

## Quelques applications de la diffraction neutronique à l'étude des structures cristallines

### INTRODUCTION

L'exposé suivant concerne différentes applications de la diffraction neutronique à l'étude des structures cristallines. Je me suis toutefois limitée à certains domaines, qui seront précisés, en m'efforçant d'en donner un aperçu complet, dans la limite des documents dont je disposais.

### PRINCIPE

Les neutrons de vitesse  $v$ , ont une onde associée de de Broglie de longueur d'onde  $\lambda = \frac{h}{mv}$ , qui, dans le cas des neutrons appelés lents ou thermiques, (énergie allant de 0,02 à 1 eV, vitesse de  $\sim 2 \cdot 10^5$  cm/sec à  $1,4 \cdot 10^6$  cm/sec), est du même ordre de grandeur que les distances interatomiques. Les neutrons thermiques donc, se comporteront dans la traversée des solides comme les rayons X, en ce qui concerne la diffusion et la diffraction par le réseau cristallin. Une différence essentielle est toutefois que l'optique neutronique est nucléaire tandis que les rayons X sont diffractés par les électrons orbitaux, la distribution spatiale du nuage électronique autour de l'atome étant comparable en dimensions aux longueurs d'onde des rayons X.

Les ondes associées aux neutrons, diffractées par une distribution régulière d'atomes dans un réseau cristallin, interféreront avec des maxima, pics de diffraction, dont la position, comme dans le cas des rayons X est donnée par la condition usuelle de Bragg:  $n\lambda = 2d \sin \sigma$  où «n» entier positif re-

présente l'ordre de réflexion, « $\lambda$ » la longueur d'onde du neutron, « $d$ », l'espacement internucléaire.

La diffraction des neutrons par un réseau cristallin sert tout d'abord à confirmer l'essentiel des caractéristiques de l'onde associée aux neutrons: le côté ondulatoire des propriétés des neutrons. Par la suite l'utilisation de flux de neutrons plus denses et plus couramment produits, se fit pour l'étude des structures cristallines parallèlement aux études par rayons X, ou les complétant, les deux techniques ayant bien-tôt chacune leur domaine propre, celui des neutrons demeurant toutefois beaucoup plus restreint.

#### *Comparaison avec les rayons X.*

Quelques précisions sur les différences entre diffractions par rayons X et neutrons permettront de comprendre le rôle particulier joué par l'une ou l'autre dans l'étude des structures. On parlera tantôt d'amplitude de diffraction « $a$ » tantôt de section efficace de diffraction  $\sigma$ , selon les méthodes ou techniques utilisées, les deux étant reliées entre elles dans le domaine de longueurs d'onde considéré, par la formule  $\sigma = 4\pi |a|^2$ .

1) Les rayons X sont diffractés par les électrons et la section efficace de diffraction a une variation lente et régulière avec  $Z$  (on montre qu'elle est proportionnelle à  $Z^2$ ). Pour les neutrons, le phénomène est nucléaire et  $\sigma$  n'a pas de variation liée à  $Z$ . On pourra avoir une section efficace du même ordre de grandeur pour des éléments aussi éloignés dans la classification périodique que

Be et  $^{197}\text{Au}$  ou bien N et Bi. En moyenne de l'ordre du barn, les sections efficaces pourront être plus élevées pour un atome léger ( $N: \sigma = 11,1$  barns) que pour un plus lourd (Ba:  $\sigma 3,5$  barns). Dans le même ordre d'idées, différents isotopes d'un même élément se comportent vis à vis des neutrons comme différents types d'atomes, de même deux éléments de numéros atomiques voisins pourront avoir une section efficace permettant de les différencier, ce qui est impossible par rayons X.

2) Dans le cas des rayons X, l'onde diffractée est toujours à  $180^\circ$  de l'onde incidente, c'est ce qu'on appelle amplitude positive. Dans le cas des neutrons, certains noyaux ont une onde diffractée à  $0^\circ$ . L'amplitude de diffraction pour un élément naturel sera positive, négative ou même nulle selon la composition isotopique de l'élément. Ainsi pour le Lithium, elle est  $> 0$  pour  $^6\text{Li}$ ,  $< 0$  pour  $^7\text{Li}$  et  $< 0$  pour Li naturel. De même pour le Nickel,  $< 0$  pour  $^{62}\text{Ni}$ ,  $> 0$  pour  $^{58}\text{Ni}$  et  $^{59}\text{Ni}$ , et  $> 0$  pour Ni naturel. A la diffraction cohérente par un réseau de même signe s'ajoutera dans les spectres un fond de diffraction incohérente dû à la composition isotopique de l'élément ou aux composants du corps considéré.

