



N° d'ordre : .....

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

Université de M'sila  
Faculté des Sciences  
Département de Physique

## MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

## MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Physique des Particules à haute Energie**

Par

**SAADAOUI Mounira**

## THEME

---

**Détermination des sections efficaces empiriques de production des  
raies M des éléments de numéros atomiques  $60 \leq Z \leq 90$  par des  
protons.**

---

Soutenue le : 25/06/2013

Devant le jury composé de :

<b>KAHOUL Abdelhalim</b>	<b>M.C.A. Université de B.B.A</b>	<b>Président</b>
<b>NEKKAB Mohammed</b>	<b>Prof. Université de M'sila</b>	<b>Rapporteur</b>
<b>DEGHFEL Bahri</b>	<b>M.C.A. Université de M'sila</b>	<b>Examineur</b>

Promotion Juin 2013

## REMERCIEMENTS

---

### REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier très vivement Monsieur Mohammed NEKKAB , Professeur à l'Université de M'Sila pour avoir proposé et dirigé mes travaux de recherche. Ses compétences et ses bonnes directives m'ont aidé à achever ce mémoire de master. Merci aussi pour son attention et ses exigences pendant la période de rédaction du mémoire.

Je remercie Monsieur Abdelhalim KAHOUL, M.C.A à l'Université Mohammed-Bachir-El-Ibrahimi Bordj-Bou-Arréridj pour avoir accepté de présider le jury de soutenance de ce mémoire.

Je remercie Monsieur Bahri DEGHFEL, M.C.A à l'Université de M'Sila pour m'avoir apporté son soutien et son aide durant l'exécution de mes travaux et pour avoir accepté de faire partie de ce jury en tant qu'examineur.

Je tiens à remercier tous les enseignants du département de physique qui ont contribué à ma formation par leurs conseils et leurs orientations.

Enfin, je ne saurais oublier de remercier tous mes collègues de la promotion 2013.

Saâdaoui Mounira

Juin 2013

Je dédie ce mémoire :

*A mes parents*

*A mes frères Ali et Omar*

*A mes oncles*

*A toute ma famille SAADAoui*

*A mes amis*

*A tous ceux et celles qui m'ont aidé et encouragé de près comme de loin .*

TABLE DES MATIERES

<b>INTRODUCTION GENERALE.....</b>	<b>1</b>
<b>CHAPITRE I.....</b>	<b>3</b>
<b>Rappels théoriques.....</b>	<b>3</b>
I.1 .Introduction.....	3
I.2.Transitions électroniques et règles de sélection.....	4
I.2.1. Les niveaux des transitions pour la couche M.....	5
I.3.Emission de rayons X.....	5
I.4 .Rendement de fluorescence .....	6
I.5.Modèle quantique PWBA.....	9
I.5.1. Section efficace de diffusion .....	13
I.5.2. Section efficace d'ionisation.....	15
I.5.3. Section efficace de production de rayons X.....	19
I.5.4. Facteur de forme de la couche M .....	19
I.6.Model ECPSSR.....	21
<b>CHAPITRE II.....</b>	<b>22</b>
<b>Résultats des modèles PWBA et ECPSSR.....</b>	<b>22</b>
II.1.Introduction .....	22
II.2. Résultats du modèle PWBA .....	22
II.3.Modèle ECPSSR (modèle PWBA modifié).....	23
II.3.1.Augmentation de l'énergie de liaison de l'électron atomique.....	24
II.3.2.Déflexion coulombienne .....	24

## TABLE DES MATIERES

---

II.3.3. Correction de la perte d'énergie de l'ion incident.....	25
II.3.4. Correction relativiste.....	26
II.4. Résultats du modèle ECPSSR .....	26
<b>CHAPITRE III.....</b>	<b>28</b>
<b>Résultats et Interprétation.....</b>	<b>28</b>
III.1. Introduction.....	28
III.2. Section efficace empirique .....	29
III.2.1. Traitement individuel des éléments.....	31
III.2.1. Traitement collectif des éléments.....	35
III.3. Analyse et discussion des résultats.....	37
<b>Conclusion.....</b>	<b>46</b>
<b>Références bibliographiques .....</b>	<b>47</b>

### INTRODUCTION GENERALE :

Les travaux réalisés dans le cadre de ce mémoire sont basés essentiellement sur les interactions d'ions et plus particulièrement les protons ( $H^+$ ) avec des cibles solides.

Les protons sont par nature des particules chargées et peuvent avoir des interactions coulombiennes avec les cibles. Sous l'effet des forces coulombiennes, ils interagissent avec les particules chargées présentes dans la cible : les noyaux atomiques et les électrons du cortège électronique. Les protons peuvent donc ioniser les couches électroniques des atomes qu'ils rencontrent. Un photon X peut alors être émis après réarrangement du cortège électronique. Ce processus d'interaction rayonnement-matière est dominé par l'ionisation directe de Coulomb par impact d'ions légers avec la cible, menant ainsi à la création des lacunes (états électroniques vacants).

L'atome cible retrouve alors sa stabilité (désexcitation) par émission radiative de rayons X ou par des processus non radiatifs d'électrons-Auger ou transitions de Coster-Kronig [Me.58]. L'ionisation des couches internes et la production des rayons X par des particules chargées ont été intensivement étudiées durant les quatre dernières décennies, principalement en raison de leur importance pour la technique d'analyse par émission des rayons X induite par des particules chargées (Particle Induced X-ray Emission - PIXE). Cette technique d'analyse est basée sur l'ionisation des couches internes ( $K$ ,  $L$  ou  $M$ ) de l'atome cible conduisant, par réarrangement électronique, à la production des rayons X qui sont caractéristiques de l'élément ionisé et donc des informations sur la composition élémentaire de l'échantillon à étudier peuvent être tirées de l'analyse du spectre X obtenu.

Les calculs théoriques des sections efficaces d'ionisation des niveaux M reposent sur différents modèles théoriques tel que le modèle ECPSSR qui conduit généralement aux sections efficaces d'ionisation, converties ensuite en sections efficaces de production de rayons X en utilisant les rendements de fluorescence, les probabilités de transitions de Coster-Kronig et des taux d'émission X.

Dans ce travail, nous présentons les résultats de calcul des sections efficaces empiriques des sous-couches  $M_i$  des éléments de numéros atomiques  $60 \leq Z \leq 90$  pour des protons d'énergie comprise entre 0.1 MeV et 4.0 MeV.

Le travail effectué dans ce mémoire est axé autour de trois chapitres structurés comme suit :

## INTRODUCTION GENERALE :

---

Le premier chapitre est consacré à l'étude théorique du modèle *PWBA* utilisé pour décrire l'ionisation d'un atome par une particule en introduisant la notion de section efficace d'ionisation et de production des rayons X.

Le second chapitre est consacré à la description des modèles théoriques pour décrire l'ionisation d'un atome par une particule chargée : les modèles théoriques PWBA et ECPSSR.

Dans le troisième chapitre nous présentons les données expérimentales des sections efficaces empiriques pour les éléments  $60 \leq Z \leq 90$ . Les résultats obtenus pour les sections efficaces empiriques calculées selon deux approches (approche collective et approche individuelle) sont exposés et discutés.

## CHAPITRE I

### Rappels théoriques

#### I.1.INTRODUCTION :

En 1895, le physicien Allemand Wilhelm Conrad Röntgen découvre une nouvelle sorte de rayons ; qu'il nomma alors « rayons X ».

Le pouvoir des rayons X de traverser des parois opaques et de révéler l'intérieur du corps humain a immédiatement donné un grand retentissement populaire à cette découverte scientifique. La plupart des scientifiques dès le début du 19<sup>ème</sup> siècle utilisèrent les rayons X pour étudier les corps cristallisés. Les rayons X ont permis aux physiciens de confirmer expérimentalement les théories de la cristallographie. En utilisant des méthodes de diffraction des rayons X, il est possible d'identifier des substances cristallines et de déterminer leur structure. La diffraction de rayons X largement reconnue pour sa capacité à résoudre un nombre pratiquement illimité de problèmes d'analyse de matériaux, ainsi l'étude des rayons X a joué un rôle essentiel en physique théorique, en particulier dans le développement de la mécanique quantique.

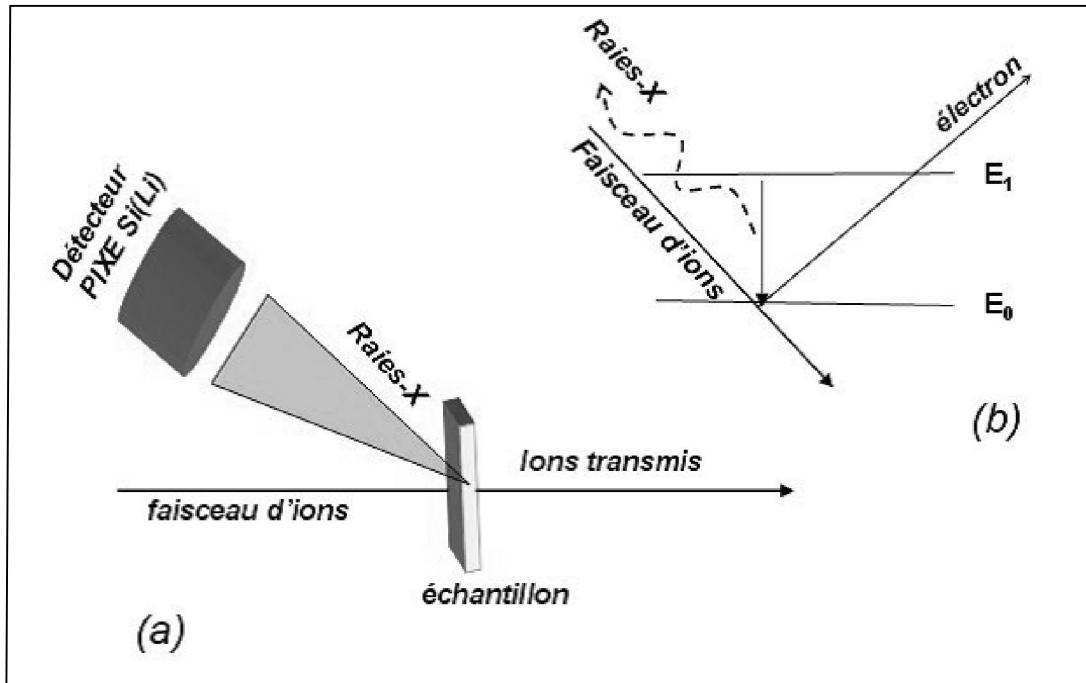
Les rayons X sont des ondes électromagnétiques que l'on retrouve dans un large domaine des radiations.

Lorsqu'un échantillon est bombardé par des ions rapides, des électrons sont arrachés aux atomes de cette cible. L'ionisation des atomes résulte de l'interaction coulombienne électron-ion ce qui conduit à éjecter des électrons, le plus souvent, des couches électroniques les moins liées des atomes, mais peuvent l'être également des couches profondes. Ce dernier phénomène est à la base de la technique d'analyse par émission X induite par des particules chargées PIXE « Particule Induced X-ray Emission ». Cette méthode d'analyse est basée sur l'ionisation des couches internes de l'atome cible par les ions incidents et sur la détection du rayonnement X émis lors du réarrangement du cortège électronique.

Le principe physique qui régit cette technique est un processus atomique en trois étapes :

- 1- L'ionisation des couches profondes de l'atome cible.
- 2- Le remplissage de la lacune électronique ainsi créée par un électron d'une couche plus externe.
- 3- Le relâchement de l'excédent d'énergie par émission d'un rayon X caractéristique.

La figure I.1 montre le schéma de principe de production des raies X et de l'analyse par PIXE.



**Figure I.1** : Schéma de principe de l'analyse PIXE (a) de production des photons X par ionisation de l'atome cible par un ion incident (b) [Ng.08].

## I.2. Transitions électroniques et règles de sélection :

Les principales transitions radiatives permises sont présentées sur la figure 1.2. Dans le formalisme du modèle en couche atomique, seules certaines transitions électromagnétiques de type dipolaire électrique, sont permises par les règles de sélection quantiques [Ng.08] :

$$\Delta n \geq 1 \quad (I.2.1)$$

$$\Delta l = \pm 1 \quad (I.2.2)$$

$$\Delta j = 0 ; \pm 1 \quad (I.2.3)$$

Où

- n : nombre quantique principal (n = 1, 2, 3...)
- l : nombre quantique orbital (l = 0, 1, 2, ..., n-1)
- m : nombre quantique magnétique (-l ≤ m ≤ +l)
- j : nombre quantique associé au moment angulaire total de l'électron (|l - s| ≤ j ≤ |l + s|)

où  $s$  est le nombre quantique associé au spin de l'électron ( $s = 1/2$ ).

### I.2.1 Les niveaux des transitions pour la couche M :

La couche M est composée de cinq sous-couches ( $M_1, M_2, M_3, M_4, M_5$ ).

Pour  $n = 3$  et  $s = 1/2$

- $0 \leq \ell \leq n-1, \quad \ell = 0, 1, 2.$

$$|\ell - s| \leq j \leq |\ell + s|, \quad [j = 3/2, 5/2 \text{ (pour } \ell=2), j = 3/2, 1/2 \text{ (pour } \ell=1), j = 1/2 \text{ (pour } \ell=0)].$$

$$3s_{1/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}, 3d_{3/2}, 3d_{5/2}.$$

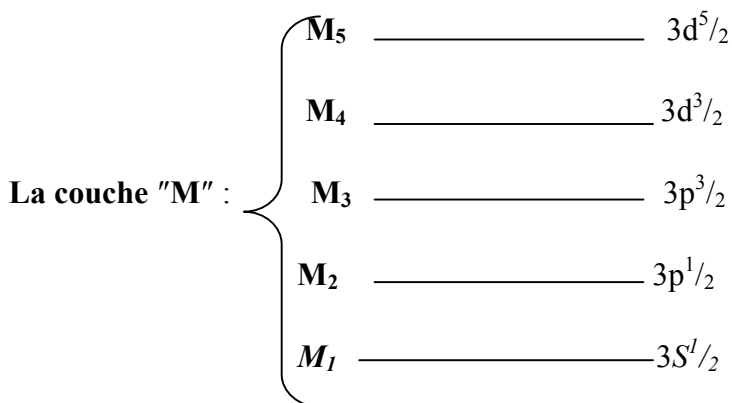


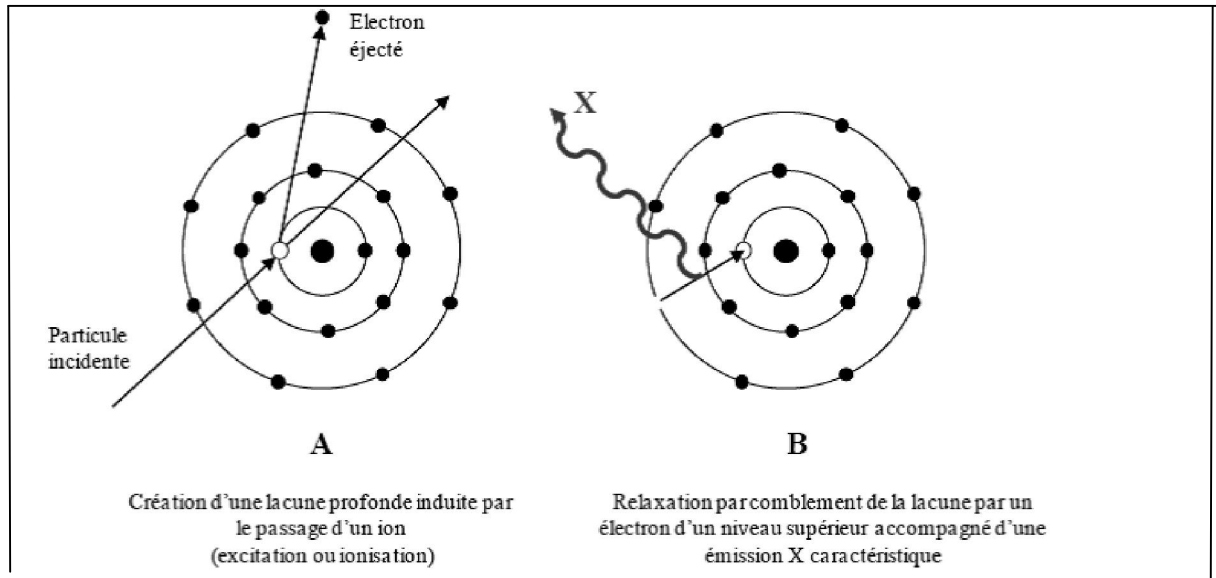
Figure (I.2) : Diagramme des niveaux d'énergie en notations empirique et quantique.

### I.3.Emission de rayons X :

L'interaction coulombienne entre les ions incidents et les électrons liés des couches atomiques profondes induit l'ionisation de ces couches [Ng.08]. Le réarrangement du cortège électronique résultant de la création des lacunes dans une couche interne (K, L ou M) peut alors s'accompagner de l'émission de raies X caractéristiques de l'atome émetteur. Lorsque la lacune est comblée par un électron provenant d'une couche plus externe, la transition libère une énergie correspondant à la différence des énergies de liaison des couches électroniques impliquées dans la transition.

La figure 1.3 illustre l'exemple des processus d'excitations et d'émission X.

- A. Dans un premier temps survient **l'ionisation** de l'atome cible suite à son bombardement par le faisceau d'ions incidents. En effet, l'éjection d'un électron des couches atomiques profondes correspond à la création d'une lacune électronique.
- B. Le cortège électronique de l'atome ionisé se réorganise rapidement ( $10^{-17}$  à  $10^{-13}$ s).



**Figure I.3** : Principe de l'émission X induite par particules chargées [So.10].

La désexcitation des atomes peut se produire non seulement par l'émission du rayonnement électromagnétique, mais également par d'autres processus concurrents. Dans une série classique d'expériences, Auger démontra que l'énergie libérée par l'atome lors de sa désexcitation vers les couches internes peut s'employer en émettant d'autres électrons par des transitions non-radiatives. En outre, en étudiant des spectres d'émission des rayons X, Coster et Kronig découvrirent des transitions non-radiatives entre les sous-couches de la même couche [Ba.72].

#### I. 4. Rendement de fluorescence :

Le rendement de fluorescence d'une couche ou d'une sous-couche atomique est défini comme étant la probabilité pour qu'une lacune dans cette couche ou sous-couche soit comblée par une transition radiative.

