e^{-0.3 \frac{r}{a_{12}}} + 0.55 e^{-1.2 \frac{r}{a_{12}}} + 0.1 e^{-6.0 \frac{r}{a_{12}}} \quad (2.8)$$

Une solution numérique approximative effectuée par Firsov du potentiel de Thomas-Fermi dans le problème diatomique établit la forme suivante du paramètre d'écrantage a_{12} [70]

$$a_{12} = \left(\frac{9 \pi^2}{128}\right)^{\frac{1}{3}} (\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2})^{-\frac{2}{3}} a_B \quad (2.9)$$

II.5.2- Potentiel de Born - Mayer :

C'est un potentiel répulsif sous forme exponentielle. Les paramètres de ce potentiel utilisés par Marlowe se basent sur les relations données par Anderson et Sigmund [76]

$$V(r) = A e^{-r/a_{12}} \quad (2.10)$$

avec

$$A = \sqrt{52} (Z_1 Z_2)^{3/4} \quad (2.11)$$

II.5.3- Potentiel de Ziegler, Biersack et Littmark :

Le potentiel de Ziegler, Biersack et Littmark, appelé aussi potentiel ZBL est une forme généralisée du potentiel de Molière. L'expression de ce potentiel est [48]

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{k=1}^4 c_k e^{-b_k r/a_{12}} \quad (2.12)$$

avec : $c_k = \{0.1818, 0.5099, 0.2802, 0.02817\}$, $b_k = \{3.20, 0.9423, 0.4029, 0.2016\}$

Le paramètre d'écrantage a_{12} est donné par :

$$a_{12} = \frac{0.8854}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} a_B \quad (2.13)$$

II.5.4- Potentiel modifié de Lenz-Jensen :

Le potentiel modifié de Lenz-Jensen (AMLJ) est un potentiel répulsif coulombien écranté par une fonction exponentielle [77,78]

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} e^{-c_1(\frac{r}{a_{12}}) + c_2(\frac{r}{a_{12}})^{1.5} - c_3(\frac{r}{a_{12}})^2} \quad (2.14)$$

où a_{12} peut être évalué de la relation :

$$a_{12} = \frac{0.8853 a_B}{(Z_1^{0.307} + Z_2^{0.307})^{2/3}} \quad (2.15)$$

Les valeurs de C_1, C_2 et C_3 sont données par

$$C_1 = 1.51 \quad , \quad C_2 = 0.763 \frac{Z_1^{0.169} + Z_2^{0.169}}{Z_1^{0.307} + Z_2^{0.307}} \quad , \quad C_3 = 0.191 \left(\frac{Z_1^{0.0418} + Z_2^{0.0418}}{Z_1^{0.307} + Z_2^{0.307}} \right)^{1/3}$$

II.5.5- Potentiel de Morse :

Ce potentiel introduit par Morse [79,80] est composé de deux exponentielles de sorte qu'il y a une région attractive qui entoure un cœur répulsif.

$$V(r) = A e^{\frac{(d-r)}{a}} \left[e^{\frac{(d-r)}{a}} - 2 \right] \quad (2.16)$$

où a et d sont des paramètres liés à la largeur et la profondeur du potentiel.

Marlowe offre à l'utilisateur la possibilité d'intégrer son propre potentiel d'interaction atomique dans le programme pourvu qu'il soit représentable par une fonction analytique continue et dérivable. Notons que si des potentiels semi-empiriques sont disponibles dans la littérature, un ajustement des potentiels de Marlowe à ces potentiels peut être fait pour calculer le paramètre d'écrantage.

II.6- L'énergie inélastique perdue :

La partie inélastique de la collision se symbolise par l'excitation des électrons du projectile et de la cible. La perte d'énergie inélastique se divise en deux parties : Une partie locale qui dépend de la distance de séparation des deux atomes et une partie non-locale qui dépend uniquement de l'énergie du projectile et de la distance qu'il parcourt.

Marlowe recèle trois procédures et deux fonctions pour traiter l'énergie inélastique perdue. Ces procédures se communiquent entre eux et avec les procédures du potentiel d'interaction atomique. Pour le calcul de la partie locale, on a le choix entre une dépendance en exponentielle et en cinquième puissance de l'abscisse de collision. La méthode de Bragg est utilisé pour le calcul de partie non-locale de l'énergie inélastique perdue [53,54,70,72,81].

II.7- Les vibrations thermiques :

Marlowe offre la possibilité d'inclure les vibrations thermiques des atomes du réseau de la cible. La période de vibration thermique étant généralement plus longue que le temps d'une collision, les atomes sont supposés effectuer des déplacements par rapport à leur site d'équilibre. Les composantes du déplacement sont choisies aléatoirement le long de trois axes cartésiens, selon une distribution Gaussienne dont la largeur est fournie par l'utilisateur ou calculée à l'aide du modèle de Debye [82]. Dans le dernier cas, une température de Debye doit être donnée pour chaque type d'atomes du réseau de la cible.

II.8- Les défauts ponctuels :

Considérons une collision dans laquelle le projectile émerge avec une énergie cinétique E_1 et transfère une énergie cinétique T à l'atome cible. La cible est considérée en mouvement et ajoutée aux atomes de la cascade si son énergie excède une énergie seuil E_d qui est l'énergie minimum nécessaire pour créer un déplacement. Aussi est-il nécessaire, pour mettre fin au mouvement, de prévoir un seuil énergétique E_c en dessous duquel les atomes sont forcés de s'arrêter. La valeur d'un tel seuil dépend de la structure du milieu et de la nature des atomes en mouvement. Le programme permet d'introduire autant de valeurs différentes de E_c qu'il y a en présence d'atomes de nature différente.

À la fin d'une cascade simulée par Marlowe, c'est à dire lorsqu'il ne reste aucun atome avec une énergie supérieure à E_c , les atomes de la cascade et les lacunes sont assemblés en paires. Marlowe cherche tout d'abord la plus courte distance de séparation interstitiel-lacune dans la cascade, puis la distance suivante et ainsi de suite jusqu'à ce que, dans la mesure du possible, tous les atomes et les sites soient appariés. Les paires sont classées en trois types différents. Dans le premier type nommé "close pairs" le site avoisinant l'atome est vacant. Dans le deuxième type appelé "near pairs" le site est occupé ou déjà apparié mais un site voisin est vide et non apparié.

Toutes les autres paires sont classées en “distant pairs”. Si l’atome d’une paire s’est éjecté du site avec lequel il est apparié, la paire est dite corrélée autrement, elle est dite non-corrélée [70].

Chapitre III

Résultats et Discussions

III.1-Introduction :

Dans ce chapitre, nous présentons les résultats de simulations de l'irradiation du tantale en utilisant le programme Marlowe basé sur la BCA. Nous avons commencé par lisser le potentiel de Born-Mayer disponible dans le package de Marlowe à la branche répulsive du potentiel ADP pour obtenir le paramètre d'écrantage adéquat. Puis nous avons ajusté les paramètres énergétiques de Marlowe afin d'obtenir un nombre de paires de Frenkel proche de celui du tungstène, élément voisin du tantale. Ensuite nous avons étudié l'évolution temporelle du nombre d'atomes en mouvement, du nombre d'atomes déplacés et de la dissipation de l'énergie de la cascade pour des températures différentes du cristal. Nous présentons aussi les résultats de l'étude du nombre moyen de paires de Frenkel produits en fonction de l'énergie incidente du projectile et en fonction de la distance de séparation lacune-interstitiel.