3) Enfin le neutron ayant un moment magnétique, l'orientation du neutron par rapport au spin du noyau (lorsqu'il en a un) peut introduire une variation dans l'amplitude de diffraction, variation distribuée au hasard (sauf dans le cas des corps ferromagnétiques pour lesquels les moments magnétiques sont alignés) et qui ajoutée également au fond continu incohérent. Cette propriété fera utiliser les neutrons comme outils de recherche précisément dans le domaine des orientations des moments magnétiques atomiques ou de la modification dans ces orientations. C'est un vaste domaine d'applications de la diffraction neutronique à l'étude des propriétés magnétiques des matériaux et que je ne citerai que pour mémoire en me bornant à

l'utilisation des neutrons pour la détermination des structures cristallines.

## METHODES

Les premières expériences destinées à exploiter ces différences entre rayons X et neutrons étaient rendues difficiles par la faible intensité des sources naturelles de neutrons. Par la suite la production de faisceaux intenses par les accélérateurs de particules, ont permis d'utiliser les méthodes expérimentales mises en oeuvre pour les rayons X. Deux principes de méthodes différents ont été appliqués :

— *La méthode par transmission*, basée, comme dans le cas des rayons X sur la mesure de la perte d'intensité dans le faisceau de neutrons lors de sa transmission par le matériel diffracteur, ceci en fonction de l'énergie des neutrons incidents.

— *La méthode de diffraction* basée sur la mesure des faisceaux diffractés de manière cohérente, et du fond continu de diffraction incohérente, à partir d'un faisceau monocinétique de neutrons et en fonction de l'angle de diffraction (Fig. 1). La méthode utilise soit un monocristal fixe (méthode de Laue), soit un cristal tournant, soit une poudre (méthode de Debye Scherrer) selon les techniques mises au point pour les rayons X. Le domaine d'application de cette méthode est étendu par adjonction au diffractomètre de cryostats permettant de couvrir une large gamme de températures (depuis la température de He liquide jusqu'à  $1000^\circ\text{C}$  par exemple pour l'appareil en service à Argonne [1]).

### 1 — Méthode par transmission.

Cette méthode, utilisée surtout à partir de sources de neutrons de faible intensité, mesure la perte d'intensité d'un faisceau en fonction de la vitesse. On a, si  $I_0$  et  $I$  sont les intensités initiale et transmise du faisceau

$\frac{I}{I_0} = e^{-\sigma T N}$ ,  $\sigma_T$  représentant la section efficace de transmission et  $N$  le nombre d'atomes ou de molécules par  $\text{cm}^2$  d'échantillon.

Correspondant aux réflexions de Bragg, on obtient des pics de diffraction dans la

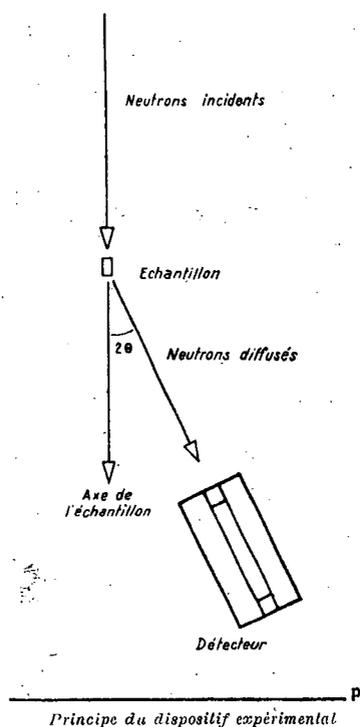


Fig. 1

courbe section efficace de transmission en fonction de la longueur d'onde.

Des changements de structure du matériel diffracteur sous l'effet de traitements divers entraîneront des modifications dans la courbe de transmission et la méthode sera appliquée à l'étude des propriétés physiques de l'état solide dans plusieurs domaines.