Le rendement de fluorescence d'une couche est égal au nombre de rayons X émis  $I_x$  divisé par le nombre  $n_x$  de lacunes initiales dans une couche donnée

$$\omega_x = I_x / n_x \tag{I.4.1}$$

Soit  $\omega_i^X$  le rendement de fluorescence de la  $i$ ème sous-couche d'une couche dont le nombre quantique principal est désigné par X (X= K, L, M..) selon l'équation donnant le rendement de fluorescence d'une couche atomique, on obtient pour une sous-couche :

$$\omega_i^X = I_i^X / n_i^X \quad (I.4.2)$$

Le rendement moyen de fluorescence d'une couche atomique est défini à partir des rendements de fluorescence des sous-couches X comme suit :

$$\varpi_X = \sum_{i=1}^k N_i^X \omega_i^X \quad (I.4.3)$$

Où  $N_i^X$  est le nombre relatif de lacunes primaires dans la  $i$ ème sous-couche de la couche X :

$$N_i^X = n_i^X / \sum n_i^X \text{ et } \sum_{i=1}^k N_i^X = 1 \quad (I.4.4)$$

En étudiant les transitions de Coster-Kronig , deux approches peuvent être prises en compte. D'abord, le rendement moyen de fluorescence  $\varpi_X$  peut être considéré comme une combinaison linéaire des rendements de fluorescence  $\omega_i^X$  des sous-couches k définies par leurs distributions  $V_i^X$  des lacunes incluant le changement créé par les transitions de Coster-Kronig :

$$\varpi_X = \sum_{i=1}^k V_i^X \omega_i^X . \quad (I.4.5)$$

La probabilité de Coster-Kronig pour faire passer une lacune d'une sous- couche  $X_i$  à une autre sous-couche plus élevée  $X_j$  est désignée par  $f_{ij}^X$  et par conséquent les quantités  $V_i^X$  peuvent être écrites en fonction du  $N_i^X$  comme suit [Ba.09] :

$$\begin{aligned} V_1^X &= N_1^X \\ V_2^X &= N_2^X + f_{12}^X N_1^X \\ V_3^X &= N_3^X + f_{23}^X N_2^X + (f_{13}^X + f_{12}^X f_{23}^X) N_1^X , \end{aligned} \quad (I.4.6)$$

$$V_k^X = N_k^X + f_{k-1,k}^X N_{k-1}^X + (f_{k-2,k-1}^X f_{k-1,k}^X) N_{k-2}^X + \dots + (f_{1k}^X + f_{12}^X f_{2k}^X + f_{12}^X f_{23}^X f_{3k}^X + \dots) N_1^X$$

En second lieu, le rendement moyen de fluorescence  $\varpi_X$  peut être considéré comme une combinaison linéaire de la distribution des lacunes primaires  $N_i^X$  avec un ensemble de coefficients  $\nu_i^X$  incluant l'effet de transitions de Coster-Kronig [Ba.72]:

$$\varpi_X = \sum_{i=1}^k N_i^X \nu_i^X . \quad (I.4.7)$$

Les relations de transformation entre  $N_i^X$  et  $V_i^X$ , d'une part, et entre  $\nu_i^X$  et  $\omega_i^X$ , d'autre part, sont obtenues à partir des équations (I.4.5), (I.4.6) et (I.4.7). En particulier, on donne ces relations pour les sous-couches  $M_i$  ( $i = 1, \dots, 5$ ) de la couche  $M$  comme suit :

$$V_1 = N_1 ,$$

$$V_2 = N_2 + f_{12} N_1 ,$$

$$V_3 = N_3 + f_{23} N_2 + (f_{13} + f_{12} f_{23}) N_1$$

$$V_4 = N_4 + f_{34} N_3 + (f_{24} + f_{23} f_{34}) N_2 + (f_{14} + f_{13} f_{34} + f_{12} f_{24} + f_{12} f_{23} f_{34}) N_1$$

$$V_5 = N_5 + f_{45} N_4 + (f_{35} + f_{34} f_{45}) N_3 + (f_{25} + f_{24} f_{45} + f_{23} f_{35} + f_{23} f_{34} f_{45}) N_2 + (f_{15} + f_{14} f_{45} + f_{13} f_{35} + f_{12} f_{25} + f_{13} f_{34} f_{45} + f_{12} f_{24} f_{45} + f_{12} f_{23} f_{35} + f_{12} f_{23} f_{34} f_{45}) N_1 \quad (I.4.8)$$

et

$$\nu_1 = \omega_1 + f_{12} \omega_2 + (f_{13} + f_{12} f_{23}) \omega_3 + (f_{14} + f_{12} f_{24} + f_{13} f_{34} + f_{12} f_{23} f_{34}) \omega_4 + (f_{15} + f_{12} f_{25} + f_{13} f_{35} + f_{14} f_{45} + f_{12} f_{23} f_{35} + f_{12} f_{24} f_{45} + f_{13} f_{34} f_{45} + f_{12} f_{23} f_{34} f_{45}) \omega_5 ,$$

$$\nu_2 = \omega_2 + f_{23} \omega_3 + (f_{24} + f_{23} f_{34}) \omega_4 + (f_{25} + f_{23} f_{35} + f_{24} f_{45} + f_{23} f_{34} f_{45}) \omega_5 ,$$

$$\nu_3 = \omega_3 + f_{34} \omega_4 + (f_{35} + f_{34} f_{45}) \omega_5 ,$$

$$\nu_4 = \omega_4 + f_{45} \omega_5 ,$$

$$\nu_5 = \omega_5 \quad (I.4.9)$$

### I.5. Modèle quantique PWBA :

Le premier modèle théorique utilisé pour décrire l'ionisation d'un atome par une particule chargée est le modèle de l'approximation d'onde plane de Born PWBA élaboré pour la première fois par Merzbacher et Lewis en 1958.

On considère une collision élastique entre le faisceau des particules incidentes (projectiles), et une cible (atomes), c'est -à-dire le cas où l'état final est composé des mêmes particules que l'état initial et où l'état interne des particules reste inchangé.

De plus,

- Les particules sont supposées sans spin ;
- Aucune prise en compte de la structure interne des particules incidentes ;
- On considère que l'interaction entre la particule incidente et la particule cible se fait via un potentiel de la forme :  $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  dépendant de la distance relative entre les deux particules :

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = V(\vec{r}) \quad (I.5.1)$$

Où  $r \vec{r}_1$  et  $\vec{r}_2$  : sont respectivement les vecteurs positions des particules incidente et cible.

De plus,  $\mu = M_1 M_2 / M_1 + M_2$  est la masse réduite du système et  $M_1$  et  $M_2$  sont respectivement les masses des particules incidente et cible.

On considère les états stationnaires de l'équation de Schrödinger correspondante :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{r})\right)\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \quad (I.5.2)$$

L'énergie E représente l'énergie cinétique de la particule incidente avant qu'elle n'ait abordé la zone d'action du potentiel.

On pose alors :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad \text{et} \quad V(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} U(r) \quad (I.5.3)$$

L'équation de Schrödinger devient alors :

$$(\Delta + k^2)\varphi(\vec{r})=U(\vec{r})\varphi(\vec{r}) \quad (\text{I.5.4})$$

Où  $\varphi(\vec{r})$  : représente la fonction d'onde du projectile décrit par l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

L'équation de Schrödinger décrivant l'évolution de la particule diffusée par le potentiel  $V(\vec{r})$  admet des solutions d'énergie  $E$  définies comme suit:

$$\chi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{\frac{iEt}{\hbar}} \quad (\text{I.5.5})$$

La particule incidente, caractérisée par l'absence d'interaction avec la cible, est une particule libre décrite par une onde plane :

$$\varphi_i(\vec{r}) = e^{ik_i\vec{r}} \quad (\text{I.5.6})$$

Solution de l'équation :

$$(\Delta + k_i^2)\varphi_i(\vec{r}) = 0 \quad (\text{I.5.7})$$

On cherche maintenant une fonction  $\varphi(\vec{r})$  solution particulière de (I.5.4) sous la forme :

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}) + \int G(\vec{r} - \vec{r}')U(\vec{r}')\varphi(\vec{r}')d\vec{r}' \quad (\text{I.5.8})$$

Où  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  est la fonction de Green, définie par la relation :

$$(\Delta + k^2)G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{I.5.9})$$

Le problème essentiel revient maintenant à la détermination de la fonction de Green, solution de l'équation (I.5.9). L'examen de cette équation nous montre que la fonction de Green doit être nulle pour toutes les valeurs de  $\vec{r}$  différentes de zéro.

Une onde sphérique divergente  $\exp(K_i r)/r$ , correspondant à une énergie  $E_i$  du projectile, possède bien cette particularité, c'est ce qu'on peut vérifier en cherchant une solution  $E_i = \hbar^2 k_i^2 / 2\mu$ , sous cette forme [Sa.94]

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{e^{ik_i|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{I.5.10})$$

On utilisera la relation suivante :

$$\Delta\left(\frac{1}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}\right) = -\delta(\vec{r}-\vec{r}') \quad (\text{I.5.11})$$

En posant  $\vec{r}-\vec{r}' = \vec{r}''$ , On obtient :

$$\Delta G(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{k_i^2 e^{ik_i|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} - \frac{ik_i e^{ik_i|\vec{r}-\vec{r}'|}}{2\pi|\vec{r}-\vec{r}'|^2} + \delta(\vec{r}-\vec{r}') e^{ik_i|\vec{r}-\vec{r}'|} + \frac{2}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|^2} (ik_i e^{ik_i|\vec{r}-\vec{r}'|}) \quad (\text{I.5.12})$$

Ce qui conduit à la relation :

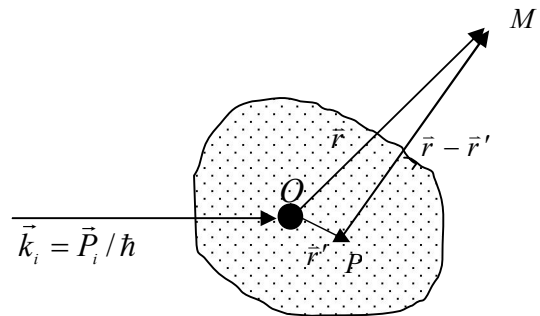
$$\Delta G(\vec{r}-\vec{r}') = -k_i^2 G(\vec{r}-\vec{r}') + \delta(\vec{r}-\vec{r}') \quad (\text{I.5.13})$$

Donc, la solution choisie est bien une solution de l'équation (I.5.9).

En utilisant les équations (I.5.8) et (I.5.10), la solution de l'équation (I.5.4) prend alors la forme :

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik_i|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \varphi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.5.14})$$

C'est une équation intégrale de la fonction d'onde  $\varphi(\vec{r})$ . Le phénomène de diffusion est représenté sur la figure I.4; la particule incidente diffuse à l'extérieur de la zone d'action du potentiel créé par la particule cible où:



**Figure(I.4):** Processus de diffusion représenté

La zone d'action du potentiel créé par la cible.

$\vec{r}$  : La distance entre M et O.

$\vec{r}'$  : La distance entre P et O.

$\vec{r}-\vec{r}'$  : La distance entre P et M.

La zone d'action précédemment définie est petite par rapport à la distance  $\vec{r}$  (position du détecteur), ceci nous permet de prendre une valeur approchée du dénominateur

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = [r^2 + \vec{r}'^2 - 2\vec{r}\vec{r}']^{1/2} = r \left[ 1 + \frac{r'^2}{r^2} - 2\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2} \right]^{1/2} \approx r \left[ 1 - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2} \right] \quad (\text{I.5.15})$$

L'onde sphérique de l'intégrand devient ainsi :

$$\frac{e^{ik_i|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \frac{e^{ik_i r \left(1 - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2}\right)}}{r \left(1 - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2}\right)} \approx \frac{e^{ik_i r}}{r} e^{-ik_i \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r}} \quad (\text{I.5.16})$$

Le vecteur impulsion émergent est défini comme suit :

$$\vec{k}_f = k_i \frac{\vec{r}}{r} \quad (\text{I.5.17})$$

L'onde émergente prend la forme suivante :

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_i r}}{r} \int e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \varphi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.5.18})$$

Cette onde se comporte comme une onde plane  $\varphi_i(\vec{r})$  augmentée d'une onde sphérique diffusée d'amplitude  $e^{ik_i r} / r$  de  $f$ . Donc, l'onde émergente s'écrit sous la forme :

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}) + f \frac{e^{ik_i r}}{r} \quad (\text{I.5.19})$$

Où  $f$  est l'amplitude de diffusion exprimée en fonction du vecteur d'onde  $k_f$  de la particule diffusée :

$$f = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \varphi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.5.20})$$

L'amplitude  $f$  dépend de la position du détecteur, ce qui nous permet de l'écrire en coordonnées sphériques. De plus, l'approximation de Born consiste à remplacer l'état propre dans l'intégrale par une onde plane:

$$f = f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle \quad (\text{I.5.21})$$

**I.5.1. Section efficace de diffusion :**

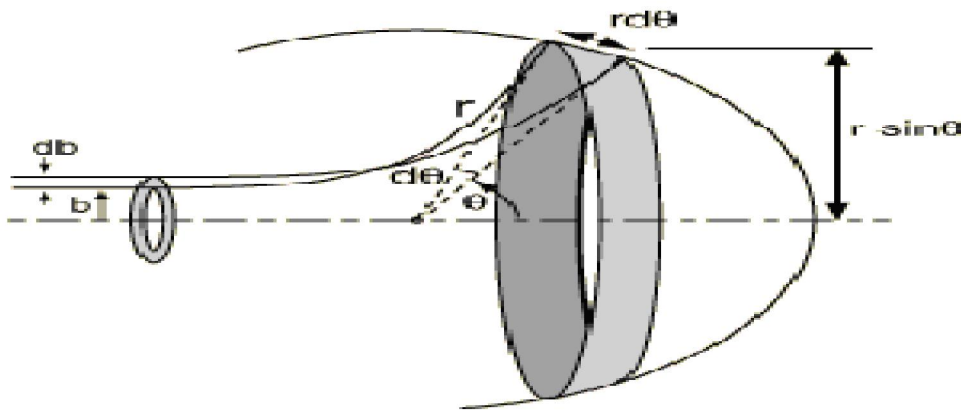
On considère un faisceau de particules incidentes, caractérisé par la fonction d'onde plane (Equation (I.5.6)) et par son flux  $\Phi_i$  (le nombre de particules traversant pendant l'unité de temps une surface unitaire perpendiculaire à la direction de propagation), qui se propage suivant la direction  $oz$  (figure I.5). Du fait de son interaction avec la cible, les particules du faisceau incident sont diffusées dans tout l'espace. Nous allons exprimer le nombre  $dn$  de particules diffusées par unité de temps dans l'angle solide  $d\Omega$ . Par une analyse physique de la situation,  $dn$  est proportionnel au flux  $\Phi$  et à l'angle solide  $d\Omega$  :

$$dn \propto \Phi d\Omega . \tag{I.5.22}$$

$dn$  est proportionnel à une quantité ayant les dimensions d'une surface :

$$dn \propto \sigma(\theta, \varphi) \Phi d\Omega \tag{I.5.23}$$

Où  $\sigma(\theta, \varphi)$  est la section efficace différentielle de diffusion.



**Figure (1.5) :** Schéma représentant le processus de diffusion [KI.10].

On définit la section efficace totale comme suit :

$$\sigma = \int \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega \tag{I.5.24}$$

Pour calculer la section efficace différentielle on utilise la relation de la densité de courant :

$$j = \frac{\hbar}{2\mu i} (\varphi^* \nabla \varphi - \varphi \nabla \varphi^*) \quad (\text{I.5.25})$$

Où  $\varphi$  représente la fonction d'onde indépendante du temps.

- Pour calculer la densité du courant incident  $j_i \rightarrow$  on utilise la fonction d'onde plane  $\varphi = e^{ik_i r}$ .
- Pour calculer la densité du courant diffusé  $j_d \rightarrow$  on utilise la fonction d'onde diffusé  $\varphi = f(\theta, \varphi) \frac{e^{ik_i r}}{r}$

En coordonnées sphériques on donne :

$$\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r},$$

$$\nabla_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta},$$

et 
$$\nabla_\varphi = \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\text{I.5.26})$$

Ce qui conduit à :

$$j_i = \frac{\hbar k_i}{\mu}$$

$$j_{dr} = \frac{\hbar k_f}{\mu} \frac{1}{r^2} |f(\theta, \varphi)|^2$$

$$j_{d\theta} = \frac{\hbar}{\mu r^3} \text{Re} \left[ \frac{1}{i} f^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} f(\theta, \varphi) \right]$$

$$j_{d\varphi} = \frac{\hbar}{\mu r^3 \sin(\theta)} \text{Re} \left[ \frac{1}{i} f^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} f(\theta, \varphi) \right] \quad (\text{I.5.27})$$

On peut négliger les 3<sup>ème</sup> et 4<sup>ème</sup> termes car  $\frac{1}{r^3} \ll \frac{1}{r^2}$  et  $\frac{1}{r^4} \ll \frac{1}{r^2}$  donc :

$$j_d = \frac{\hbar k_f}{\mu} \frac{1}{r^2} |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (\text{I.5.28})$$

Pendant l'unité de temps  $j_d r^2 d\Omega$  particules passent dans un élément de surface  $r^2 d\Omega$ , ce qui nous permet d'écrire la section efficace différentielle de diffusion sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega &= \frac{j_d r^2 d\Omega}{j_i} \\ &= \frac{k_f}{k_i} |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \end{aligned} \quad (\text{I.5.29})$$

### I.5.2. Section efficace d'ionisation :

Dans le développement du modèle PWBA [Ba.73b], [Be.78] l'approximation de Born est utilisée dans la théorie de la diffusion pour décrire l'interaction entre la particule chargée incidente (proton) et l'atome cible. On considère que l'ionisation se fait via la seule interaction coulombienne entre la particule incidente et les électrons de la cible.

Pour pouvoir appliquer l'approximation de Born, nous devons faire quelques hypothèses :

- (i): Le projectile est considéré comme une charge ponctuelle.
- (ii) : Les états initial et final sont décrits par des ondes planes.
- (iii) : les états des électrons de la cible sont ceux de l'atome non perturbé.