Dans nos calculs, des échantillons de 1000 cascades ont été générés. Les projectiles sont lancés avec une énergie cinétique allant de 0.2 keV à 50 keV avec incidence normale. Lorsqu'il s'agit d'un événement de déplacement d'un atome de son site, celui-ci doit surmonter une énergie de liaison qui est l'énergie seuil de déplacement E_d . La détermination d'une valeur appropriée pour E_d pour la simulation, est un peu ambiguë car E_d dépend fortement des directions cristallographiques [40,59]. Selon Jung et al. [6] l'énergie seuil de déplacement pour *Ta* est d'environ 36 eV dans la région de 20° autour de la direction <111>, et d'environ 53 eV dans la région 18° autour la direction <100> et supérieure à 130 eV pour les autres directions. Biget et al. [7] ont rapporté que la production des défauts dans la direction <100> est gouvernée par deux valeurs légèrement différentes $E_{d1}^{<100>} = 33 \pm 1 \text{ eV}$, $E_{d2}^{<100>} = 38 \pm 1 \text{ eV}$ et que $E_d \geq 55 \text{ eV}$ pour toutes les autres directions cristallographiques. D'autres travaux récents [29,66,83-85] ont adopté pour E_d la valeur moyenne de 90 eV.

C'est la valeur que nous adaptons nous aussi pour la simulation. Pour l'événement de remplacement, l'énergie de liaison des atomes cibles prise est égale à $E_b = 8.1 \text{ eV}$ [16,86], alors que dans le cas d'un redéplacement l'énergie de liaison est $E'_b = 3.0 \text{ eV}$. L'énergie de coupure était $E_c = 5.0 \text{ eV}$. Le tantale a une structure cristalline d'un cube centré avec une constante de réseau $a_0 = 3.304 \text{ \AA}$ [16,87]. Le potentiel interatomique utilisé est le potentiel de Born-Mayer ajusté au potentiel ADP. Les collisions ont été évaluées avec un paramètre d'impact maximum de $0.71 a_0$. Les déplacements thermiques des atomes du réseau ont été décrits par le modèle de Debye en utilisant la température de Debye du tantale $T_D = 240 \text{ K}$ [88]. Les calculs ont été faits pour des températures de 0, 300 et 1000 K.

III.2-Ajustement du potentiel :

Tout d'abord, il faut signaler qu'il est courant de paramétrer l'approximation des collisions binaires par la dynamique moléculaire. On profite ainsi de la précision de la dernière et de la rapidité de la première. Il est à signaler aussi l'absence de toute étude portant sur le nombre de paires de Frenkel dans le tantale par la dynamique moléculaire. Ce qui nous a incité à prendre les résultats de la MD du nombre de défauts créés dans le tungstène ($^{182}_{74}W$) élément voisin du tantale ($^{181}_{73}Ta$) pour référence. Vu que la charge et la masse des deux noyaux est presque la même, l'écart entre le nombre de défauts produits pour la même énergie dans les deux cristaux doit être petit.

Il est connu que le potentiel d'interaction atomique a une grande influence sur le nombre de séquences de remplacement et la création des défauts dans le solide suite à son bombardement par des particules [31,32,89]. Comme nous l'avons mentionné dans le chapitre précédent, six fonctions décrivant le potentiel interatomique sont prédéfinies dans le programme Marlowe. Les travaux précédents portant sur les séquences de collisions linéaires (LCS) et les défauts dans le tantale par la BCA ont fait usage de ces potentiels [31,32]. Mais il se trouve que le nombre de paires de Frenkel produits était trop important comparé au nombre créé dans le tungstène [90].

Il est clair que pour faire une étude fiable des cascades de déplacement dans le Ta , il fallait choisir un potentiel d'interaction $Ta - Ta$ adéquat et ajuster les paramètres énergétiques de la BCA pour approcher le nombre de FP donné par la MD. Plusieurs études ont été faites pour développer un potentiel semi-empirique pour le tantale. La plupart de ces potentiels mènent à des résultats en bon accord avec les propriétés connues du tantale telles que le paramètre de maille, les constantes d'élasticité, l'énergie de formation des lacunes et l'énergie de cohésion [8-27]. Notre choix s'est porté sur le potentiel ADP [22,23] (disponible sous forme de tableau au site NIST [33]) du fait qu'il répondait à nos attentes sur le nombre de défauts créés dans le Ta . Et comme les potentiels de Marlowe sont sous forme de fonctions continues et dérivables, alors un ajustement de ces potentiels à la branche répulsive du potentiel ADP s'impose. Comme il est montré à la figure III.1, les meilleurs ajustements sont obtenus pour les potentiels de Molière [74] et Born-Mayer [76]. Mais une fois de plus le calcul du nombre de défauts nous a incité à choisir le deuxième potentiel. Le paramètre A de la relation (2.11) pour le tantale ($Z_1 = Z_2 = 73$) est $A = 32433.038 \text{ eV}$ et le meilleur ajustement donne pour le paramètre d'écrantage la valeur $a_{12} = 0.23514 A^0$.

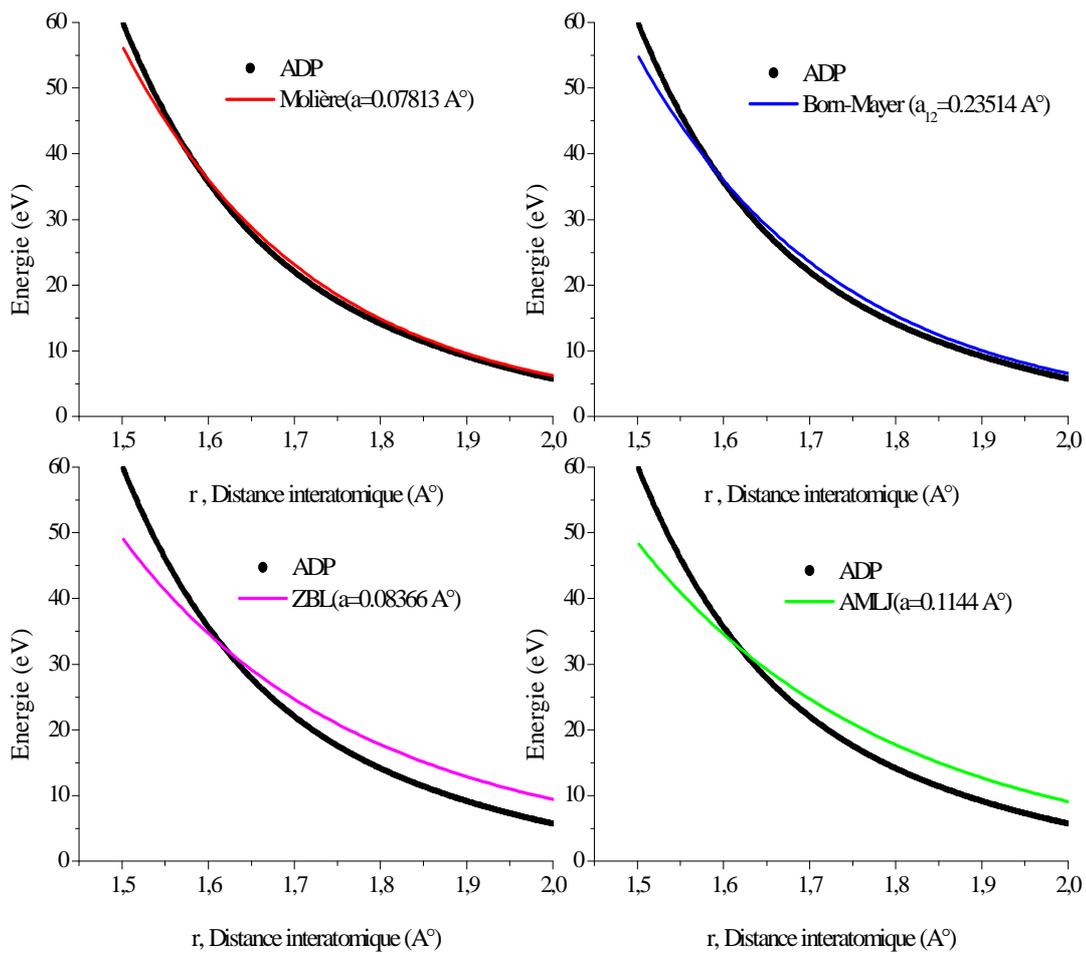


Figure III.1- Ajustement des potentiels de Marlowe au potentiel ADP.