#### 1. 1 — Etude de la cristallisation.

Le passage du monocristal à une forme polycristalline entraîne une augmentation de la section efficace de transmission due à ce fait que l'alignement des plans cristallins est plus poussé dans un monocristal.

Des études faites pour des échantillons de Fe, Ni,  $\text{SiO}_2$  ont montré la généralité du phénomène.

#### 1. 2 — Grosseur du grain.

La section efficace décroît avec la grosseur du grain ce qui est en accord avec l'augmentation du nombre de plans cristallins alignés. Des études ont été faites sur du fer et du cuivre recuits, en fonction de la grosseur du grain.

#### 1. 3 — Comparaison entre solutions solides et mélanges mécaniques.

Les études montrent que les sections efficaces totales de solutions solides ou de mélanges de carbures réfractaires ( $\text{TiC}$  et  $\text{WC}$  par exemple) changent en fonction des proportions du mélange, ou du solvant dans la solution solide.

L'observation de ces propriétés permet à l'inverse de déduire d'une courbe de transmission des renseignements sur la structure d'un matériau, ceci en utilisant la propriété des neutrons d'être peu absorbés par les substances de poids atomiques élevés (à l'inverse des rayons X).

#### 1. 4 — Etude des composés binaires polycristallins.

L'allure de la courbe de transmission renseigne alors de façon non ambiguë sur le signe de l'amplitude de diffraction. Une amplitude négative pour l'un des composants du corps étudié entraîne un fond continu de diffraction incohérente très important et l'atténuation ou la disparition de pics de diffraction caractéristiques du système cristallin pour les réflexions de Bragg. La comparaison des intensités observée et calculée pour les plans d'indices de Miller pair et impair permet le choix du signe de l'amplitude de diffraction. (La formule théorique de section efficace de diffraction contient le facteur de structure  $F$  du réseau

binaires, facteur  $F$  dans lequel interviennent les amplitudes de diffraction des deux composants du binaire). Dans le cas des diagrammes de transmission en fonction de la longueur d'onde des neutrons, de Ti C par exemple, comparé à Ca O, l'accord entre données expérimentales et formule théorique n'intervient que lorsqu'on donne à Ca une amplitude de signe  $> 0$  et Ti de signe  $< 0$ .

### I. 5 — Etude de l'effet des irradiations.

On a utilisé la transmission des neutrons pour déterminer la répartition et le type de défauts produits dans les solides après irradiation par des particules de haute énergie. Ainsi sur l'alumine [2] pour laquelle les résultats expérimentaux montrent une stabilité cristallographique après des irradiations par neutrons rapides et une apparition de défauts 40 fois moindre que le prédisent les théories courantes en même temps que la création de lacunes par paires du radical Al O.

### II — Méthodes par diffraction.

Les méthodes par diffraction utilisent un faisceau de neutrons monocinétiques. Elles ont été appliquées aux neutrons lorsque la production des faisceaux de neutrons par les piles a pu en augmenter l'intensité. Or la monochromatisation d'un faisceau à la sortie d'une pile est de faible rendement, et un faisceau doit, pour avoir une intensité suffisante, avoir une section de l'ordre du  $\text{cm}^2$ . D'où la limitation d'emploi de la méthode du monocristal par exemple, au cas des corps que l'on peut obtenir sous forme de monocristal d'une surface aussi grande. Et en conséquence le souci des utilisateurs, d'augmenter l'intensité du faisceau de neutrons utilisable ce qui permet d'étudier la diffraction des neutrons à l'aide d'un monocristal de dimensions plus réduites [3].

L'interprétation des diagrammes obtenus se fait de manière identique pour les neutrons

et pour les rayons X, et présente dans les deux cas le même genre de difficultés.

Sous ces réserves, les méthodes de diffraction de neutrons s'appliquent à différents domaines, domaines souvent déjà explorés partiellement à l'aide des rayons X et pour lesquels l'étude à l'aide des neutrons apporte un complément d'informations, ou domaine propre aux neutrons, ou même dans les travaux récents, étude complète, grâce aux neutrons de certains problèmes qui semblaient jusqu'alors réservés aux rayons X.

#### II. 1 — Détermination des amplitudes de diffraction de certains éléments ou de changements d'amplitudes en fonction de certains traitements.