Donc, l'amplitude de diffusion peut prendre la forme :

$$\begin{aligned} f &= f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle \\ &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \phi_f^*(\vec{r}_2) W(\vec{r}_2) \phi_i(\vec{r}_2) d\vec{r}_2, \end{aligned} \quad (\text{I.5.30})$$

où  $W(\vec{r}_2) = \int \phi_f^*(\vec{r}_1) V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \phi_i(\vec{r}_1) d\vec{r}_1$ .

Pour  $V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = -Z_1 e^2 / |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ , le potentiel d'interaction entre l'ion incident et l'électron atomique, et  $\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ , le moment transféré par l'ion incident à l'électron atomique, la fonction  $W(\vec{r}_2)$  devient :

$$\begin{aligned}
 W(\vec{r}_2) &= -Z_1 e^2 \int \frac{e^{i\vec{q}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_2}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 \\
 &= -4\pi Z_1 e^2 \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_2}}{q^2}.
 \end{aligned} \tag{I.5.31}$$

On peut estimer cette intégrale sachant que :

$$\int \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{r} d\vec{r} = \frac{4\pi}{q^2}. \tag{I.5.32}$$

Ceci nous permet d'écrire  $f$  sous la forme :

$$f = -\frac{2\mu Z_1 e^2}{\hbar^2} \frac{F_s(q)}{q^2}, \tag{I.5.33}$$

où  $F_s(q) = \int \phi_f^*(\vec{r}_2) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_2} \phi_i(\vec{r}_2) d\vec{r}_2$ .

En substituant l'expression (I.5.33) dans (I.5.29), donnant la section efficace différentielle de diffusion, nous obtenons la section efficace différentielle d'ionisation d'un atome par une particule chargée :

$$d\sigma = d\sigma(\theta, \varphi) = \frac{k_f}{k_i} \left( \frac{2\mu Z_1 e^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{|F_s(q)|^2}{q^4} d\Omega. \tag{I.5.34}$$

En se servant de l'expression donnant le moment transféré par l'ion incident à l'électron atomique  $\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$  ;  $q^2 = k_f^2 + k_i^2 - 2k_i k_f \cos(\theta)$  et en dérivant par rapport à  $\theta$ , ce qui permet d'introduire à la place de l'angle de diffusion (et donc l'angle solide  $d\Omega$ ) le vecteur de moment transféré  $\vec{q}$ , on déduit :

$$d\Omega = \frac{2\pi q dq}{k_i k_f} \tag{I.5.35}$$

En reportant cette valeur dans l'expression (I.5.34), il vient :

$$d\sigma = 8\pi Z_1^2 \left( \frac{e^2}{\hbar V_1} \right)^2 \frac{|F_s(q)|^2}{q^3} dq, \tag{I.5.36}$$

Où  $\hbar k_i = P_i = \mu V_1$ .

Notre but est de calculer la section efficace d'ionisation d'un électron d'une orbite  $S$  d'énergie d'ionisation  $I_s$  vers l'état libre d'énergie  $\varepsilon = I_s + T$ , où  $T = \hbar^2 k^2 / 2m_e$  est l'énergie cinétique de l'électron éjecté. L'expression de la section efficace différentielle d'ionisation pour des électrons d'énergie comprise entre  $\varepsilon$  et  $\varepsilon + d\varepsilon$ , prend la forme :

On introduit maintenant les quantités sans dimensions :

$$W Z_{2s}^2 R = \varepsilon = T + I_s, K = a_s k, \text{ et } Q = (a_s q)^2, \quad (\text{I.5.37})$$

Avec  $W^2 = K^2 + 1/9$ ,  $R$  est la constante de Rydberg,  $a_s = a_0 / Z_{2s}$  où  $a_0$  est le rayon de Bohr et  $Z_{2s}$  est la charge effective du noyau de l'atome cible vue par un électron de l'orbite  $S$  [Sl.30]. La section efficace différentielle d'ionisation peut donc être réécrite sous la forme :

$$d^2\sigma = 4\pi Z_1 \left( \frac{e^2}{\hbar V_1} \right)^2 \left( \frac{a_0}{Z_{2s}} \right)^2 \frac{|F_{W,S}(Q)|^2 dQ}{Q^2} dW. \quad (\text{I.5.38})$$

Introduisons de plus les quantités  $\theta_s$  (l'énergie réduite de liaison de l'électron atomique) et  $\eta_s$  (l'énergie réduite de l'ion incident), qui sont données par :

$$\theta_s = n^2 \frac{I_s}{Z_{2s}^2 R} \quad (\text{I.5.39})$$

et

$$\eta_s = \frac{m_e E}{M_1 Z_{2s}^2 R} = \frac{1}{Z_{2s}^2} \left( \frac{\hbar V_1}{e^2} \right)^2 \quad (\text{I.5.40})$$

où  $m_e$  est la masse de l'électron.

Nous obtenons finalement la section efficace d'ionisation d'une couche  $S$  d'un atome par une particule chargée dans l'approximation de Born [Li.96] :

$$\sigma_s^{PWBA}(\eta_s, \theta_s) = \frac{\sigma_{0S}}{\eta_s} \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} |F_{W,S}(Q)|^2 \frac{dQ}{Q^2},$$

$$= \frac{\sigma_{0S}}{\eta_S} f_S(\eta_S, \theta_S) \quad (\text{I.5.41})$$

avec :

$$\sigma_{0S} = 8\pi a_0^2 \frac{Z_1^2}{Z_{2S}^4} \quad (\text{I.5.42})$$

et

$$f_S(\eta_S, \theta_S) = \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} |F_{W,S}(Q)|^2 \frac{dQ}{Q^2}. \quad (\text{I.5.43})$$

$F_{W,S}(Q)$  est le facteur de forme pour la transition entre les états électroniques de l'atome cible ; l'électron se trouve initialement dans l'état lié  $S$ , puis éjecté avec un transfert d'énergie  $\varepsilon$ .

Les bornes d'intégration  $Q_{\min}, Q_{\max}, W_{\min}, W_{\max}$  sont déterminées pour une couche quelconque  $S$  par :

$$Q_{\min} = \frac{\mu^2 \eta_S}{m_e} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{m_e W}{\eta_S \mu}} \right)^2$$

$$Q_{\max} = \frac{\mu^2 \eta_S}{m_e} \left( 1 + \sqrt{1 - \frac{m_e W}{\eta_S \mu}} \right)^2$$

$$W_{\min} = \frac{\varepsilon_{\min}}{Z_{2S}^2 R} = \frac{I_S}{Z_{2S}^2 R} = \frac{\theta_S}{n^2}$$

$$W_{\max} = \frac{\varepsilon_{\max}}{Z_{2S}^2 R} = \frac{E}{Z_{2S}^2 R} = \frac{\mu}{m_e} \eta_S \quad (\text{I.5.44})$$

Avec : 
$$\theta_S = n^2 \frac{I_S}{Z_{2S}^2 R} \quad (\text{I.5.45})$$

Toutefois, On réécrit la relation (I.5.41) en utilisant la variable  $\xi_S = 2n\sqrt{\eta_S}/\theta_S$  qui mesure le temps caractéristique de l'orbite  $S$  par rapport au temps de collision. Ceci nous permet de séparer les régimes de collisions lentes ( $\xi_S < 1$ ) et rapides ( $\xi_S > 1$ ). Nous obtenons alors :

$$\sigma_S^{PWBA}(\eta_S, \theta_S) = \frac{\sigma_{OS}}{\theta_S} F(\xi_S, \theta_S) \quad (\text{I.5.46})$$

### I.5.3. Section efficace de production de rayons X :

Les sections efficaces de production de rayon X  $\sigma^x$  qui sont mesurées sont reliées aux sections efficaces d'ionisation des sous-couches  $M_i (i = 1, \dots, 5)$  par des relations faisant intervenir les rendements de fluorescence et les probabilités de transition de Coster-Kronig [De.09].

$$\sigma_{M_1}^x = \sigma_{M_1}^I \omega_1,$$

$$\sigma_{M_2}^x = [\sigma_{M_2}^I + S_{12} \sigma_{M_1}^I] \omega_2,$$

$$\sigma_{M_3}^x = [\sigma_{M_3}^I + S_{23} \sigma_{M_2}^I + (S_{13} + S_{12} S_{23}) \sigma_{M_1}^I] \omega_3,$$

$$\sigma_{M_4}^x = [\sigma_{M_4}^I + S_{34} \sigma_{M_3}^I + (S_{24} + S_{23} S_{34}) \sigma_{M_2}^I + (S_{14} + S_{12} S_{24} + S_{13} S_{34} + S_{12} S_{23} S_{34}) \sigma_{M_1}^I] \omega_4,$$

$$\begin{aligned} \sigma_{M_5}^x = & [\sigma_{M_5}^I + f_{45} \sigma_{M_4}^I + (S_{35} + S_{34} f_{45}) \sigma_{M_3}^I + (S_{25} + S_{23} S_{35} + S_{24} f_{45} + S_{23} S_{34} f_{45}) \sigma_{M_2}^I + \\ & (S_{15} + S_{12} S_{25} + S_{13} S_{35} + S_{14} f_{45} + S_{12} S_{23} S_{35} + S_{12} S_{24} f_{45} + S_{13} S_{34} f_{45} + S_{12} S_{23} S_{34} f_{45}) \sigma_{M_1}^I] \omega_5 \end{aligned} \quad (\text{I.5.47})$$

La section efficace totale de production de rayons X peut s'écrire :

$$\sigma_M^x = \sum_{i=1}^5 \sigma_{M_i}^x. \quad (\text{I.5.48})$$

### I.5.4. Facteur de forme de la couche M :

Les facteurs de forme  $F_{w,s}(Q)$  pour les sous-couches  $M_i$  ont été calculés en utilisant des fonctions d'onde hydrogénoïdes non relativistes. Conformément au calcul de Choi [Ch.73], l'intégrant dans l'équation (I.5.41) peut être construit sous la forme :

$$\frac{dQ}{Q^2} |F_{w,3l}(Q)|^2 = A(Q, k) S_{3l}(W, Q), \quad (\text{I.5.49})$$

où  $S = 3l = 3s, 3p, 3d$ .

Les notations spectroscopiques, en adoptant la représentation  $3lj$ , des cinq états propres d'énergie sont  $3s_{1/2}$ ,  $3p_{1/2}$ ,  $3p_{3/2}$ ,  $3d_{3/2}$ ,  $3d_{5/2}$ , correspondant aux  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$ ,  $M_5$ ,

respectivement. D'ailleurs, les fonctions universelles  $F_{W,3j}(Q)$  pour  $(2j+1)$  électrons dans les sous-couches  $M_i$  sont obtenues à partir des fonctions  $F_{W,3l}(Q)$  des états propres du moment angulaire orbital,  $3s$ ,  $3p$  et  $3d$  et peuvent prendre la forme suivante :

$$|F_{W,3ij}(Q)|^2 = \frac{2j+1}{2(2l+1)} |F_{W,3l}(Q)|^2 \quad (\text{I.5.50})$$

avec :  $j = |l \pm 1/2|$ .

$A(Q, k)$  prend la même forme pour toutes les sous couches  $M_i$  :

$$A(Q, k) = \frac{2^7 \exp \left[ -\frac{2}{k} \arctan \left( \frac{2k/3}{Q - k^2 + 1/9} \right) \right]}{9 \left[ 1 - \exp \left( -2\frac{\pi}{k} \right) \right] \left[ (Q - k^2 + 1/9)^2 + \frac{4}{9} k^2 \right]^7} \quad (\text{I.5.51})$$

Le facteur de normalisation  $1/(1 - \exp - 2\pi/k)$ , qui apparaît dans le facteur de forme, est mis égal à l'unité pour les valeurs de  $W$  entre  $0$  et  $1/9$  ( $k^2$  est négatif). De plus, En utilisant  $\arctan(iy) = (i/2) \ln[(1+y)/(1-y)]$  pour les nombres imaginaires, on obtient alors:

$$\exp \left[ -\frac{2}{k} \arctan \left( \frac{2k/3}{Q - k^2 + 1/9} \right) \right] = \left[ \frac{q + k_1^2 + 1/9 - 2k_1/3}{Q + k_1^2 + 1/9 + 2k_1/3} \right]^{1/k_1} \quad (\text{I.5.52})$$

où  $k = i k_1$ .

$S_{M_i}$  prend différentes formes pour les sous-couches  $M_i$  et peut être écrit comme:

$$S_{M_1} = \frac{1}{Q} \sum_{i=0}^9 \sum_{j=0}^9 C_{ij}^{3s} k^{2i} Q^j, \quad (\text{I.5.53})$$

$$S_{M_2} = \frac{1}{3Q} \sum_{i=0}^8 \sum_{j=0}^8 C_{ij}^{3p} k^{2i} Q^j, \quad (\text{I.5.54})$$

$$S_{M_3} = \frac{2}{3Q} \sum_{i=0}^8 \sum_{j=0}^8 C_{ij}^{3p} k^{2i} Q^j, \quad (\text{I.5.55})$$

$$S_{M_4} = \frac{2}{5Q} \sum_{i=0}^7 \sum_{j=0}^7 C_{ij}^{3d} k^{2i} Q^j \quad (\text{I.5.56})$$

$$S_{M_5} = \frac{3}{5Q} \sum_{i=0}^7 \sum_{j=0}^7 C_{ij}^{3d} k^{2i} Q^j \quad (\text{I.5.57})$$

où les coefficients  $C_{ij}$ , rapportés du calcul de Choi [Ch.73].

## I. 6. Modèle ECPSSR

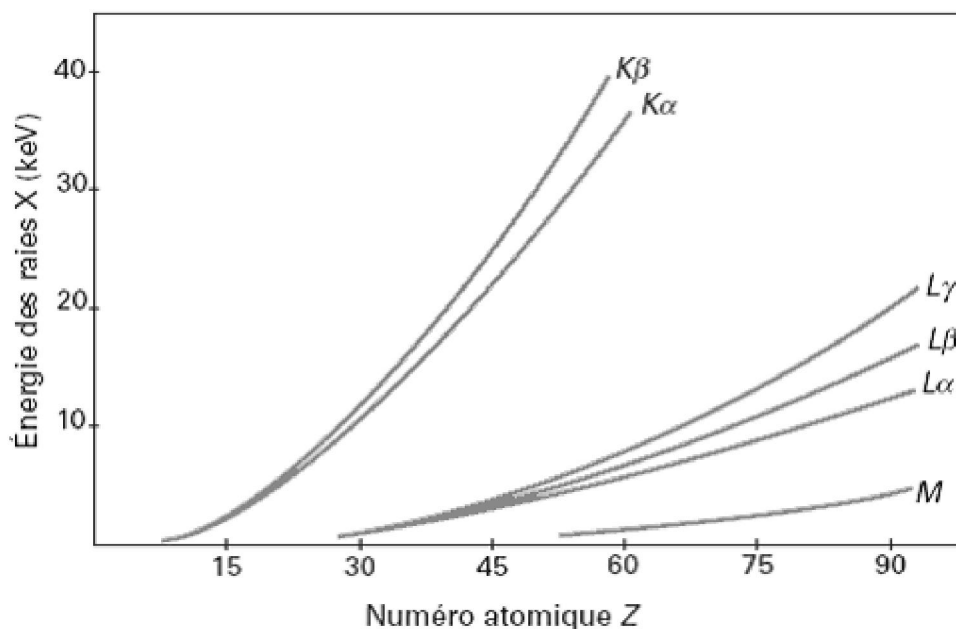
Le modèle ECPSSR a été proposé dans le but de pallier aux insuffisances du modèle PWBA afin de rapporter un meilleur accord théorie-expérience. Il consiste à prendre en considération quelques effets correctifs non pris en compte dans le modèle PWBA, il s'agit de : l'augmentation de l'énergie de liaison des électrons-cibles (PSS), la déflexion coulombienne du projectile dans le champ du noyau-cible (C), les effets relativistes (R) et la perte d'énergie de la particule incidente (E).

## CHAPITRE II

## Résultats des modèles PWBA et ECPSSR

**II.1.Introduction :**

Les énergies des principales raies X sont portées sur la figure II.1 en fonction du numéro atomique  $Z$  de l'atome émetteur. Pour un atome émetteur  $Z$  donné, les raies les plus énergétiques sont les raies K; viennent ensuite les raies L puis M.

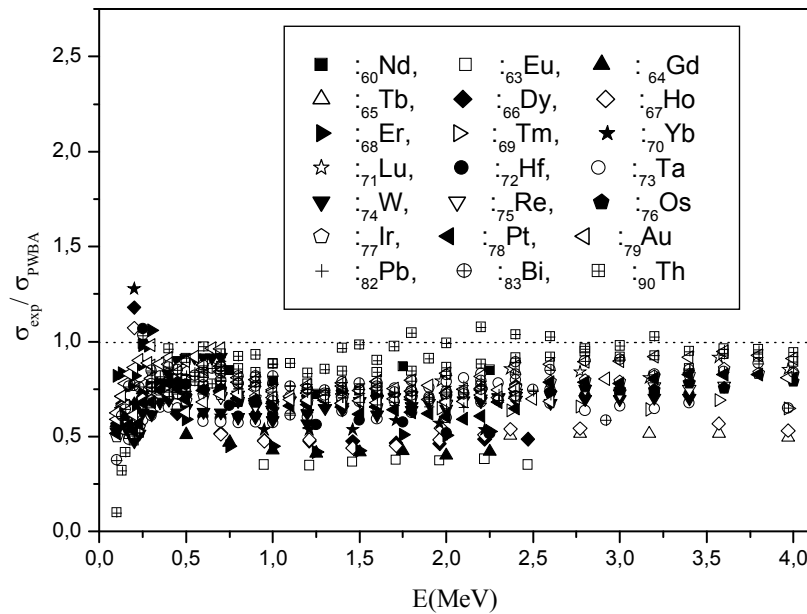


**Figure II.1** : Energie caractéristique des raies X (K, L et M) en fonction du numéro atomique  $Z$  de l'élément émetteur [MB. 81].

Ce chapitre sera donc consacré à une étude approfondie de la section efficace d'ionisation et la production de rayons X des raies M par un faisceau de protons.