III.3-Atomes en mouvement :

Sur le tableau III.1 et la figure III.2 sont présentés les résultats de l'étude de la variation du nombre moyen d'atomes en mouvement du tantale, $\langle N \rangle$, en fonction du temps suite à son irradiation par des projectiles d'énergie cinétique de 10 keV. Le cristal étant porté à des températures de 0, 300 et 1000 K.

Dans les premiers instants du développement de la cascade, les primaires et les secondaires constituent la quasi-totalité des atomes en mouvement et les collisions avec les atomes du réseau dominant les chocs dans la cascade. Au cours du temps les atomes qui sont arrêtés (parce que leur énergie est inférieure à l'énergie de coupure E_c) deviennent eux aussi des cibles potentielles et participent aux collisions. Ainsi, le nombre d'atomes en mouvement augmente et atteint son maximum à environ 120fs pour les températures 0 et 300 K et 140 fs pour la température 1000 K. Cette valeur est un peu basse par comparaison avec la valeur de 200 fs obtenue à $T = 300 K$ dans l'irradiation interne du tantale et l'utilisation du potentiel de Molière [32]. À long terme, l'énergie cinétique des projectiles se trouve partagée entre un nombre conséquent d'atomes de reculs et se dissipe rapidement conduisant à une baisse importante du nombre d'atomes en mouvement et ceux pour les trois températures. Une telle variation du nombre d'atomes en mouvement en fonction du temps a été signalée dans d'autres matériaux comme le cuivre et l'or [91]. Nous remarquons aussi que $\langle N \rangle$ dépend sensiblement de la température. Les calculs montrent que le temps de ralentissement des primaires à la température $T=1000 K$ est deux fois plus court qu'à la température $T=0 K$. Ceci signifie que les primaires à $T=1000 K$ cèdent leur énergie rapidement aux atomes du cristal provoquant l'augmentation de $\langle N \rangle$ qu'à la température $T=0$ et 300 K.

Tableau III.1. Le nombre moyen d'atomes en mouvement en fonction du temps pour les températures du cristal 0, 300 et 1000 K. L'énergie cinétique du projectile est $E_0 = 10 \text{ keV}$.

Temps (fs)	T=0 K	T=300 K	Temps (fs)	T=1000 K
40	7693	8035	80	17659
80	15007	16257	160	21463
120	16956	18893	240	12870
160	15294	17396	320	6310
200	11539	13325	400	3088
240	7572	9105	480	1613
280	4969	6079	560	926
320	3367	4102	640	517
360	2398	2869	720	290
400	1854	2098	800	190
440	1488	1593	880	129
480	1289	1297	960	101
520	1133	1095	1040	75
560	998	984	1120	65
600	905	868	1200	54
640	843	786	1280	46
680	784	721	1360	40
720	748	687	1440	36
760	711	660	1520	31
800	686	639	1600	27
840	658	616	1680	25
880	650	586	1760	20
920	629	533	1840	20
960	615	443	1920	19
1000	595	313	2000	18
1040	555	216	2080	18
1080	479	143	2160	17
1120	353	98	2240	16
1160	237	66	2320	16

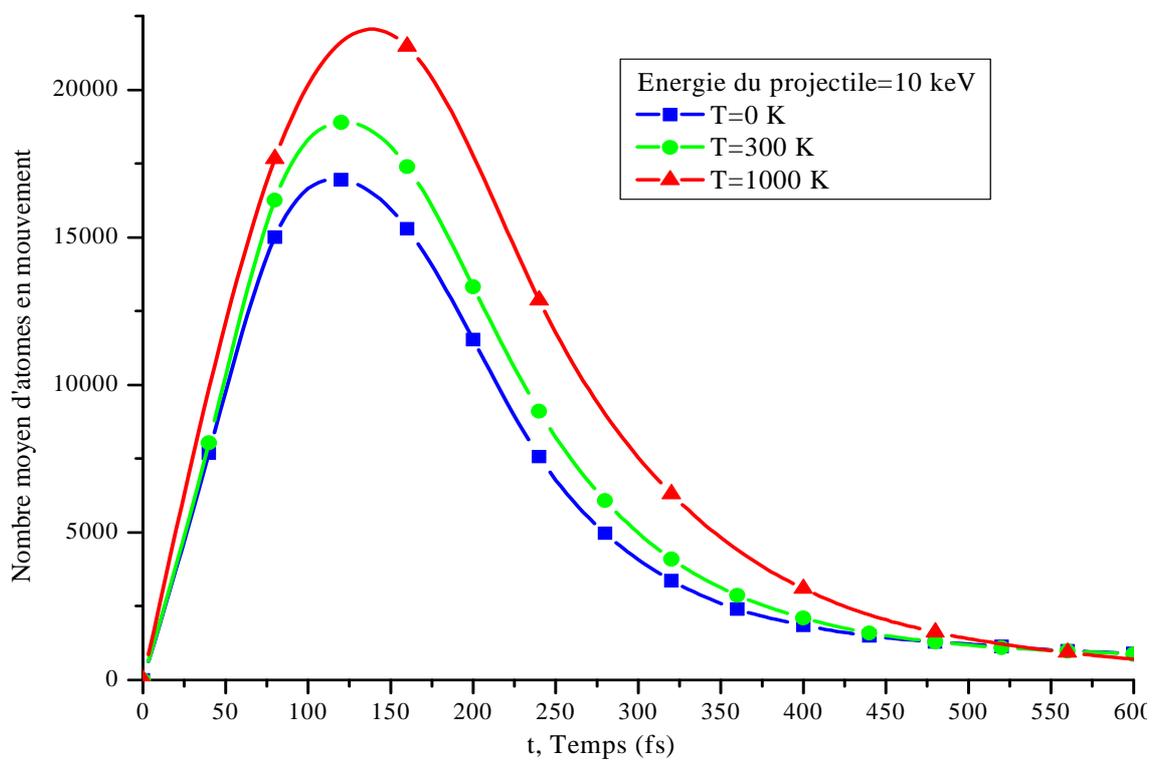


Figure III.2- Nombre moyen d'atomes en mouvement dans la cascade en fonction du temps pour les températures du cristal 0, 300 et 1000 K.

III.4-Atomes déplacés :

La figure III.3 montre la variation du nombre d'atomes déplacés en fonction du temps pour les températures du cristal 0, 300 et 1000 K et une énergie du projectile de 10 keV. Il est à rappeler que dans le tantale, un atome ne peut être éjecté de son site pour créer un défaut stable que si son énergie est supérieure à l'énergie seuil de déplacement $E_d = 90 \text{ eV}$. Il est clair de la figure 3.3 que indépendamment de la température du cristal, le nombre d'atomes déplacés augmente avec le temps puis il commence à se stabiliser. Lorsque l'atome du tantale pénètre le cristal, il interagit avec les atomes le composant en leur transmettant une certaine quantité d'énergie cinétique. L'énergie du projectile est suffisante pour que l'atome quitte son site atomique. L'atome déplacé entrera en collision avec les atomes de son voisinage. Ceux-ci peuvent à leur tour acquérir suffisamment d'énergie cinétique pour produire de nouvelles collisions. Ce phénomène, se produisant de proche en proche, déclenche ainsi une avalanche de déplacements atomiques dont le nombre d'atomes impliqués augmente avec le temps. Ceci implique que l'énergie cinétique du projectile se partage entre un nombre grandissant d'atomes de recul. Après un certain temps, l'énergie de ces atomes devient de plus en plus insuffisante pour déplacer de nouveaux atomes et le nombre d'atomes déplacés commence à se stabiliser.

La température influence sensiblement le nombre d'atomes déplacés. En effet, à la fin de développement de la cascade, ce nombre augmente d'environ 49% à la température $T=1000 \text{ K}$ par comparaison avec la température $T=0 \text{ K}$. Ceci est attribué au fait que la mobilité des atomes augmente avec l'augmentation de la température. Un tel comportement a été signalé pour les atomes du composé UO_2 [92] par une étude utilisant la dynamique moléculaire.