Dans ce domaine ont été étudiées les structures de He solide à différentes températures et sous différentes pressions, par Henshaw [4] dont les résultats expérimentaux sont interprétés par Donohue [5], de Al et de fils métalliques après recuit [6], de Ge [7], de Be [8] dont la détermination de structure par rayon X était contestée, et, utilisant la faible absorption des neutrons par la plupart des substances de poids atomique élevé, (à l'inverse des rayons X), la texture cristalline de barreaux d'U déformés sous irradiation [9].

#### II. 2 — Localisation d'atomes au milieu d'autres atomes.

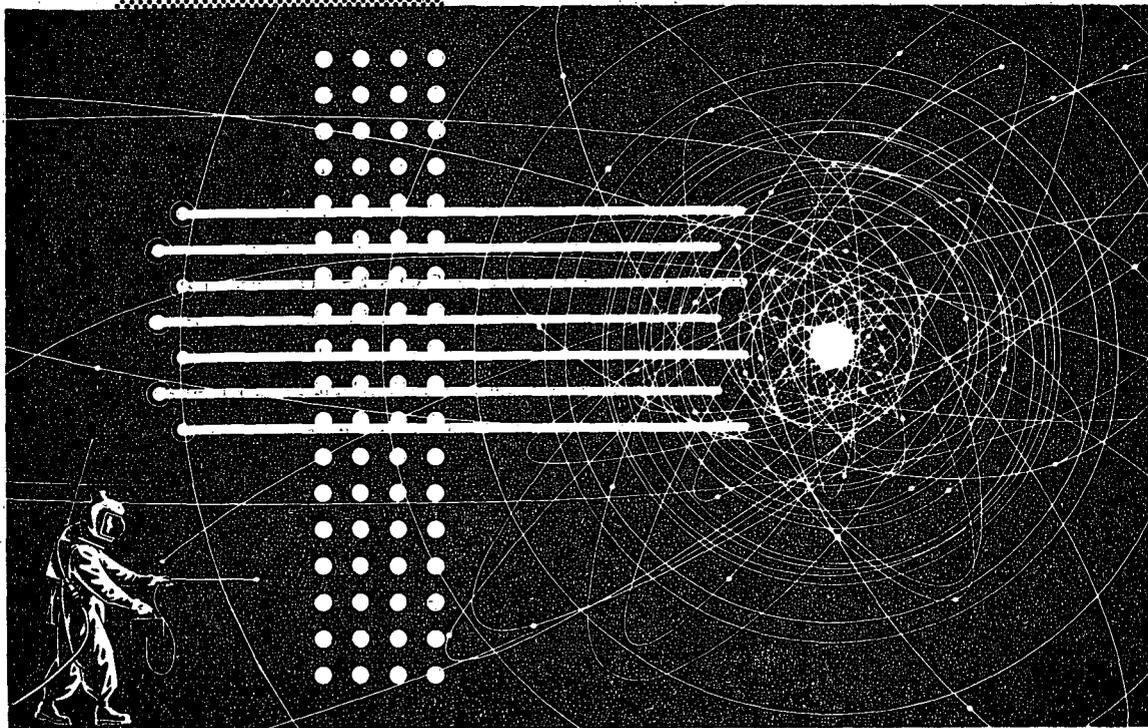
Dans ce domaine des études préalables par rayons X auront localisé certains atomes et les neutrons apporteront des précisions de localisation pour ceux des atomes échappant aux rayons X.

##### II. 2.1 — Eléments de numéros atomiques proches.

Ainsi C et N dans les cobaltocyanures [10].

Fe et Co, Ni et Mn,  $^{65}\text{Cu}$  et  $^{63}\text{Cu}$  [11], Pb et Bi, Mn et Co, les isotopes de Ti [12], dans certains alliages.