**II.2. Résultats du modèle PWBA :**

La figure II.2 représente le rapport des sections efficaces totales de production expérimentales ([Se.80], [Me.82], [Me.83], [Pa.90a], [Pa.06], [Ci.95], [Sh.86], [Ro.02], [Go.06] et [Ph.09]) et théoriques, calculées en utilisant l'approximation de Born des ondes planes (PWBA), dans la couche M pour différents atomes cibles en fonction de l'énergie des protons incidents (en MeV) [Ba.09].



**Figure II.2** Rapport des sections efficaces totales de production expérimentales et théoriques (PWBA) dans la couche *M* pour différents atomes cibles en fonction de l'énergie des protons.

On remarque que nos résultats théoriques surestiment les sections efficaces expérimentales et ceci augmente surtout à basse énergie des protons pour atteindre quelques ordres de grandeur. Cette surestimation provient probablement d'effets qui n'apparaissent pas explicitement dans l'approximation de Born ; l'augmentation de l'énergie de liaison des électrons atomiques (PSS - Perturbed Stationary-States) ; la déviation coulombienne du projectile due à son interaction avec le noyau (C) ; l'effet dû au caractère relativiste des électrons (R) ; la perte d'énergie du projectile lors de l'ionisation (E). Toutes ces corrections successives conduisent à l'élaboration de la théorie *ECPSSR*.

### II.3.Modèle ECPSSR (modèle PWBA modifié) :

Le modèle ECPSSR a été proposé dans le but de pallier aux insuffisances du modèle PWBA afin de rapporter un meilleur accord théorie-expérience. Il consiste à prendre en considération quelques effets correctifs non pris en compte dans la théorie PWBA (Plane Wave Born Approximation). Un des effets les plus importants qui a été négligé est : la correction de l'énergie de liaison des électrons de l'atome cible.

### II.3.1.L'augmentation de l'énergie de liaison de l'électron atomique :

Lors des processus d'ionisation, les états atomiques sont perturbés par le passage des particules chargées incidentes. Dans le régime à faible vitesse, c'est-à-dire pour  $\zeta_s \ll 1$ , les états stationnaires perturbés de l'électron de l'atome cible deviennent ceux d'une molécule diatomique avec une distance internucléaire changeante. Quand  $Z_1 \ll Z_2$ , les états électroniques se rapprochent de ceux d'un atome de numéro atomique  $Z_1 + Z_2$  qui peut être décrit par l'approximation de Born [Ba.73a]. L'énergie de liaison des électrons atomiques augmente alors, ce qui a pour conséquence une diminution de la section efficace d'ionisation. Toutefois, pour les régimes de vitesses intermédiaires ( $\zeta_{\downarrow s} \approx 1$ ) et élevé ( $\zeta_{\downarrow s} \gg 1$ ), la contribution principale pour la section efficace d'une orbite S provient de particules se trouvant dans des zones extérieures à cette orbite. Cette particule chargée va perturber l'état stationnaire et entraîner un effet dit de polarisation qui aura comme conséquence une augmentation de la section efficace. En prenant en considération ces deux effets, la section efficace d'ionisation de la sous-couche  $M_i$  s'écrit [Ba.73], [Co.85] :

$$\sigma_{M_i}^{PSS} = \sigma_{M_i}^{PWBA} \left( \frac{\xi_{M_i}}{\zeta_{M_i}}, \theta_{M_i}, \zeta_M \right) \quad (\text{II.3.1})$$

Où 
$$\xi_S = \frac{\sqrt{\eta_S}}{\theta_S} \quad (\text{l'état } S = M_i)$$

En adoptant l'approximation de l'atome unifié (United atome), le changement de l'énergie de liaison est défini par le facteur  $\xi_{M_i}$  ([Ch.85], [Ch.83] et [Ch.89]) comme suit:

$$\zeta_{M_i} = \left( 1 + \frac{Z_1}{Z_{2M_i}} \right)^2 \quad (\text{II.3.2})$$

### II.3.2.Déflexion coulombienne :

Pour des particules lentes, l'approximation de Born donne des sections efficaces qui peuvent dépasser, de plusieurs ordres de grandeur, les valeurs expérimentales. Cette différence énorme à basse énergie provient du fait que l'approximation de Born néglige l'influence de la répulsion entre la particule incidente et le noyau de l'atome cible. Cette répulsion a pour conséquence un ralentissement de la particule incidente et une modification de sa trajectoire.

On ne peut donc pas considérer la trajectoire des particules incidentes comme trajectoires linéaires mais plutôt hyperboliques. On définit alors le coefficient  $C_{M_i}(dq_{0M_i})$  qui représente la correction de déflexion coulombienne [Ba.73], [Br.74].

$$C_{M_i}(dq_{0M_i}) = (9 + 2l_2)E_{10+2l_2}(\pi dq_{0M_i}) \quad (\text{II.3.3})$$

Où  $l_2 = 0$  pour la sous couche  $M_1$ .

$l_2 = 1$  pour les sous couche  $M_2$  et  $M_3$ .

$l_2 = 2$  pour les sous couches  $M_4$  et  $M_5$ .

$$E_m(y) = \frac{e^{-y}}{(y+m)} \left[ 1 + \frac{m}{(y+m)^2} + \frac{m(m-2y)}{(y+m)^4} + \frac{m(6y^2 - 8my + m^2)}{(y+m)^6} + \dots \right] \quad (\text{II.3.4})$$

$d = \frac{2Z_1Z_2e^2}{\mu V_1^2}$  : est la distance minimale d'approche du projectile au noyau cible.

$$q_{0M_i} = \frac{U_{M_i}}{V_1} \quad (\text{II.3.5})$$

$q_{0M_i}$  : est le moment minimal transféré à l'électron durant la collision.

En tenant compte de l'effet de la déflexion coulombienne l'expression de section efficace prend la forme :

$$\sigma_{M_i}^{CPSS} = C_{M_i}(dq_{0M_i}) \sigma_{M_i}^{PWBA} \left( \frac{\xi_{M_i}}{\zeta_{M_i}}, \theta_{M_i}, \zeta_{M_i} \right) \quad (\text{II.3.6})$$

### II.3.3. Correction de la perte d'énergie de l'ion incident

Une autre correction sur l'approximation de Born prend en considération la perte d'énergie de la particule incidente durant le processus d'ionisation. En intégrant celle-ci dans l'expression donnant l'effet de la déflexion coulombienne ([La.80] et [Br.74]), on obtient l'expression suivante :

$$C_{M_i}^E(dq_{0M_i}) = (9 + 2l_2)E_{10+2l_2} \left( \frac{2\pi dq_{0M_i}}{Z_{M_i}(1 + Z_{M_i})} \right). \quad (\text{II.3.7})$$

Où  $Z_{M_i}$ , argument représente le rapport entre la perte d'énergie de la particule incidente et son énergie cinétique, donné par [Ba.73] :

$$Z_{M_i} = \sqrt{1 - \frac{4}{\mu \zeta_{M_i} \theta_{M_i}} \left( \frac{\xi_{M_i}}{\zeta_{M_i}} \right)^2} . \quad (\text{II.3.8})$$

Avec  $\xi_{M_i} = 2V_1 / \theta_{M_i} v_{M_i}$ , appelée la vitesse réduite de la particule incidente, et  $V_1$  et  $v_{M_i}$  sont les vitesses de la particule incidente et de l'électron de l'atome cible, respectivement. Pour décrire le mouvement de la particule incidente, nous avons utilisé la formule relativiste suivante ([Co.85] et [Li.96]):

$$V_1 = 137.036 \left[ 1 - \frac{1}{\left( 1 + \frac{E}{931.498 M_1} \right)^2} \right]^{1/2} . \quad (\text{II.3.9})$$

Où E est en MeV.

La section efficace d'ionisation s'écrit alors :

$$\sigma_{M_i}^{ECPSS} = C_{M_i}^E (dq_{0M_i}) \sigma_{M_i}^{PWBA} \left( \frac{\xi_{M_i}}{\zeta_{M_i}}, \theta_{M_i} \zeta_{M_i} \right) \quad (\text{II.3.10})$$

### II.3.4. Correction relativiste

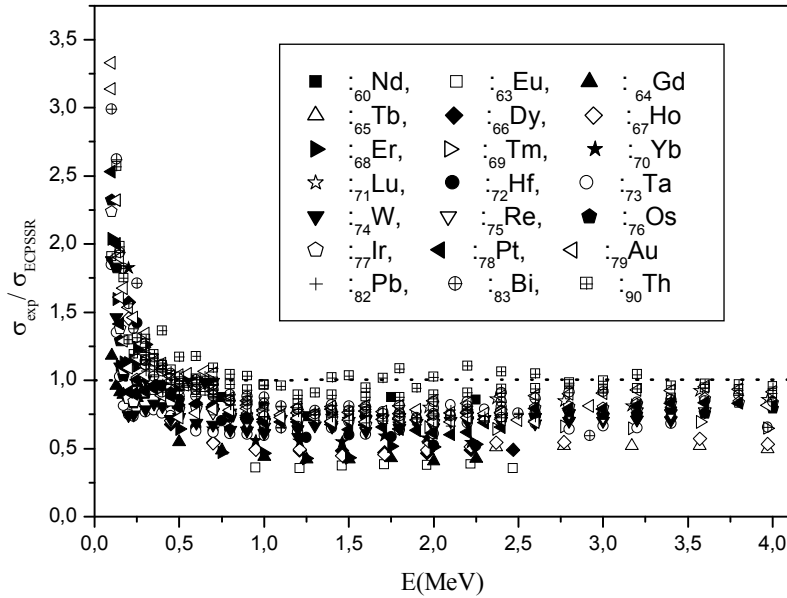
Pour la couche M, il n'y a aucune formulation publiée au sujet la correction relativiste de la masse de l'électron de la cible. Cette correction tient compte du caractère relativiste de l'électron des orbites internes des atomes de numéro atomique élevé. Si on définit le facteur de correction de la masse relativiste de l'électron comme étant  $m_{M_i}^R(\xi_{M_i})$ , on obtient finalement la section efficace d'ionisation dans la théorie ECPSSR :

$$\sigma_{M_i}^{ECPSSR} = C_{M_i}^E (dq_{0M_i} \zeta_{M_i}) \sigma_{M_i}^{PWBA} \left( \sqrt{m_{M_i}^R(\xi_{M_i} / \zeta_{M_i})} \xi_{M_i} / \zeta_{M_i}, \theta_{M_i} \zeta_{M_i} \right) \quad (\text{II.3.11})$$

### II.4. Résultats du modèle ECPSSR :

La figure (II. 3) présente les variations du rapport des sections efficaces totales de production expérimentales ([Se.80], [Me.82], [Me.83], [Pa.90a], [Pa.06], [Ci.95], [Sh.86] [Ro.02], [Go.06], [Ph.09]) et théoriques calculé dans le cadre du modèle ECPSSR pour la couche M pour les atomes cibles ( $_{60}\text{Nd}$ ,  $_{63}\text{Eu}$ ,  $_{64}\text{Gd}$ ,  $_{65}\text{Tb}$ ,  $_{66}\text{Dy}$ ,  $_{67}\text{Ho}$ ,  $_{68}\text{Er}$ ,  $_{69}\text{Tm}$ ,  $_{70}\text{Yb}$ ,  $_{71}\text{Lu}$ ,  $_{72}\text{Hf}$ ,  $_{73}\text{Ta}$ ,

$^{74}\text{W}$ ,  $^{75}\text{Re}$ ,  $^{76}\text{Os}$ ,  $^{77}\text{Ir}$ ,  $^{78}\text{Pt}$ ,  $^{79}\text{Au}$ ,  $^{82}\text{Pb}$ ,  $^{83}\text{Bi}$  et  $^{90}\text{Th}$  ) en fonction de l'énergie des protons incidents.



**Figure II.3** Rapport des sections efficaces totales de production expérimentales et théoriques (ECPSSR) dans la couche  $M$  pour différents atomes cibles en fonction de l'énergie des protons.

On remarque que les valeurs théoriques sont proches des résultats expérimentaux pour les hautes énergies. Pour les basses énergies, les valeurs théoriques s'éloignent de façon significative des valeurs expérimentales.

Malgré les améliorations intégrées dans la théorie ECPSSR, les écarts persistent dans la gamme des basses énergies. Ceci a conduit les différents auteurs à adopter les méthodes empiriques et semi-empiriques basées sur l'ajustement des données expérimentales disponibles.

## Chapitre III

### Résultats et Interprétation

#### III.1.Introduction :

Avec le développement des détecteurs à semi-conducteurs, les données expérimentales plus précises sont devenues disponibles pour les sections efficaces d'ionisation des raies M par impact d'ions. L'utilisation des cibles minces dans ces expériences conduit à l'amélioration de la qualité des données expérimentales. Néanmoins, les sections efficaces d'ionisation des couches M mesurées disponibles dans la littérature sont sensiblement dispersées, excédant parfois le niveau de leurs incertitudes. Durant les dernières années plusieurs expériences ont été effectuées pour mesurer les sections efficaces d'ionisation des couches M pour différents éléments.

Le processus d'ionisation des couches internes par des particules chargées a été intensivement étudié en raison de son importance pour la technique d'analyse par émission X induite par des particules chargées (Particule Induced X-ray Emission –PIXE)[Pa.06].

Dans ce travail, nous avons utilisé les données expérimentales des sections efficaces de production des raies M par des protons d'énergie allant de 0.1 à 4.0 MeV des éléments de numéros atomiques  $60 \leq Z_2 \leq 90$ , rassemblées des différents sources ([Se.80], [Me.82], [Me.83], [Pa.90a], [Pa.06], [Ci.95], [Sh.86] [Ro.02], [Go.06], [Ph.09]) Néanmoins, les prédictions théoriques s'écartent de manière significative de valeurs expérimentales, particulièrement à basse énergie. Ces valeurs sont sensiblement dispersées, excédant parfois l'ordre d'incertitude citée dans l'expérience (Figure II.3). Cette situation nous a motivé à adopter des méthodes empiriques basées sur l'ajustement direct des données expérimentales et sur l'étude des théories familières de collision (PWBA, SCA et BEA) où les sections efficaces de productions des rayons X, présentent une forme universelle et indépendante de numéro atomique de la cible.

### III.2. Section efficace empirique :

Les sections efficaces mesurées de production des raies M (658 données expérimentales) rassemblées de différentes sources ([Se.80], [Me.82], [Me.83], [Pa.90a], [Pa.06], [Ci.95], [Sh.86] [Ro.02], [Go.06], [Ph.09]) pour des protons d'énergie allant de 0.1 à 4.0MeV , présentent une forme universelle lorsqu'elles sont tracées dans une échelle logarithmique en fonction de la vitesse réduite moyenne  $\xi_M$  (voir figure III .1) ,donnée par l'expression [Ro.02] :

$$\xi_M = (\xi_{M_1} + \xi_{M_2} + 2\xi_{M_3} + 2\xi_{M_4} + 3\xi_{M_5})/9 \quad (\text{III.1})$$

Dans la présent travail nous avons ajusté des données expérimentales de chaque élément séparément pour des éléments de numéro atomique dans la gamme 60-90. Le caractère universel de ces sections efficaces mesurées de la couche M nous permet de dériver des sections efficaces empiriques en utilisant la forme suivante :

$$\ln \sigma_{emp} = \sum_{i=0}^3 b_i (\ln \xi_M)^i \quad (\text{III.2})$$

La déviation totale entre les sections efficaces calculées (empirique) et les sections efficaces expérimentales est exprimée en fonction de l'écart quadratique moyenne par l'expression suivante :

$$\varepsilon_{rms} = \left[ \sum \frac{1}{N} \left( \frac{\sigma_{exp} - \sigma_{emp}}{\sigma_{emp}} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{III.3})$$

Où N est le nombre total de données expérimentales ajustées.

Les valeurs de  $\varepsilon_{rms}$  sont représentées dans le tableau III .1

**Tableau III.1:** les valeurs de  $rms$  ( emp.1 et emp.2) .

Rms EMP.1						Rms EMP.2					
Element N data	individuel	Collectif	Element	Individuel	collectif	Elément N data	individuel	collectif	Element	individuel	collectif
<sup>60</sup> Nd(09)	04.20	23.13	<sup>73</sup> Ta(47)	13.22	16.72	<sup>60</sup> Nd(09)	4.19	50.53	<sup>73</sup> Ta(47)	09.52	18.27
<sup>63</sup> Eu(07)	01.20	49.60	<sup>74</sup> W(56)	14.55	15.56	<sup>63</sup> Eu(07)	01.26	50.40	<sup>74</sup> W(56)	11.67	14.70
<sup>64</sup> Gd(18)	07.72	29.32	<sup>75</sup> Re(18)	02.71	04.04	<sup>64</sup> Gd(18)	06.31	29.20	<sup>75</sup> Re(18)	02.62	18.93
<sup>65</sup> Tb(06)	00.39	31.46	<sup>76</sup> Os(31)	15.16	14.65	<sup>65</sup> Tb(06)	00.46	33.49	<sup>76</sup> Os(31)	06.25	15.88
<sup>66</sup> Dy(10)	07.61	32.46	<sup>77</sup> Ir(32)	14.00	14.68	<sup>66</sup> Dy(10)	01.19	31.00	<sup>77</sup> Ir(32)	06.52	19.79
<sup>67</sup> Ho(14)	06.88	37.16	<sup>78</sup> Pt(50)	13.65	13.05	<sup>67</sup> Ho(14)	04.91	26.58	<sup>78</sup> Pt(50)	06.43	14.42
<sup>68</sup> Er(18)	11.96	25.38	<sup>79</sup> Au(91)	14.75	18.88	<sup>68</sup> Er(18)	11.37	29.36	<sup>79</sup> Au(91)	08.87	16.63
<sup>69</sup> Tm(06)	01.97	22.44	<sup>82</sup> Pb(51)	07.17	09.15	<sup>69</sup> Tm(06)	02.04	06.42	<sup>82</sup> Pb(51)	07.14	10.44
<sup>70</sup> Yb(09)	03.89	25.00	<sup>83</sup> Bi(85)	12.28	15.74	<sup>70</sup> Yb(09)	03.66	34.57	<sup>83</sup> Bi(85)	09.74	12.66
<sup>71</sup> Lu(06)	03.77	27.51	<sup>90</sup> Th(68)	09.75	28.95	<sup>71</sup> Lu(06)	03.74	37.87	<sup>90</sup> Th(68)	11.49	15.83
<sup>72</sup> Hf(26)	10.40	12.43				<sup>72</sup> Hf(26)	09.40	20.92			

D'autre part, basée sur l'étude des théories familières de collision (PWBA, SCA et BEA), il est courant de tracer  $U_M^2 \sigma_M^I / Z_1$  en fonction de  $E / \lambda U_M$  dans une échelle logarithmique pour avoir approximativement une courbe universelle pour tous les points expérimentaux ([Se.80], [Me.82], [Me.83], [Pa.90a], [Pa.06], [Ci.95], [Sh.86] [Ro.02], [Go.06], [Ph.09]),  $Z_1$  et E sont la charge et l'énergie de la particule incidente ( $Z_1=1$  pour le proton), respectivement,  $\lambda$  est le rapport de la masse du proton à celle de l'électron et  $\sigma_M^I$  la section efficace totale d'ionisation qui est liée à la section efficace totale de production  $\sigma_M^X$  par la relation suivante :

$$\sigma_M^X = \varpi_M \sigma_M^I \quad (III.4)$$

Où  $\varpi_M$  est le rendement de fluorescence moyen de la couche M.