Tableau III.2. Le nombre moyen d'atomes déplacés en fonction du temps pour les températures du cristal 0, 300 et 1000 K. L'énergie cinétique du projectile est $E_0 = 10 \text{ keV}$.

Temps (fs)	T=0 K	T=300 K	T=1000 K
20	3617	3677	3710
40	7643	7947	8136
60	11993	12669	13252
80	15364	16627	17997
100	17377	19200	21800
120	18521	20782	24665
140	19255	21877	26832
160	19737	22702	28512
180	20098	23305	29877
200	20361	23800	30984
220	20545	24166	31850
240	20665	24446	32569
260	20756	24658	33124
280	20806	24797	33553
300	20843	24914	33909
320	20863	25004	34195
340	20878	25067	34430
360	20886	25124	34614
380	20891	25166	34745
400	20893	25200	34872
420	20895	25236	34952
440	20896	25263	35016
460	20898	25291	35068
480	20902	25314	35112
500	20904	25332	35150
520	20904	25353	35200
540	20905	25375	35230
560	20906	25400	35251
580	20907	25414	35277
600	20909	25427	35285
620	20910	25435	35291
640	20910	25450	35301
660	20911	25466	35309
680	20911	25479	35313
700	20915	25496	35314

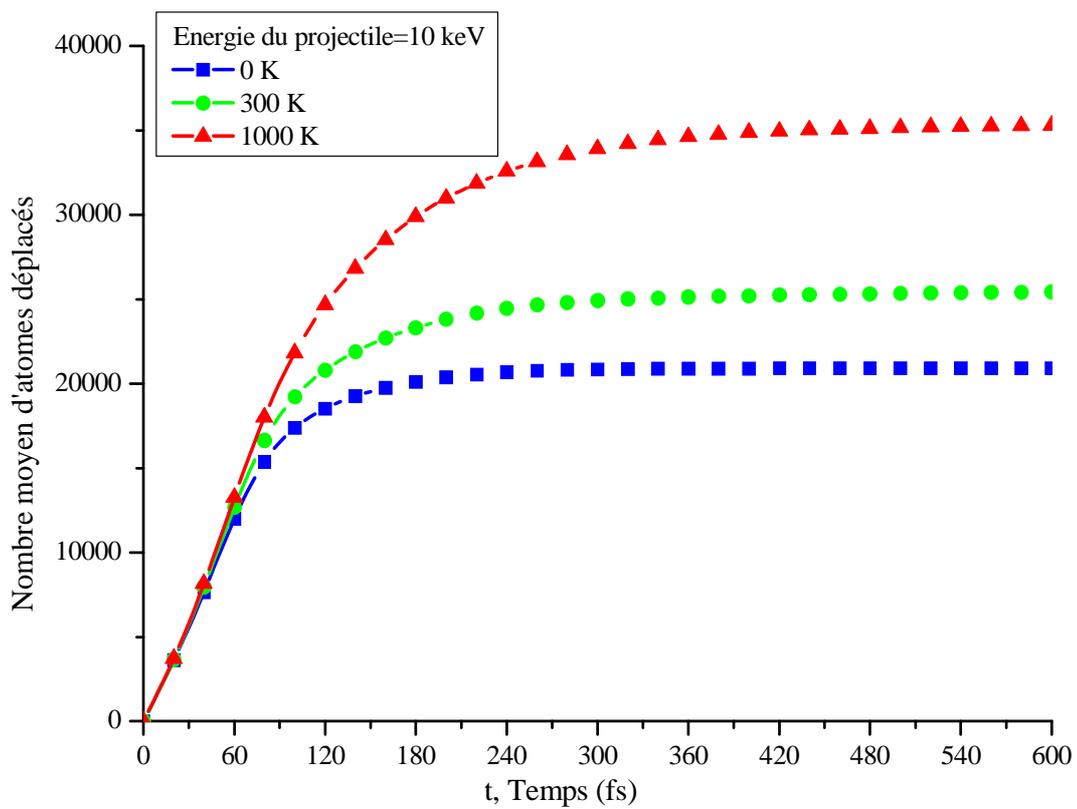


Figure III.3- Nombre moyen d'atomes déplacés en fonction du temps pour les températures de cristal 0, 300 et 1000 K.

III.5-L'énergie cinétique :

L'évolution temporelle de l'énergie cinétique moyenne des atomes de la cascade est une conséquence directe de la façon dont la partition de l'énergie entre les atomes cibles se fait. Dans Marlowe, les atomes de cascade sont suivis aussi longtemps que leur énergie cinétique est supérieure à la valeur E_c . L'énergie cinétique des projectiles, E_0 , est dissipée en partie dans l'excitation des électrons des atomes cibles et en partie dans le déplacement de nouveaux atomes. Les résultats de l'étude de la variation de l'énergie cinétique moyenne de la cascade en fonction du temps sont donnés sur la Figure III.4. Il est clair qu'indépendamment de la température du cristal, la dissipation de l'énergie de la cascade est en augmentation pendant toute la durée de développement de la cascade. On constate aussi que cette dissipation qui était presque identique pour les trois températures du cristal au début de la formation de la cascade et jusqu'à environ 50 fs, s'accélère avec l'augmentation de la température. Un tel comportement n'était pas observé dans l'étude du tantale par irradiation interne avec utilisation du potentiel de Molière et aucune paramétrisation du BCA [32]. Dans l'étude de l'or [91] la différence entre l'énergie cinétique de la cascade d'un réseau statique et un réseau porté à la température $T = 1000 K$ a été attribuée aux vibrations thermiques qui ne favorisent pas le développement des longues séquences de remplacements (RCS) qui transportent les atomes à de longues distances et conservent ainsi l'énergie cinétique dans la cascade pour de longues durées. Dans notre étude, on relève une augmentation de séquences de remplacement d'environ 38% pour une augmentation de température entre $0 K$ et $1000 K$. Les RCS sont aussi, dans notre cas, à l'origine du comportement de l'énergie cinétique moyenne de la cascade pour des températures différentes.

Tableau III.3. L'énergie cinétique moyenne des atomes en mouvement dans la cascade en fonction du temps pour les températures du cristal 0, 300 et 1000 K. L'énergie cinétique du projectile est $E_0 = 10 \text{ keV}$.

Temps (fs)	T=0 K	T=300 K	T=1000 K
0	10000	10000	10000
50	7785,43	7836,62	7617,74
100	5370,58	5381,85	4625,32
150	4062,03	3897,1	2664,11
200	3321,79	2992,91	1557,06
250	2824,13	2391,27	921,97
300	2442,57	1974,92	543,357
350	2129,51	1654,15	326,211
400	1859,07	1391,29	194,785
450	1619,78	1166,92	110,703
500	1405,9	974,688	60,7486
550	1212,07	805,001	32,2431
600	1036	651,863	15,2392
650	876,046	512,54	6,55718
700	729,711	385,76	2,89347
750	595,698	270,892	0,95711
800	472,35	170,988	0,22527
850	357,155	87,8213	0,0182