# zona perigosa?

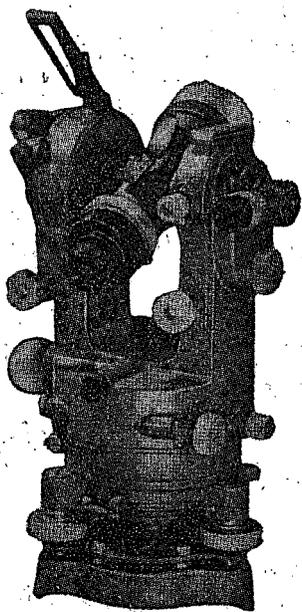


## a Shell aceita o desafio

O aparecimento da energia nuclear veio trazer novas esperanças a um mundo esfomeado de energia. Contudo só métodos novos conseguem resolver problemas novos. Um deles era o da lubrificação dos novos mecanismos. Os lubrificantes tradicionais expostos por pouco tempo a radiações atômicas relativamente fracas perdiam todas as qualidades e então... a Shell após 4 anos de pesquisas e usando todo o seu potencial de investigação científica conseguiu produzir lubrificantes especiais capazes de suportar doses fortísimas de radiações durante longos períodos. São os famosos Shell A P L única gama de lubrificantes, capazes de resistir com sucesso a radiações atômicas.



## NA VANGUARDA DOS LUBRIFICANTES



# NUCLEON

EQUIPAMENTOS DE PRECISÃO LIMITADA

SECCÕES:

- *DESENHO TÉCNICO*
- *APARELHAGEM CIENTÍFICA*  
*APARELHAGEM DE CONTROLE INDUSTRIAL*
- *MATERIAL DIDÁTICO*  
*TOPOGRAFIA E GEODESIA*

OFICINAS DE ASSISTÊNCIA TÉCNICA

A TODOS OS EQUIPAMENTOS VENDIDOS POR NUCLEON  
É OFERECIDA ASSISTÊNCIA TÉCNICA E APOIO TÉCNICO  
DAS SUAS OFICINAS.

Avenida António Augusto de Aguiar, 165 • Telef. 7321 31 • LISBOA

Liberte-se do ar  
viciado e cheiros  
desagradáveis com  
os ventiladores

**Vent-Axia**

NOVOS E ELEGANTES MODELOS



A VENDA EM  
TODO O PAIS

Agentes gerais para Portugal e Províncias Ultramarinas  
SOCIEDADE TÉCNICA DE FOMENTO, LDA  
PORTO LISBOA

Tipografia // Litografia // Encadernação

**S O C I E D A D E**  
**T I P O G R Á F I C A**

«**A Mundial**»  
L I M I T A D A

ESCRITÓRIO:

AVENIDA ALMIRANTE REIS, 45-A

TELEFONE 83 36 66

LISBOA 1

OFICINAS: NOVAS INSTALAÇÕES,  
REGUEIRÃO DOS ANJOS, 36

**NUCLEAR DE CHICAGO**

TODA A APARELHAGEM  
PARA ENERGIA NUCLEAR

REPRESENTANTE

**RUALDO, L. DA**  
SOCIEDADE COMERCIAL

LISBOA-2—(PORTUGAL) R. de S. José, 15-1.º  
L. da Anunciada, 19-1.º

TELEGRAMAS: RUALDO

TELEF.	Material	3 06 76
	Armazém	3 06 06
	Séc. Prev.	32 20 00
	Contab.	32 48 59
	Gerência	32 59 07

**LIVRARIA ESCOLAR**  
**EDITORA**

SEDE: RUA DA ESCOLA POLITÉCNICA, 70  
TELEFONE 66 40 40

SUCURSAL: CAMPO GRANDE, 111

TELEFONE 76 74 06

L I S B O A

*Livros para o Ensino Universitário,  
Liceal, Técnico e Primário*

NOVIDADES LITERÁRIAS

*Rápido serviço de encomendas de livros*

SECÇÃO DE PAPELARIA

*Material de desenho, canetas e artigos  
de escritório*

**DISCOTECA**

**T i p o g r a f i a**  
**L I S B O N E N S E**

de

**António Joaquim de Alencastre Telo**

FABRICANTE DE SACOS DE PAPEL  
EM TODOS OS GÊNEROS  
ENCADERNAÇÕES

IMPRESSÃO EM PAPEL CELOFANE  
ARTIGOS DE ESCRITÓRIO

Rua do Passadiço, 48 a 56  
Telef. 54357 — LISBOA

# MATERIAL DIDÁCTICO

de Física,  
Química  
e Biologia



Galvanómetro



PHYWE

PHYWE AG.

Goettingen — Alemanha Ocd.