Avec  $U_M$  est l'énergie de liaison moyenne de la couche M [Re.02] :

$$U_M = (U_{M_1} + U_{M_2} + 2U_{M_3} + 2U_{M_4} + 3U_{M_5}) / 9 \quad (III.5)$$

Dans ce travail, nous avons utilisé les valeurs moyennes des rendements de fluorescence moyens de la couche M calculées en utilisant les paramètres théoriques  $\omega_i$ ,  $S_{if}$  et  $f_{45}$  rapportés dans le référence [De.09].

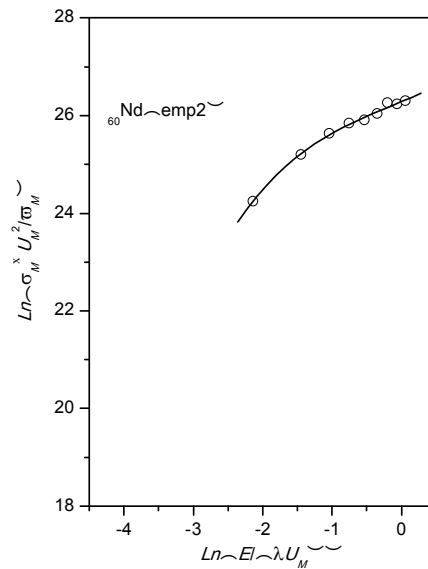
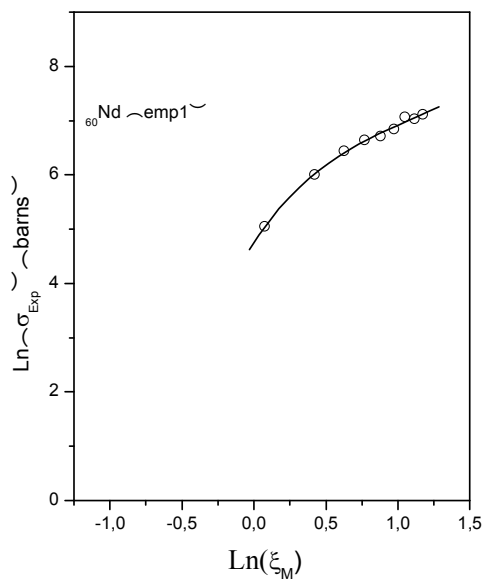
La distribution des données expérimentales disponibles des sections efficaces de production des rayons X-M, prises de différentes références (les même données expérimentales utilisées

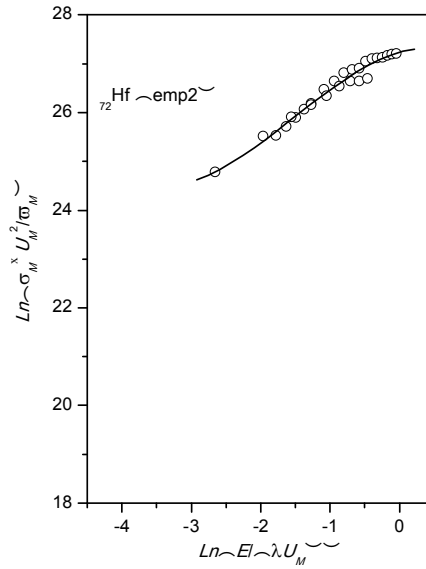
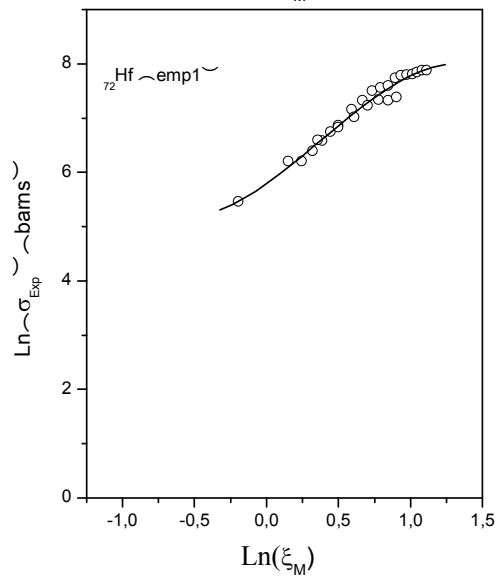
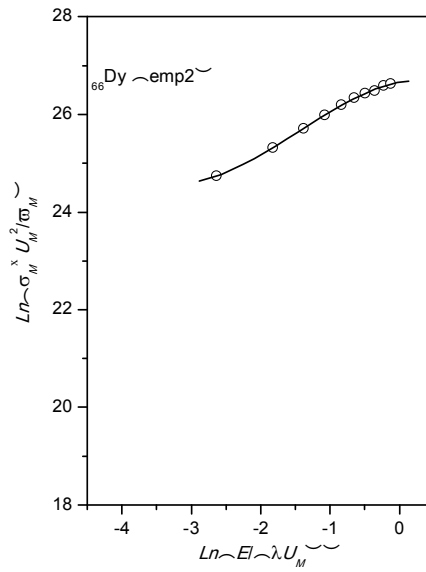
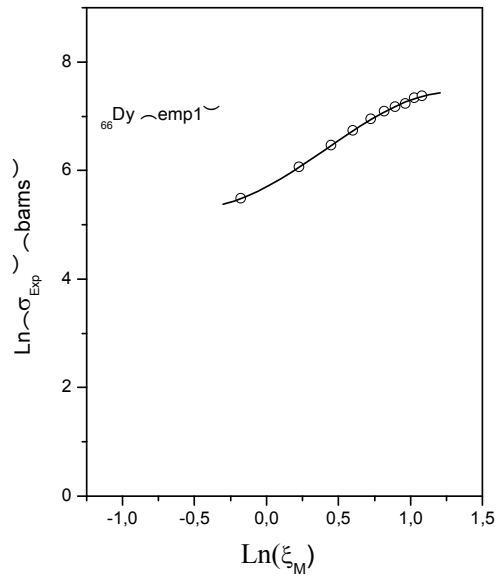
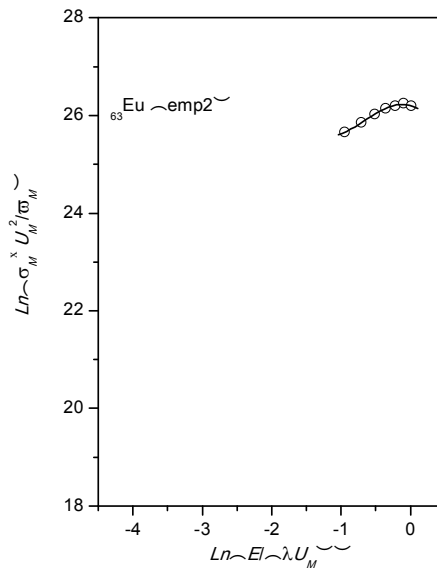
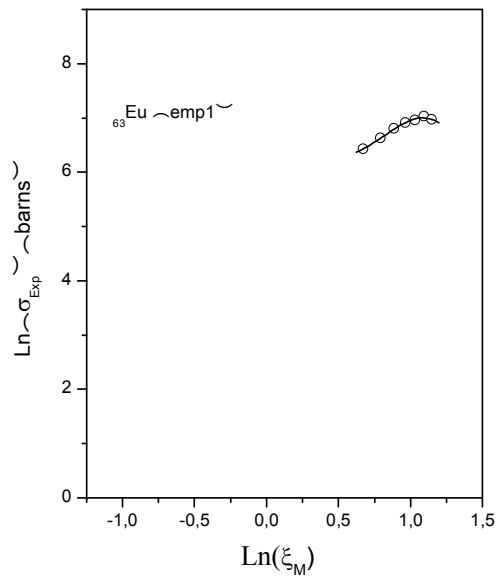
dans les calculs de la section efficace empirique précédente), est présentée sur la figure III.2 , où la grandeur  $U_M^2 \sigma_M^X / \varpi_M$  est tracée en fonction de l'énergie réduite du proton  $E / \lambda U_M$  dans un échelle logarithmique, qui prend une forme universelle. Par conséquent, l'ajustement des données expérimentales disponibles nous permet de calculer les sections efficaces empiriques de production des rayons X-M. D'ailleurs, un polynôme d'ordre trois est utilisé pour cet ajustement de la forme :

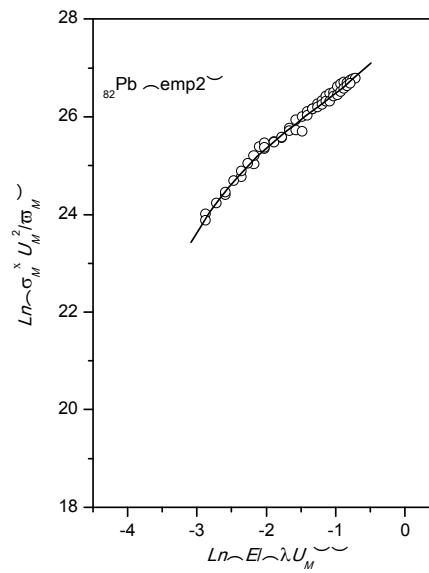
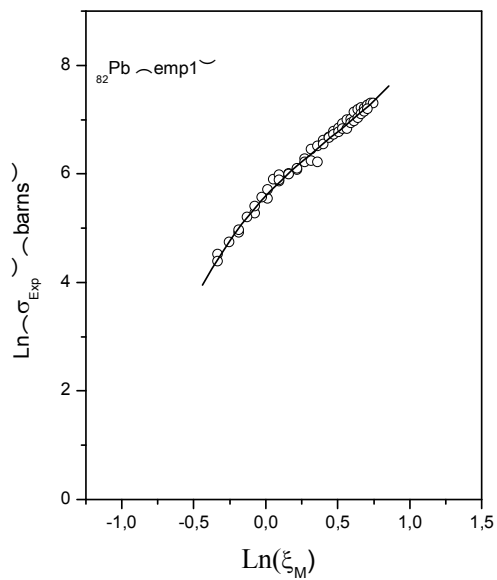
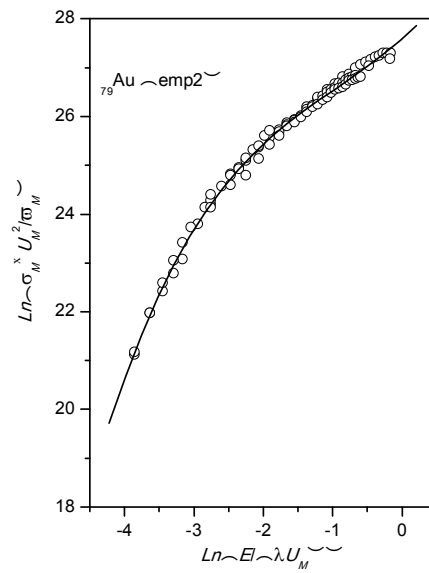
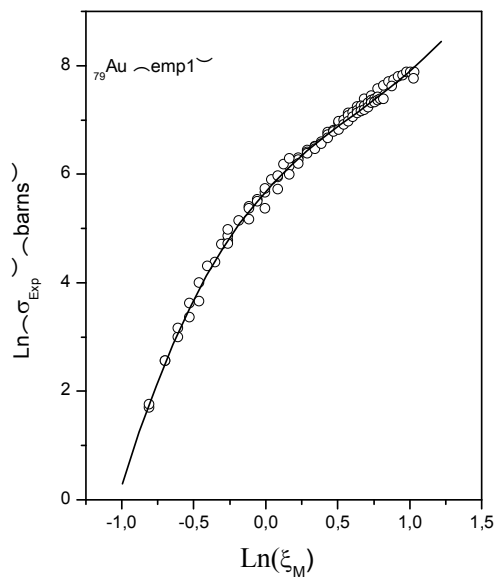
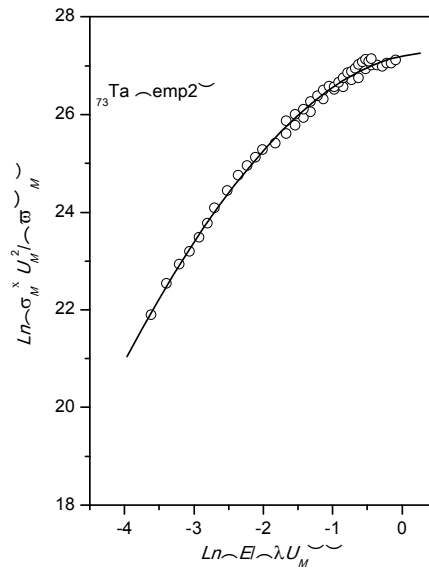
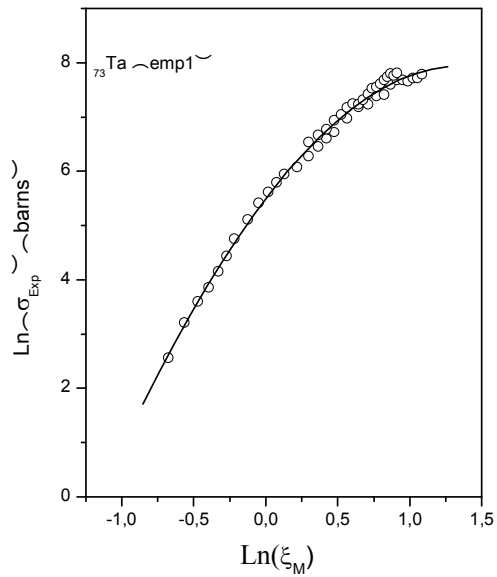
$$\ln(U_M^2 \sigma_M^X / \varpi_M) = \sum_{i=0}^3 c_i (\ln(E / \lambda U_M))^i \quad (\text{III.6})$$

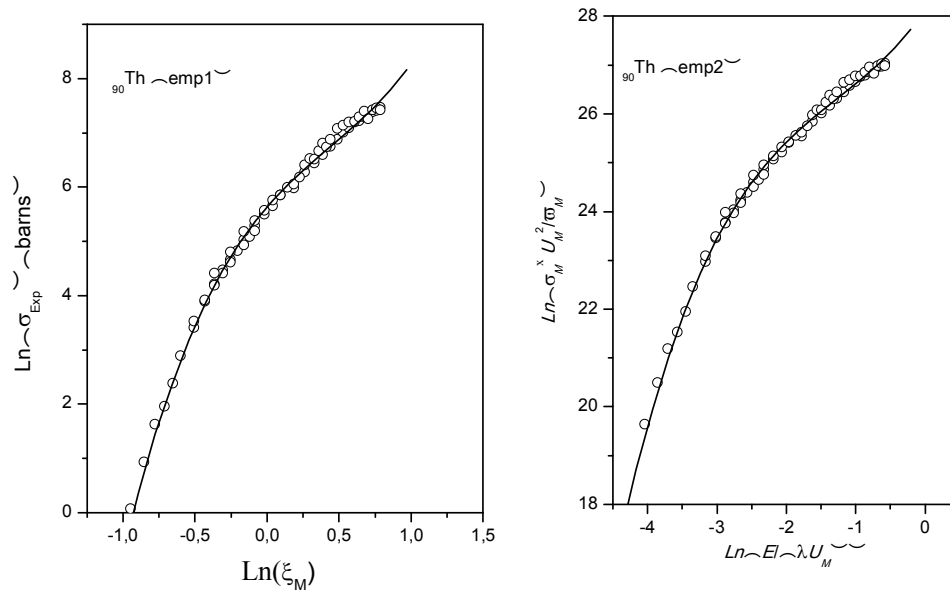
### III.2.1. Traitement individuel des éléments

Notre étude a porté sur les éléments lourds compris entre Nd et Th . Afin d'éviter de surcharger le mémoire par les différentes figures, nous avons choisi de représenter les figures pour seulement huit éléments qui sont :  $^{60}\text{Nd}$ ,  $^{63}\text{Eu}$ ,  $^{66}\text{Dy}$ ,  $^{72}\text{Hf}$ ,  $^{73}\text{Ta}$ ,  $^{82}\text{Pb}$ ,  $^{79}\text{Au}$  et  $^{90}\text{Th}$  pour le traitement individuel des données expérimentales.









**Figure III .1:** Distribution des données expérimentales disponibles des sections efficaces de production des raies M de  $\ln(\sigma_M^X U_M^2 / \omega_M)$  en fonction de l'énergie réduite du proton  $\ln(E/(\lambda U_M))$  et de  $\ln(\sigma_M^X)$  en fonction de la vitesse réduite moyenne  $\ln(\xi_M)$ , pour les éléments ( ${}_{60}\text{Nd}$ ,  ${}_{63}\text{Eu}$ ,  ${}_{66}\text{Dy}$ ,  ${}_{72}\text{Hf}$ ,  ${}_{73}\text{Ta}$ ,  ${}_{79}\text{Au}$ ,  ${}_{82}\text{Pb}$ , et  ${}_{90}\text{Th}$ ), le fit est aussi représenté par une ligne continue.