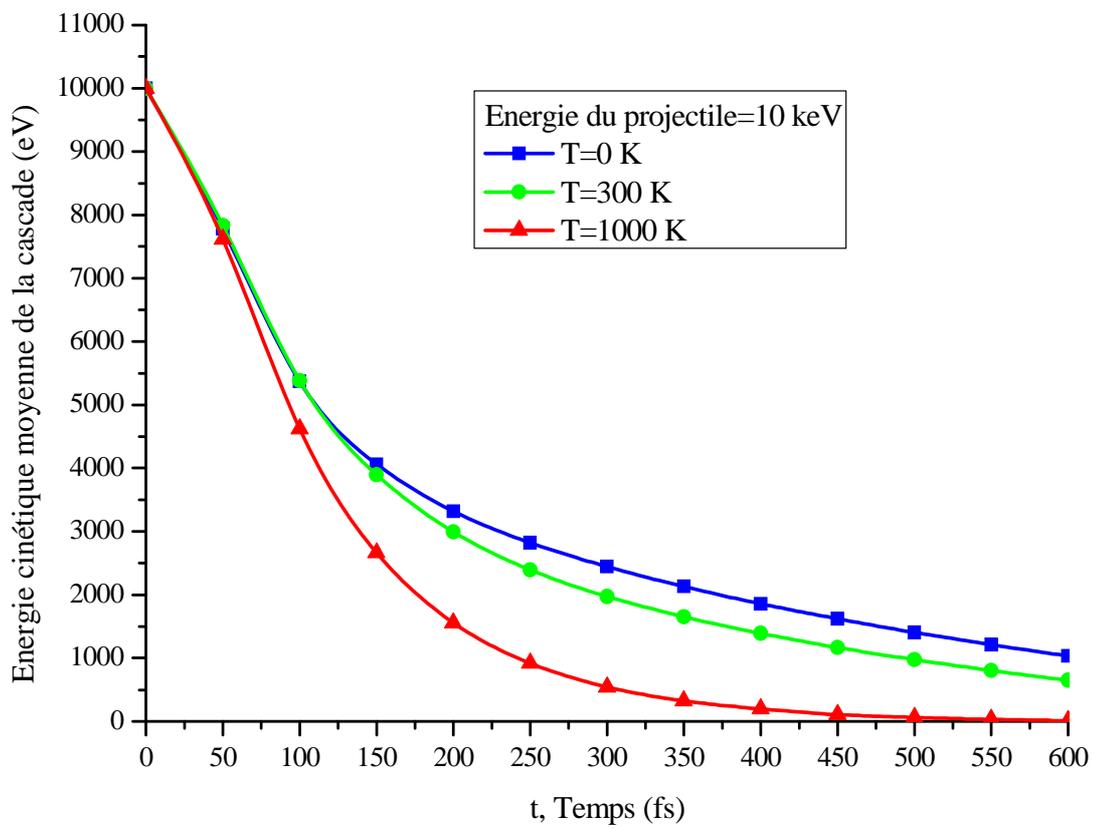


Figure III.4- L'énergie cinétique moyenne de la cascade en fonction du temps.

III.6- Paires de Frenkel :

La cascade de déplacement est une région où la dissipation de l'énergie du PKA cause le déplacement de plusieurs atomes de leurs sites. Au cours de ce processus, il y a création d'un certain nombre de défauts ponctuels (interstitiels et lacunes). Ils peuvent se recombiner menant à un nombre final d'interstitiels et de lacunes plus petit que le nombre d'atomes déplacés. Ils peuvent s'agglomérer pour former des petits amas d'interstitiels ou de lacunes ou encore s'échapper de la région de la cascade et ainsi augmenter la concentration en défauts libres .

La figure III.5 illustre le nombre moyen de paires de Frenkel , $\langle \nu \rangle$, produits en fonction de l'énergie initiale du projectile E_0 pour la température du cristal $T = 300 K$. Comme on s'attendait, $\langle \nu \rangle$ augmente avec E_0 car plus le projectile est énergétique plus il y a d'énergie à transmettre aux atomes du réseau et plus les atomes déplacés sont nombreux. Pour l'énergie $E_0 = 10 keV$ il n'y a qu'environ 33% des atomes déplacés qui ont constitué des paires de Frenkel. Les séquences de remplacement étant principalement courtes , leur contribution à la création des paires de Frenkel est faible.

Nous avons présenté au premier chapitre les deux modèles utilisés habituellement pour estimer le nombre de paires de Frenkel créés dans un matériau suite à son irradiation ; le modèle de Kinchin-Pease donné par (1.53) et qui dépend de l'énergie du projectile et de l'énergie seuil de déplacement E_d et le modèle NRT donné par (1.55). Les résultats de ces deux modèles pour le tantale sont eux aussi présentés sur la figure III.5. Pour le rendement de déplacement du modèle NRT, nous avons utilisé la valeur moyenne $\langle \eta \rangle = 0.73$ donnée au référence [29].

Il est connu que les modèles de Kinchin-Pease et NRT surestiment le nombre de paires de Frenkel (surtout aux énergies élevées) produits puisqu'ils n'intègrent pas dans leur description le phénomène de recombinaison qui réduit le nombre de lacunes et d'interstitiels créés dans la première phase de la cascade de déplacement. Un autre facteur important du modèle NRT (qui approche relativement nos résultats) est le rendement de déplacement η . Actuellement, il n'y a

aucune connaissance assez précise de la valeur de η mais uniquement des valeurs moyennes et approximatives. De ces faits, la comparaison de nos résultats avec les modèles Kinchin-Pease et NRT ne peut être que qualitative.

Tableau III.4. Le nombre moyen de paires de Frenkel calculé par Marlowe et estimé par les modèles de Kinchin-Pease et NRT en fonction de l'énergie cinétique du projectile.

E_0	$\langle \nu \rangle$ calculé par Marlowe	Modèle Kinchin-Pease	Modèle NRT
200	0,024	1,111	0,5752
500	0,604	2,778	1,4116
1000	1,646	5,556	2,77
2000	3,361	11,11	5,46
5000	7,312	27,778	13,297
10000	11,982	55,556	26
20000	19,343	111,11	50,71
30000	26,5	166,667	74,83
50000	39,752	277,778	121,9663

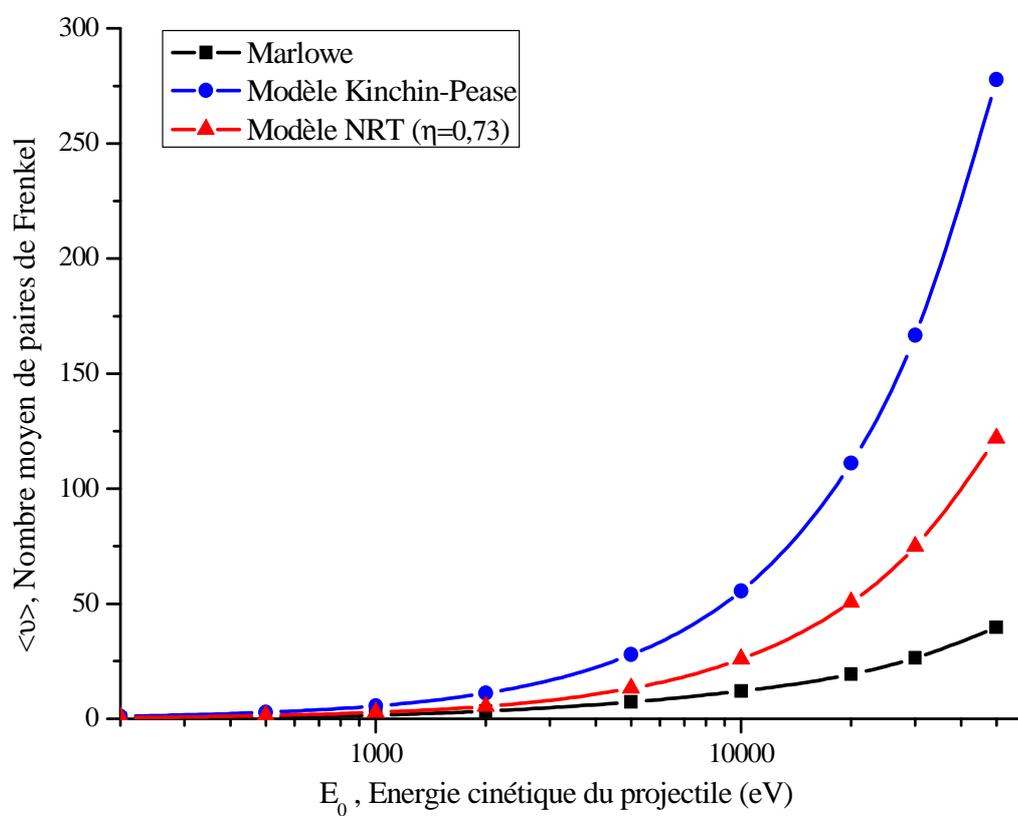


Figure III.5- Nombre moyen de paires de Frenkel en fonction de l'énergie cinétique du project

Sur le tableau III.5 et la figure III.6 sont donnés les résultats de distribution du nombre moyen de paires de Frenkel en fonction de la distance de séparation de la paire interstitiel-lacune à la température $T = 300 K$ et l'énergie du projectile $E_0 = 10 keV$.