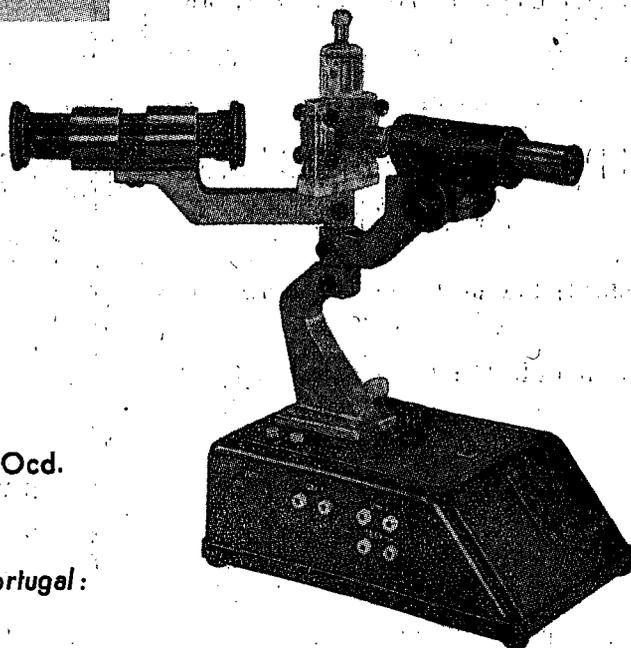
*Representante exclusivo para Portugal:*

**LUSOMAX**

**Sociedade de Importação e Exportação, Lda.**

RUA DOS CORREIROS, 123-3.º-DT.º

TELEF. PPC 30607 \* LISBOA. 2



*Aparelho de Millikan*

L'étude des composés du type spinelle : de formule générale  $XY_2O_4$  où  $X$  est un métal divalent, et  $Y$  un métal trivalent, le spinelle normal aura les ions divalents dans les cavités tétraédriques et les ions trivalents dans les cavités octaédriques, les mélange de structures pouvant aller jusqu'au spinelle inverse en passant par les structures mixtes. Les propriétés électriques et magnétiques des spinelles étant conditionnées par la répartition des cations dans l'édifice cristallin, lorsque  $X$  et  $Y$  ont par rapport aux rayons  $X$  des pouvoirs diffusants voisins, on a pu s'adresser aux neutrons et montrer ainsi par exemple que le spinelle  $MgAl_2O_4$  est normal.

## II. 2. 2 — Localisation d'atomes légers au milieu d'atomes lourds.

Ces études venant compléter les déterminations antérieures par rayons  $X$  permettent de localiser en particulier les atomes d' $O$  et d' $H$  dans leurs composés.

### Localisation des atomes d' $O$

Dans les oxydes lourds pour lesquels la diffraction par le métal lourd masquait l'atome d'oxygène ainsi  $V_2O_3$  [13] ou  $PbO$  [14] ou  $Ti_2O_3$  [15].

### Localisations des atomes d' $H$

Ce cas particulier a fait l'objet de nombreuses déterminations par diffraction neutronique. L'application toutefois n'est pas aussi simple que ne peut le faire espérer la section efficace de  $H$  qui est de 1,79 barns. Par effet de spin,  $H$  donne un fond de diffraction incohérente très important qui rend les diagrammes difficiles à interpréter. On pallie cet inconvénient en remplaçant  $H$  par du deutérium qui ne présente pas l'effet de spin.

Ainsi dans le cas particulier de la glace lourde la diffraction par rayons  $X$  avait

donné l'emplacement des atomes d' $O$  et les diverses hypothèses faites sur la position des atomes d' $H$  ont pu être éliminées (sauf deux d'entre elles) à la suite de l'étude par les neutrons.

A l'énumération des recherches faites dans l'article de Levy et Peterson [16] on ajoutera en particulier parmi les composés organiques le biphénylacétate d' $H$  et de  $K$  [17], la diméthylglyoxime [18], l'acide sulfamique [19].

## II. 2. 3 — Etude des mélanges.

Une méthode intéressante est alors la méthode dite de «matrice nulle» [1], qui permet de localiser dans certains cas particuliers les atomes légers seuls au milieu d'atomes lourds. Lorsqu'on a un mélange de carbures ou d'hydrures formant une solution solide (par exemple mélange de carbures de  $Ti$  et  $W$ ), pour lesquels les amplitudes de diffraction neutronique sont positive pour l'un des métaux, et négative pour l'autre, un certain taux de mélange donnera une amplitude résultante de diffraction cohérente nulle et le spectre de diffraction cohérente sera entièrement dû aux atomes légers (Fig. 2).