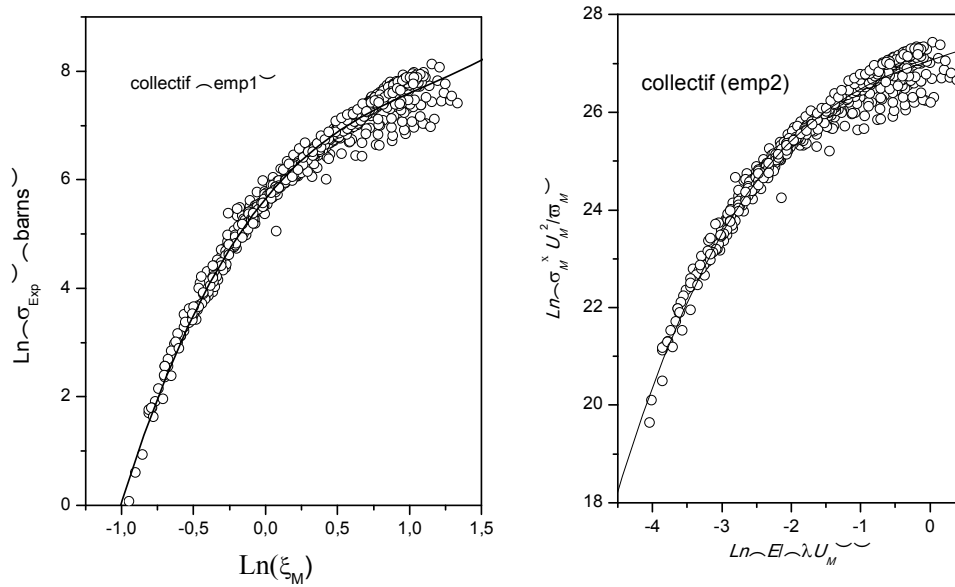
Les coefficients des polynômes ( $b_i$  et  $c_i$ ) des sections efficaces empiriques selon l'équation III.2 (emp.1) et l'équation III. 6 (emp. 2) sont regroupés dans le tableau III.2 pour les éléments en question pour des protons d'énergie allant de 0.1 à 4.0 MeV.

**Tableau III.2** Coefficients d'ajustement individuel des éléments étudiés pour les sections efficaces de production des rayons X empiriques par des protons d'énergie allant de 0.1 à 4.0 MeV.

Element	Emp.1 (Eq.III.2)				Emp.2 (Eq. III.6)			
	b <sub>0</sub>	b <sub>1</sub>	b <sub>2</sub>	b <sub>3</sub>	c <sub>0</sub>	c <sub>1</sub>	c <sub>2</sub>	c <sub>3</sub>
<sup>60</sup> Nd	4,76046	3,92836	-2,5759	0,80402	26,28348	0,59368	0,04772	0,10077
<sup>63</sup> Eu	9,55401	-14,34187	19,90804	-8,16344	26,20574	-0,41367	-2,00888	-1,01153
<sup>64</sup> Gd	5,45353	2,97045	-2,43466	1,08635	26,52623	0,83176	0,32410	0,13606
<sup>65</sup> Tb	16,45797	-27,33342	26,5004	-8,31626	26,66713	0,33035	-0,48315	-1,0291
<sup>66</sup> Dy	5,69943	1,41926	0,97972	-0,80064	26,65943	0,26542	-0,43798	-0,0995
<sup>67</sup> Ho	5,63681	1,64253	0,72282	-0,63604	26,76734	0,4033	-0,36247	-0,07911
<sup>68</sup> Er	5,77606	2,33069	-2,34316	1,77707	27,28881	1,94896	0,92826	0,22104
<sup>69</sup> Tm	20,32846	-38,6594	38,24661	-12,28406	27,04245	0,33418	-0,90366	-1,51181
<sup>70</sup> Yb	5,82029	1,81623	0,34982	-0,40947	27,02741	0,51006	-0,2616	-0,05105
<sup>71</sup> Lu	-2,76353	27,55016	-23,86884	7,03885	27,34989	0,28249	0,0057	0,82793
<sup>72</sup> Hf	5,79321	1,88065	0,91066	-0,80781	27,23494	0,41233	-0,45779	-0,10017
<sup>73</sup> Ta	5,48734	3,51174	-1,15248	-0,08073	27,20022	0,29455	-0,35705	-0,01023
<sup>74</sup> W	5,6532	3,31162	-1,74436	0,53676	27,28564	0,71262	0,01982	0,06738
<sup>75</sup> Re	5,75037	2,33568	0,58445	-0,84917	27,26911	0,21622	-0,56127	-0,10282
<sup>76</sup> Os	5,64379	3,34428	-1,50286	0,32405	27,33867	0,59093	-0,10512	0,04004
<sup>77</sup> Ir	5,64117	3,27773	-1,53994	0,51327	27,49533	0,87575	0,04538	0,06395
<sup>78</sup> Pt	5,63309	3,14771	-1,60141	0,68606	27,51512	1,06459	0,17347	0,0855
<sup>79</sup> Au	5,68624	2,98005	-1,61881	0,84862	27,59161	1,26154	0,30344	0,10584
<sup>82</sup> Pb	5,59285	2,85047	-1,5486	1,15833	27,88521	1,82015	0,56595	0,14378
<sup>83</sup> Bi	5,61944	2,97619	-1,67468	0,97004	27,64967	1,3957	0,37721	0,1205
<sup>90</sup> Th	5,63292	3,07804	-1,88391	1,44473	28,11434	2,00713	0,69065	0,18025

### III.2.1. Traitement collectif des éléments

Les deux figures ci-dessus représentent les fits collectifs dans les deux cas (emp1) et( emp2 ).



**Tableau III.2** Coefficients d’ajustement collectif des sections efficaces empiriques de production des rayons X par des protons d’énergie allant de 0.1 à 4.0 MeV.

Procédure	b <sub>0</sub>	b <sub>1</sub>	b <sub>2</sub>	b <sub>3</sub>
Emp(1)	5.65227	3.24759	-1.83727	0.53601
Procédure	c <sub>0</sub>	c <sub>1</sub>	c <sub>2</sub>	c <sub>3</sub>
Emp(2)	27.06147	0.46993	-0.05125	0.06232

En outre, par la même procédure décrite dans le cas de la section efficace empirique, nous pouvons estimer la déviation totale ( $\varepsilon_{rms}$ ) des données expérimentales ( $\sigma_{exp}$ ) avec les valeurs ajustées correspondantes ( $\sigma_{emp}$ ). Les valeurs de  $\varepsilon_{rms}$  avec les coefficients des polynômes ( $b_i$  et  $c_i$ ) sont regroupées dans le tableau III.1 pour tous les éléments en question.

D’après les graphes on remarque que :

- Pour tous les éléments et malgré les mêmes nombres des données expérimentales et le même degré de polynôme utilisé pour l’ajustement des sections efficaces empirique décrites par les équations (III.2) et (III.6), la dispersion des valeurs n’est pas la même. Ceci est exprimé systématiquement par les valeurs des  $rms$  observés.

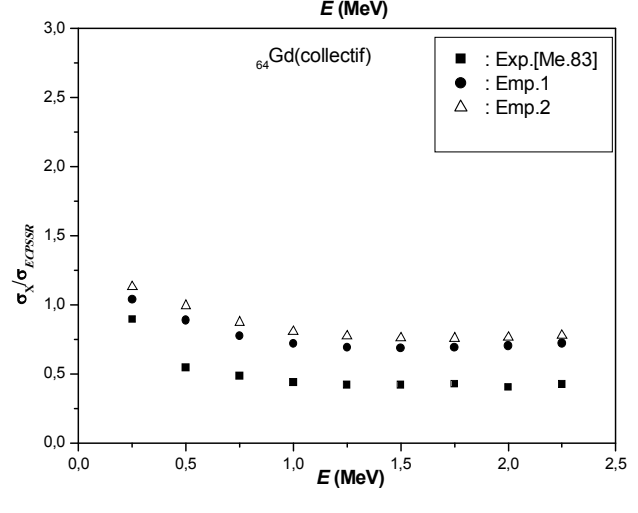
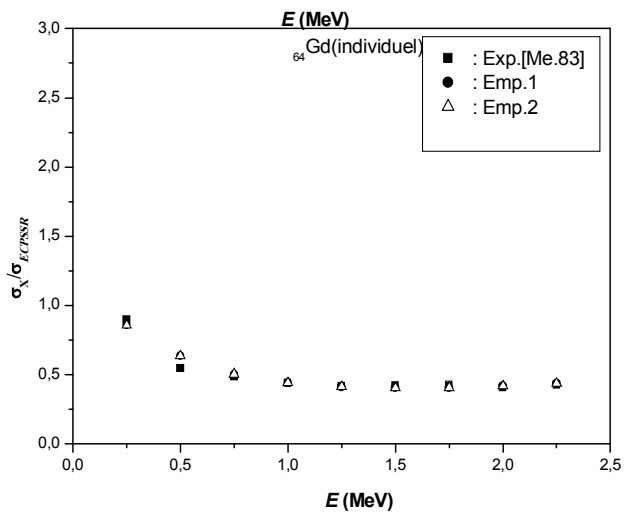
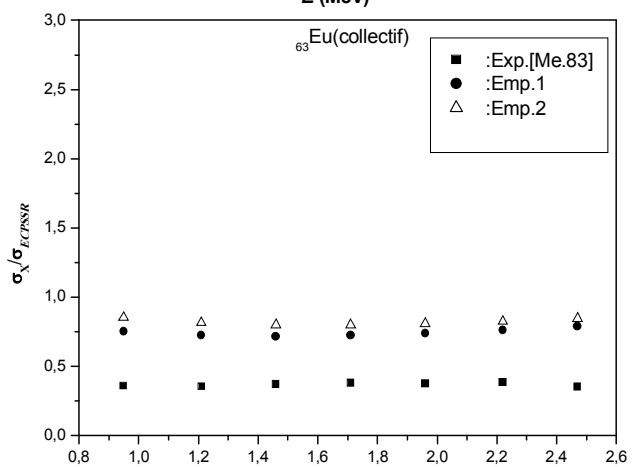
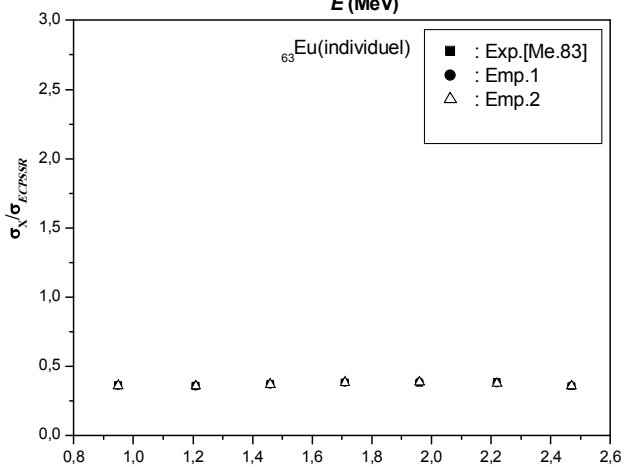
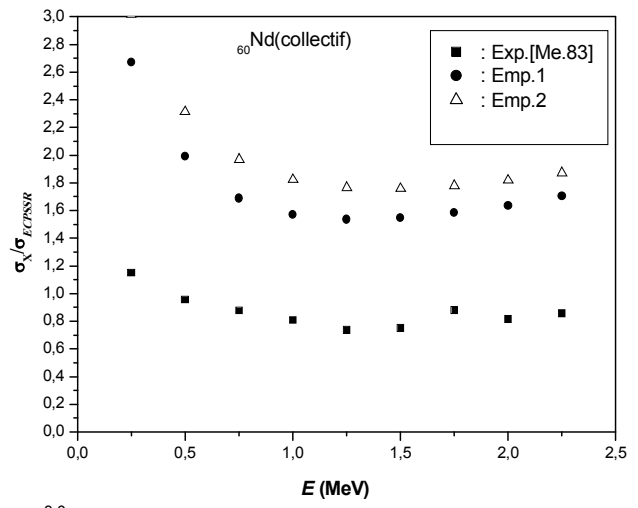
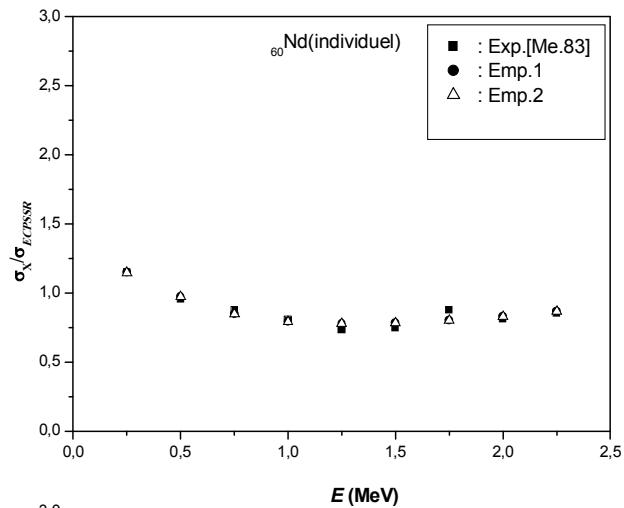
- La qualité de fit dépend plus fortement de la dispersion des données expérimentales que du nombre de données.
- Les résultats des *rms* pour les sections efficaces empiriques déterminées selon les deux équations (emp.1 et emp.2) sont presque les mêmes pour tous les éléments.

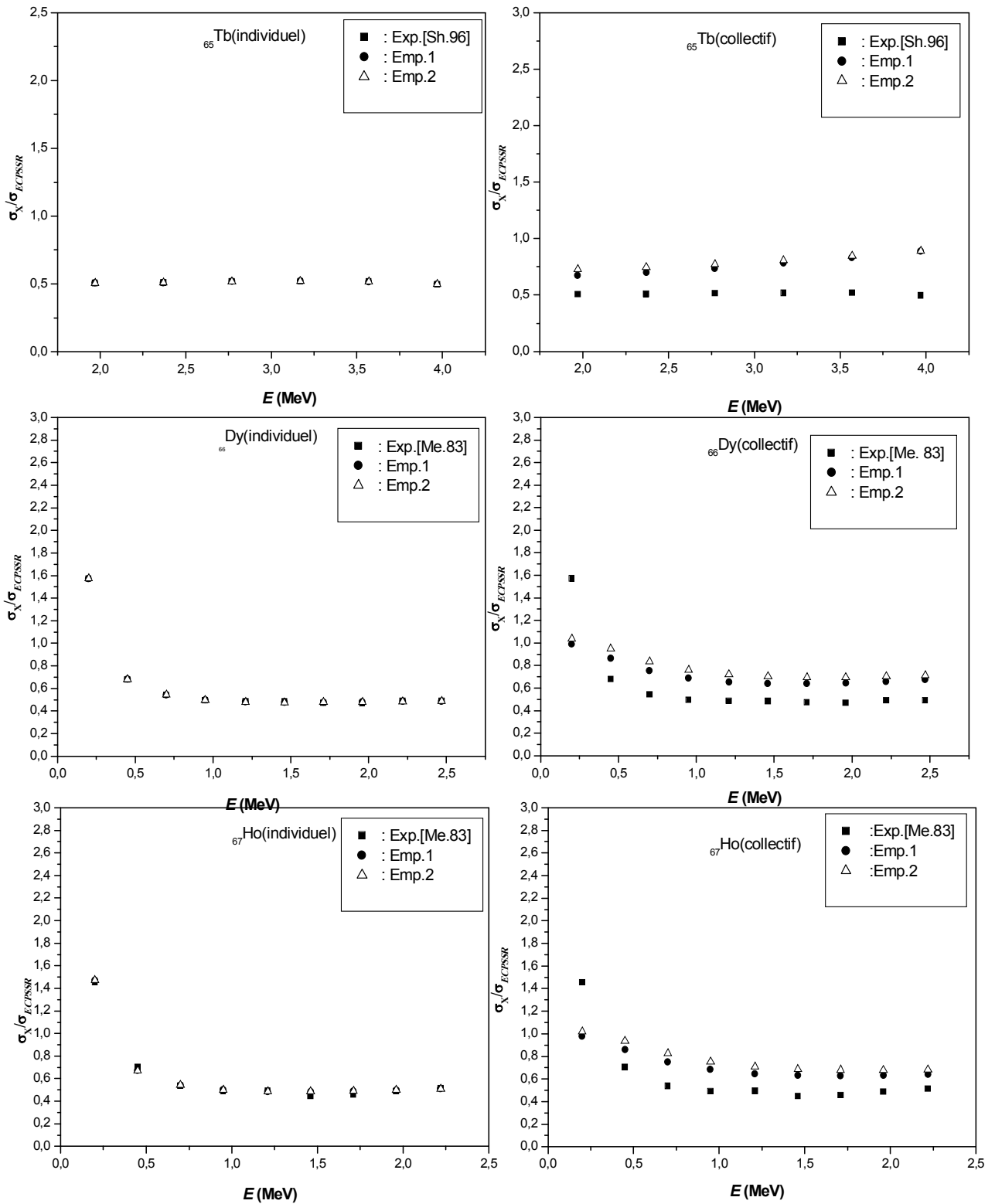
### III.3 .Analyse et discussion des résultats