Les résultats montrent que les paires non corrélées sont plus nombreuses que les paires corrélées. À la fin de développement de la cascade, le nombre total de paires de Frenkel non corrélées est six fois plus grand que le nombre de paires corrélées. Ce qui signifie que les atomes déplacés ne s'immobilisent pas au voisinage des sites dont ils sont issus. D'autre part, le nombre total de paires de Frenkel qui ont une distance de séparation relativement courte est important. Ceci veut dire que la plupart des atomes déplacés terminent leurs trajectoires à proximité des sites vacants. Il s'agit là d'une indication que le nombre de défauts isolés produits est petit et que, probablement, la cascade se développe dans un volume relativement restreint.

Tableau III.5. Le nombre moyen de paires de Frenkel corrélées, non corrélées et le nombre total en fonction de la distance de séparation de la paire interstitiel-lacune pour $E_0 = 10 \text{ keV}$.

Distance de séparation(r_{γ}/a_0)	Paires corrélées	Paires non corrélées	Nombre total de paires
1	1,694	9,739	11,433
1,25	1,686	9,726	11,412
1,5	1,544	9,64	11,184
1,75	1,098	8,941	10,039
2	0,734	7,899	8,633
2,25	0,38	7,09	7,47
2,5	0,21	6,177	6,387
2,75	0,12	5,185	5,305
3	0,074	4,474	4,548
3,25	0,045	3,946	3,991
3,5	0,032	3,518	3,55
3,75	0,019	2,908	2,927
4	0,014	2,543	2,557
4,25	0,009	2,306	2,315
4,5	0,006	2,039	2,045
4,75	0,005	1,771	1,776
5	0,005	1,588	1,593
5,25	0,005	1,444	1,449
5,5	0,004	1,333	1,337
5,75	0,004	1,171	1,175
6	0,003	1,043	1,046
6,25	0,003	0,964	0,967
6,5	0,003	0,88	0,883

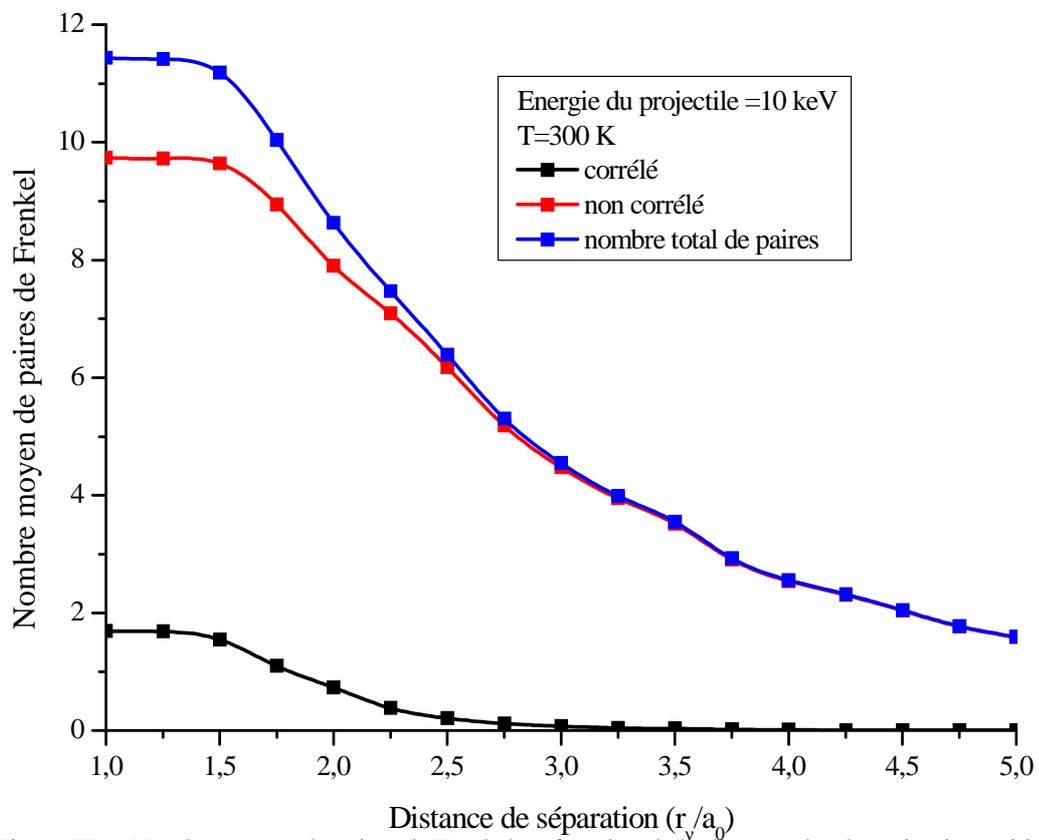


Figure III.6- Nombre moyen de paires de Frenkel en fonction de la distance de séparation interstitiel-lacune.

Conclusion Générale

Conclusion Générale

Nous avons simulé les cascades de déplacement dans le tantale par utilisation du programme Marlowe basé sur la BCA. Nous avons fait usage du potentiel de Born-Mayer ajusté au potentiel semi-empirique ADP pour l'interaction atomique $Ta - Ta$. Nous avons paramétré la BCA en utilisant des résultats de la dynamique moléculaire. Nous avons examiné certains aspects en relation avec le développement temporel de la cascade tels que le nombre d'atomes en mouvement, le nombre d'atomes déplacés et l'énergie cinétique des atomes de la cascade. Nous avons étudié le nombre de défauts produits en fonction de l'énergie du projectile, leur distribution en fonction de la distance de séparation interstitiel-lacune. Puis, Nous avons confronté nos résultats à ceux de l'irradiation interne du tantale utilisant des potentiels prédéfinis dans Marlowe.

Les résultats obtenus montrent clairement que le nombre moyen d'atomes en mouvement dans la cascade augmente avec le temps et atteint son maximum à environ 120 fs et décroît après rapidement. Le nombre d'atomes déplacés croît lui aussi avec le temps et 33% de ceux-ci constituent des paires de Frenkel. La température influe sur le développement de la cascade. Plus la température du cristal est élevée, plus le nombre d'atomes en mouvement et le nombre d'atomes déplacés dans la cascade sont grands. La dissipation de l'énergie de la cascade s'accélère avec le temps et croît davantage avec la température.

Le nombre de paires de Frenkel produits suite à l'irradiation du tantale augmente avec l'énergie du projectile comme il a été prédit théoriquement par des modèles de production de défauts tels que le modèle de Kinchin-Pease et le modèle NRT. Les résultats montrent que le potentiel d'interaction atomique joue un rôle très important dans le développement de la cascade et dans la création des défauts dans le cristal.

Nous espérons que cette étude qui a contribué à la compréhension du mécanisme de formation de défauts dans le tantale sera complétée par l'étude des dommages créés dans les alliages du tantale vu leur importance dans l'industrie et la technologie de pointe.

Bibliographie.