L'application de cette méthode permettra par exemple dans un mélange de deutériures à 62%  $Ti$  et 38%  $Zr$ , de voir apparaître le spectre de diffraction dû au seul deutérium.

On peut voir une application de cette méthode au choix de matériaux complètement transparents aux neutrons et utilisables comme porte-échantillons.

Toutefois cette application est limitée aux seuls atomes de soluté et solvant distribués au hasard dans la solution solide. Lorsque ces atomes prennent des positions ordonnées dans un composé d'éléments à matrice nulle avec le ou les éléments dont on veut étudier la diffraction, le diagramme obtenu contiendra les pics de diffraction de tous les composants.

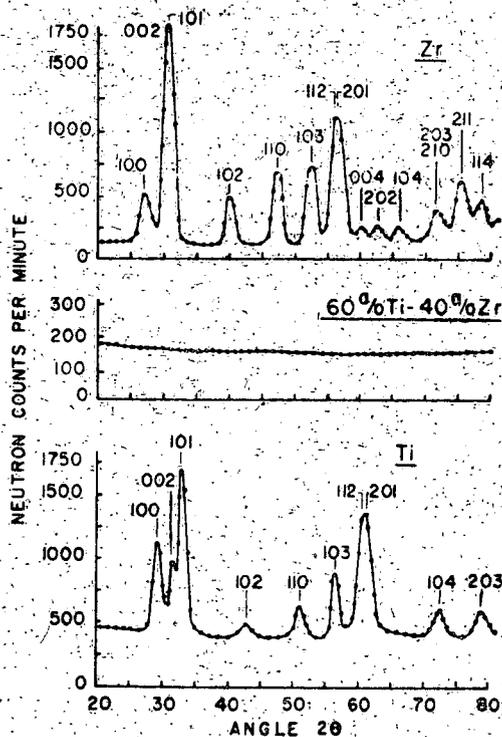


Fig. 2

## II. 2:4 — Etude de substances ferroélectriques.

Le point de transition ferroélectrique pour certains composés correspond à l'apparition d'une polarisation électrique spontanée qui peut être inversée par application d'un champ extérieur. L'étude de la position de l'atome d'Hydrogène dans certaines substances ferroélectriques a permis de confirmer brillamment l'hypothèse selon laquelle le point de transition ferroélectrique correspondait pour les atomes d' $H$  à un alignement en structure ordonnée par exemple pour  $KHF_2$  ou  $PO_4H_2K$ . L'étude en parallèle par rayons X et neutrons [22] d'oxydes doubles de formule générale  $ABO_3$  ( $PbZrO_3$ ,  $BaTiO_3$ ), a permis de déterminer les modifications de structure apparaissant au point de transition.

Par contre l'étude de solutions solides de formules  $AlTh_2D_n$  avec  $n=0, 2, 3, 4$  [23] a permis d'établir qu'aucune structure

ordonnée n'apparaissait même à la température que l'on considérait comme point de transition.

## CONCLUSION

Cette revue rapide de quelques applications de la diffraction de neutrons à l'étude des structures cristallines est loin d'être complète. Tout le domaine des études de structures magnétiques, ou des propriétés dynamiques d'un cristal, n'a pas été envisagé. De plus, l'obtention de faisceaux de neutrons plus intenses, ainsi que la réalisation d'appareillages plus élaborés, mieux adaptés aux neutrons va-t'il permettre d'étendre l'utilisation de ces techniques. Déjà certaines études récentes ont pu, avec les neutrons seules, confirmer des résultats obtenus avec les rayons X [14] ou même déterminer des structures cristallines complètes [24].

## RESUMO

Expõem-se os princípios e os métodos de estudo da estrutura da matéria utilizando a difracção neutrónica. Indicam-se algumas das suas aplicações mais importantes.