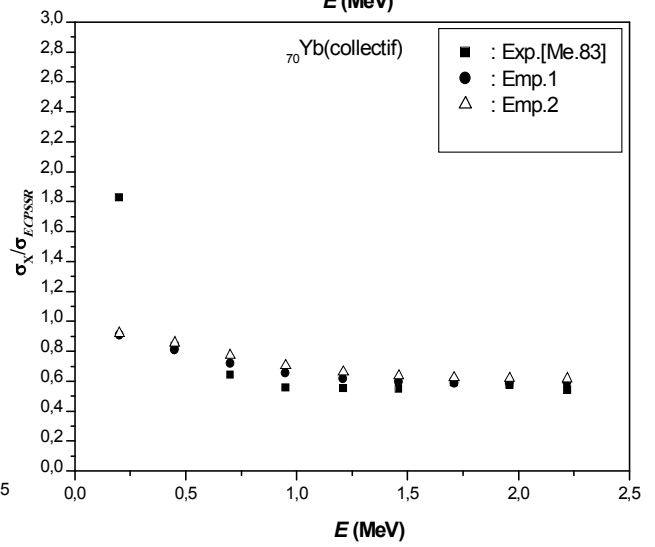
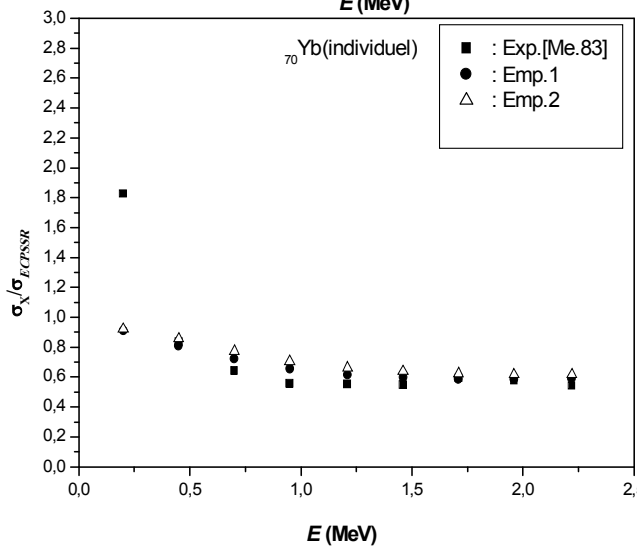
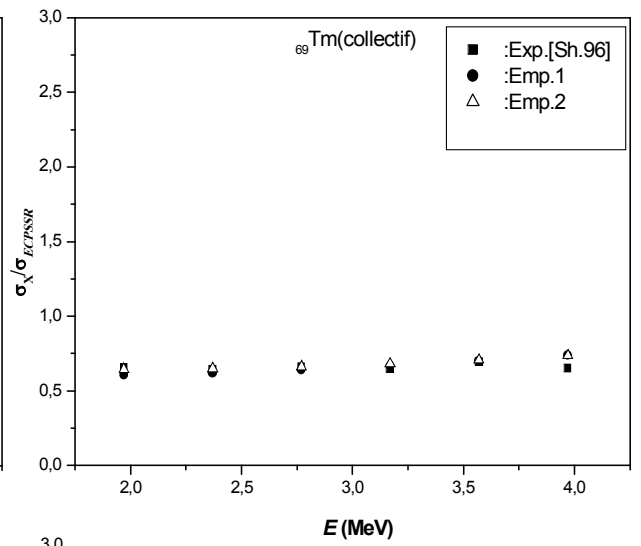
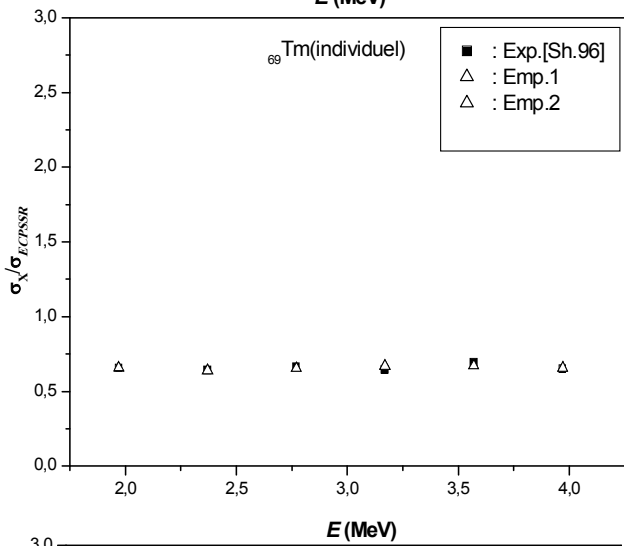
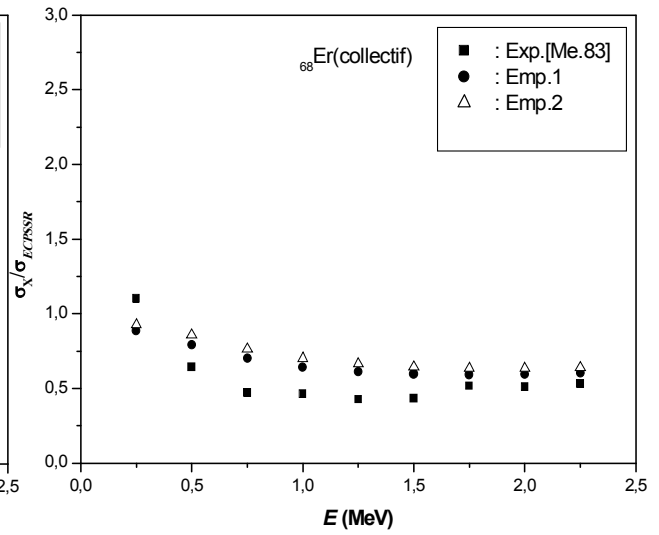
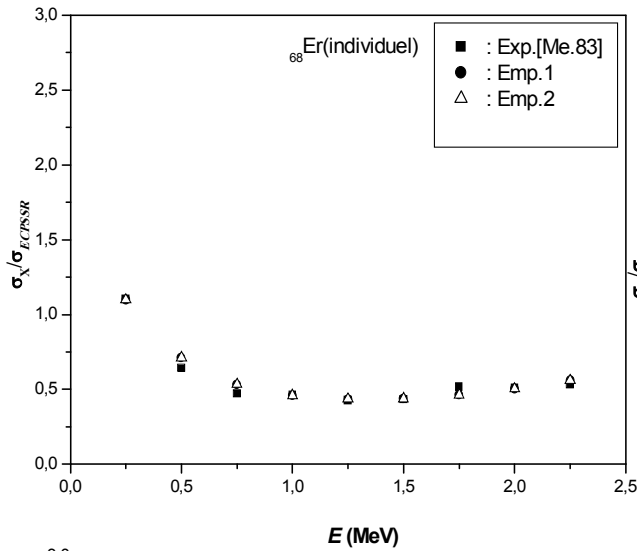
De plus, pour tester la fiabilité de nos calculs, les sections efficaces de production expérimentales ([Se.80], [Me.82], [Me.83], [Pa.90a], [Pa.06], [Ci.95], [Sh.86] [Ro.02], [Go.06], [Ph.09]), les sections efficaces de production empiriques (emp.1 et emp .2), approche individuelle et collective, sont normalisées par rapport aux valeurs correspondantes calculées dans le cadre du modèle ECPSSR pour tous les éléments en question pour des protons d'énergie allant de 0.1 et 4.0 MeV , sont représentés sur la figure III. 3.

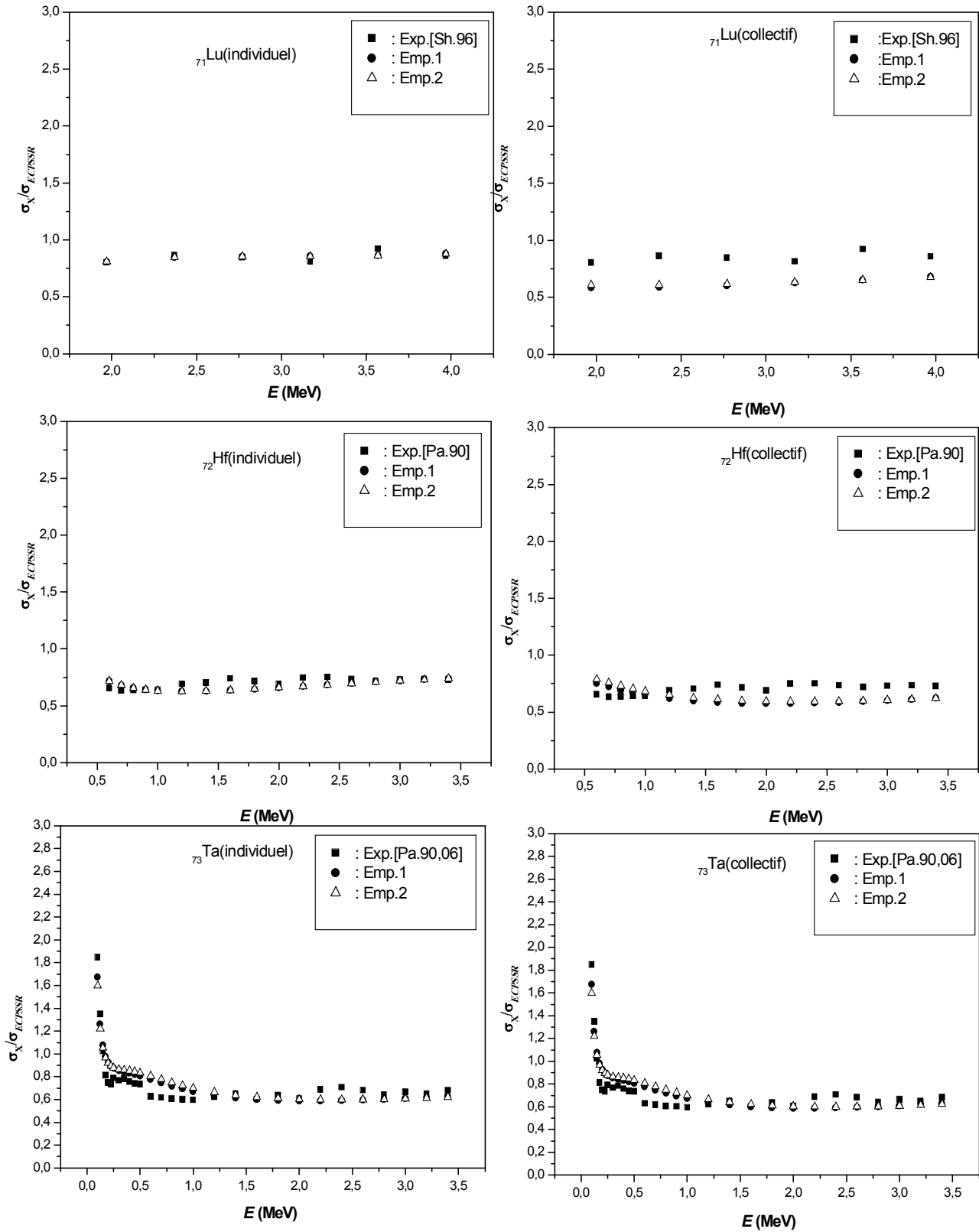
Les notations suivantes sont utilisées dans la figure III. 3 :

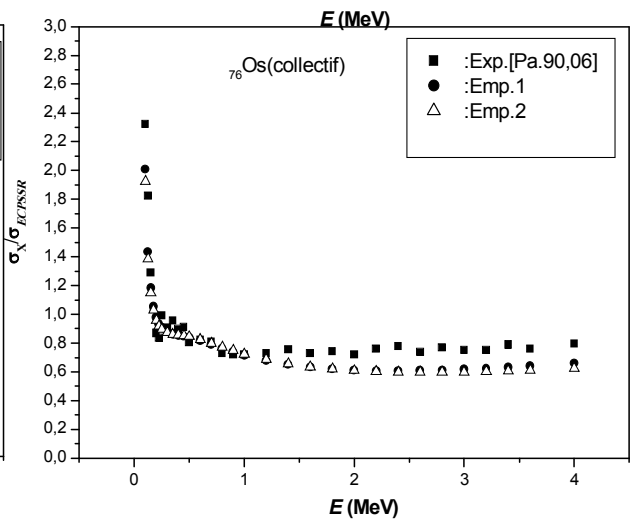
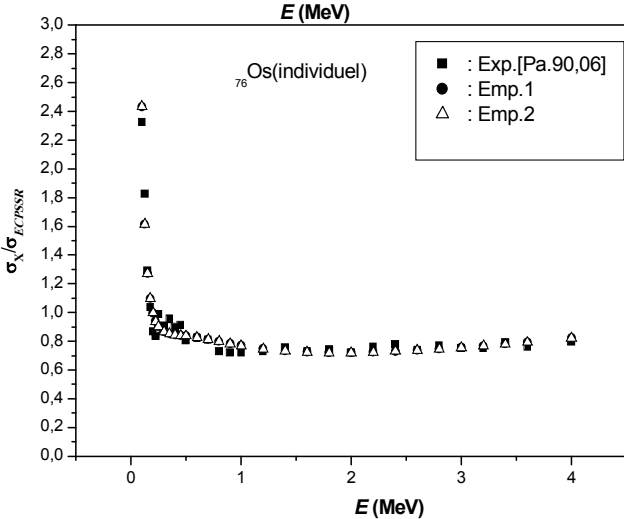
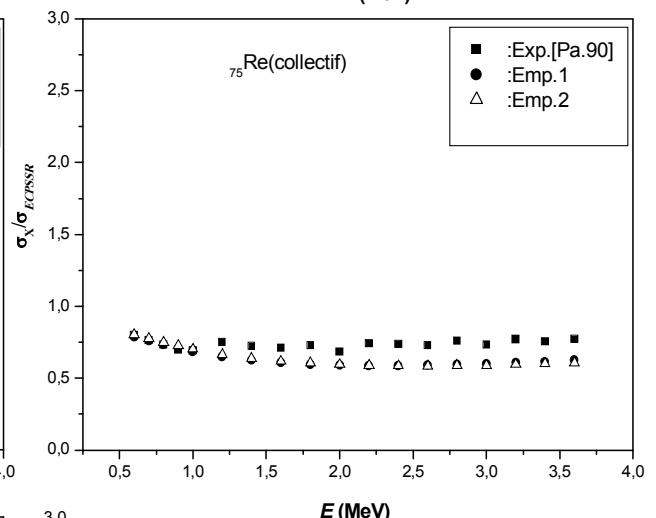
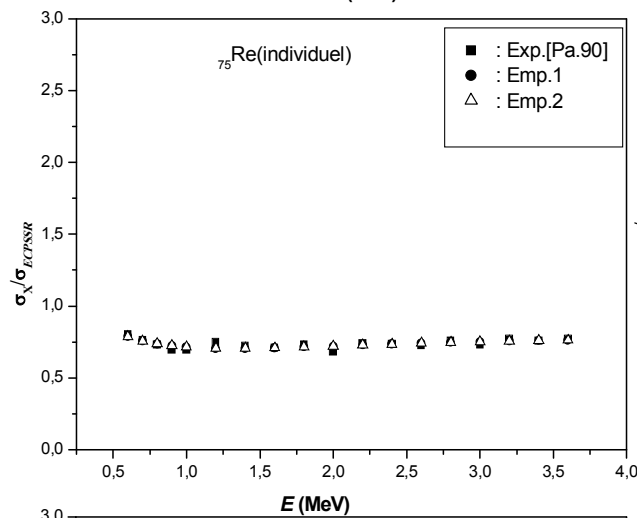
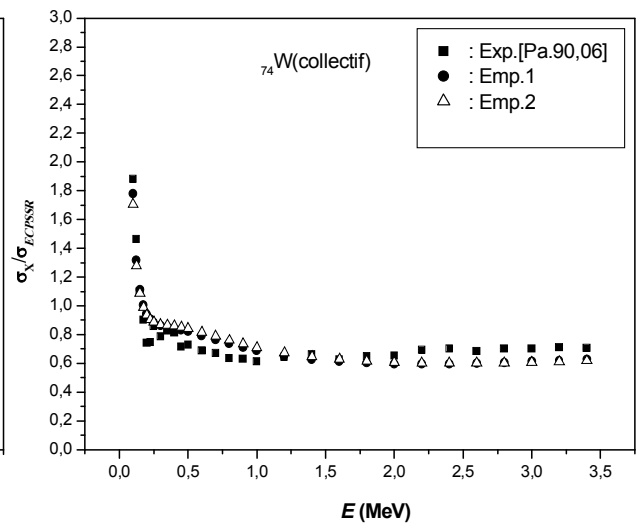
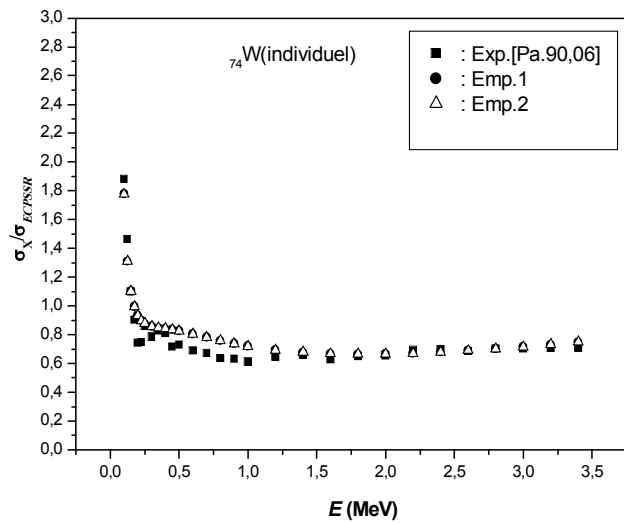
- $E$  est l'énergie des protons incidents en MeV.
- $\sigma_{Theo}^X$  est la section efficace de production calculée dans le cadre du modèle *ECPSSR*.
- $\sigma_{Exp}^X$  est la section efficace expérimentale de production.
- $\sigma_{Emp.1}^X$  est la section efficace empirique de production selon l'équation (III.2).
- $\sigma_{Emp.2}^X$  est la section efficace empirique de production selon l'équation (III.6).