Références

- [1] M. T. Robinson, « Radiation Induced Voids in Metals », edited by J. W. Corbett, U. S. Atomic Energy Commission, CONF-710601 (U. S.GPO, Washington, DC.) (1972) .
- [2] M. T. Robinson and I. M. Torrens, « Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects », edited by P. C. Gehlen, J. R. Beeler, and I. Jaffee (Plenum, New York) (1972).
- [3] A. Scholtz, C. Lehmann. Phys. Rev. B6 (1972) 813.
- [4] D. R. Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics. CRC, Press Inc, 90^e edition (2009).
- [5] [http://fr.wikipedia.org/wiki/Tantale_\(chimie\)](http://fr.wikipedia.org/wiki/Tantale_(chimie))
- [6] P. Jung, W. Schilling. Phys. Rev. B5, (1972)2046
- [7] M. Biget, F. Maury, P. Vajda, A. Lucasson, and P. Lucasson. Phys. Rev. B 19 (1979) 820.
- [8] M. S. Daw, M. I. Baskes. Phys Rev B29 (1984) 6443.
- [9] R. A. Johnson, D. J. Oh. J. Mater. Res. 4 (1989) 1195.
- [10] A. M. Guellil, J. B. Adams. J. Mater. Res. 7 (1992) 639.
- [11] M. S. Daw, S. M. Foiles, M. I. Baskes. Mater Sci Rep (1993) 251.
- [12] G. Wang, A. Strachan, T. Cagan, W. A. Goddard. Materials Science and Engineering. A309-310 (2001) 133.
- [13] Y. Li, D. J. Siegel, J. B. Adams, X. Y. Liu. Phys. Rev.B67(2003)125101.
- [14] A. Strachan, T. Cagin, O. Gulseren, S. Mukherjee, R. E. Cohen, W. A. Goddard. Materials Science and Engineering. 12:S445-S459,(2004).
- [15] Mishin Y. In: Yip S, editor. Handbook of materials modeling. Netherlands: Springer; (2005) 459.

- [16] R. Ravelo, T. C. Germann, O. Guerrero, Q. An, B. L. Holian. *Phys. Rev. B* 88 (2013) 134101.
- [17] M. W. Finnis, J. E. Sinclair. *Philos Mag* A50 (1984) 45.
- [18] G. J. Ackland, R. Thetford. *Philo. Mag.* A56 (1987) 15.
- [19] X. D. Dai, Y. Kong, J. H. Li, B. X. Liu. *J. Phys. Condens. Matter* 18 (2006) 4527.
- [20] Z. L. Liu, L. C. Cai, X. R. Chen, F. Q. Jing. *Phys. Rev. B* 77 (2008) 024103.
- [21] Lee BJ, Baskes MI, Kim H, Cho YK. *Phys Rev B* 64 (2001) 184102.
- [22] Y. Mishin, A.Y. Lozovoi : *Acta Mater.* 54 (2006) 5013.
- [23] A. Hashibon, A. Y. Lozovoi, Y. Mishin, C. Elsässer and P. Gumbsch. *Phys. Rev. B* 77(2008) 094131.
- [24] J. A. Moriarty, W.Xu, P. Söderlind, J. F. Belak, L. H. Yang, J. Zhu. *J. Eng. Mater. Technol.* 121:120 (1999).
- [25] J. A. Moriarty , J. F. Belak, R. E. Rudd, P. Söderlind, F. H. Streitz, L. H. Yang. *J. Phys. Condens. Matter.* 14 (2002) 2825.
- [26] J. A. Moriarty, V. Vitek, V. V. Bulatov, S. Yip. *J. Computer Aided Mater. Des.* 9 (2002) 99.
- [27] J. A. Moriarty, L. X. Benedict, J. N. Glosli, R. Q. Hood, D. A.Orlikowski, M. V. Patel, P. Söderlind, F. H. Streitz, M. Tang, L. H. Yang. *J. Mater. Res.* 21 (2006) 563.
- [28] P. M. Anglade, “Etude du Comportement Mécanique du Tantale Sous Pression par Dynamique Moléculaire”, Thèse de Doctorat (2004).
- [29] C. H. M. Broeders, A. Yu. Konobeyev , *J. Nucl. Mater.* 336 (2005) 201.
- [30] C. H. M. Broeders, A. Yu. Konobeyev , *J. Nucl. Mater.* 342 (2005) 68.
- [31] K. Benkaddour. “ Etude des défauts dans le tantale par la méthode BCA”, mémoire de Magister, (2010).
- [32] A. Djaafri, T. Djaafri, A. Elias, M. Driss Khodja. *The African Review of Physics.* 8 (2013) 365.

- [33] NIST Interatomic Potentials Repository. <http://ctcms.nist.gov/potentials/Ta.html>.
- [34] M. T. Robinson, I. Torrens. Phys. Rev. B 9 (1974) 5008.
- [35] M. T. Robinson. Phys. Rev. B40 (1989) 10717.
- [36] M. T. Robinson. Nucl. Instr. and Methods in Phys. Research. B48 (1990) 408.
- [37] M. T. Robinson. Nucl. Instr. and Methods in Phys. Research. B67 (1992) 396.
- [38] M. T. Robinson. Rad. Effects 141 (1997) 1.
- [39] R. Smith (ed.). « Atomic & ion collisions in solids and at surfaces: theory, simulation and applications », Cambridge University Press, Cambridge, UK, (1997).
- [40] Binary collision approximation. http://en.wikipedia.org/wiki/Binary_collision_approximation.
- [41] P. Arnolda, « La création de défauts de déplacements atomiques dans le silicium et son impact sur les composants électroniques à applications spatiales », Thèse de Doctorat, (2001).
- [42] D. R. Olander, Arthur Motta. Light Water Reactor Materials, Draft (2006).
http://www2.mne.psu.edu/motta/Chapters/Chapter12_Radiation%20Damage%20aug09.pdf.
- [43] W. Eckstein. « Computer simulation of Ion-Solid Interactions ». Springer Series in Materials Science, vol 10 (1992).
- [44] N. Paour. « Etude de diffusion intervenant dans la résolution en profondeur en analyse SIMS : Application à l'AlGaAs ». Thèse de Doctorat (1997).
- [45] H. Goldstein. « Classical Mechanics ». Addison-Wesley, Cambridge, Mass, (1959).
- [46] Z. Kopal, « Numerical Analysis » 2nd ed. Wiley, New York, (1961).
- [47] P.L. Grande, F.C. Zawislak, D. Fink et M. Behar, Nucl. Inst. And Meth. In Phys. Res., B61(1991) 282.

- [48] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark. « The stopping and range of ions in solids », Pergamon Press, (1985).
- [49] W. Moller « Fundamentals of Ion-Surface Interaction ».
www.hzdr.de/FWI/GENERAL/Fundam_ISI.pdf
- [50] P. Salou, « Interaction ion-surface : simulation de l'interaction plasma-paroi (ITER) », Thèse de Doctorat (2013).
- [51] S. Merabet : « Simulation à l'aide d'un modèle dit de Monté Carlo des profils de bore implantés requis pour la réalisation des jonctions courtes utilisées dans les processus de haute densité d'intégration », Thèse de Doctorat, (2009).
- [52] J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schiott. *Physics. Medd.* 33 (1963) 54.
- [53] O. B. Firsov. *Soviet Physics. JETP* 36 (1959) 1076.
- [54] J. Lindhard , M. Scharff . *Phys. Rev.* 24 (1961) 128.
- [55] H. Bethe. *Handbuch der Physik.* 14 (1933) 491.
- [56] J.P. Biersack. *Zeitschrift fur Physik.* 211(1968) 495.
- [57] V. Ermin, A. Ivanov, E. Verbitskaya, Z. Li, S. U. Pandey. *Nuclear Science and Method in Physics research*, A426 (1999) 120.
- [58] J. W. Corbett, G. Watkins : *Phys. Rev. Letters*, 138 (1965).
- [59] D. R. Olander. « Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Elements ». Technical Information Center, Office of Public Affairs Energy Research and Development Administration, (1975).
- [60] www.lanl.gov/mst/radeffects/docs/Osetsky-27B851.pdf .
- [61] J. R. Beeler, Jr., and D. G. Besco. *J. Appl. Phys.* 34 (1963) 2873.
- [62] G. H. Kinchin, R. S. Pease. *Prog. Phys.* 18(1955)1.
- [63] J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schiott. *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* 33 (1963) 1.
- [64] M. J. Norgett, M. T. Robinson, I. M. Torrens. *Nucl. Eng. Des.* 33 (1975) 50.
- [65] M. T. Robinso. *J. Nucl. Mater.* 216 (1994) 1.
- [66] C.H.M. Broeders, A.Yu. Konobeyev, *J. Nucl. Mater.* 328 (2004)197.