GENEVIEVE BASTIN-SCOFFIER

Laboratoire de l'Aimant-Permanent du C. N. R. S.  
Orsay (S-et-O) France

## BIBLIOGRAPHIE

- 1) Sidhu S. S., Le Roy Heaton, et Mueller M. H., *Journ Appl. Phys.*, **30** (1959) 1323 (article de synthèse).
- 2) Antal J. J. et Goland A. N., *Phys. Rev.*, **112** (1958) 103.
- 3) Bacon G. E. et Dyer R. F., *Nature*, **183** (1958) 35.
- 4) Henshaw D. G., *Phys. Rev.*, **109** (1958) 328.
- 5) Donohue J., *Phys. Rev.* **114** (1959) 1009.
- 6) Swalin R. A. et Geisler A. H., *Trans. Aime* **206** (1956) 1259.
- 7) Brockhouse B. N. et Iyengar, *Phys. Rev.* **11** (1958) 747.

- 8) Hay H. J. Pattenden N. J. et Egelstaff P. A., *Acta Cryst.* **11** (1958) 228.
- 9) Laniesse J., Meriel P. et Englander M., *Rapport CEA*, 1555 (1960).
- 10) Curry N. A. et Runciman W. A., *Acta Cryst.*, **12** (1959) 674.
- 11) Keating D. T., Neidhardt W. J. et Goland A. N., *Phys. Rev.* **111** (1958) 261.
- 12) Shull C. G., Wilkinson M. K. et Mueller M. H., *Phys. Rev.*, **118** (1960) 308.
- 13) Paoletti A. et Pickart S. J., *Journ. Chem. Phys.*, **32** (1960) 308.
- 14) Kay Mortimer, *Act. Cryst.*, **14** (1961) 80.
- 15) Shirane, Pickart S. J., *Phys. Chem. Sol.* (1960) 166.
- 16) Levy H. A. et Peterson S. W., *Rev. Mod. Phys.*, **30** (1958) 100, 101.
- 17) Bacon G. E. et Curry N. A., *Act. Cryst.*, **13** (1960) 717.
- 18) Walter B. G. et Hamilton C., *Act. Cryst.*, **14** (1961) 95.
- 19) Sass R. L., *Act. Cryst. Dan.*, **13** (1960) 320.
- 20) Peterson S. W. et Levy H. A., *Journ. Chem. Phys.*, **20** (1952) 704.
- 21) Bacon G. E. et Peaser S., *Proc. Roy. Soc. A.* **230** (1955) 359.
- 22) Shirane, Danner, Pepinsky, *Phys. Rev.* **105** (1958) 849.
- 23) Bergsma Goedkoop et Van Vucht J. N., *Act. Cryst.*, **14** (1961) 223.
- 24) Bacon G. E. et Curry N. A., *Act. Cryst.*, **13** (1960) 10.

## Comparaison entre les résultats expérimentaux et théoriques dans le domaine de la conversion interne

### 1 — Introduction

L'étude du phénomène de la conversion interne est un des outils les plus puissants pour la connaissance de la structure nucléaire. En effet, la détermination expérimentale des coefficients de conversion interne et leur comparaison avec les valeurs théoriques, joué un rôle très important dans l'établissement des schémas de niveaux nucléaires: elle permet de déterminer, dans beaucoup de cas, leurs moments angulaires totaux et parités.

Le phénomène de la conversion interne résulte d'une interaction entre le noyau et son cortège électronique, et il est en compétition avec l'émission  $\gamma$ , c'est-à-dire, dans les deux cas la transition se produit entre deux états d'un même noyau: il n'y a pas changement de numero atomique. Dans la desexcitation du noyau par l'émission  $\gamma$ , le photon emporte la différence d'énergie entre les deux états nucléaires. Par contre, dans

la conversion interne, cette différence d'énergie n'est pas émise sous la forme d'un rayonnement électromagnétique: elle est transférée *directement* à un électron du cortège électronique du noyau, qui quitte l'atome avec une énergie donnée par

$$E(e^-) = E(\gamma) - E(l)$$

( $E(\gamma)$ : énergie du photon  $\gamma$  émis en compétition;  $E(l)$ : énergie de liaison de l'électron dans le cortège).

On appelle coefficient de conversion interne, le rapport du nombre d'électrons de conversion interne et de photons  $\gamma$  émis dans la même transition entre deux états nucléaires:  $\alpha = \frac{N(e)}{N(\gamma)}$ . Ce rapport dépend de plusieurs paramètres:

- Numero atomique ( $Z$ );
- Ordre de la couche ou de la sous-couche électronique ( $K, L_I, L_{II}, L_{III}, \dots$ ) d'où l'électron est arraché;
- Énergie de la transition entre les deux niveaux nucléaires;