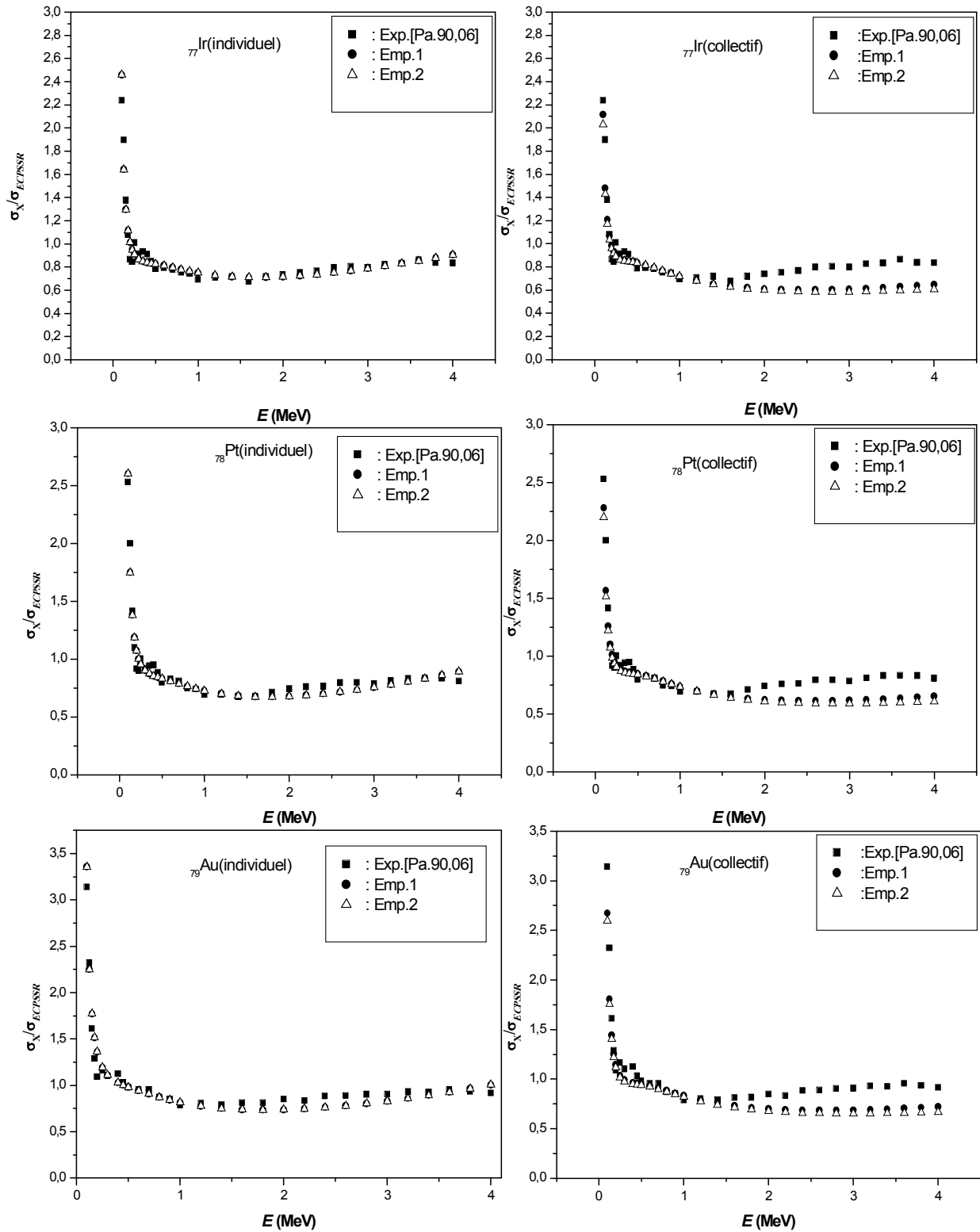


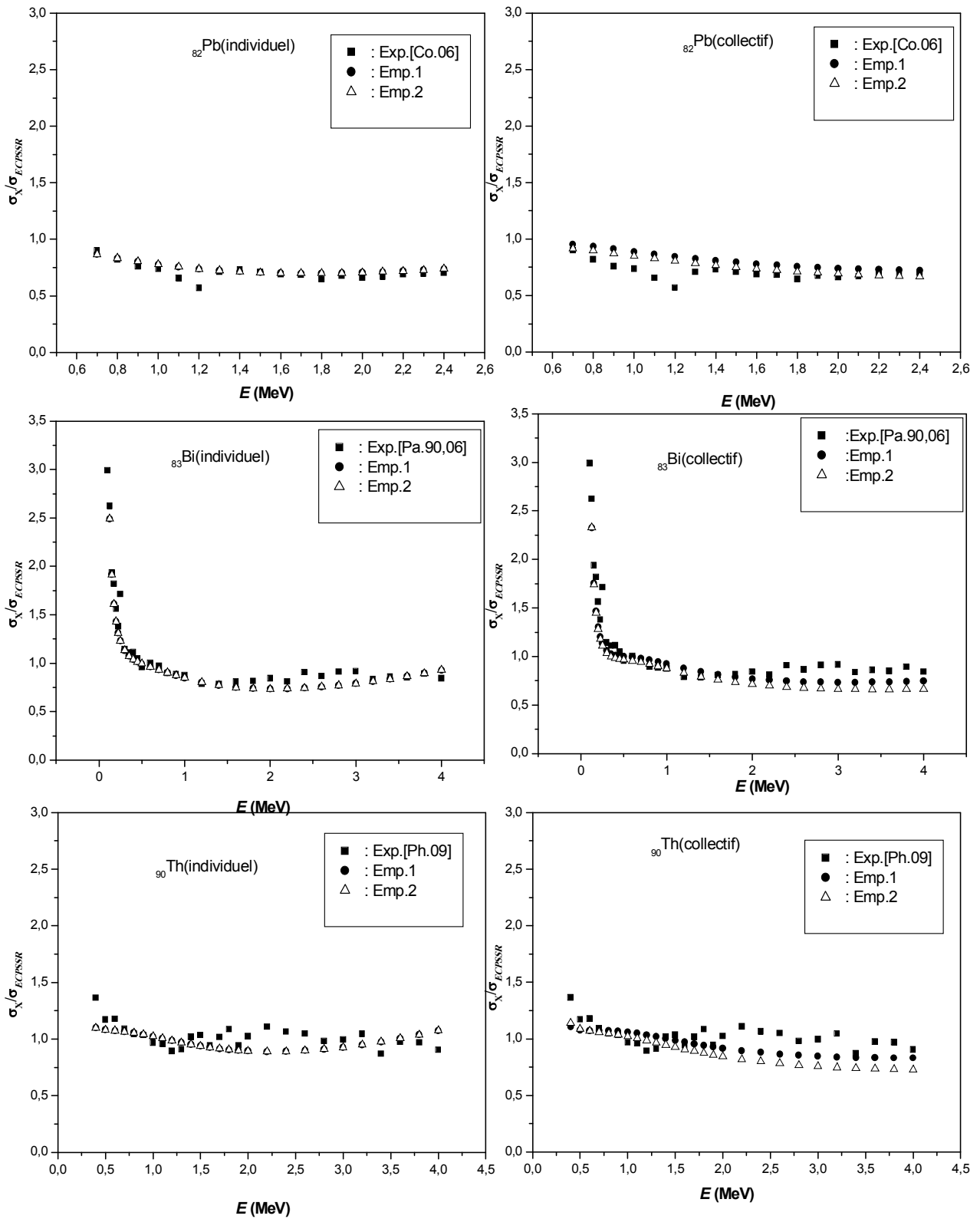












**Figure III.3 :** Rapport des sections efficaces de production expérimentales [Me.83],[Sh .96],[Pa.90],[Pa.06],[Go.06]et [Ph.09]et des sections efficaces de production empirique (emp.1 et

emp.2) par rapport aux résultats correspondants calculées dans le cadre du modèle (ECPSSR) pour  $^{60}\text{Nd}$ ,  $^{63}\text{Eu}$ ,  $^{64}\text{Gd}$ ,  $^{65}\text{Tb}$ ,  $^{66}\text{Dy}$ ,  $^{67}\text{Ho}$ ,  $^{68}\text{Er}$ ,  $^{69}\text{Tm}$ ,  $^{70}\text{Yb}$ ,  $^{71}\text{Lu}$ ,  $^{72}\text{Hf}$ ,  $^{73}\text{Ta}$ ,  $^{74}\text{W}$ ,  $^{75}\text{Re}$ ,  $^{76}\text{Os}$ ,  $^{77}\text{Ir}$ ,  $^{78}\text{Pt}$ ,  $^{79}\text{Au}$ ,  $^{82}\text{Pb}$ ,  $^{83}\text{Bi}$  et  $^{90}\text{Th}$  en fonction de l'énergie du proton ; dans le cas individuel et collectif.

D'après l'examen des résultats obtenus pour les sections efficaces de production empiriques des raies  $M$  pour les éléments de numéros atomiques compris entre 60 et 90 en fonction de l'énergie de proton, nous remarquons que :

- Le rapport des sections efficaces empiriques et expérimentales aux valeurs théoriques du modèle ECPSSR avoisine l'unité pour la majorité des éléments étudiés dans ce travail sauf pour les éléments Eu, Gd, Tb, Tm, Hf et Re où le rapport chute à 0.5. Ceci peut être expliqué par une surestimation des sections efficaces par le modèle ECPSSR ou par une sous-estimation expérimentale.
- Pour l'ensemble des éléments étudiés, l'accord entre les sections efficaces empiriques déduites par le fit individuel pour chaque élément et les sections efficaces expérimentales est meilleur que dans le cas du fit collectif de tous les éléments. On peut donc conclure que l'approche individuelle constitue une meilleure représentation des données expérimentales.
- Dans l'approche collective, les données expérimentales, pour tous les éléments étudiés, ont été ajustées d'une seule opération par un polynôme du troisième degré ne prenant pas en considération la dépendance de la section efficace du numéro atomique de l'atome-cible.
- Pour un élément donné, la dispersion des valeurs des sections efficaces empiriques et expérimentales est meilleure à haute énergie qu'à basse énergie.
- L'accord entre les sections efficaces empiriques déduites des expressions III.2 (emp.1) et III.6 (emp.2) est satisfaisant dans le cas individuel pratiquement pour tous les éléments de numéros atomiques entre 60 et 90 et moins satisfaisant dans le cas collectif pour les éléments  $^{60}\text{Nd}$ ,  $^{63}\text{Eu}$  et  $^{64}\text{Gd}$ .
- L'accord entre les sections efficaces emp.1, emp.2 et exp. est satisfaisant pour les éléments  $^{60}\text{Nd}$ ,  $^{63}\text{Eu}$ ,  $^{64}\text{Gd}$ ,  $^{65}\text{Tb}$ ,  $^{66}\text{Dy}$ ,  $^{67}\text{Ho}$ ,  $^{69}\text{Tm}$  et  $^{75}\text{Re}$  dans le cas individuel.
- La précision sur les sections efficaces empiriques dépend de la dispersion des valeurs expérimentales exprimée par le *rms* et du nombre de data utilisées dans le fit. C'est le cas du fit individuel du  $^{90}\text{Th}$  avec 68 data relativement bien agglomérées avec un *rms* de 9.75.

### Conclusion :

Dans ce travail, nous avons présenté les résultats des calculs des sections efficaces empiriques, basées sur l'ajustement direct des données expérimentales disponibles, des raies  $M$  des éléments de numéros atomiques  $60 \leq Z \leq 90$ , pour des protons d'énergie comprise entre 0.1 et 4.0 MeV.

Malgré l'utilisation du modèle ECPSSR qui améliore les calculs du modèle PWBA de façon significative, les écarts de ce modèle avec l'expérience persistent surtout aux basses énergies.

Les sections efficaces empiriques donnent la meilleure représentation des données expérimentales lorsque ces dernières sont traitées pour chaque élément séparément.

La section efficace de production de rayons X des raies  $M$ , obtenue en utilisant les différentes approches théoriques, excèdent généralement nos résultats de la section efficace de production empirique. Ceci pourrait être dû à la dispersion des données expérimentales qui sont prises de diverses sources et par conséquent mesurées dans différentes conditions expérimentales.

La précision sur les sections efficaces empiriques dépend de la dispersion des valeurs expérimentales exprimée par le  $rms$  et du nombre de data utilisées dans le fit.

Enfin, Nous devons signaler que les équations d'ajustement et leurs coefficients pour calculer les sections efficaces empiriques, sont valables seulement dans la gamme d'énergie des données expérimentales utilisées et leur prolongation en dehors de cette gamme peut conduire à des valeurs erronées.

**Références bibliographiques :**

- [Ba.09] Bahri DEGHFEL -,Thèse doctorat:Détermination des Sections efficaces d'ionisation et de production des raies M des éléments lourds, Département de Physique,Université Ferhat Abbas- Sétif, (2009).
- [Ba.73b]- G.Basbas, W.Brandt, R.Laubert,Phys.Rev A7,983(1973).
- [Ba.72]-Bambynek,B.Crasemann,R.Fink,H.Freund,H.Mark,C.Swift R.Price,andP.Rao.Rev.Mod.phys.44,716 (1972).
- [Be.78]- O.Benka and A.Kropf,atom.Data Nucl.Data Tables 22,219 (1978).
- [Br.74] W. Brandt and G. Lapicki, Phys. Rev. **A10**, 474 (1974).
- [Ch.73] B. Choi, Phys. Rev. **A7**, 2056 (1973).
- [Ch.85] M. Chen and B. Crasemann, At, Data & Nucl. Data Tables **33**, 217 (1985).
- [Ch.83] M. Chen, B. Crasemann, and H. Mark, Phys. Rev. **A27**, 2358 (1983).
- [Ch.89] M. Chen and B. Crasemann, At, Data & Nucl. Data Tables, **41**, 257 (1989).
- [Ci.95] S. Cipolla, Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. **B 99**, 22 (1995).
- [Co.85] - D.Cohen and M.Harrigan At.Data1 Nucl. Data Tables 33,255 (1985).
- [De.09] Bahri DEGHFEL, détermination des sections efficaces d'ionisation et de production des aies M des éléments lourds, thèse doctorat de l'université Ferhat Abbas-Sétif, (2009).
- [Is.75]- K. Ishii, S. Morita, H. Tawara, H. Kaji, and T. Shiokawa, Phys. Rev. A 11, 119 (1975).
- [Go.06] M. Goudarzi, F. Shokouhi, M. Laméhi-Rachti, P. Oliairy, Nucl. Instr. and Meth. **B 247**, 217 (2006).
- [KI.10] C A KIWANGA, physique atomique, université virtuelle Africain (2010).
- [Li.96] Z. Liu and S. J. Cipolla, Comp. Phys. Com. **97**, 315(1996).
- [Me.82] R. Mehta, J. Duggan, J. Price, F. McDaniel, and G. Lapicki, Phys. Rev. **A 26**, 1883 (1982).
- [Me.83] R. Mehta, J. Duggan, J. Price, P. Kocur, F. McDaniel, and G. Lapicki, Phys. Rev. **A 28**, 3217 (1983).

## Références bibliographiques

---

- [MB.81] Mitchell I. V. and K. M. Barfoot (1981). "Particle induced X-ray emission analysis, applications to analytical problems." *Nuclear Science Applications* **11**(2): 101-162.
- [Ng.08] NGUYEN Duy Thuy, « développement d'algorithmes de reconstruction tomographique pour l'analyse PIXE d'échantillons biologiques » ; thèse doctorat de l'université Bordeaux I, 2008.
- [Pa.06] M. Pajek, D. Banaś, J. Braziewicz, M. Czarnota, A. Braziewicz, M. Jaskóła, A. Korman, D. Trautmann, and G. Lapicki, *Phys. Rev. A* **73**, 1 (2006).
- [Pa.90] M. Pajek, A. Kobzev, R. Sandrik, A. Skrypnik, R. Ilkhamov, S. Khusmurodov, and G. Lapicki, *Phys. Rev. A* **42**, 261 (1990).
- [Ph. 09] L.C. Phinney , JL Duggan, G Lapicki, FU Naab, K Hossain and FD Mc Daniel. *J. Phys. B : At. Mol. opt. phys.* **42** (2009).
- [Ro.02] L. Rodriguez-Fernández, J. Miranda, J. Ruvalcaba-Sil, E. Segundo, and A. Olivier, *Nucl. Instr. and Meth. B* **189**, 27 (2002).
- [Sa.94] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company (1994).
- [Sa.81]- M. Sarkar, H. Mommsen, W. Sarter, and P. Schürkes, *J. Phys. B* **14**, 3163 (1981).
- [Se.80] K. Sera, K. Ishii, A. Yamadera, A. Kuwako, M. Kamiya, M. Sebata, S. Morita, and T. C. Chu, *Phys. Rev. A* **22**, 2536 (1980)
- [Sl.30] J. C. Slater, *Phys. Rev.* **36**, 57 (1930).

## Résumé

Nous présentons dans la première partie de ce travail nos valeurs théoriques des sections efficaces de production des rayons X de la couche M calculées dans le cadre du modèle ECPSSR, en utilisant un programme en FORTRAN. Nos résultats pour des éléments lourds bombardés par des protons sont comparés avec les valeurs expérimentales des autres sources. Bien que des améliorations successives aient été incorporées dans la théorie, quelques écarts continuent d'apparaître entre les données expérimentales et les prévisions théoriques. Donc, l'ajustement direct des données expérimentales a été utilisé pour calculer les sections efficaces empiriques. D'autre part, nous avons essayé, dans la deuxième partie de ce travail, de déduire les sections efficaces empiriques en ajustant les données disponibles pour chaque élément séparément. Nos résultats des sections efficaces empiriques des raies M des éléments de numéros atomiques  $60 \leq Z \leq 90$  pour des protons d'énergie allant de 0.1 à 4.0 MeV sont présentés. Une étude comparative avec les données expérimentales a montré un bon accord pour certains éléments.

**Mots clés :** Modèle ECPSSR, section efficace empirique.

## Abstract

We present in the first part of this work our theoretical values of the cross sections of production of x-rays of the M-shell calculated within the framework of ECPSSR model by using a Fortran program. Our results for heavy elements bombarded by protons are compared with the experimental values of the other sources. Although successive improvements were built-in the theory, some discrepancies continue to appear between the experimental data and the theoretical predictions. Therefore, the direct adjustment of the experimental data was used to calculate the empirical cross sections. In addition, in the second part of this work, we deduce the empirical cross sections by adjusting the available data for each element separately. Our results of the empirical cross sections of the lines M of the elements of atomic numbers going  $60 \leq Z \leq 90$  for protons of energy from 0.1 to 4.0 MeV are presented. A comparative study with the experimental data shown a good agreement for some elements.

**Keywords:** ECPSSR model, empirical cross section.

## ملخص

نقدم في الجزء الأول من هذا العمل القيم النظرية للمقاطع العرضية لإنتاج الأشعة السينية للطبقة M محسوبة في النموذج ECPSSR، وذلك باستخدام برنامج FORTRAN. تتم مقارنة نتائجنا للعناصر الثقيلة المقذوفة بواسطة البروتونات مع القيم التجريبية من مصادر أخرى. على الرغم من التحسينات المدرجة في نظرية ECPSSR، إلا أن بعض الخلافات لا تزال تظهر بين البيانات التجريبية والتوقعات النظرية. وهكذا استخدم التعديل مباشرة من البيانات التجريبية لحساب المقاطع العرضية التجريبية. من جهة أخرى، حاولنا في الجزء الثاني من هذا العمل، الاستدلال على المقاطع العرضية من خلال تعديل البيانات التجريبية المتوفرة لكل عنصر على حدى. نتائجا التجريبية من المقاطع العرضية للخطوط M للعناصر ذات الأرقام الذرية  $60 \leq Z \leq 90$  المقذوفة بالبروتونات ذات الطاقة 0.1-4 إلكترون فولت. وأظهرت دراسة مقارنة البيانات التجريبية مع النظرية اتفاق جيد لبعض العناصر

**الكلمات المفتاحية :** المقاطع العرضية التجريبية , نموذج ECPSSR