- [67] Une version en langage C du programme de la dynamique moléculaire CDCMD peut être trouvée à <http://www.ims.uconn.edu/centers/simul/index.htm#xmd>
- [68] C. S. Becquart, C. Domain, A. Legris, J. C. Van Duysen, J. Nucl. Mater. 280 (2000) 73.
- [69] S.H. Han, G.L. Kulcinshi, J.R. Conrad. Nucl. Inst. And Meth. In Phys. Res., B45 (1990)710.
- [70] M.T. Robinson. « MARLOWE: computer simulation of atomic collisions in crystalline solids » (Version 15a), RSICC Code Package PSR-137 (Report).
- [71] M. T. Robinson, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 43 (1993) 27.
- [72] M. T. Robinson, Radiat. Eff. 130/131 (1994) 3.
- [73] A. Elias, « Les effets des potentiels et de la température sur les séquences des collisions linéaires (LCS) dans le platine et le fer », thèse de doctorat (2005).
- [74] G. Molière. Z. Naturforsch. A2 (1947) 133.
- [75] O. B. Firsov. Sov. Phys.-JETP 6 (1958) 538.
- [76] H. H. Andersen, P. Sigmund. Nucl. Instr. Methods 38 (1965) 238.
- [77] S. T. Nakagawa, Y. Yamamura. *Radiation Effects* 105 (1988) 239
- [78] S. T. Nakagawa. *Radiation Effects* 116 (1991) 21.
- [79] P. M. Morse. Phys. Rev. 34 (1929) 57.
- [80] L. A. Girifalco, V. G. Weizer. Phys. Rev. 114 (1959) 687.
- [81] O. S. Oen, M. T. Robinson. Nucl. Instrum. Methods 132 (1976) 647.
- [82] M. Blackman. *Handbuch der Physik, Volume VII. Part 1.* Springer-Verlag, Berlin, (1955) 377.
- [83] R.E. Macfarlane, D.W. Muir. The NJOY Nuclear Data Processing System, Ver. 91, Report LA-12740 M, UC-413, (1994).
- [84] P. Lucasson, in: M.T. Robinson, F.W. Young Jr. (Eds), “Fundamental Aspects of Radiation Damage in Metals”. 1 (1976) 42 (CONF-75-1006-P1, US ERDA, Washington, DC) (1975).

- [85] P. Jung. Phys. Rev. B 23 (1981) 664.
- [86] F. R. de Boer, R. Boom, W. C. M. Mattens, A. R. Miedema, A. K. Niessen. « Cohesion in Metals: Transition Metal Alloys » . Elsevier Scientific, New York, (1988).
- [87] A. Dewaele, P. Loubeyre, and M. Mezouar. Phys. Rev. B 70 (2004) 94112.
- [88] C. Kittel. "Introduction to Solid State Physics". (8 ed.), John Wiley & Sons, (2004).
- [89] C. S. Becquart, M. Hou, A. Souidi, MRS-proceedings 650 (2001).
- [90] M. J. Caturla, T. D. de la Rubia, M. Victoria, R. K. Korzine, M. R. James, G. A. Greene. Journal of Nuclear Materials 296 (2001) 90.
- [91] M. T. Robinson. Nucl. Instr. and Meth. B67 (1992) 396.
- [92] L. Van Brutzel, M. Rarivomanantsoa. Journal of Nuclear Materials 358 (2006) 209.

Simulation des collisions atomiques dans le tantale par l'approximation des collisions binaires.

Résumé :

Nous avons simulé l'irradiation du tantale (Ta) en utilisant le programme MARLOWE basé sur l'approximation des collisions binaires (BCA). Les calculs ont été effectués en lançant des atomes de tantale avec incidence normale et une énergie cinétique variant de 0,2 keV à 50 keV sur le cristal Ta. Le potentiel de Born- Mayer ajusté à la branche répulsive du potentiel semi-empirique à dépendance angulaire (ADP) est utilisé. Nous avons étudié l'évolution temporelle du nombre d'atomes en mouvement, du nombre d'atomes déplacés et de l'énergie cinétique des atomes de reculs. Nous avons calculé le nombre de paires de Frenkel en fonction de l'énergie cinétique du projectile et en fonction de la distance de séparation interstitiel-lacune. Les effets des vibrations thermiques sur le développement de la cascade ont été analysés. Les résultats obtenus montrent que le nombre moyen d'atomes en mouvement, les atomes déplacés et la dissipation de l'énergie de la cascade augmentent en fonction du temps. Les vibrations thermiques des atomes du réseau diminuent le nombre de séquences de remplacement et affectent le développement de la cascade. Le nombre de défauts produits augmente avec l'énergie cinétique des projectiles et la plupart des atomes déplacés terminent leurs trajectoires au voisinage des sites vacants.

Mots clés : approximation des collisions binaires, simulation, déplacement, cascade, tantale, paires de Frenkel, potentiel.

Simulation of atomic collisions in tantalum by the binary-collision approximation.

Abstract:

We simulated the irradiation of tantalum (Ta) with the MARLOWE code based on the binary collision approximation (BCA). Calculations were made by normally incident 0.2keV to 50keV Ta atoms .The Born-Mayer potential is used, which screening distance is adjusted in such a way to much the repulsive angular-dependant interatomic potential (ADP) branch. We have studied the temporal evolution of the number of atoms in motion, the displaced atoms and the kinetic energy of the moving recoils. We computed the number of Frenkel pairs as function of the incident projectile energy and as function of the separation distance interstitial-vacancy. Effects of thermal vibrations on the cascade development were analyzed. Results obtained show that the average number of atoms in motion , the displaced atoms and the energy dissipation from the cascade increase in all times. Thermal vibrations of lattice atoms of the crystal reduce the number of replacement sequences and affect the cascade development. The number of defects increases with the kinetic energy of projectiles and most displaced atoms terminate their trajectories in fairly close proximity to vacant lattice sites.

Keywords : Binary collision approximation, simulation, displacement, cascade, tantalum, Frenkel pairs, potential.

محاكاة الاصطدامات الذرية في معدن التنتاليوم باستعمال تقريب التصادم الثنائي

الملخص:

نقوم بمحاكاة الإصطدامات الذرية في معدن التنتاليوم باستعمال البرنامج MARLOWE الذي يعتمد على تقريب التصادم الثنائي (BCA). تمت الحسابات بارسال ذرات من التنتاليوم بطاقة حركية ما بين 0.2 و 50 كيلو إلكترون فولط بشكل ناظمي على سطح المعدن. استخدمنا كمون بورن-ماير للتأثير الذري المتبادل بعد إن قمنا بمقاربتة بالفرع الممثل للتناظر في الكمون ذا الارتباط الزاوي (ADP).

درسنا تغيير عدد الذرات المتحركة، و عدد الذرات المزاحة و الطاقة الحركية الكلية للذرات في الشلال بدلالة الزمن. كما قمنا بحساب عدد أزواج فرانكل بدلالة الطاقة الحركية للقذيفة و عددها بدلالة المسافة الفاصلة بين أعضاء الزوج. جرى أيضا تحليل آثار الاهتزازات الحرارية على تطور الشلال. النتائج التي تم الحصول عليها تشير إلى أن متوسط عدد الذرات المتحركة، و الذرات المزاحة و الطاقة المبددة من الشلال تنزايد كلها مع الزمن. الاهتزازات الحرارية تقلل من عدد الإستبدالات المتتالية و عدد العيوب يزيد مع الطاقة الحركية للمقذوفات و معظم الذرات المزاحة تنهي مساراتها على مقربة من المواقع الشاغرة للذرات.

الكلمات المفتاحية: تقريب التصادم الثنائي, محاكاة, إزاحة, زوج فرانكل, شلال, تنتاليوم, كمون